



**HAL**  
open science

# Design ab-initio de matériaux micro et nanostructurés pour l'émission thermique cohérente en champ proche et en champ lointain

Jérémie Drevillon

► **To cite this version:**

Jérémie Drevillon. Design ab-initio de matériaux micro et nanostructurés pour l'émission thermique cohérente en champ proche et en champ lointain. Energie électrique. Université de Nantes, 2007. Français. NNT: . tel-00250350

**HAL Id: tel-00250350**

**<https://theses.hal.science/tel-00250350>**

Submitted on 11 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ECOLE DOCTORALE  
Mécanique, Thermique et Génie Civil  
DE NANTES

2007

**THÈSE DE DOCTORAT**  
Discipline : Sciences pour l'Ingénieur

Spécialité : Thermique

Présentée et soutenue publiquement par

**DREVILLON Jérémie**

le 4 Décembre 2007

à l'Ecole Polytechnique de l'Université de Nantes

**Design ab-initio de matériaux micro et nanostructurés pour  
l'émission thermique cohérente en champ proche et en champ  
lointain.**

Jury

<b>R. Carminati</b>	Professeur, ESPCI, Paris	<i>Rapporteur</i>
<b>K. Joulain</b>	Maître de conférence, ENSMA / LET, Futuroscope	<i>Rapporteur</i>
<b>D. Baillis</b>	Professeur, INSA / CETHIL, Lyon	<i>Examineur</i>
<b>D. Maystre</b>	Directeur de recherche, Institut Fresnel, Marseille	<i>Examineur</i>
<b>J.J. Greffet</b>	Professeur, EM2C, Ecole Centrale, Paris	<i>Invité</i>
<b>B. Garnier</b>	Chargé de Recherche, Université de Nantes	<i>Directeur de thèse</i>
<b>P. Ben-Abdallah</b>	Chargé de Recherche, Université de Nantes	<i>Encadrant</i>

# **Design ab-initio de matériaux micro et nanostructurés pour l'émission thermique cohérente en champ proche et en champ lointain**

L'émission thermique à partir d'un corps chaud a été longtemps considérée comme étant large bande et quasi-isotrope. Aujourd'hui nous savons que ce paradigme est faux et de nombreux matériaux micro et nanostructurés ont été développés pour rayonner dans des bandes spectrales étroites et autour de certaines directions d'espace. Les techniques modernes de dépôt permettent maintenant de concevoir des structures complexes à base de matériaux métalliques, polaires ou diélectriques à l'échelle nanométrique. Ces avancées soulèvent la question de la meilleure structure possible pour obtenir des propriétés radiatives désirées et pour augmenter le degré de cohérence d'une source. Cependant, jusqu'à présent, seules des stratégies heuristiques basées sur une approche de type essai-erreur ont été suivies pour concevoir des sources thermiques. Dans ce travail de thèse, nous présentons une méthode générale pour le design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ lointain et en champ proche. Le cadre de ce travail est celui de la théorie des matrices de diffusion et de l'électrodynamique fluctuacionnelle. De nouveaux effets de champ proche sont prédits théoriquement pour les matériaux nanostructurés multicouches. Ils ouvrent de nouvelles opportunités pour améliorer de façon significative les performances des technologies modernes de conversion d'énergie.

## **Design ab-initio of materials micro and nanostructured for coherent thermal emission both in far field and near field**

Emission of thermal light from a hot body has been considered during long time as broadband and quasi-isotropic. Today we know this paradigm is wrong and it has been shown that many micro and nanostructured materials are able to radiate in narrow spectral bands and around specific directions of space. The ability to artificially grow in a controllable manner, from modern deposition techniques, complex structural configurations of metallic, polar and dielectric materials raises now the issue of the 'best' achievable inner structures to tailor the radiative properties of a nanostructured thermal source in a prescribed manner and to enhance the coherence degree of its emission. However, so far, only heuristic strategies based on trial-and-error have been followed for engineering such sources. In this thesis we present a general method for the ab initio design of coherent thermal sources both in far field and near field. The framework of this thesis is the scattering matrix theory and the fluctuational electrodynamic. New near-field effects are theoretically predicted for nanostructured materials. They open new opportunities to significantly improve the performances of new energy conversion technologies.

### **Mots clés**

Rayonnement thermique, électromagnétisme, optique, source thermique cohérente, design ab-initio par algorithme génétique, champ lointain, champ proche, matériaux nanostructurés, électrodynamique fluctuacionnelle, conversion d'énergie thermophotovoltaïque.

Discipline : Sciences pour l'Ingénieur

## ECOLE DOCTORALE

### MÉCANIQUE, THERMIQUE ET GÉNIE CIVIL

ED 0367

### LISTE DES DIRECTEURS DE RECHERCHE

#### AMBIANCES ARCHITECTURALES ET URBAINES

Michel	BERENGIER	HDR	DR LCPC	LCPC	Division Exploitation Entretien Acoustique Routière	
Gérard	HEGRON		PR	Ecole Architecture Nantes	CERMA Nantes	UMR 1563
Jean-Pierre	PENEAU		PR émérite		CERMA Nantes	UMR 1563

#### DYNAMIQUE DES FLUIDES ET DES TRANSFERTS

Bertrand	ALESSANDRINI	HDR	IR	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Jacques	ASTOLFI	HDR	MC	Ecole Navale de Brest	IRENAV Brest	EA 3634
Jean-Yves	BILLARD		PR	Ecole Navale de Brest	IRENAV Brest	EA 3634
Alain	CLEMENT	HDR	IR	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Gérard	DELHOMMEAU	DE	IR	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Henda	DJERIDI	HDR	MC	Ecole Navale de Brest	IRENAV Brest	EA 3634
Pierre	FERRANT	HDR	MC	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Jean-François	HETET		PR	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Dominique	MARICHAL		PR	Ecole Centrale de Nantes		
Patrice	MESTAYER		DR CNRS	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Jean	PIQUET		PR	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Jean-Michel	ROSANT	DE	CR CNRS	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Jean-François	SINI		PR	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598
Michel	VISONNEAU		DR CNRS	Ecole Centrale de Nantes	L. M. F.	UMR 6598

#### GENIE CIVIL

Alain	ALEXIS		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Guy	BASTIAN		PR émérite	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Pierre	CHAMBON	HDR	MC	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Francis	DE LARRARD	HDR	Pr. Ag.	LCPC	Division Technologies du GC et de l'Environnement	
Jacques	GARNIER	HDR	DR LCPC	LCPC	Division Reconnaissance et Mécanique des Sols	
Pierre-Yves	HICHER		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Agnès	JULLIEN	HDR	DR LCPC	LCPC	Division Technologies du GC et de l'Environnement	
Abdelhafid	KHELIDJ		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Van Anh	LE		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Ahmed	LOUKILI	HDR	MC	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Gilles	PIJAUDIER-CABOT		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Abdul-Hamid	SOUBRA		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Philippe	TAMAGNY	HDR	DR LCPC	LCPC	Division Mécanique et Structure des Chaussées	
Pierre	THOMAS		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Christian	WIELGOSZ		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183

#### GEOSCIENCES

Odile	ABRAHAM	HDR	IDTPE	LCPC	Division Reconnaissance et Mécanique des Sols	
Véronique	CARRERE	HDR	MC	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Philippe	CÔTE	DE	DR LCPC	LCPC	Division Reconnaissance et Mécanique des Sols	
Hervé	DIOT		PR	Univ. La Rochelle	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Patrick	GENOT		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Jacques	GIRARDEAU		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112

Olivier	GRASSET		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Eric	HUMLER		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Richard	LAGABRIELLE	DE	DR LCPC	Directeur Technique - LCPC		
Bernard	LASNIER		PR émérite	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Patrick	LAUNEAU		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Daniel	MEGE	HDR	MC	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Eric	MERCIER		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Antoine	MOCQUET		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Martin	SANCHEZ	HDR	MC	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112
Christophe	SOTIN		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	Lab. Planét. et Géodyn.	UMR 6112

### GENIE MECANIQUE

Fouad	BENNIS		PR	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Alain	BERNARD		PR	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Christian	BURTIN	HDR	MC	Ecole Centrale de Nantes		
Patrice	CARTRAUD		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Pascal	CASARI	HDR	MC	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Patrick	CHEDMAIL		PR	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Chi Yuen	CHIEM		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Philippe	DEPINCE	HDR	MC	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Benoît	FURET		PR	IUT Nantes - Univ. Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Laurent	GORNET	HDR	MC	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Ronald	GUILLEN		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Jean-Yves	HASCOËT		PR	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Frédéric	JACQUEMIN	HDR		IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GeM	UMR 6183
Bernard	LAMY		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Donatien	LE HOUËDEC		PR émérite	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Surandar	MARYA		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Nicolas	MOES		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Pascal	MOGNOL	HDR	MC	ENS CACHAN	IRCCyN	UMR 6597
Bernard	PESEUX		PR Emérite	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Jean-François	PETIOT		PR	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597
Arnaud	POITOU		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Guillaume	RACINEUX		PR	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Erwan	VERRON	HDR	MC	Ecole Centrale de Nantes	GeM	UMR 6183
Philippe	WENGER		DR CNRS	Ecole Centrale de Nantes	IRCCyN	UMR 6597

### THERMIQUE, ÉNERGÉTIQUE ET GÉNIE DES PROCÉDÉS

Yves	ANDRES	HDR	MA	Ecole des Mines de Nantes	GEPEA	UMR 6144
Hervé	ANDRIEU	HDR	IDTPE	LCPC	Division Eau	
Marie	DELAMBALLERIE	HDR	PR	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144
Marc	ANTON		DR	INRA Nantes	Unité BIA	
Abdellah	ARHALIASS		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Jean-Pierre	BARDON		PR Emérite	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Jérôme	BELLETRÉ	HDR	MA	Ecole des Mines de Nantes	Dép. Syst. Energ & Environnement	UMR 6144
Lionel	BOILLEREAUX		PR	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144
Brahim	BOUROUGA		PR	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Jacques	COMITI		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Didier	DELAUNAY		DR CNRS	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Arnaud	DELEBARRE		PR	Ecole des Mines de Nantes	GEPEA	UMR 6144
Guy	DELLA VALLE	HDR	IR	INRA Nantes	Unité BIA	
Anne	DESROMAUX	HDR	MC	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144
Rémi	DETERRE		PR	IUT Nantes - Univ. Nantes	OPERP EE 0101	
Jean-Louis	DOUBLIER		DR	INRA Nantes	Unité BIA	
Louis	DOUBLIEZ		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Francine	FAYOLLE	HDR	MC	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144
Alain	FOUCAULT	HDR	IR CNRS	CRTT Saint-Nazaire	GEPEA	UMR 6144
Bertrand	GARNIER	HDR	CR	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Jean-Luc	ILARI	HDR	PR	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144

Pascal	JAOUEN		PR	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Yvon	JARNY		PR	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Abdeljalil	LAHMAR		PR	IUT La Roche/Yon - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Alain	LE BAIL	HDR	PR	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144
Laurence	LE COQ	HDR	MA	Ecole des Mines de Nantes	Dép. Syst. Energ & Environnement	UMR 6144
Olivier	LE CORRE	HDR	MA	Ecole des Mines de Nantes	Dept Syst. Energet. et Environnement	
Yves	LECOINTE		PR	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Patrick	LEGENTILHOMME		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Jack	LEGRAND		PR	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Michel	LEGRET	HDR	DR LCPC	LCPC	Division Eau	
Denis	LOURDIN		CR	INRA Nantes	BIA	
Agnès	MONTILLET	HDR	MC	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Ahmed	OULD EL MOCTAR	HDR	MC	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Hassan	PEERHOSSAINI		PR	Ecole Polytechnique - Univ. Nantes	Lab. Thermocinétique	UMR 6607
Denis	PONCELET		PR	ENITIAA Nantes	GEPEA	UMR 6144
Jérémy	PRUVOST	HDR	MC	Fac. Sc. et Techn - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Francis	QUEMENEUR		PR Emérite	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Véronique	RUBAN	HDR	DR LCPC	LCPC	Division Eau	
Jean-Pierre	SCHLUMPF	HDR	MC	IUT Saint-Nazaire - Univ. Nantes	GEPEA	UMR 6144
Camille	SOLLIEC	HDR	MA	Ecole des Mines de Nantes	GEPEA	UMR 6144
Mohan	TAZEROUT	HDR	MA	Ecole des Mines de Nantes	Dép. Syst. Energ & Environnement	



# Remerciements

---

Cette thèse a été réalisée au Laboratoire de Thermocinétique de Nantes entre septembre 2004 et septembre 2007. Je tiens à remercier son directeur Hassan Peerhossaini de m'y avoir accueilli.

Je remercie Daniel Maystre de m'avoir fait l'honneur de présider ce jury et d'avoir porté de l'intérêt à mon travail. Je remercie aussi Rémi Carminati et Karl Joulain d'avoir accepté le long, difficile mais essentiel travail de rapporteur. Je remercie également Dominique Baillis et Jean-Jacques Greffet d'avoir accepté de faire partie de ce jury.

Je tiens à remercier Bertrand Garnier, en tant que directeur de thèse, pour m'avoir donné sa confiance tout au long de ces trois années.

Un grand merci à Philippe Ben-Abdallah pour avoir encadré cette thèse et pour m'avoir permis de découvrir le domaine de recherche passionnant qu'est la thermique des milieux micro et nanostructurés. Merci aussi à lui pour sa disponibilité et son enthousiasme tout au long de ces trois années, ainsi que pour son très grand intérêt pour ce travail qui n'aurait pu aboutir de la sorte sans son active participation.

Merci aux thésards du laboratoire qui ont grandement contribué à l'ambiance détendue et amicale qui régnait dans les lieux. Je pense plus particulièrement à mes camarades de rédaction Xavier et Cédric mais aussi à Matthieu, Clément, Eric et David pour les bons moments partagés aussi bien au labo qu'en dehors. Un grand merci aussi au " Staff Technique " pour leur bonne humeur quotidienne. Je n'oublie pas non plus les autres membres du laboratoire, chercheurs, enseignement-chercheurs et secrétaires.

Je tiens aussi à remercier Didier Louvet de m'avoir fait confiance pendant mes trois années de monitorat. Je le remercie pour son sens de la pédagogie et les nombreux conseils qu'il m'a donnés en tant qu'enseignant.

Je remercie aussi bien évidemment les "guérandais" répondant toujours présents le week-end et soucieux de savoir si "mon code fonctionnait enfin ...". Un grand merci aussi à mes parents qui m'ont toujours encouragé dans la voie que j'avais choisi, ainsi qu'à mes frère et sœurs pour leur soutien et l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux.

Enfin, et surtout, merci Marie-Laure !





# Table des matières

---

<b>Remerciements</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>I Chapitre introductif</b>	<b>3</b>
<b>2 Le rayonnement thermique</b>	<b>5</b>
2.1 Interaction rayonnement-matière . . . . .	6
2.1.1 L'absorption . . . . .	6
2.1.2 L'émission spontanée . . . . .	6
2.1.3 L'émission induite ou stimulée . . . . .	7
2.2 L'approche radiométrique . . . . .	8
2.2.1 Rayonnement du corps noir . . . . .	8
2.2.2 Rayonnement du corps réel . . . . .	10
2.3 L'approche électromagnétique . . . . .	12
<b>3 Etat de l'art sur l'émission thermique cohérente</b>	<b>15</b>
3.1 Émission cohérente . . . . .	15
3.1.1 Cohérence temporelle . . . . .	15
3.1.2 Cohérence spatiale . . . . .	16
3.2 Les sources thermiques à émission cohérente . . . . .	17
3.2.1 Les réseaux de surface . . . . .	17
3.2.2 Les cristaux photoniques . . . . .	18
3.2.3 Les films minces . . . . .	19
3.2.4 Les métamatériaux . . . . .	20
3.2.5 Les multicouches . . . . .	21
3.2.6 Les structures hybrides . . . . .	21
3.3 Conclusion . . . . .	22
<b>II Design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ lointain</b>	<b>23</b>
<b>4 Émission thermique d'un matériau multicouche</b>	<b>27</b>
4.1 Calcul des propriétés radiatives . . . . .	27
4.1.1 Réflexion-transmission d'un onde plane à travers une interface . . . . .	27
4.1.2 Propagation d'une onde plane dans un film . . . . .	32
4.2 Méthode des matrices de transfert pour les milieux multicouches isotropes . . . . .	32
4.2.1 Cas d'une couche mince homogène et isotrope . . . . .	33
4.2.2 Généralisation à un milieu multicouche . . . . .	36
4.3 Relations de dispersion des modes propres . . . . .	37

4.4	Conclusion . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Design inverse de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente</b>	<b>39</b>
5.1	Optimisation par algorithme génétique . . . . .	40
5.1.1	Historique . . . . .	40
5.1.2	Principe d'un algorithme génétique . . . . .	40
5.2	Design de sources thermiques quasimonochromatiques et isotropes . . . . .	44
5.2.1	Dans l'infrarouge moyen . . . . .	44
5.3	Design de sources partiellement cohérentes . . . . .	51
5.3.1	Dans le proche infrarouge . . . . .	51
5.3.2	Dans l'infrarouge thermique . . . . .	58
5.3.3	Influence de la présence d'un substrat sur la cohérence de la structure . . . . .	63
5.3.4	Influence de la température . . . . .	64
5.4	Conclusion . . . . .	65
<b>III Design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ proche</b>		<b>67</b>
<b>6</b>	<b>Densité d'énergie électromagnétique</b>	<b>71</b>
6.1	Introduction . . . . .	71
6.2	Calcul des composantes de Weyl du tenseur de Green . . . . .	73
6.2.1	Dans l'espace libre . . . . .	73
6.2.2	Dans un milieu semi-infini . . . . .	78
6.2.3	Dans un milieu multicouche . . . . .	80
6.3	Relation entre les tenseurs de Green magnétique et électrique . . . . .	85
6.4	Matrices de diffusion pour des milieux multicouches . . . . .	88
6.4.1	Cas de la polarisation $\mathbf{s}$ . . . . .	89
6.4.2	Cas de la polarisation $\mathbf{p}$ . . . . .	92
6.5	Conclusion . . . . .	94
<b>7</b>	<b>Densité d'énergie au dessus d'un film</b>	<b>95</b>
7.1	Théorie . . . . .	95
7.1.1	Tenseur de Green . . . . .	95
7.1.2	Densité d'énergie électromagnétique . . . . .	97
7.2	Émission thermique en champ proche au dessus d'un film de carbure de silicium . . . . .	98
7.3	Émission thermique en champ proche au dessus d'un film d'aluminium . . . . .	102
7.4	Conclusion . . . . .	103
<b>8</b>	<b>Amplification de la densité d'énergie au dessus d'une structure multicouche</b>	<b>105</b>
8.1	Motivations . . . . .	105
8.2	Théorie . . . . .	105
8.2.1	Tenseurs de Green . . . . .	105
8.2.2	Densité d'énergie . . . . .	107
8.3	Design inverse de sources thermiques en champ proche à haute densité d'énergie . . . . .	107
8.4	Design inverse de sources thermiques cohérentes en champ proche à haute densité d'énergie . . . . .	111
8.5	Conclusion . . . . .	112
<b>9</b>	<b>Conclusion générale</b>	<b>115</b>
<b>A</b>	<b>Modélisation des propriétés électromagnétiques des matériaux</b>	<b>117</b>
A.1	Les métaux . . . . .	117
A.2	Les matériaux polaires et les semi-conducteurs . . . . .	120

---

<b>B</b>	<b>Calcul du champ électrique par la méthode des matrices de transfert</b>	<b>125</b>
B.1	Cas d'un film homogène . . . . .	125
B.2	Cas d'un système multicouche . . . . .	126
<b>C</b>	<b>Rotationnel d'un tenseur d'ordre 2</b>	<b>129</b>
C.1	Cas du tenseur de Green électrique . . . . .	129
C.2	Cas du tenseur de Green magnétique . . . . .	131
C.3	Relations entre les tenseurs de Green suivant la polarisation . . . . .	132
<b>D</b>	<b>Calcul des termes <math>A_{lj}</math> et <math>C_{lj}</math> du champ électrique pour l'étude de la densité d'énergie au dessus d'un film mince et d'une structure multicouche</b>	<b>135</b>
D.1	Cas d'un film mince . . . . .	135
D.2	Cas d'un milieu multicouche . . . . .	137
<b>E</b>	<b>Introduction à la physique des polaritons</b>	<b>141</b>
E.1	Les polaritons de volume . . . . .	141
E.1.1	Relation de dispersion pour les ondes électromagnétiques . . . . .	141
E.1.2	Les plasmon-polaritons de volume . . . . .	142
E.1.3	Les phonon-polaritons de volume . . . . .	143
E.2	Les polaritons de surface . . . . .	143
E.2.1	Les plasmon-polaritons de surface . . . . .	145
E.2.2	Les phonon-polaritons de surface . . . . .	147
	<b>Bibliographie</b>	<b>154</b>



# Nomenclature

---

## Notations grecques

$\alpha$	absorptivité spectrale et directionnelle	
$\gamma$	fréquence de collision des électrons	( Hz )
$\delta$	Dirac	
$\epsilon$	émissivité spectrale et directionnelle	
$\varepsilon$	permittivité diélectrique	
$\varepsilon_0$	permittivité diélectrique du vide	
$\theta$	angle d'incidence	( degré )
$\Theta$	énergie moyenne d'un oscillateur quantique	( J )
$\lambda$	longueur d'onde	( m )
$\mu$	perméabilité magnétique	
$\nu$	fréquence	( Hz )
$\rho$	densité locale d'états électromagnétique	( m <sup>-3</sup> .s )
$\omega$	pulsation	( rad.s <sup>-1</sup> )
$\omega_p$	pulsation plasma	( rad.s <sup>-1</sup> )

## Notations normales

$c$	vitesse de la lumière	( m.s <sup>-1</sup> )
$\mathbf{e}$	vecteur de Sipe pour la polarisation $\mathbf{s}$ de la lumière	
$\overline{\overline{G}}$	Tenseur de Green	
$h$	constante de Planck	( J.s <sup>-1</sup> )
$\mathbf{h}$	vecteur de Sipe pour la polarisation $\mathbf{p}$ de la lumière	
$\mathbf{j}$	vecteur courant	
$J$	fonction fitness	
$\mathbf{k}_i$	vecteur d'onde du milieu $\mathbf{i}$	
$\mathbf{k}_{z_i}$	composante orthogonale du vecteur d'onde du milieu $\mathbf{i}$	
$k_B$	constante de Boltzmann	( J.K <sup>-1</sup> )
$\mathbf{K}$	composante parallèle du vecteur d'onde	
$n_i$	indice de réfraction du milieu $i$	
$p_m$	probabilité de mutation	
$Q$	facteur de qualité	
$r$	réflectivité spectrale et directionnelle	
$r_{ij}$	coefficient de réflexion de Fresnel à l'interface entre les milieux $i$ et $j$	
$T$	température	( K )
$t$	transmittivité spectrale et directionnelle	
$t_{ij}$	coefficient de transmission de Fresnel à l'interface entre les milieux $i$ et $j$	
$u$	densité locale d'énergie électromagnétique	( J.m <sup>-3</sup> .s )

## Autres notations

$\hbar$	constante de Planck réduite	( J.s <sup>-1</sup> )
$\mathfrak{S}$	matrice de transfert	

# Introduction générale

---

Le thème central de ce travail concerne la modélisation du rayonnement thermique et plus particulièrement l'étude de matériaux micro ou nanostructurés monodimensionnels pour l'émission thermique cohérente. Contrairement au rayonnement laser, dont le grand intérêt est sa directivité, qui est la manifestation de la cohérence spatiale de la source, les sources thermiques ont longtemps été présentées comme des objets qui émettaient de manière quasi-isotrope (Mandel & Wolf, 1995) sur une large bande spectrale. De récents travaux théoriques et expérimentaux ont permis d'établir que ce paradigme était faux (Carminati & Greffet, 1999; Shchegrov et al., 2000) et qu'il était possible de modifier l'émission thermique de matériaux micro ou nanostructurés. Le rayonnement thermique est le champ émis par un corps à une température  $T$ . Il est dû à une agitation des électrons, des ions, des charges ponctuelles qui constituent la matière. Généralement, on parle de rayonnement thermique lorsque la longueur d'onde d'émission est comprise entre 0.1 et 100  $\mu\text{m}$ . Ce domaine spectral inclut le rayonnement visible, une partie des rayonnements u.v et l'infrarouge. Il n'occupe donc qu'une faible partie du spectre des ondes électromagnétiques. Bien que le rayonnement thermique soit un rayonnement électromagnétique, il est le plus souvent présenté par une approche thermodynamique que l'on nomme la radiométrie. Cette approche est basée sur la notion de corps noir et une description phénoménologique en termes de flux d'énergie fondée sur les hypothèses de l'optique géométrique. La radiométrie permet de traiter de nombreux problèmes de rayonnement thermique et est ainsi très souvent préférée aux notions de champs électromagnétiques. Cependant, il a été démontré expérimentalement et théoriquement que, lorsque l'on veut étudier le rayonnement pour des épaisseurs inférieures à la longueur d'onde, de nombreux phénomènes ondulatoires apparaissent et ne sont pas pris en compte par la radiométrie. Il est alors nécessaire d'étudier le rayonnement thermique par une approche électromagnétique afin de prendre en compte et de comprendre les mécanismes physiques mis en jeu aux petites échelles spatiales.

Nous présenterons donc dans une première partie l'approche radiométrique et la notion de corps noir puis la modélisation électromagnétique basée sur l'approche fluctuatoire des équations de Maxwell. Nous montrerons alors en prenant l'exemple du transfert radiatif entre deux milieux semi-infinis séparés par une distance  $d$ , les limites de l'approche radiométrique lorsque la distance de séparation est petite par rapport à la longueur d'onde et par conséquent la nécessité de l'approche électromagnétique du rayonnement thermique à ces échelles. Ensuite, après avoir défini ce qu'est la cohérence spectrale et spatiale du rayonnement thermique, nous ferons un état de l'art concernant les différentes voies explorées pour concevoir des sources thermiques cohérentes. Jusqu'à ce jour, la conception de ces sources thermiques capables de rayonner dans certaines directions d'espace extrêmement localisées et dans des bandes spectrales très étroites relève d'une démarche pseudo-empirique de type essai-erreur. Or les techniques modernes de nanofabrication permettent désormais d'envisager un design plus rationnel (type bottom-up) qui s'appuie uniquement sur les principes de base de l'optique. Dans ce travail nous franchissons cette étape en développant une technique de design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ lointain et en champ proche. Notre approche est basée uniquement sur les principes premiers de l'optique pour des structures monodimension-



nelles, associés aux propriétés diélectriques des matériaux comme uniques paramètres d'entrée.

Une deuxième partie sera donc consacrée au design inverse de sources thermiques spectralement et/ou spatialement cohérentes en champ lointain. Nous présenterons tout d'abord la méthode des matrices de transfert qui permet de calculer les propriétés radiatives de structures multicouches 1D ainsi que les relations de dispersion des modes résonants dans un système stratifié. Nous présenterons ensuite le processus d'optimisation que nous avons utilisé : l'algorithme génétique (AG). Après avoir décrit le principe général d'un AG et les différentes étapes propres à cette méthode d'optimisation globale, nous détaillerons les spécificités de notre AG appliqué à la conception de sources thermiques cohérentes 1D. L'efficacité de cet outil pour le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente sera alors démontré par la conception d'une source thermique monochromatique et isotrope rayonnant dans le moyen infrarouge et la conception de deux sources partiellement cohérentes dans le proche infrarouge et l'infrarouge thermique. L'étude de la distribution du champ électrique à l'intérieur de la structure lorsque celle-ci est soumise à une excitation externe unitaire nous permettra de mettre en exergue les mécanismes physiques à l'origine de la cohérence du champ rayonné par la structure.

Dans la troisième partie de ce manuscrit, nous nous intéresserons au design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ proche. Cette étude se fera dans le cadre de l'approche fluctuatoire des équations de Maxwell et de la théorie des matrices de diffusion. Nous présenterons le calcul exact de la densité d'énergie électromagnétique à la surface d'un matériau. Pour cela nous introduirons le formalisme des tenseurs de Green, véritable signature optique du milieu, et la méthode des matrices de diffusion, adaptée à notre problème. Cette approche électromagnétique du rayonnement thermique nous permettra alors d'étudier la densité d'énergie électromagnétique au dessus d'un film de carbure de silicium, matériau polaire supportant des phonons polaritons de surface et d'un film d'aluminium, matériau métallique supportant des plasmons polaritons de surface. Nous montrerons ainsi que la densité d'énergie au dessus d'un film gagne plusieurs ordres de grandeurs par rapport à celle au dessus du matériau massif. Enfin, sur la base des résultats obtenus pour la densité d'énergie électromagnétique au dessus d'un film, nous réaliserons le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ proche et nous montrerons sur quelques exemples l'efficacité réitérée du processus d'optimisation qu'est l'algorithme génétique.

Première partie

Chapitre introductif



# Le rayonnement thermique

Le rayonnement thermique est le champ électromagnétique émis par un corps à une température  $T$ . Il est dû à une agitation des électrons, des ions ou des charges ponctuelles qui constituent la matière. Généralement, on parle de rayonnement **thermique** lorsque la longueur d'onde d'émission est comprise entre 1 et 100  $\mu\text{m}$ , c'est à dire lorsque l'on se situe essentiellement dans le domaine infrarouge. Il n'occupe donc qu'une faible partie du spectre électromagnétique (fig. 2.1).

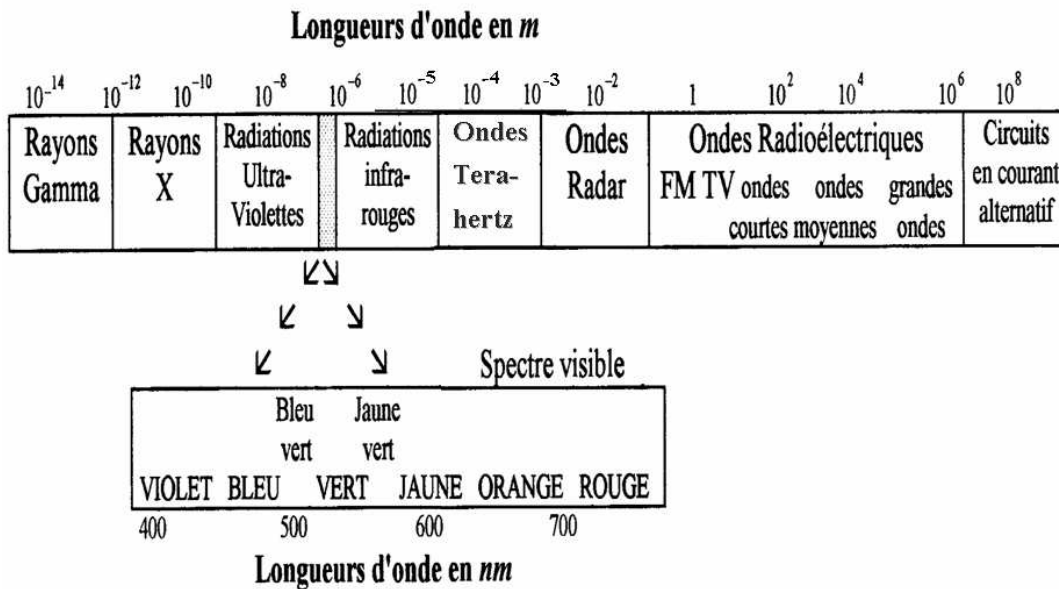


FIG. 2.1 – Spectre du rayonnement électromagnétique.

Bien que le rayonnement thermique soit un rayonnement électromagnétique, il est le plus souvent étudié par une approche thermodynamique, que l'on nomme la radiométrie. Cette approche est basée sur la notion de luminance et repose sur les hypothèses de l'optique géométrique. Elle est néanmoins mise en défaut (Cravalho et al., 1967; Polder & Van Hove, 1971) lorsque les échelles spatiales sont du même ordre de grandeur que la longueur d'onde caractéristique du système étudié, typiquement de l'ordre du micro ou du nanomètre. Il est alors nécessaire d'étudier le rayonnement thermique par une approche électromagnétique (Rytov, 1958; Landau et al., 1980) qui prend en compte la nature ondulatoire de la lumière et les mécanismes physiques qui apparaissent aux petites échelles d'espace mais aussi de temps. Dans ce chapitre, nous commencerons par quelques rappels sur les mécanismes élémentaires d'interaction entre le rayonnement et la matière, puis nous décrirons brièvement l'approche "classique" du rayonnement telle qu'elle a été développée initialement par Planck (1901). Nous présenterons ensuite les principes sur lesquels repose l'approche électromagnétique du rayonnement thermique. Enfin, pour illustrer les limites de la radiométrie, nous calculerons par les deux approches le flux radiatif échangé entre deux milieux semi-infinis séparés par une fine

couche de vide. Cravalho et al. (1967) ont été les premiers à utiliser l’approche développée par Rytov pour étudier le transfert radiatif entre deux plans et ainsi mettre en évidence le rôle joué par les ondes évanescentes. Polder & Van Hove (1971), puis Loomis & Marris (1994) étudièrent aussi le flux échangé entre deux milieux semi-infinis composés de matériaux métalliques et plus récemment l’étude fut étendue à tout type de matériaux (Mulet, 2003; Joulain et al., 2005). C’est sur la base de ces résultats que nous montrerons la nécessité de l’approche électromagnétique aux échelles spatiales sub-longueur d’onde.

## 2.1 Interaction rayonnement-matière

La matière peut absorber ou émettre des ondes électromagnétiques. Nous rappelons ici succinctement les principaux mécanismes d’interaction entre ces ondes et la matière, notamment comment la matière absorbe et réémet le rayonnement. D’un point de vue corpusculaire ou quantique, l’interaction entre un atome et le champ électromagnétique correspond à l’absorption ou l’émission de photons par les atomes.

### 2.1.1 L’absorption

Lorsqu’un atome est soumis à une onde lumineuse, il peut absorber, selon son énergie, un photon. L’atome, initialement dans un état d’énergie électronique  $E_a$  (état fondamental) passe dans un état électronique d’énergie supérieur  $E_b$  (état excité). Pour que ce processus d’absorption soit efficace, l’énergie  $h\nu$  du photon doit être égale à la différence d’énergie  $E_b - E_a$ . Dans le cas d’un système d’atomes à deux niveaux d’énergie ( $E_a < E_b$ ), le nombre d’atomes

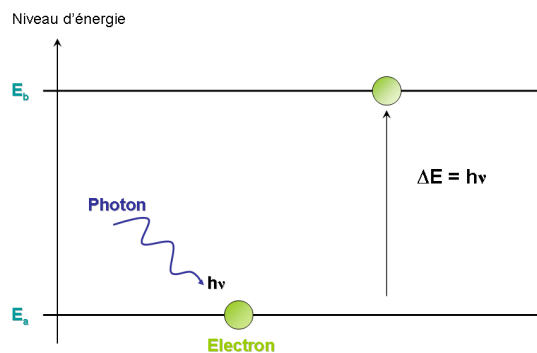


FIG. 2.2 – Mécanisme d’absorption d’un photon par une excitation électronique.

susceptibles d’absorber de l’énergie diminue avec le temps selon la loi

$$dN_a = -B_{ab} u_\nu N_a dt, \quad (2.1)$$

où  $u_\nu$  représente la densité spectrale d’énergie par unité de volume et  $B_{ab}$  représente le coefficient d’Einstein pour l’absorption.

### 2.1.2 L’émission spontanée

Les états électroniques excités ne sont pas stables. De manière plus ou moins rapide, l’atome excité retombe dans son état fondamental (stable) en émettant un photon d’énergie  $h\nu = E_b - E_a$ . Le photon peut être émis dans n’importe quelle direction (l’émission spontanée à l’échelle atomique est isotrope). Si l’on considère de nouveau un système à deux niveaux

d'énergie  $E_a$  et  $E_b$  avec  $E_a < E_b$ , alors la probabilité ou taux d'émission spontanée  $A_{ba}$  par atome et par unité de temps est donnée par

$$dN_b = -A_{ba} N_b dt, \quad (2.2)$$

où  $N_b(t)$  représente le nombre d'atomes dans le niveau excité. L'intégration de cette équation conduit à

$$N_b(t) = N_b(0) e^{-\tau^{-1}t}, \quad (2.3)$$

où  $\tau = 1/A_{ba}$  représente la durée de vie moyenne de l'état excité. À titre d'exemple, pour le laser à  $\text{CO}_2$  à  $10,6 \mu\text{m}$ , la constante d'Einstein  $A_{ba}^{\text{CO}_2} \simeq 0,3 \text{ s}^{-1}$  alors qu'elle est d'environ  $A_{ba}^{\text{HeNe}} \simeq 800 \text{ s}^{-1}$  pour le laser Hélium-Néon à  $633 \text{ nm}$ .

### 2.1.3 L'émission induite ou stimulée

La présence d'un rayonnement incident peut induire l'émission d'un photon ayant les mêmes caractéristiques que les photons incidents à partir d'un atome excité. Mais cela n'est possible que si l'énergie de ces photons incidents est résonante, c'est à dire que  $h\nu = E_b - E_a$ . Le photon créé par l'atome en se désexcitant est émis à la même fréquence et suivant la même direction de propagation que le rayonnement incident. En outre, il se raccroche en phase avec le photon incident. Ce processus qui permet d'amplifier une onde lumineuse est à la base du fonctionnement des lasers. Ainsi, le photon stimulé prend strictement les mêmes caractéris-

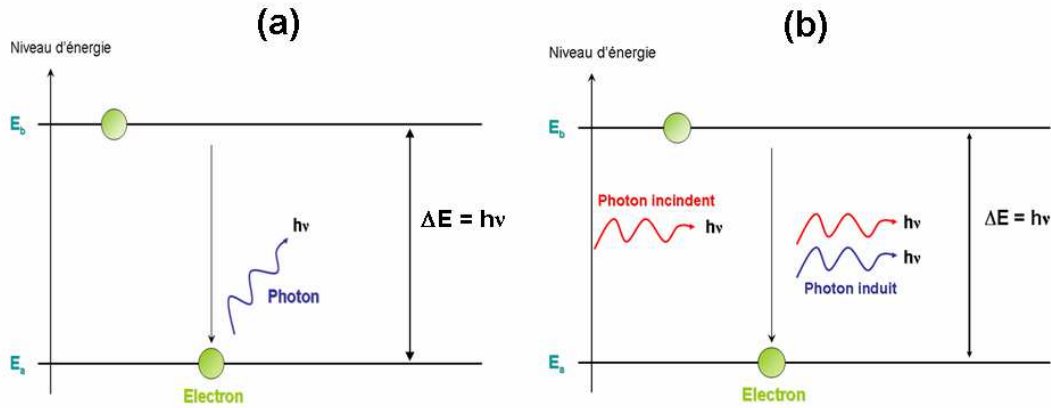


FIG. 2.3 – Mécanismes d'émission spontanée (a) et induite (b) par desexcitation électronique et excitation stimulée.

tiques que celles des photons incidents, d'où une cohérence du rayonnement lumineux qui en résulte (l'émission induite n'est pas isotrope), au contraire du rayonnement thermique émis par une ampoule à filament qui correspond à l'émission de photons à différentes fréquences et dans n'importe quelle direction et qui est donc *a priori* incohérent. Le processus d'émission induite est par de nombreux points analogue à celui d'absorption. L'évolution des population d'atomes excités et stables est régit par des équations analogues à celle que l'on a dans le processus d'absorption. En particulier pour un système d'atomes à deux niveaux d'énergie, on a

$$dN_b = -B_{ind} u_\nu N_b dt, \quad (2.4)$$

$$dN_a = B_{ind} u_{\nu_0} N_b dt, \quad (2.5)$$

où  $B_{ind} \equiv B_{ba}$  est le coefficient d'Einstein pour l'émission stimulée (identique à celui de l'absorption).

## 2.2 L'approche radiométrique

### 2.2.1 Rayonnement du corps noir

Un corps noir est, par définition, un milieu idéal qui absorbe et réémet toute l'énergie électromagnétique qu'il reçoit sans en réfléchir ni en transmettre. Ce corps est à l'équilibre thermodynamique, c'est à dire que tous les atomes ont en moyenne la même vitesse. Ceci implique que le rayonnement thermique qu'il émet est exactement égal au rayonnement qu'il absorbe. Il s'en suit que ses propriétés radiatives et notamment la distribution spectrale de celui-ci, ne dépendent que de sa température.

Dans le cas d'un système d'atomes à deux niveaux d'énergie ( $E_a < E_b$ ) de même dégénérescence, la variation du nombre d'atomes excités due à l'absorption et à l'émission de photons est donnée, compte tenu de ce que nous avons écrit précédemment, par :

$$\frac{dN_b}{dt} = -A_{ba} N_b - B_{ba} u_\nu N_b + B_{ab} (N - N_b) u_\nu, \quad (2.6)$$

où  $N = N_a + N_b$  est le nombre total d'atomes. En procédant de manière identique pour la population  $N_a$  d'atomes stables et en remarquant que,  $dN_a/dt = dN_b/dt$ , il vient

$$N_b = \frac{u_\nu B_{ab}}{A_{ba} + u_\nu (B_{ab} + B_{ba})} N, \quad (2.7)$$

$$N_a = \frac{A_{ba} + u_\nu B_{ba}}{A_{ba} + u_\nu (B_{ab} + B_{ba})} N. \quad (2.8)$$

Or, à l'équilibre thermodynamique (c'est le cas du corps noir), la loi de Boltzmann donne la population d'un état en fonction de son énergie, de sorte que

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{A_{ba} + u_\nu B_{ba}}{u_\nu B_{ab}} = \exp \left[ \frac{(E_b - E_a)}{k_B T} \right]. \quad (2.9)$$

Lorsque  $T$  tend vers l'infini, la densité spectrale tend aussi vers l'infini et l'exponentielle ci-dessus tend vers 1, de sorte que l'on obtient directement l'expression

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{B_{ba}}{B_{ab}} = 1. \quad (2.10)$$

Il s'en suit que

$$\frac{A_{ba} + u_\nu B_{ab}}{u_\nu B_{ab}} = \exp \left[ \frac{(E_b - E_a)}{k_B T} \right]. \quad (2.11)$$

Ainsi, puisque  $E_b - E_a = h\nu$

$$u_\nu = \frac{A_{ba}}{B_{ab} \left( \exp \left[ \frac{(h\nu)}{k_B T} \right] - 1 \right)}. \quad (2.12)$$

Or, on a aussi

$$u_\nu = h \nu n_\nu, \quad (2.13)$$

où  $n_\nu$  est la densité de photons à la fréquence  $\nu$ . De surcroît, cette distribution est donnée par la statistique de Bose-Einstein

$$n_k = \frac{1}{\exp \left[ \frac{(h\nu)}{k_B T} \right] - 1}, \quad (2.14)$$

comme

$$n_\nu = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} n_k, \quad (2.15)$$

il vient

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left[\frac{h\nu}{k_B T}\right] - 1}. \quad (2.16)$$

La loi de Planck (1901) qui décrit la distribution spectrale du corps noir s'écrit alors

$$L^\circ_\omega(T) = \frac{c}{4\pi} u_\omega = \frac{2\hbar\omega^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}, \quad (2.17)$$

$L^\circ_\omega(T)$  étant la luminance spectrale du corps noir, c'est à dire une puissance rayonnée par unités d'angle solide, de surface apparente et spectrale. Cette grandeur est en  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ .

Écrite en fonction de la longueur d'onde, la fonction de Planck prend la forme <sup>1</sup>

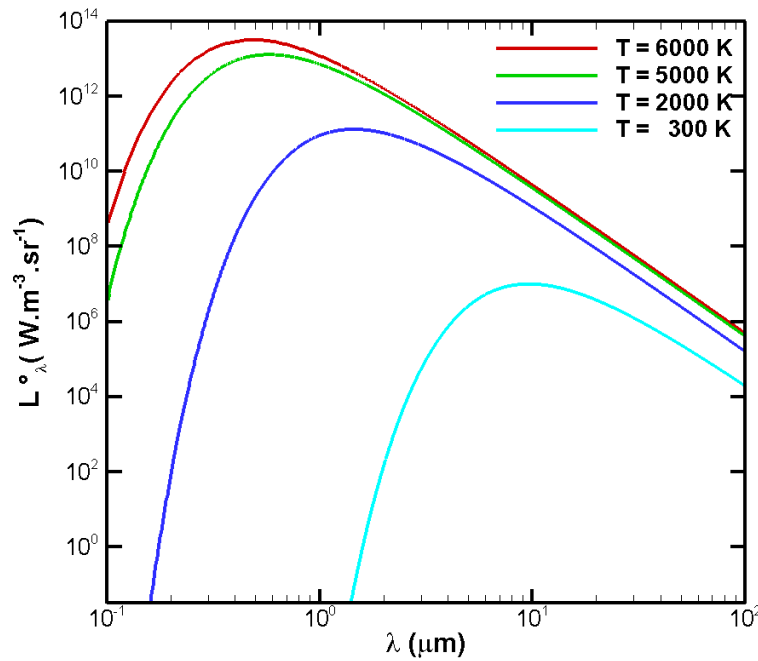


FIG. 2.4 – Luminance monochromatique du corps noir à différentes températures (échelle Log-Log).

$$L^\circ_\lambda(T) = \frac{2hc^2\lambda^{-5}}{e^{\frac{hc}{\lambda T}} - 1} \quad \text{en } \text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}. \quad (2.18)$$

Ce qu'il convient essentiellement de retenir dans cette fonction, c'est d'une part qu'elle est indépendante de la direction d'émission et qu'elle s'étale sur une large bande spectrale (nous verrons au chapitre suivant que cela traduit une absence de cohérence spatio-temporelle du champ rayonné par le corps noir) et d'autre part que les courbes qui décrivent l'émission spectrale du corps noir à différentes températures ont toutes la même forme et sont "emboîtées" les unes dans les autres. On peut voir sur la figure 2.4 que la densité spectrale du corps noir est d'autant plus importante que sa température est élevée. La fonction de Planck, passe par un maximum dont la position, à une température  $T$ , est donnée par la loi du déplacement de Wien (1893)

$$\lambda_{max} (\mu\text{m}) = \frac{2898}{T (K)}. \quad (2.19)$$

<sup>1</sup>lorsque qu'on effectue ce passage en luminance en fonction de la longueur d'onde, l'élément différentiel est conservé, à savoir :  $L^\circ_\lambda d\lambda = L^\circ_\omega d\omega$



Il découle de cette loi que plus un objet est chaud, plus la longueur d'onde du rayonnement qu'il émet est courte. Par exemple, pour le soleil, sa température de surface est de 5 780 K, ce qui correspond à un maximum d'émission vers 500 nm, dans le spectre visible. Cette lumière nous apparaît comme jaune. Les étoiles plus chaudes émettent à des longueurs d'onde plus courtes et apparaissent bleutées, tandis que les étoiles plus froides semblent rougeâtres. Il est important de noter que 25 % de l'énergie thermique d'un corps noir à une température  $T$  est émis entre  $\lambda = 0$  et  $\lambda = \lambda_{max}$  et 75 % au-delà de cette fréquence. Enfin, 98 % du rayonnement est émis entre  $\lambda_{max}/2$  et  $8\lambda_{max}$ . Ainsi, à une température de 300 K ( $\lambda_{max} \simeq 10 \mu\text{m}$ ), un corps noir émet en majorité entre 5 et 30  $\mu\text{m}$  (fig.2.5). Rappelons aussi la loi de Stefan-Boltzmann,

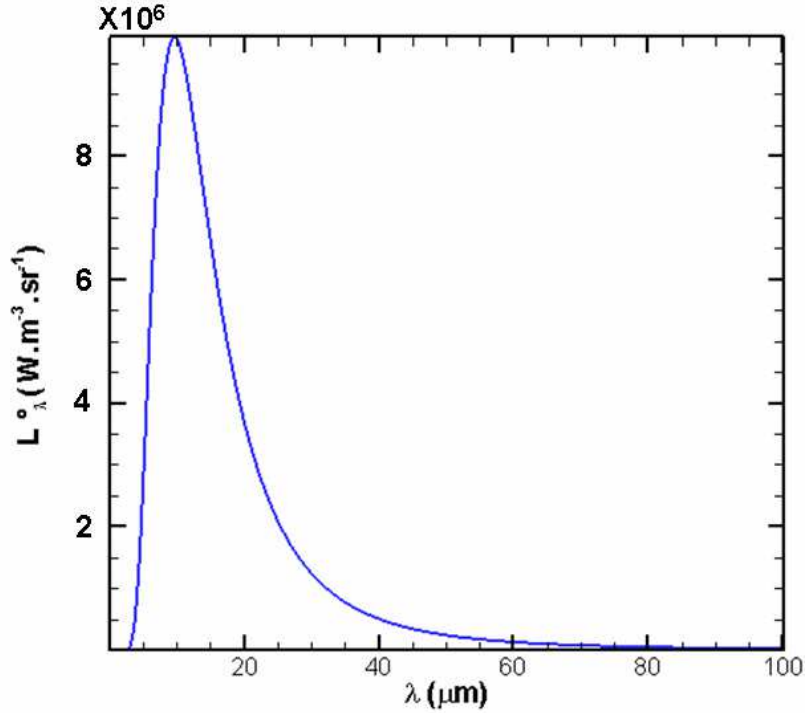


FIG. 2.5 – Luminance monochromatique du corps noir à la température de 300 K.

qui permet d'exprimer la puissance rayonnée par unité de surface par un corps noir. Cette loi s'obtient par intégration de la fonction de Planck sur l'ensemble du spectre (Siegel & Howell, 2001)

$$L(T) = \int_0^{\infty} L_{\lambda}(T) d\lambda = \frac{\sigma T^4}{\pi}, \quad (2.20)$$

où  $\sigma = \pi^2 k_B^4 / 60 \hbar^3 c^2 = 5.67040010^{-8} \text{J} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$  désigne la constante de Stefan-Boltzmann.

## 2.2.2 Rayonnement du corps réel

Comme nous l'avons précisé au paragraphe précédent, le corps noir est un objet idéal. Contrairement aux corps noirs, les corps réels n'absorbent et n'émettent qu'une partie du rayonnement en fonction de l'angle d'incidence et de la longueur d'onde. Les propriétés d'absorption de ces objets, à une longueur d'onde donnée, s'expriment généralement en fonction de celles du corps noir placé à la même température. Ainsi, la luminance monochromatique directionnelle émise par un corps réel à la température  $T$ , c'est à dire l'énergie qu'il émet par unité d'angle solide  $d\Omega$  dans la direction  $\vec{\Omega}$  et autour de la longueur d'onde  $\lambda$  (fig. 2.6), est donnée par

$$L^{\text{réel}}(\lambda, \theta) = \alpha(\lambda, \theta) L^{\circ}(\lambda, \theta). \quad (2.21)$$

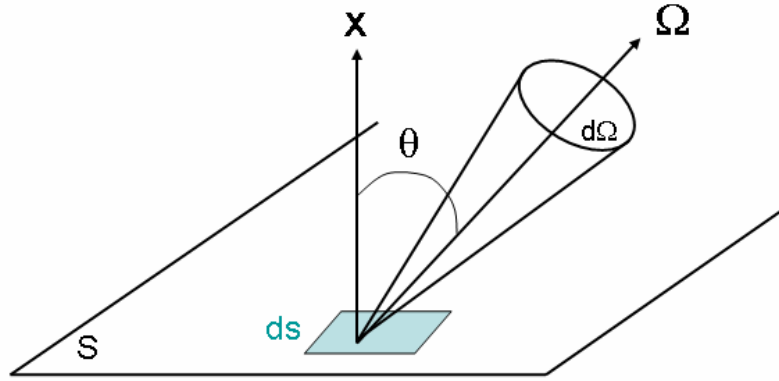


FIG. 2.6 – Schématisation de l'émission monochromatique directionnelle par un corps réel à la température  $T$ .

Cette relation est la première loi de Kirchoff et permet de définir le coefficient d'absorption spectral et directionnel  $\alpha$  du corps réel. On définit de même l'émissivité spectrale et directionnelle de ce milieu à partir de la relation

$$L^{\text{réel}}(\lambda, \theta) = \epsilon(\lambda, \theta)L^{\circ}_{\lambda}(T, \theta). \quad (2.22)$$

D'après la deuxième loi de Kirchoff, l'absorptivité spectrale et hémisphérique d'un corps réel est égale à son émissivité de sorte que

$$\alpha(\lambda, \theta) = \epsilon(\lambda, \theta) \quad (2.23)$$

Enfin, si au lieu d'être absorbé, le rayonnement incident sur une paroi est directement renvoyé par la paroi, on parle dans ce cas de réflexion. Si cette réflexion obéit aux lois de l'optique géométrique, on définit alors un coefficient de réflexion spectral et directionnel  $r(\lambda, \theta)$ . La conservation de l'énergie électromagnétique lors du processus d'interaction avec ce milieu impose alors la relation

$$\epsilon(\lambda, \theta) = 1 - r(\lambda, \theta) - t(\lambda, \theta) \quad (2.24)$$

où  $t(\lambda, \theta)$  désigne le coefficient de transmission spectral et directionnel du milieu.

Nous allons maintenant appliquer cette approche phénoménologique au calcul du flux radiatif échangé entre deux milieux semi-infinis séparés par une couche de vide d'épaisseur  $d$  (fig. 2.7) [Au paragraphe suivant, nous ferons ce calcul par une approche électromagnétique. La comparaison des résultats obtenus par les deux approches nous permettra alors de mettre en évidence les limites de la radiométrie lorsque la longueur caractéristique du système (ici la distance entre les deux milieux) est petite devant la longueur d'onde de Wien].

Le flux net  $\Phi_{1,2}$  échangé entre ces deux milieux est alors défini par

$$\Phi_{1,2} = \Phi_{1 \rightarrow 2} - \Phi_{2 \rightarrow 1}, \quad (2.25)$$

où  $\Phi_{1 \rightarrow 2}$  est le flux allant du milieu 1 vers le milieu 2 et  $\Phi_{2 \rightarrow 1}$  est le flux allant du milieu 2 vers le milieu 1. Le flux élémentaire  $d\phi_{1 \rightarrow 2}$  émit dans l'angle solide  $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$  s'obtient en sommant toutes les contributions dues aux multiréflexions

$$d^2\phi_{1 \rightarrow 2} = \epsilon'_{1\omega} \left( 1 + r'_{1\omega}r'_{2\omega} + (r'_{1\omega}r'_{2\omega})^2 + \dots \right) \epsilon'_{2\omega} L^{\circ}_{\omega}(T_1) \cos\theta d\Omega d\omega, \quad (2.26)$$

où  $\epsilon'_{1\omega}$  et  $\epsilon'_{2\omega}$  sont respectivement les émissivités spectrales et directionnelles des milieux 1 et 2,  $r'_{1\omega}$  et  $r'_{2\omega}$  les réflectivités et  $L^{\circ}_{\omega}(T_1)$  est la luminance monochromatique du corps noir à la

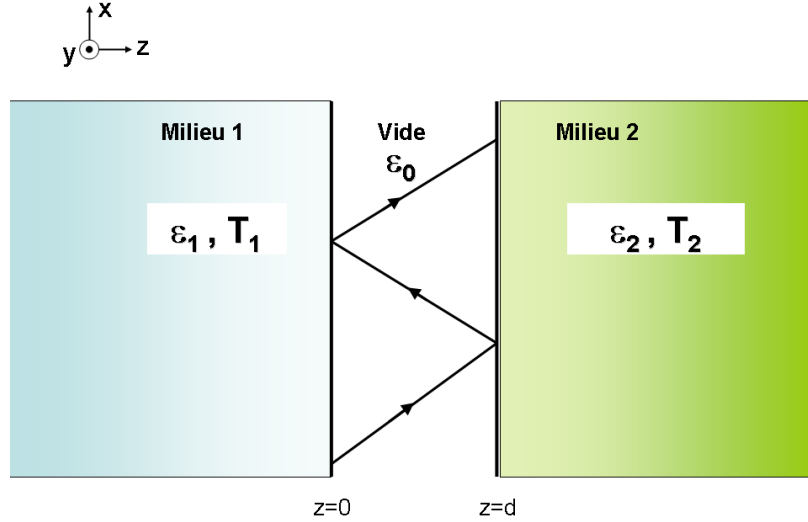


FIG. 2.7 – Configuration du système.

température  $T_1$ . En remarquant que l'expression entre parenthèses dans la relation 2.26 est une série géométrique de raison  $r'_{1\omega} r'_{2\omega}$ , il est facile de voir que

$$d^2\phi_{1\rightarrow 2} = \frac{\epsilon'_{1\omega} \epsilon'_{2\omega}}{1 - r'_{1\omega} r'_{2\omega}} L^\circ_\omega(T_1) \cos\theta d\Omega d\omega. \quad (2.27)$$

En intégrant alors cette expression sur tout le spectre et sur le demi-espace supérieur (intégration sur  $2\pi$  stéradian,  $\theta$  variant de 0 à  $2\pi$ ), le flux net émis par le milieu 1 et absorbé par le milieu 2 s'exprime sous la forme

$$\phi_{1\rightarrow 2} = \int_{2\pi} \cos\theta d\Omega \int_0^\infty d\omega \frac{\epsilon'_{1\omega} \epsilon'_{2\omega}}{1 - r'_{1\omega} r'_{2\omega}} L^\circ_\omega(T_1). \quad (2.28)$$

De la même manière on peut calculer le flux émis par le milieu 2 et absorbé par le milieu 1

$$\phi_{2\rightarrow 1} = \int_{2\pi} \cos\theta d\Omega \int_0^\infty d\omega \frac{\epsilon'_{1\omega} \epsilon'_{2\omega}}{1 - r'_{1\omega} r'_{2\omega}} L^\circ_\omega(T_2). \quad (2.29)$$

Le flux net échangé entre les deux milieux devient alors

$$\phi_{1,2} = \int_{2\pi} \cos\theta d\Omega \int_0^\infty d\omega \frac{\epsilon'_{1\omega} \epsilon'_{2\omega}}{1 - r'_{1\omega} r'_{2\omega}} (L^\circ_\omega(T_1) - L^\circ_\omega(T_2)). \quad (2.30)$$

Cette quantité est indépendante de la distance de séparation entre les deux milieux. On peut alors définir un coefficient d'échange radiatif entre les deux milieux par

$$h_{rad}^R(T_1) = \lim_{T_2 \rightarrow T_1} \frac{\phi_{1,2}}{T_2 - T_1}. \quad (2.31)$$

D'après l'équation 2.30 du flux net échangé, ce coefficient est indépendant de la distance de séparation  $d$  (fig. 2.8).

### 2.3 L'approche électromagnétique

Lorsque l'on s'intéresse au transfert radiatif au sein de structures dont la taille est inférieure à la longueur d'onde ou lorsque l'on étudie le rayonnement émis par ces structures à

une distance de l'ordre de la longueur d'onde d'émission, il est nécessaire d'avoir recours à une approche électromagnétique du rayonnement thermique. En effet, à cette échelle, les effets ondulatoires (interférences, effet tunnel,...) deviennent importants et seule une approche électromagnétique permet de les appréhender. Cette approche repose sur les équations de Maxwell (1873), qui relient les champs électriques et magnétiques aux sources de courants fluctuants  $\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, \omega)$  et  $\mathbf{j}_m(\mathbf{r}, \omega)$  (Rytov, 1953)

$$\nabla \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mu_0 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{j}_m(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.32)$$

$$\nabla \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{j}_e(\mathbf{r}, \omega) + i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.33)$$

Dans un milieu nonmagnétique (ce qui est toujours le cas dans ce mémoire)  $\mu = 1$  et  $\mathbf{j}_m = 0$ . Le flux d'énergie radiatif transporté par le champ électromagnétique est alors donné par la moyenne statistique du vecteur de Poynting

$$\langle \Pi(\mathbf{r}, \omega) \rangle = \frac{1}{2} \langle \text{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r}, \omega)] \rangle, \quad (2.34)$$

où la moyenne  $\langle \rangle$  est calculée sur toutes les réalisations du courant électrique fluctuant (Loomis & Marris, 1994). Le calcul du vecteur de Poynting s'obtient alors à partir des tenseurs de Green électrique et magnétique associé au milieu étudié. On ne développera pas ici ce calcul. Pour cela, on renvoie le lecteur à l'article de revue de Joulain et al. (2005).

Nous allons maintenant étudier le transfert radiatif entre deux milieux semi-infinis séparés par une couche de vide d'épaisseur  $d$ . Le système considéré est identique à celui présenté lors de l'approche radiométrique (fig. 2.7). Le calcul par l'approche électromagnétique du flux net échangé entre les deux milieux est ici plus complexe. Notre but dans cette étude est simplement de mettre en évidence la non prise en compte par la radiométrie de la nature ondulatoire de la lumière. Nous ne donnerons donc que les principaux résultats (voir (Mulet, 2003) pour le calcul complet).

On considère un champ électromagnétique émis par le milieu 1 et absorbé par le milieu 2 et inversement, un champ émis par le milieu 2 et absorbé par le milieu 1. Pour décrire le flux net échangé, il suffit de calculer la différence suivante

$$P(d, \omega, T_1, T_2) = \langle \Pi_z(d^+, \omega) \rangle - \langle \Pi_z(0^-, \omega) \rangle. \quad (2.35)$$

En linéarisant cette grandeur par rapport à la différence de température, on peut en déduire un coefficient de transfert radiatif monochromatique  $h_\omega^R(d, T_1)$  donné par

$$h_\omega^R(d, T_1) = \lim_{T_2 \rightarrow T_1} \frac{P(d, \omega, T_1, T_2)}{T_2 - T_1}. \quad (2.36)$$

En intégrant sur tout le spectre, nous pouvons définir un coefficient de transfert radiatif total  $h^R(d, T_1)$

$$h^R(d, T_1) = \int_0^\infty d\omega h_\omega^R(d, T_1), \quad (2.37)$$

et ainsi calculer le flux net d'énergie  $\Delta\Phi$  par unité de surface

$$\Delta\Phi = h^R(d, T_1) \Delta T. \quad (2.38)$$

Ce calcul réalisé par Mulet (2003) a conduit à l'expression suivante

$$h_\omega^R(d, T_1) = h_\omega \left\{ \int_0^{k_0} K \frac{dK}{k_0^2} \sum_j \frac{(1 - |r_{31_j}|^2)(1 - |r_{32_j}|^2)}{|1 - r_{31_j} r_{32_j} e^{-2ik_{z_3} d}|^2} + \int_{k_0}^\infty K \frac{dK}{k_0^2} \sum_j \left[ \frac{4\text{Im}(r_{31_j}) \text{Im}(r_{32_j})}{|1 - r_{31_j} r_{32_j} e^{+2k_{z_3} d}|^2} \right] e^{+2k_{z_3} d} \right\}, \quad (2.39)$$

où  $\dot{h}_\omega = \partial L_\omega(T)/\partial T$  et  $k_0 = \omega/c$  désigne le vecteur d'onde dans le vide. La somme opère ici sur les deux états de polarisation de la lumière.  $r_{lm}$  sont les coefficients de réflexion de Fresnel et  $k_{z_i} = k'_{z_i} + ik''_{z_i}$  (avec  $k''_{z_i} < 0$ ) est la composante orthogonale du vecteur d'onde dans le milieu  $i$ . La première intégration, entre 0 et  $k_0$  correspond à la contribution des ondes propagatives et la deuxième intégration correspond à la contribution des ondes évanescentes. En effet, on peut montrer (Joulain et al., 2005), en passant à la limite des courtes longueurs d'onde (c'est l'hypothèse de l'optique géométrique) que la contribution propagative au coefficient de transfert  $h^R$  est identique à celle que l'on a obtenue au paragraphe précédent. Sur la figure 2.8

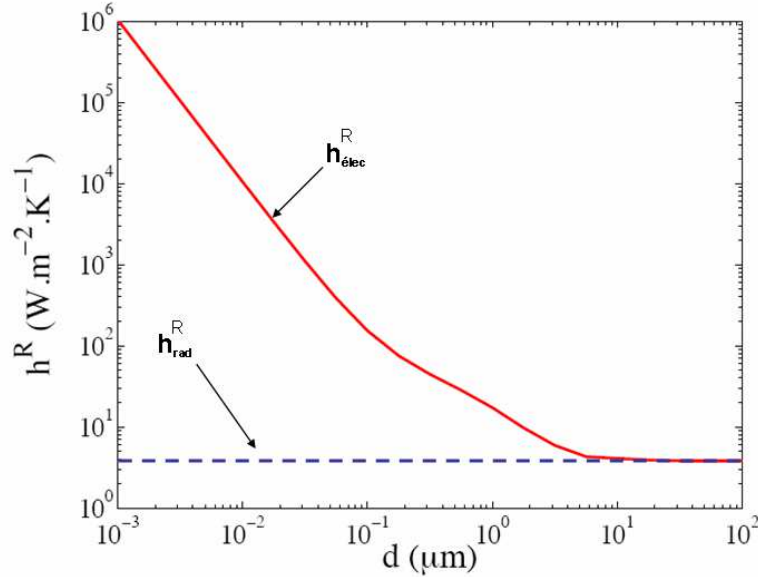


FIG. 2.8 – Coefficient de transfert radiatif total à 300 K entre deux milieux semi-infinis de carbure de silicium en fonction de la distance  $d$  par l'approche électromagnétique (trait rouge) ((Mulet, 2003)) et par l'approche radiométrique (trait bleu).

sont représentés les fonctions  $h_{rad}^R$  et  $h_{elec}^R$  en fonction de la distance de séparation  $d$ , dans le cas de deux milieux semi-infinis de carbure de silicium (SiC) à  $T \simeq 300$  K. Lorsque  $d$  est supérieure à  $10 \mu\text{m}$ , le transfert est indépendant de la distance de séparation. En revanche, à plus courte distance, le transfert calculé par l'approche électromagnétique augmente en  $1/d^2$  alors qu'il demeure constant lorsque l'on utilise l'approche radiométrique classique. Cette déviation est directement liée à la contribution des modes évanescents supportés par le SiC autour de  $10 \mu\text{m}$  (longueur d'onde de Wien). Ce problème illustre ainsi parfaitement les limites de l'approche radiométrique qui reste un outil efficace en champ lointain mais qui est clairement inapproprié en champ proche.

# Etat de l'art sur l'émission thermique cohérente

---

Nous commencerons dans ce chapitre par rappeler brièvement la notion de cohérence d'un champ. Nous détaillerons ensuite les principales structures qui présentent une émission thermique cohérente en nous attachant sur la description des mécanismes physiques qui sont à l'origine de cette cohérence.

## 3.1 Émission cohérente

La cohérence d'un champ  $\mathbf{E}$  est directement reliée au caractère ondulatoire de ce champ. Il s'agit d'une grandeur qui permet de quantifier la qualité des interférences spatio-temporelles du champ (on parle alors de degré de cohérence). La cohérence du champ est décrite par la fonction de corrélation croisée qui est encore appelée fonction de corrélation du 2<sup>ème</sup> ordre :  $\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t_1) \mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle$ . Cette fonction permet d'évaluer la possibilité de prédire la valeur du champ en  $\mathbf{r}_2$  à l'instant  $t_2$  connaissant sa valeur en  $\mathbf{r}_1$  à l'instant  $t_1$ . Les crochets représentent ici la moyenne statistique ou moyenne d'ensemble (prise sur toutes les réalisations possibles du champ) du produit  $\mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t_1) \mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t_2)$ . En guise d'exemple, considérons le cas de deux champs parfaitement corrélés à tout instant. Alors, lorsque le premier champ évolue, le second change de la même manière. La combinaison de ces deux champs est constructive et conduit à des franges d'interférences qui s'additionnent. Ainsi, la mesure du degré d'interférence peut se faire par une expérience d'interférométrie.

### 3.1.1 Cohérence temporelle

La cohérence temporelle (ou spectrale) d'un champ est la mesure de la corrélation moyenne du champ en deux instants  $t_1$  et  $t_2$ . Dans ce cas, la fonction de corrélation caractérise la mémoire du champ. Cette mémoire peut être mesurée directement à partir d'une expérience d'interférométrie de Michelson. Cette expérience permet en effet de mesurer le déphasage entre deux champs (monochromatiques) pour une différence de marche donnée. Le temps de corrélation  $\tau_c$  correspond alors au temps où la fonction de corrélation  $\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, 0) \mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t_2 - t_1) \rangle$  s'annule. Ce temps est relié, d'après le théorème de Wiener-Khinchin (Mandel & Wolf, 1995) à la largeur spectrale  $\Delta \nu$  du champ par la relation

$$\tau_c \Delta \nu \simeq 1. \quad (3.1)$$

On peut donc augmenter le temps de cohérence en diminuant la largeur spectrale du champ. De manière équivalente, on peut définir la cohérence en terme de longueur d'onde

$$L_c \frac{\Delta \lambda}{\lambda^2} \simeq 1, \quad (3.2)$$

où  $L_c$  représente la longueur de cohérence.

### 3.1.2 Cohérence spatiale

La cohérence spatiale d'un champ décrit la possibilité qu'ont deux points  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  d'interférer à un instant donné  $t$ . Pour mesurer cette cohérence spatiale, on définit généralement la densité spectrale croisée du champ dans le plan de la source par

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t + \tau) \rangle e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (3.3)$$

D'après les propriétés de la transformée de Fourier on a

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \delta(\omega - \omega') = \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_2, \omega') \rangle, \quad (3.4)$$

où  $*$  représente le complexe conjugué. La densité spectrale croisée du champ permet donc de mesurer directement la corrélation spatiale du champ entre  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  à la fréquence  $\omega$ . D'autre part, d'après Mandel & Wolf (1995), il existe une relation entre la densité spectrale et la luminance monochromatique et directionnelle  $L(\mathbf{k}, \omega)$  ( $\mathbf{k}$  étant le vecteur d'onde associé au champ)

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \propto \int L(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} d\mathbf{K}, \quad (3.5)$$

où  $\mathbf{K}$  désigne la composante parallèle du vecteur d'onde. Comme par ailleurs, d'après la relation 2.22,  $L(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon(\mathbf{k}, \omega) L_T(\omega)$ , on a également

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \propto \int \epsilon(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} d\mathbf{K}. \quad (3.6)$$

Or, au voisinage d'un mode résonant l'émissivité peut se développer sous la forme (Maystre & Nevière, 1977)

$$\epsilon = 1 - r^\circ \left| \frac{K - K^z}{K - K^p} \right|^2, \quad (3.7)$$

où  $K^z$  et  $K^p$  représentent le zéro et pôle de la réflectivité du milieu et  $r^\circ$  est une constante. L'insertion de cette expression dans celle de la densité spectrale conduit alors à la relation

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \propto 2\pi \delta(|r_2 - r_1|) + A e^{iK^p|r_2 - r_1|}. \quad (3.8)$$

La longueur de cohérence spatiale  $L_c$  du champ émis par la source est donc égale à la longueur de décroissance  $1/K^p$  de la densité spectrale croisée

$$L_c = \frac{1}{K^p} \approx \frac{\lambda}{\Delta\theta} \quad (3.9)$$

D'après le développement de l'émissivité en fonction du pôle  $K^p$  et comme

$$K = \frac{\omega}{c} \sin\theta, \quad (3.10)$$

en fonction de l'angle d'émission  $\theta$ , on peut montrer (Laroche et al., 2006) que la longueur de cohérence spatiale devient en fonction de la longueur d'onde d'émission

$$L_c = \frac{\lambda}{\pi \Delta\theta \cos\theta_0}, \quad (3.11)$$

où  $\Delta\theta$  représente l'ouverture angulaire correspondant à la largeur à mi-hauteur de l'émissivité au niveau du lobe d'émission (position de la résonance) et  $\theta_0$  indique la position angulaire de ce lobe. Il est donc clair, à la lumière de cette relation, qu'une source fortement directionnelle est la signature d'une grande cohérence spatiale. Notons pour conclure que les fonctions de

corrélations du 2<sup>eme</sup> ordre des champs électrique  $\mathbf{E}$  et magnétique  $\mathbf{H}$  pour un corps noir s'écrivent simplement (Mandel & Wolf, 1995)

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t_1) \mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle = \frac{\pi^2 k_B^4 T^4}{30 \varepsilon_0 \hbar^3 c^3} \quad (3.12)$$

$$\langle \mathbf{H}(\mathbf{r}_1, t) \mathbf{H}(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle = \frac{\pi^2 k_B^4 T^4}{30 \varepsilon_0 \hbar^3 c^5}, \quad (3.13)$$

ce qui confirme, comme nous l'avions affirmé au paragraphe précédent, que le rayonnement du corps noir est incohérent.

## 3.2 Les sources thermiques à émission cohérente

Nous avons vu au paragraphe précédent que le champ rayonné par un corps noir est incohérent. Cependant nous allons voir dans ce paragraphe qu'il est désormais possible de concevoir des sources thermiques possédant un certain degré de cohérence.

### 3.2.1 Les réseaux de surface

Carminati & Greffet (1999), puis Shchegrov et al. (2000), ont montré que la présence d'ondes de surface sur un matériau émettant permet d'obtenir une grande cohérence spatiale en champ proche (bien supérieure à la longueur d'onde du mode de surface). Ce comportement résulte de l'excitation de l'onde de surface par les courants fluctuants. Cependant le champ cohérent reste confiné au voisinage de l'interface. Or, on sait depuis les travaux de Hesketh et al. (1986) que des plasmon-polaritons de surface peuvent être diffractés en ondes propagatives à l'aide de réseaux de surface. Un résultat analogue a été obtenu plus récemment avec des phonon-polaritons de surface (Le Gall et al., 1997). En 2002, (Greffet et al., 2002) ont montré que du carbure de silicium surmonté par un réseau de surface du même matériau pouvait émettre un champ spatialement cohérent et était donc capable d'exporter la cohérence spatiale des ondes de surface en champ lointain (fig. 3.1). Des travaux plus récents (Marquier, 2004; La-roche, 2005) ont permis d'obtenir des résultats analogues avec d'autres matériaux. Cependant, la principale limitation de ces sources thermiques est que la forte directivité n'est observée qu'en polarisation  $p$ , où existe une onde de surface. Ainsi, en polarisation  $s$ , le rayonnement émis par ces structures demeure incohérent.

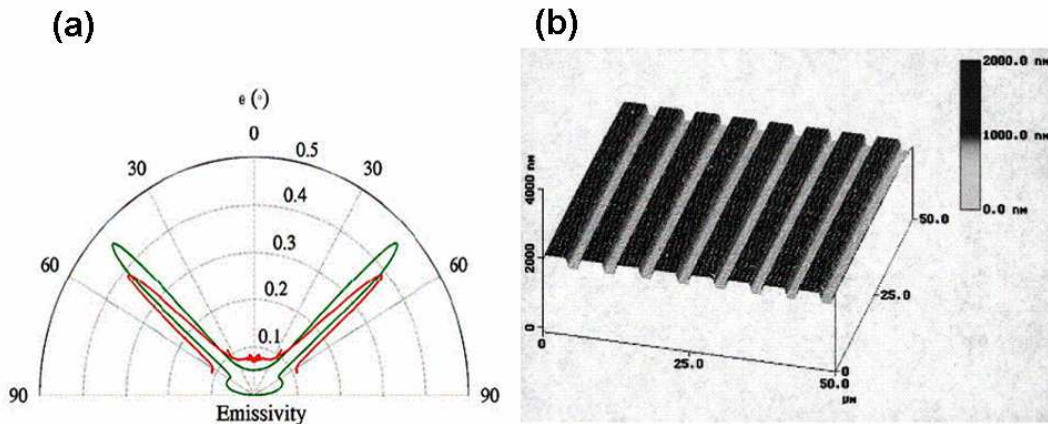


FIG. 3.1 – (a) Diagramme angulaire d'émission en polarisation  $p$  d'un réseau gravé sur une surface de SiC par mesure expérimentale (en rouge) et par calcul théorique (en vert). (b) Image AFM du réseau de SiC. (Mulet, 2003)



### 3.2.2 Les cristaux photoniques

L'une des grandes avancées dans cette recherche du contrôle du degré de cohérence de l'émission thermique a été obtenue avec des cristaux photoniques (PCs) (fig.3.2). Les cristaux photoniques sont des structures périodiques de matériaux diélectriques ou métalliques conçues pour modifier la propagation des ondes électromagnétiques de la même manière qu'un potentiel électrique périodique dans un cristal semi-conducteur affecte le déplacement des électrons en créant des bandes d'énergies autorisées et des bandes d'énergie interdites. La périodicité de matériaux diélectriques ou métalliques permet de créer des structures d'interférences destructives au sein des PCs qui inhibent totalement la propagation des photons. E.Yablonovitch (1987) et S.John (1987) furent les premiers à introduire ce concept de PCs

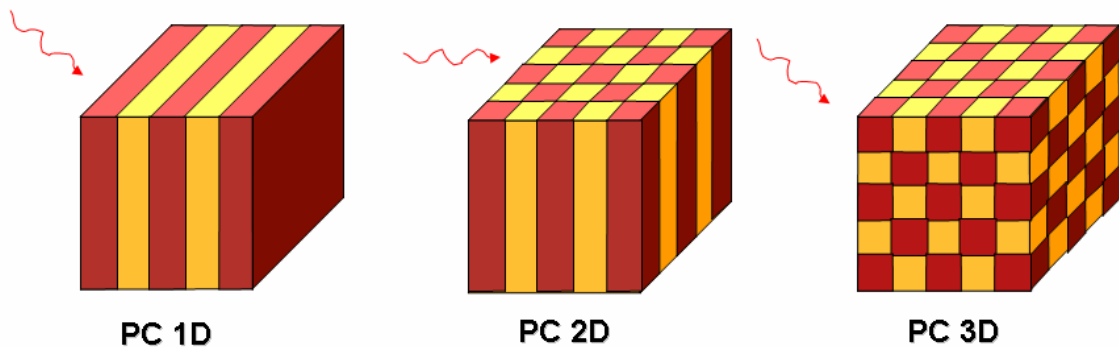


FIG. 3.2 – Schéma de principe des cristaux photoniques 1D, 2D et 3D.

et de bandes interdites photoniques (BIPs) en mettant en évidence la possibilité de créer des structures 2D ou 3D qui permettent l'inhibition de l'émission spontanée dans certaines bandes de fréquence. Deux types de BIPs ont été réalisées avec des PCs. Le premier consiste en une inhibition directionnelle partielle des photons dans une certaine bande spectrale. Seules certaines directions de propagation sont interdites. Ce type de bande interdite partielle a été mis à profit (Kesler et al., 1996; Sigalas et al., 1997; Biswas et al., 2001; Brown & McMahon, 1995) pour concevoir des sources thermiques directionnelles. Le deuxième type de bande interdite conduit à une inhibition omnidirectionnelle des photons dans une certaine bande spectrale (Lin et al., 2003). Cette propriété est aujourd'hui mise à profit pour synthétiser des miroirs parfaits.

L'introduction d'un défaut au sein des PCs a également permis, en brisant la périodicité de la structure, d'inclure des modes résonants localisés dans les bandes interdites (fig.3.3) (Yablonovitch et al., 1991; Ozbay et al., 1995; Lin et al., 1996; Sang et al., 2004, 2005; Ben-Adballah & Ni, 2005). Lorsque le défaut est absorbant, ces modes résonants permettent d'obtenir des sources quasimonochromatiques directionnelles ou non en polarisation  $s$  et  $p$ . Ces modes de défauts sont comparables aux modes résonants d'une cavité de fabry-Pérot. Récemment, Iida et al. (2004) ont montré que, dans des PC 3D, des modes de défauts peuvent se coupler avec des modes de surface, eux mêmes susceptibles de se coupler avec des ondes propagatives via le cristal photonique. En 2006, Laroche et al. (2006) ont montré que les ondes de surface supportés par des air-Ge PCs 2D finis permettent d'observer une émission thermique monochromatique et directionnelle en bord de bande interdite. L'obtention de l'émission cohérente est due à l'excitation des ondes évanescentes à la surface de la structure périodique tronquée. La cohérence spatiale est quant à elle due à la grande longueur de cohérence spatiale des ondes de surface.

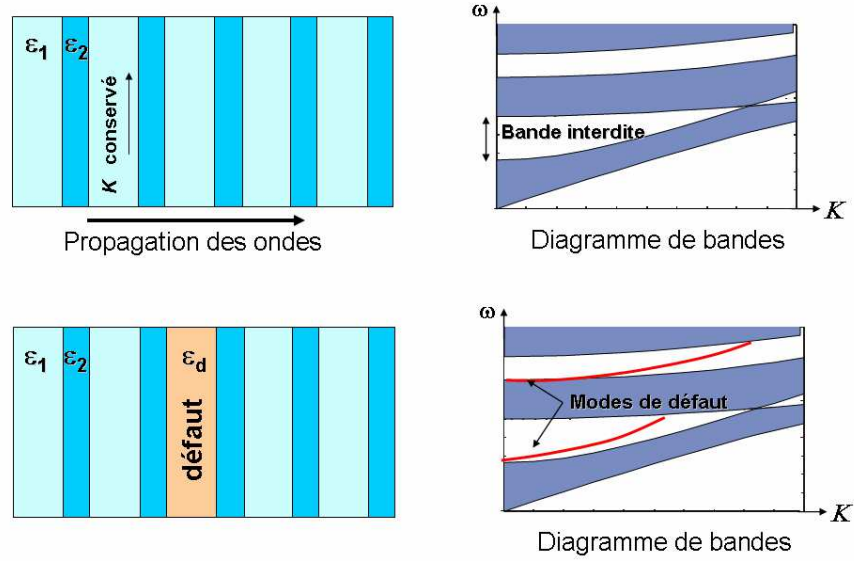


FIG. 3.3 – Relations de dispersion dans un cristal photonique plan avec et sans défaut. Modes localisés (en rouge) dans un cristal photonique plan contenant un défaut. On remarquera la présence d’une bande interdite principale partielle et d’une bande interdite secondaire complète (omnidirectionnelle).

### 3.2.3 Les films minces

Les films minces (Kollyukh et al., 2003; Ben-Abdallah, 2004) ont aussi été étudiés pour leur comportement émissif en antenne. Ici, l’origine de l’émission thermique directionnelle n’est pas liée à l’excitation d’ondes de surface mais à la présence de modes résonants comme dans une cavité de Fabry-Pérot. Ces structures permettent alors d’obtenir des lobes d’émission dans des directions spécifiques et contrairement aux réseaux gravés à la surface de matériaux supportant des ondes de surfaces, cette cohérence spatiale est observée pour les polarisations  $s$  et  $p$ . Cependant, ces structures ont des émissivités relativement faibles qui limitent leurs applications.

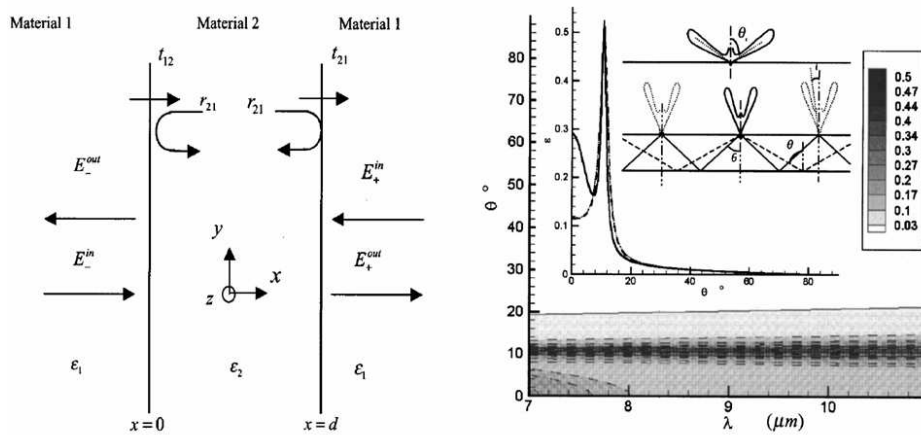


FIG. 3.4 – (a) Configuration géométrique du film mince. (b) Spectre d’émission en polarisation  $s$  d’un film de verre de  $10 \mu\text{m}$  d’épaisseur placé dans un matrice de germanium (Ben-Abdallah, 2004). Encart : émissivité en fonction de l’angle d’émission à  $\lambda = 6.6 \mu\text{m}$ .

### 3.2.4 Les métamatériaux

Les métamatériaux sont des matériaux composites artificiels qui exhibent une permittivité diélectrique et une perméabilité négative. Il résulte de ces propriétés que l'indice de réfraction des métamatériaux est négatif. Ainsi, comme l'ont démontré Enoch et al. (2002), l'émission d'un dipôle placé au sein d'un métamatériau dont l'indice est proche de zéro rayonne dans l'air autour de la normale à la surface du matériau (fig. 3.5a). Ce comportement peut également être observé avec des couches métalliques au voisinage de la fréquence plasma où la permittivité diélectrique est proche de zéro. Cependant, comme ce résultat est lié à la présence d'une onde de surface, il se limite à la polarisation  $p$ . C'est Veselago qui introduit le premier le concept de métamatériaux (Veselago, 1968), bien avant les avancées spectaculaires dans le domaine de la nanofabrication. 30 ans plus tard, Smith et al. (2000); Smith & Kroll (2000) décrivent comment réaliser ces matériaux à partir de structures périodiques métalliques formées d'anneaux concentriques coupés, appelés split-ring resonators (SRR) et de fils métalliques continus. En 2001, ils vérifièrent expérimentalement que le matériau composite proposé présentait bien un indice de réfraction négatif (Shelby et al., 2001). La difficulté de fabrication de ces métamatériaux limita cependant pendant plusieurs années leur application au domaine micro-ondes. Les métamatériaux sont en effet structurés à une échelle de l'ordre de 1/10 de la longueur d'onde. En outre, alors que les matériaux métalliques utilisés pour la conception des métamatériaux, sont parfaitement réfléchissants dans le domaine micro-ondes, ils sont très absorbants dans le proche infrarouge et le visible. Ce n'est que tout récemment, en 2007, qu'une équipe du laboratoire Ames (Soukoulis et al., 2007) développa un métamatériau qui fonctionne dans le visible (780 nm). Une étude expérimentale plus récente (Zhang et al., 2005) a montré la

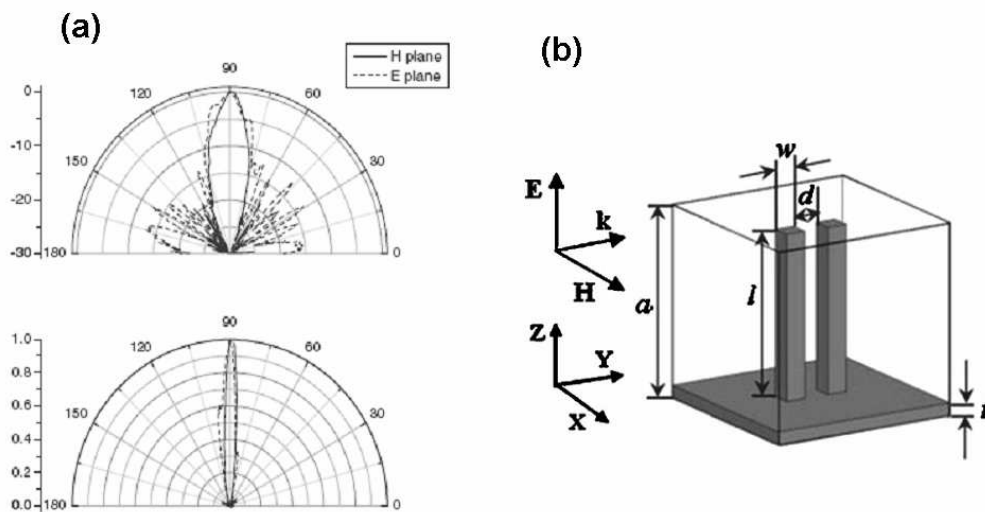


FIG. 3.5 – (a) Diagramme d'émission du métamatériau conçu par Enoch et al. (2002) en db (figure du haut) et avec une échelle linéaire (figure du bas) dans le plan E et dans le plan H. (b) Schéma d'une cellule élémentaire du métamatériau développé par Wang et al. (2007) avec  $a=15 \mu\text{m}$ ,  $w=1.6 \mu\text{m}$ ,  $l=13 \mu\text{m}$ ,  $d=2 \mu\text{m}$  et  $t=1 \mu\text{m}$ .

possibilité de concevoir des métamatériaux 3D dans le proche infrarouge ( $2 \mu\text{m}$ ) en combinant des structures diélectriques perforées à des couches métalliques. Cependant, la complexité de fabrication de ces structures semble limiter leur développement. Un résultat analogue a été obtenu dans l'infrarouge lointain ( $40$  à  $60 \mu\text{m}$ ) mais à l'aide de structures composites faites de fil d'or (Wang et al., 2007) (fig. 3.5b). Contrairement aux structures proposées par Zhang et al. (2005) dont le comportement optique est basé sur un jeu complexe d'interférences des ondes électromagnétiques dans ces structures, c'est la présence d'ondes stationnaires le long des fils qui permet de produire un indice de réfraction négatif et ce même en polarisation  $s$ . La plupart des études mentionnées dans ce chapitre ont cependant négligé les mécanismes de dissipation des ondes électromagnétiques. Or ces mécanismes deviennent très importants dans

l'infrarouge et ils constituent sans doute aujourd'hui la principale limitation au développement de métamatériaux dans ce domaine spectral.

### 3.2.5 Les multicouches

D'autres structures ont été développées pour générer de l'émission thermique cohérente. C'est le cas des microcavités développées par Celanovic et al. (2005) qui permettent d'obtenir une bonne directivité. Ce sont les modes résonants au sein de la cavité qui permettent le contrôle de l'émission thermique de la structure, comme dans le cas des films (Kollyukh et al., 2003; Ben-Abdallah, 2004). On peut aussi citer les travaux de Zhang et al. qui ont conçu des structures multicouches périodiques monodimensionnelles couplées à un matériau polaire dont l'émission thermique est partiellement cohérente pour les deux états de polarisation de la lumière (Lee & Zhang, 2007). Dans leur structure, une couche de carbure de silicium est déposée sur un cristal photonique 1D. On observe alors des pics d'émissivités qui sont dus à l'excitation via le cristal photonique de phonon-polaritons de surface présents à l'interface entre le SiC et le cristal photonique. Cependant, le contrôle de la directivité de l'émission thermique des structures multicouches planes semble plus difficile à obtenir que le contrôle de la fréquence d'émission.

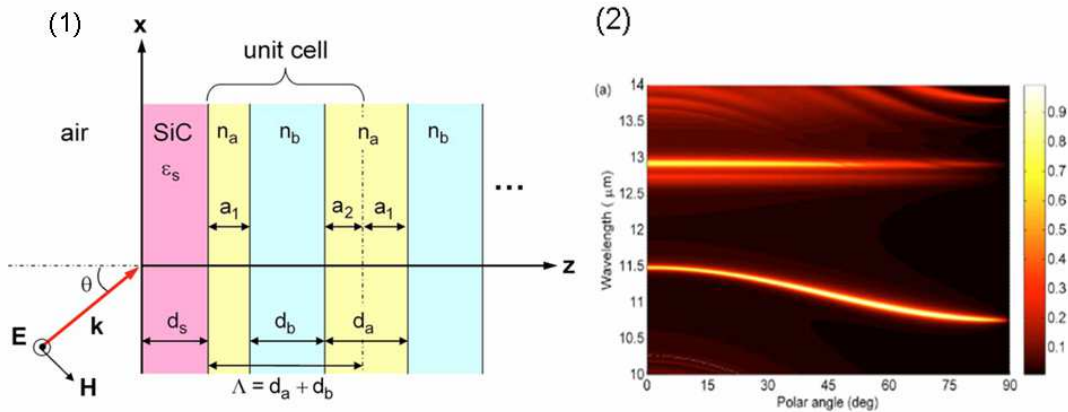


FIG. 3.6 – (1) Schéma de la source thermique partiellement cohérente étudiée par Zhang et al., composée d'une couche de SiC collée à un PC 1D semi-infini pour une onde incidente polarisée  $s$ . (2) Émissivité spectrale et directionnelle de la structure en polarisation  $s$ . (Lee & Zhang, 2007)

### 3.2.6 Les structures hybrides

Pour remédier à ce problème, des structures hybrides qui associent les comportements des structures que nous venons de décrire ont été développées. Peu de ces structures ont été proposées jusqu'ici. Citons ainsi les récents travaux de Battula & Chen (2006) sur un milieu multicouche nanostructuré composé d'une cavité placée entre un réseau de surface et un cristal photonique 1D. Cette structure a permis d'obtenir une source présentant une grande cohérence spatiale et temporelle dans le visible. La grande longueur de cohérence de cette structure est attribuée d'une part à l'excitation d'ondes évanescentes à la surface du réseau. D'autre part le cristal photonique fait office de polarisateur et supprime l'émission en polarisation  $s$  qui ne saurait être directionnelle. Enfin, le haut degré de cohérence spectral est du à la présence de la cavité qui surmonte le cristal photonique et qui amplifie l'émission à la fréquence de ces modes résonants. Joulain & Loizeau (2007) ont également montré qu'il était possible d'obtenir une source thermique directionnelle et spectralement cohérente en couplant un réseau de surface à un guide d'onde. Cependant, dans ce travail théorique, la modification des modes guidés par la présence du réseau n'a pas été étudiée, ce qui peut limiter la portée des résultats lorsque l'épaisseur du guide est comparable à la longueur d'onde d'émission.

### 3.3 Conclusion

Dans cette première partie introductive, nous avons commencé par faire un rappel sur l'approche radiométrique "classique" qui permet de modéliser le rayonnement thermique dans un grand nombre de situations dès lors que les hypothèses de l'optique géométrique sont vérifiées, c'est à dire lorsque tous les effets ondulatoires peuvent être négligés. Nous avons ensuite décrit l'approche électromagnétique utilisée lorsque la taille des structures étudiées est inférieure ou égale à la longueur d'onde caractéristique. Afin d'illustrer les limites de l'approche radiométrique, nous avons traité le problème du transfert radiatif entre deux milieux semi-infinis séparés par une faible épaisseur de vide. Dans un deuxième temps, après avoir défini les notions de cohérence spectrale et spatiale, nous avons fait un bref état de l'art sur les matériaux micro ou nanostructurés à émission thermique cohérente. Loin d'être exhaustif, cet état de l'art permet de présenter les principales stratégies adoptées pour modifier le degré de cohérence d'une source thermique et il montre que les possibilités pour modifier l'émission thermique d'une source sont nombreuses. Dans ce mémoire on s'intéressera plus particulièrement aux structures multicouches 1D. Ces structures ont en effet l'avantage d'être moins complexes à fabriquer. De surcroît, les empilements multicouches nanostructurés ont d'ores et déjà permis d'obtenir de hauts degrés de cohérence pour les deux états de polarisation.

## Deuxième partie

# Design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ lointain



# Introduction

---

Nous avons vu dans le chapitre précédent que le contrôle de l'émission thermique a suscité un grand intérêt parmi la communauté scientifique (Cornelius & Dowling, 1999; Greffet et al., 2002; Narayanaswamy & Chen, 2004; Yannopapas, 2006; Lin et al., 2003) et que de nombreuses voies ont été explorées afin de rendre l'émission thermique de matériaux micro et nanostructurés cohérente spatialement et/ou spectralement. Cette première partie s'inscrit ainsi dans cette recherche de sources thermiques cohérentes. Notre approche, basée uniquement sur les principes premiers de l'optique consistera à réaliser le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ lointain. Pour ce faire, nous présenterons tout d'abord la méthode des matrices de transfert qui permet de calculer les propriétés radiatives de structures multicouches 1D. Cette méthode sera utilisée pour résoudre le problème direct. Nous présenterons ensuite la méthode inverse que nous avons utilisé : l'algorithme génétique (AG). Nous décrirons dans un premier temps le principe de ce processus d'optimisation global et nous détaillerons les spécificités de l'AG que nous avons développé. La puissance de cette méthode pour le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente sera alors démontrée par la conception d'une source thermique monochromatique et isotrope rayonnant dans le moyen infrarouge et la conception de deux sources partiellement cohérentes dans le proche infrarouge et l'infrarouge thermique. Enfin l'étude de la distribution du champ électrique au sein des structures générées par AG lorsqu'elles sont soumises à une excitation externe unitaire nous permettra de mettre en exergue les mécanismes physiques à l'origine de la cohérence du champ rayonné par la structure.





# Émission thermique d'un matériau multicouche

---

## 4.1 Calcul des propriétés radiatives

Nous détaillons ici le calcul des propriétés radiatives de structures multicouches planes de taille finie par la méthode des matrices de transfert. Cette méthode repose sur le calcul de la propagation du champ électromagnétique au sein de la structure, c'est à dire sur la résolution de l'équation d'Helmholtz dans un milieu optique homogène par morceaux. Avant de décrire la méthode des matrices de transfert pour une structure multicouche quelconque, nous ferons tout d'abord quelques rappels sur la réflexion et la transmission d'une onde plane à l'interface entre deux milieux semi-infinis présentant des indices de réfraction différents (il s'agit en effet du dioptré optique le plus simple que l'on peut rencontrer). Nous décrirons ensuite succinctement la propagation au sein d'un milieu infini. Enfin, après avoir détaillé le calcul des matrices de transfert pour un milieu multicouche quelconque, nous montrerons comment ces matrices de transfert nous permettent de déterminer les relations de dispersion des modes propres d'une structure.

### 4.1.1 Réflexion-transmission d'un onde plane à travers une interface

Nous étudions pour commencer le problème de la traversée d'une interface plane qui sépare deux milieux diélectriques d'indices de réfraction  $n_1$  et  $n_2$ .

#### 4.1.1.1 La loi de Snell

Une onde plane incidente sur l'interface séparant deux milieux se divise en deux ondes, l'une réfléchie, l'autre transmise. Si l'on note  $\mathbf{E}_i \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})]$  le champ incident, d'amplitude  $\mathbf{E}_i$ , de fréquence  $\omega$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_i$  et  $\mathbf{E}_r \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r})]$  (resp.  $\mathbf{E}_t \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r})]$ ) les champs réfléchis (resp. transmis) ( $\mathbf{k}_r$  et  $\mathbf{k}_t$  étant les vecteurs d'ondes réfléchis et transmis) alors, comme à l'interface le vecteur d'onde transverse de ces champs se conserve

$$(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r})_{z=0}. \quad (4.1)$$

D'autre part, l'amplitude des vecteurs d'ondes dans chaque milieu est définie par

$$|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_r| = \frac{\omega}{c} n_1, \quad |\mathbf{k}_t| = \frac{\omega}{c} n_2. \quad (4.2)$$

D'après l'équation 4.1 nous constatons que les trois vecteurs d'ondes incidents, réfléchis et transmis sont contenus dans un même plan, habituellement nommé *plan d'incidence*. De plus, les composantes tangentielles de ces vecteurs sont identiques. En notant respectivement  $\theta_i$ ,  $\theta_r$  et  $\theta_t$  les angles d'incidence, de réflexion et de transmission, il découle des expressions précédentes les relations de Snell-Descartes

$$\theta_i = \theta_r \quad (4.3)$$

$$n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t. \quad (4.4)$$

#### 4.1.1.2 Les coefficients de Fresnel

Dans ce mémoire, nous utiliserons les conventions usuelles pour faire référence aux deux états de polarisation. La polarisation dite TE (ou  $s$ ) correspond à un champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence (fig. 4.2) tandis que la polarisation dite TM (ou  $p$ ) correspond à un champ magnétique perpendiculaire au plan d'incidence, donc à un champ électrique contenu dans le plan d'incidence (fig. 4.1).

#### En polarisation TM ( $p$ )

Considérons une onde incidente TM.

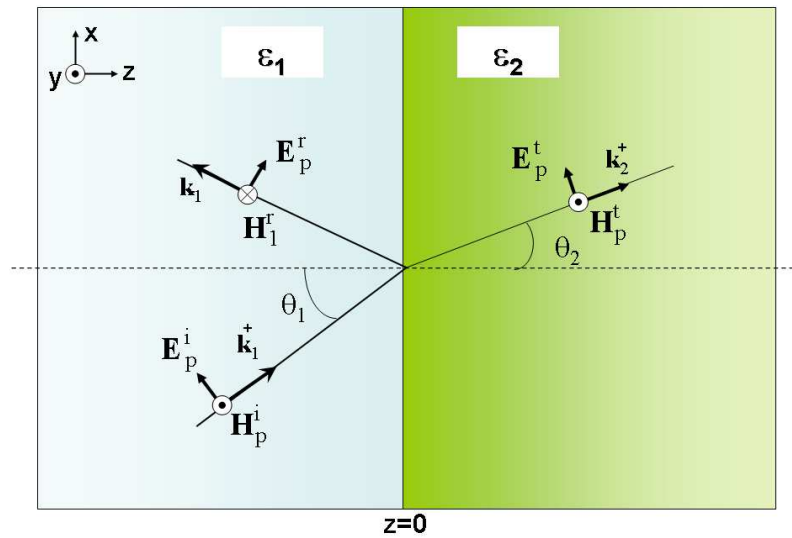


FIG. 4.1 – Champ électrique et magnétique en polarisation  $p$  à la traversée d'une interface.

Par définition, on a alors

$$E_p^y = H_p^x = 0. \quad (4.5)$$

En notant respectivement  $E^i$ ,  $E^r$  et  $E^t$  les champs incident, réfléchi et transmis, on obtient les composantes tangentielles des champs électrique et magnétique

$$E_p^{x,1} = (E_p^i + E_p^r) \cos \theta_1, \quad (4.6)$$

$$H_p^{y,1} = (E_p^i - E_p^r) n_1, \quad (4.7)$$

$$E_p^{x,2} = E_p^t \cos \theta_2, \quad (4.8)$$

$$H_p^{y,2} = E_p^t n_2. \quad (4.9)$$

La condition de continuité de ces composantes à l'interface permet alors d'écrire les équations suivantes

$$E_p^{x,1} = E_p^{x,2}, \quad (4.10)$$

$$H_p^{y,1} = H_p^{y,2}, \quad (4.11)$$

de sorte que, d'après les relations 4.6 à 4.9

$$\begin{aligned} (E_p^i + E_p^r) \cos \theta_1 &= E_p^t \cos \theta_2, \\ (E_p^i - E_p^r) n_1 &= E_p^t n_2. \end{aligned} \quad (4.12)$$

En considérant le rapport entre ces deux relations

$$\frac{(E_p^i + E_p^r)}{(E_p^i - E_p^r)} = \frac{n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1}, \quad (4.13)$$

ainsi que leur produit

$$n_1 \cos \theta_1 \left( (E_p^i)^2 - (E_p^r)^2 \right) = n_2 \cos \theta_2 (E_p^t)^2, \quad (4.14)$$

on peut alors calculer le rapport du champ réfléchi sur le champ incident

$$r_{12p} = \frac{E_p^r}{E_p^i} = \frac{n_1 \cos \theta_2 - n_2 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}.$$

En écrivant ce résultat en fonction des permittivités diélectriques et des composantes normales des vecteurs d'ondes, on a de façon équivalente

$$r_{12p} = \frac{\varepsilon_1 k_{z2} - \varepsilon_2 k_{z1}}{\varepsilon_1 k_{z2} + \varepsilon_2 k_{z1}}. \quad (4.15)$$

De la même manière, le rapport du champ transmis sur le champ incident conduit à

$$t_{12p} = \frac{E_p^t}{E_p^i} = \frac{n_1}{n_2} (1 - r_{12p}),$$

ou encore de façon équivalente

$$t_{12p} = \frac{\sqrt{\varepsilon_1} \sqrt{\varepsilon_2} k_{z1}}{\varepsilon_2 k_{z1} + \varepsilon_1 k_{z2}}. \quad (4.16)$$

$r_{12p}$  et  $t_{12p}$  sont les coefficients de Fresnel en réflexion et en transmission de l'interface pour les ondes TM.

### En polarisation TE ( $s$ )

La même démarche peut être suivie en polarisation  $s$ . Pour cette polarisation, le champ électrique est normal au plan d'incidence, de sorte que

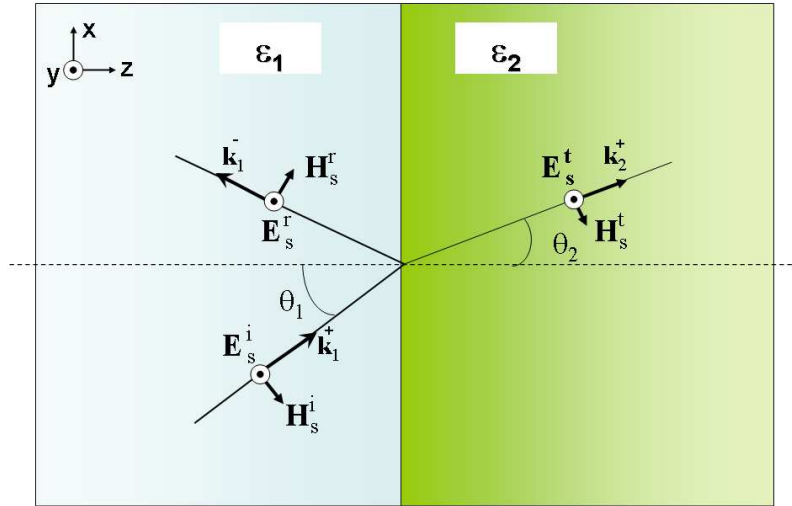
$$E_s^x = H_s^y = 0. \quad (4.17)$$

De nouveau les composantes tangentielles des champs dans chaque milieu sont données par

$$\begin{aligned} E_s^{y,1} &= (E_s^i + E_s^r), \\ H_s^{x,1} &= -(E_s^i - E_s^r) n_1 \cos \theta_1, \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} E_s^{y,2} &= E_s^t, \\ H_s^{x,2} &= -E_s^t n_2 \cos \theta_2. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Nous obtenons alors les relations de continuité à l'interface


 FIG. 4.2 – Champ électrique et magnétique en polarisation  $s$  à la traversée de l'interface.

$$\begin{aligned} (E_s^i + E_s^r) &= E_s^t, \\ (E_s^i - E_s^r) n_1 \cos \theta_1 &= E_s^t n_2 \cos \theta_2. \end{aligned} \quad (4.20)$$

En effectuant le rapport et le produit de ces équations, on obtient les relations

$$\frac{(E_s^i + E_s^r)}{(E_s^i - E_s^r)} = \frac{n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_2}, \quad (4.21)$$

et

$$n_1 \cos \theta_1 \left( (E_s^i)^2 - (E_s^r)^2 \right) = n_2 \cos \theta_2 (E_s^t)^2. \quad (4.22)$$

Il est utile de noter que les relations 4.22 et 4.14 sont identiques tandis que la relation 4.21 ne diffère de la relation 4.13 que par les facteurs de projections  $\cos \theta_i$ .

Nous obtenons alors les coefficients de Fresnel en polarisation  $s$

$$r_{12s} = \frac{E_s^r}{E_s^i} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2},$$

soit

$$r_{12s} = \frac{k_{z1} - k_{z2}}{k_{z1} + k_{z2}}, \quad (4.23)$$

et

$$t_{12s} = \frac{E_s^t}{E_s^i} = (1 + r_{12s}),$$

ou encore

$$t_{12s} = \frac{2k_{z1}}{k_{z1} + k_{z2}}. \quad (4.24)$$

#### 4.1.1.3 Relations de réciprocité

Jusqu'à maintenant nous avons considéré une onde incidente sur l'interface à partir du milieu 1. La situation réciproque correspond au cas où l'interface est traversée dans l'autre

sens et se traite de manière analogue. En reprenant les raisonnements précédents, on montre facilement que pour la réflexion,

$$r_{21} = -r_{12}, \quad (4.25)$$

tandis que pour la transmission

$$t_{21} n_1 \cos \theta_1 = t_{12} n_2 \cos \theta_2, \quad (4.26)$$

ou de manière équivalente,

$$t_{21} k_{z_1} = t_{12} k_{z_2}, \quad (4.27)$$

et ce, quelque soit la polarisation considérée. L'inspection de ces relations montre alors que

$$t_{12}t_{21} - r_{12}r_{21} = 1, \quad (4.28)$$

de sorte que, d'après la relation 4.25,

$$t_{12}t_{21} + r_{12}^2 = 1. \quad (4.29)$$

Les relations 4.25 et 4.29, encore appelées relations de réciprocité, associées aux formules de Fresnel 4.15, 4.16, 4.23 et 4.24 nous permettront de traiter la traversée de n'importe quelle interface plane.

#### 4.1.1.4 Matrice de passage à l'interface

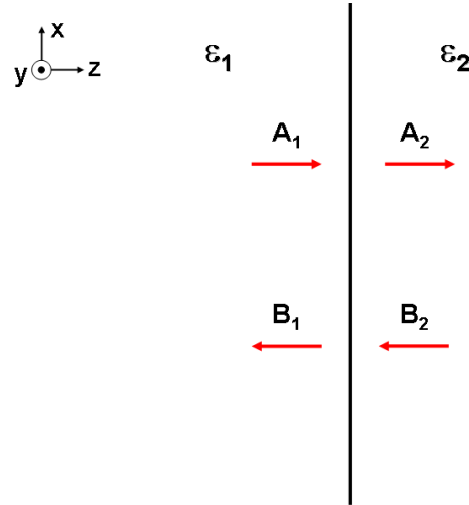


FIG. 4.3 – La traversée d'une interface : le champ de part et d'autre de l'interface se décompose en une partie qui se propage vers les  $z$  croissants ( $A_1, A_2$ ) et une partie vers les  $z$  décroissants ( $B_1, B_2$ ).

L'interface constitue avec la couche de milieu homogène l'un des deux dioptrés élémentaires qui nous servira à calculer la réponse optique d'un milieu multicouche. Pour relier le champ électrique de part et d'autre de l'interface, décomposons les champs en une composante  $A_i$  allant dans le sens des  $z$  croissants et une composante  $B_i$  allant dans les sens des  $z$  décroissants (fig. 4.3). Alors, en écrivant la conservation des composantes tangentielles des champs électriques et magnétiques à l'interface, on obtient (Yeh, 1998) une relation matricielle entre les amplitudes de champs de chaque côté de l'interface en fonction des coefficients de Fresnel

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = D_{12} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

où  $D_{12}$  représente la matrice dite de passage entre les milieux 1 et 2. Cette matrice a pour expression formelle (Yeh, 1998)

$$D_{12} = \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

valable pour les deux états de polarisations.

### 4.1.2 Propagation d'une onde plane dans un film

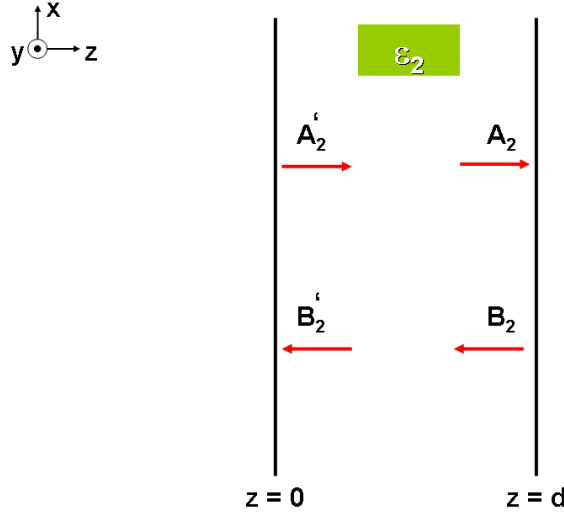


FIG. 4.4 – La propagation du champ dans un milieu homogène. Les composantes des champs ( $A_2', A_2$ ) (resp.  $B_2', B_2$ ) qui se propagent vers les  $z$  croissants (resp. les  $z$  décroissants), sont déphasées de  $\pm k_{z2}d$ .

Après avoir étudié le passage d'une interface plane, nous considérons ici la propagation au sein du deuxième dioptré élémentaire, c'est à dire le milieu homogène de permittivité diélectrique  $\varepsilon_2$  (fig. 4.4). Le champ électrique en  $z=0^+$  est relié au champ en  $z=d^-$  par un simple déphasage à travers le milieu, de sorte que

$$\begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix} = P_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

avec  $P_2$  la matrice de propagation dans le milieu qui est définie par

$$P_2 = \begin{pmatrix} e^{i\phi_2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_2} \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Ici  $\pm\phi_2 = \pm k_{z2}d$  représente le déphasage subi par le champ lors de sa propagation.

## 4.2 Méthode des matrices de transfert pour les milieux multicouches isotropes

Après avoir décrit les propriétés de réflexion et de transmission des dioptrés élémentaires, nous allons maintenant nous intéresser au cas d'un système multicouche monodimensionnel. Pour déterminer les propriétés radiatives d'un tel système, nous allons utiliser la méthode des matrices de transfert. Pour présenter cette technique, nous allons d'abord étudier le cas d'une simple couche puis nous généraliserons la méthode à un empilement multicouche quelconque (fig.4.5).

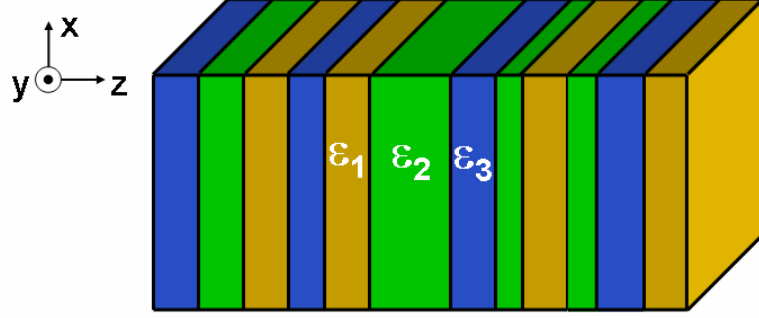
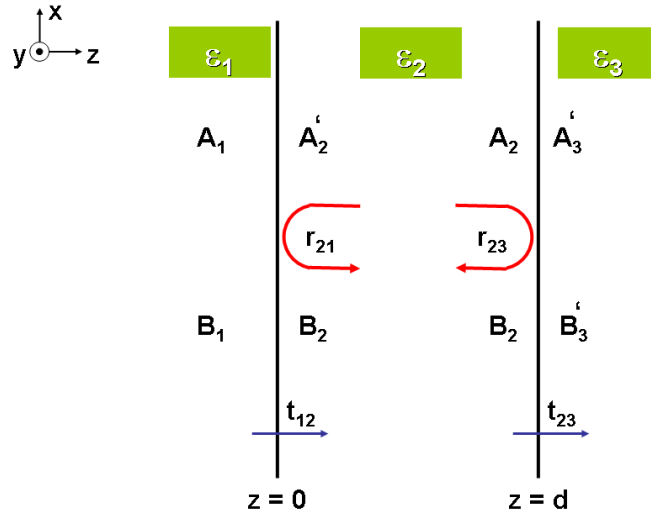


FIG. 4.5 – Exemple de structure monodimensionnelle multicouche composée de 3 matériaux différents.

#### 4.2.1 Cas d'une couche mince homogène et isotrope


 FIG. 4.6 – Réflexion et transmission d'un champ à travers un film. Les champs se décomposent en une composante qui se propage vers les  $z$  croissants ( $A_i$ ) et une composante qui se propage vers les  $z$  décroissants ( $B_i$ ).

Considérons un système monocouche d'épaisseur  $d$  placé entre deux milieux semi-infinis (fig. 4.6). Les milieux considérés sont supposés linéaires, homogènes, isotropes et décrit par les permittivités diélectriques suivantes

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_1 & z < 0, \\ \varepsilon_2 & 0 < z < d, \\ \varepsilon_3 & d < z. \end{cases} \quad (4.34)$$

Prenons alors les équations de Maxwell définies dans l'espace de Fourier temporel :

$$\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \bar{\nabla} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \rho, \quad (4.35)$$

$$\bar{\nabla} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (4.36)$$

$$\bar{\nabla} \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega), \quad (4.37)$$

$$\bar{\nabla} \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (4.38)$$



Par la suite, nous ne ferons plus apparaître la dépendance implicite en  $\omega$ , mais il sera bien entendu que nous travaillerons en régime monochromatique. Nous parlerons ainsi désormais de champ électrique et magnétique au sens de leur composante de Fourier temporelle. Dans les milieux homogènes, on montre, en combinant les équations 4.37 et 4.38, que les transformées de Fourier de champs électromagnétiques sont solutions d'une équation de la forme

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega) - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (4.39)$$

où  $k_0$  et  $c$  désignent respectivement le vecteur d'onde et la vitesse de la lumière dans le vide. Comme

$$\overline{\nabla} \wedge \overline{\nabla} \wedge \mathbf{f} = \overline{\nabla}(\overline{\nabla} \cdot \mathbf{f}) - \Delta \mathbf{f}, \quad (4.40)$$

alors, d'après les relations 4.35 et 4.36, l'équation 4.39 se réduit à une équation d'Helmholtz

$$\Delta \mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega) + k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (4.41)$$

Or, les solutions de cette équation sont de la forme

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega) = \zeta^+ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \zeta^- e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.42)$$

où  $\mathbf{k}$  représente le vecteur d'onde dans le milieu d'indice  $n_i = \sqrt{\varepsilon_i}$ . En introduisant  $\mathbf{R}$  la composante parallèle au plan (x-y) du vecteur position  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{K}$  la composante parallèle du vecteur d'onde, le champ électrique dans cette structure s'écrit par raison de symétrie

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(z) e^{(i\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{R})}. \quad (4.43)$$

Le champ électrique  $\mathbf{E}(z)$  peut alors se décomposer en deux parties, l'une correspondant à une propagation vers la droite  $\mathbf{A}$ , l'autre vers la gauche  $\mathbf{B}$ .

$$\mathbf{E}(z) = \xi_j e^{-ik_z z} + \eta_j e^{+ik_z z} \equiv \mathbf{A}(z) + \mathbf{B}(z), \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.44)$$

$\xi_j$  et  $\eta_j$  étant constants dans chaque milieu homogène. Notons alors  $A_j$  (resp.  $B_j$ ) les amplitudes du champ se propageant vers la droite (resp. la gauche) dans le milieu  $i$ . Définissons alors les différentes amplitudes de champs de part et d'autre de chaque interface du système par

$$\begin{aligned} A_1 &= A(0^-), \\ B_1 &= B(0^-), \\ A'_2 &= A(0^+), \\ B'_2 &= B(0^+), \\ A_2 &= A(d^-), \\ B_2 &= B(d^-), \\ A'_3 &= A(d^+), \\ B'_3 &= B(d^+). \end{aligned}$$

La méthode des matrices de transfert permet alors, grâce à la linéarité des équations de Maxwell, d'établir une relation entre ces amplitudes. En effet, d'après le paragraphe précédent (relation 4.31), les champs électriques de part et d'autre de la première interface séparant les milieux 1 et 2 sont reliés par la relation matricielle

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = D_{12} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix}, \quad (4.45)$$

où  $D_{12}$  représente la matrice de passage séparant les milieux 1 et 2. D'autre part, le champ électrique en  $0^+$  est relié au champ en  $z=d$  par la matrice de propagation dans le milieu 2 définie en 4.33

$$\begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = P_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Enfin, le champ en  $z=d$  subit une réfraction à travers l'interface 2-3 de sorte que

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = D_{23} \begin{pmatrix} A'_3 \\ B'_3 \end{pmatrix}. \quad (4.47)$$

Par composition, il en résulte la relation entre les champs de part et d'autre du système

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathfrak{S} \begin{pmatrix} A'_3 \\ B'_3 \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

où  $\mathfrak{S} = D_{12}P_2D_{23}$  est la matrice de transfert du système. Dans le cas où le film est éclairé par une onde plane incidente  $E_{inc}$  qui se propage dans le sens des  $z$  positifs avec un vecteur d'onde  $\mathbf{k}_1 = (\mathbf{K}, k_{z_1})$ , une onde est transmise dans le milieu 2 suivant le vecteur d'onde  $\mathbf{k}_2 = (\mathbf{K}, k_{z_2})$  puis se propage jusqu'à l'interface milieu2/milieu3 pour être transmise dans le milieu 3 suivant le vecteur d'onde  $\mathbf{k}_3 = (\mathbf{K}, k_{z_3})$ . En adoptant les notations suivantes pour les champs électriques de part et d'autre de la structure,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{inc} \\ E_{out}^- \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

$$\begin{pmatrix} A'_3 \\ B'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

on a alors

$$\begin{pmatrix} E_{inc} \\ E_{out}^- \end{pmatrix} = \mathfrak{S} \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.51)$$

et la relation matricielle 4.48 se réduit à

$$\begin{pmatrix} E_{inc} \\ E_{out}^- \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{12}} \frac{1}{t_{23}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_2}d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z_2}d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & r_{23} \\ r_{23} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.52)$$

soit

$$\begin{pmatrix} E_{inc} \\ E_{out}^- \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{12}} \frac{1}{t_{23}} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_2}d} + r_{12}r_{23}e^{-ik_{z_2}d} & r_{23}e^{ik_{z_2}d} + r_{12}e^{-ik_{z_2}d} \\ r_{12}e^{ik_{z_2}d} + r_{23}e^{-ik_{z_2}d} & e^{-ik_{z_2}d} + r_{12}r_{23}e^{ik_{z_2}d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

Les coefficients de réflexion  $r$  et de transmission  $t$  de la structure entière s'expriment alors sous la forme

$$t = \frac{E_{out}^+}{E_{inc}} = \frac{1}{\mathfrak{S}_{11}}, \quad (4.54)$$

et

$$r = \frac{E_{out}^-}{E_{inc}} = \frac{\mathfrak{S}_{21}}{\mathfrak{S}_{11}}. \quad (4.55)$$

En explicitant ces expressions, il vient

$$t = \frac{t_{12}t_{23}e^{-ik_{z2}d}}{1 + r_{12}r_{23}e^{-2ik_{z2}d}}, \quad (4.56)$$

$$r = \frac{r_{12} + r_{23}e^{-2ik_{z2}d}}{1 + r_{12}r_{23}e^{-2ik_{z2}d}}. \quad (4.57)$$

#### 4.2.2 Généralisation à un milieu multicouche

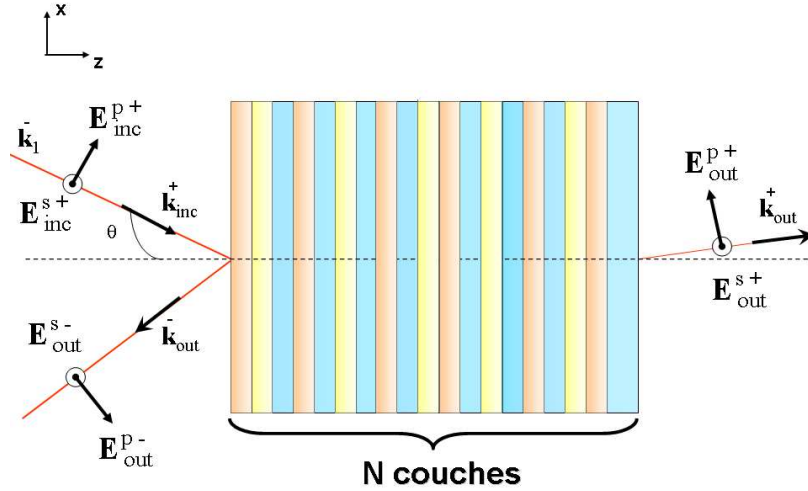


FIG. 4.7 – Propagation d'un champ électrique à travers une structure multicouche composée de 3 matériaux différents.

Considérons maintenant un empilement quelconque de  $N$  couches de matériaux homogènes et isotropes (fig. 4.7). Pour calculer les coefficients de réflexion et de transmission, il suffit de faire le produit des matrices de transfert des dioptries élémentaires traversés par les champs lors d'une expérience de diffusion. Les champs entrants et sortants de la structure sont alors reliés par

$$\begin{pmatrix} E_{inc}^+ \\ E_{out}^- \end{pmatrix} = \mathfrak{S}^N \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.58)$$

avec

$$\mathfrak{S}^N = \left( \prod_{j=0}^{N-1} T_{j,j+1} T_{j+1}^{pro} \right) T_{N,N+1}. \quad (4.59)$$

$\mathfrak{S}^N$  est la matrice de transfert de la structure, qui s'obtient en effectuant le produit des matrices de passage de l'interface entre les milieux  $i$  et  $j$ ,

$$T_{i,j} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.60)$$

et les matrices de propagation dans les couches  $j$ ,

$$T_j^{pro} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_j} \end{pmatrix}, \quad (4.61)$$

dans l'ordre de la traversée. [Dans le calcul de  $\mathfrak{S}^N$ ,  $j=0$  correspond au milieu semi-infini situé à gauche du système tandis que  $j=N+1$  correspond au milieu situé à droite]. Les coefficients de transmission  $t(\lambda, \theta)$  et de réflexion  $r(\lambda, \theta)$  spectral et directionnel sont alors définis à partir des amplitudes de champ entrant et sortant ou de manière équivalente, à partir des composantes de la matrice de transfert  $\mathfrak{S}^N$

$$t(\lambda, \theta) = \frac{E_{out}^+}{E_{inc}^+} = (\mathfrak{S}_{11}^N)^{-1}, \quad (4.62)$$

$$r(\lambda, \theta) = \frac{E_{out}^-}{E_{inc}^+} = \frac{\mathfrak{S}_{21}^N}{\mathfrak{S}_{11}^N}. \quad (4.63)$$

### 4.3 Relations de dispersion des modes propres

Les modes propres d'une structure correspondent au cas où un champ peut être émis de part et d'autre du milieu sans qu'aucun champ incident (excitation) n'y soit appliqué (fig. 4.8). Les relations de dispersion des modes propres découlent immédiatement de l'expression de la matrice de transfert 4.59 ou des relations 4.62 et 4.63. D'après ces relations, le système est résonant lorsque

$$\mathfrak{S}_{11}^N(\lambda, \theta) = 0. \quad (4.64)$$

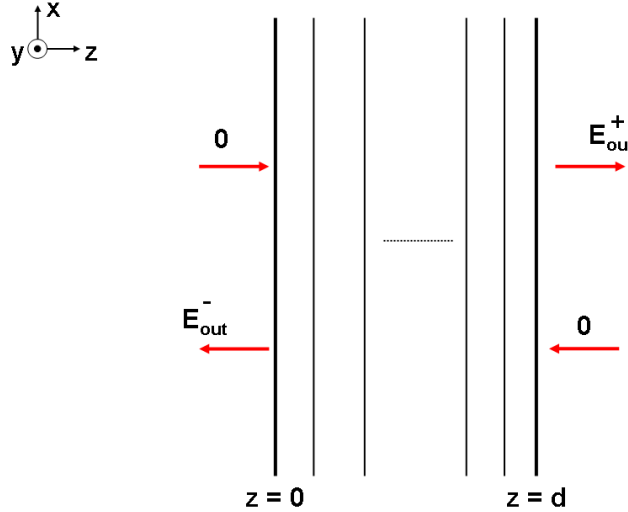


FIG. 4.8 – Structure multicouche en régime résonant : le système émet un champ sans être excité.

Dans le cas d'un système monocouche (film) d'épaisseur  $d$ , cette relation s'obtient aisément à partir de l'équation 4.54

$$1 + r_{12} r_{23} e^{-2ik_{z2}d} = 0 \quad (4.65)$$

### 4.4 Conclusion

Nous venons de présenter la méthode générale de calcul des propriétés radiatives des structures multicouches. Ce calcul repose sur la technique des matrices de transfert qui nous permet d'obtenir numériquement les coefficients de transmission et de réflexion des structures et le cas échéant de calculer le champ électrique à l'intérieur du milieu. Nous avons montré comment la réponse (linéaire) d'une structure à un champ incident oblique et monochromatique permet de déduire toutes les propriétés radiatives de la structure, c'est à dire sa réflectivité, sa

transmittivité et son émissivité spectrale et directionnelle. Nous avons enfin expliqué comment obtenir à partir des matrices de transfert, les relations de dispersion des modes propres de la structure. L'ensemble de ces outils nous permettra de caractériser les sources thermiques que nous concevrons ultérieurement lors de nos processus de design ab-initio.

# Design inverse de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente

---

La théorie de la densité fonctionnelle développée par Kohn et Sham dans les années 70 (Kohn & Sham, 1965) a ouvert la voie au design ab-initio (à partir des principes premiers de la physique) de nouveaux matériaux nanostructurés fonctionnalisés. Cependant, jusqu'à maintenant, cette théorie a été essentiellement consacrée au développement de nouveaux matériaux pour l'électronique, la spintronique ou pour des applications magnétiques (Katayama-Yoshida & Sato, 2003; Niebergall et al., 2006), sans qu'aucun travaux n'ait été consacré au design de sources thermiques cohérentes. Si certains matériaux micro ou nanostructurés sont capables de rayonner dans certaines directions d'espace extrêmement localisées et dans des bandes spectrales très étroites, leur conception relève, comme nous l'avons présenté au chapitre 3, d'une démarche pseudo-empirique de type essai-erreur. Or les techniques modernes de nanofabrication permettent désormais d'envisager un design plus rationnel (de type bottom-up) fondé uniquement sur les principes de base de l'optique. Dans ce chapitre nous franchissons donc cette étape en développant une technique de design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ lointain.

Notre approche consistera à identifier des structures ad-hoc de matériaux pour obtenir les propriétés radiatives désirées. On se limitera ici au design de structures monodimensionnelles stratifiées à  $N$  couches de même épaisseur (fig. 5.1). En d'autres termes, il s'agit de résoudre le problème inverse suivant :

Étant donnée  $A_{cible}(\lambda, \theta)$  une propriété radiative cible définie sur un domaine spectral  $[\lambda_1, \lambda_2]$  et angulaire  $[\theta_1, \theta_2]$ , il s'agit de trouver une structure plane  $V = (0, 1, \dots, 0) \in (0, 1)^N$ , telle que

$$\|A_{cible}(\lambda, \theta) - A_{calc}(V; \lambda, \theta)\| \rightarrow \min, \quad (5.1)$$

où  $A_{calc}$  représente la propriété radiative calculée à partir de la structure  $V$  [dans cette formulation nous nous sommes limité aux structures binaires. Chaque 0 et 1 représente une couche élémentaire d'un matériau].

Le nombre total de configurations structurelles possibles pour un système constitué de  $M$  matériaux distincts est de  $M^N$ . Pour des structures binaires composées de 50 couches élémentaires, le nombre de structures possible est de  $10^{15}$ . Ce nombre grimpe à  $10^{24}$  si l'on prend 3 matériaux de base différents. Un espace de recherche aussi grand offre d'immenses possibilités pour sculpter les propriétés radiatives des milieux nanostructurés. Pour explorer efficacement ce vaste espace et identifier les structures qui possèdent les propriétés désirées, une méthode de recherche rationnelle est clairement nécessaire. Pour cela, nous employons un algorithme génétique (AG) qui est une méthode d'optimisation stochastique globale basée sur des règles de sélections naturelles empruntées à la théorie de l'évolution de Darwin (Darwin, 1859) <sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>il est à noter qu'une méthode d'optimisation stochastique telle que le recuit simulé (qui mime le refroidissement d'un métal vers un état solide stable et optimal) peut aussi être envisagée pour réaliser ce design ab-initio

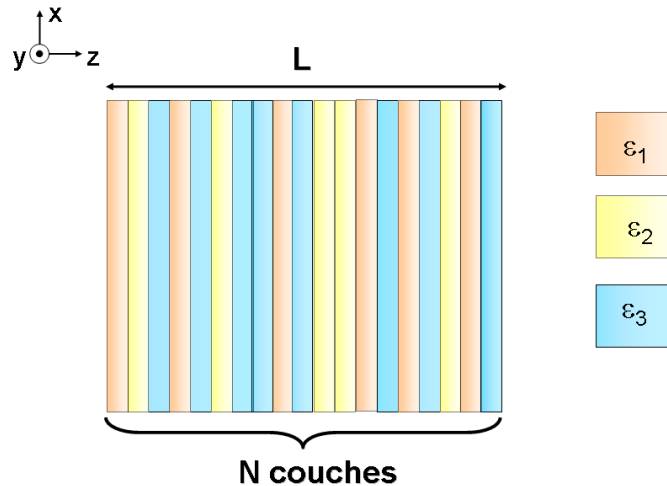


FIG. 5.1 – Structure stratifiée type constituée d’un empilement de  $N$  couches élémentaires (de même épaisseur) de 3 matériaux de permittivité diélectrique  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  et  $\epsilon_3$ .

## 5.1 Optimisation par algorithme génétique

### 5.1.1 Historique

L’utilisation des algorithmes génétiques dans la résolution de problèmes d’optimisation est à l’origine le fruit des recherches de John Holland, qui, dès 1960, a travaillé sur ce sujet. Le premier aboutissement de ces recherches a été la publication en 1975 de *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (Holland, 1975), réédité et complété en 1992 (Holland, 1992). Le but de ces recherches était double : premièrement, mettre en évidence et expliquer rigoureusement les processus d’adaptation des systèmes naturels, et deuxièmement concevoir des systèmes artificiels qui possèdent les propriétés essentielles des systèmes naturels.

Les algorithmes génétiques font partis de la famille des **algorithmes évolutionnaires** (AE). Trois types d’AE ont été développés séparément dans les années 60 : les *Algorithmes Génétiques*, les *Stratégies d’Évolution* et la *Programmation Évolutionnaire* (Bäck et al., 1997). Si les algorithmes génétiques semblent les plus utilisés ou tout du moins les plus connus, c’est qu’ils concilient au mieux puissance, généralité et facilité de programmation. Leur particularité est basée sur ce que l’on nomme le néo Darwinisme qui allie la théorie de l’évolution à la génétique moderne. Ainsi, les variables utilisées sont généralement codées en nombre binaire, et s’apparentent à des chromosomes eux mêmes décomposés en gènes élémentaires. Le vocabulaire employé pour décrire les étapes d’un AG est donc directement issu de celui de la théorie de l’évolution et de la génétique. Nous parlerons ainsi indifféremment d’individus ou de chromosomes pour qualifier les solutions parmi une population (espace des solutions) et également de parents et d’enfants pour qualifier deux générations successives.

### 5.1.2 Principe d’un algorithme génétique

La théorie de l’évolution et la génétique décrivent les mécanismes qui interviennent au sein d’une population lors du brassage génétique. Ces différents mécanismes sont repris par les AG pour la recherche de solutions optimales. La figure 5.2 présente les principales étapes d’un AG.

L’ensemble des étapes présentées sur cet organigramme correspond aux différentes étapes

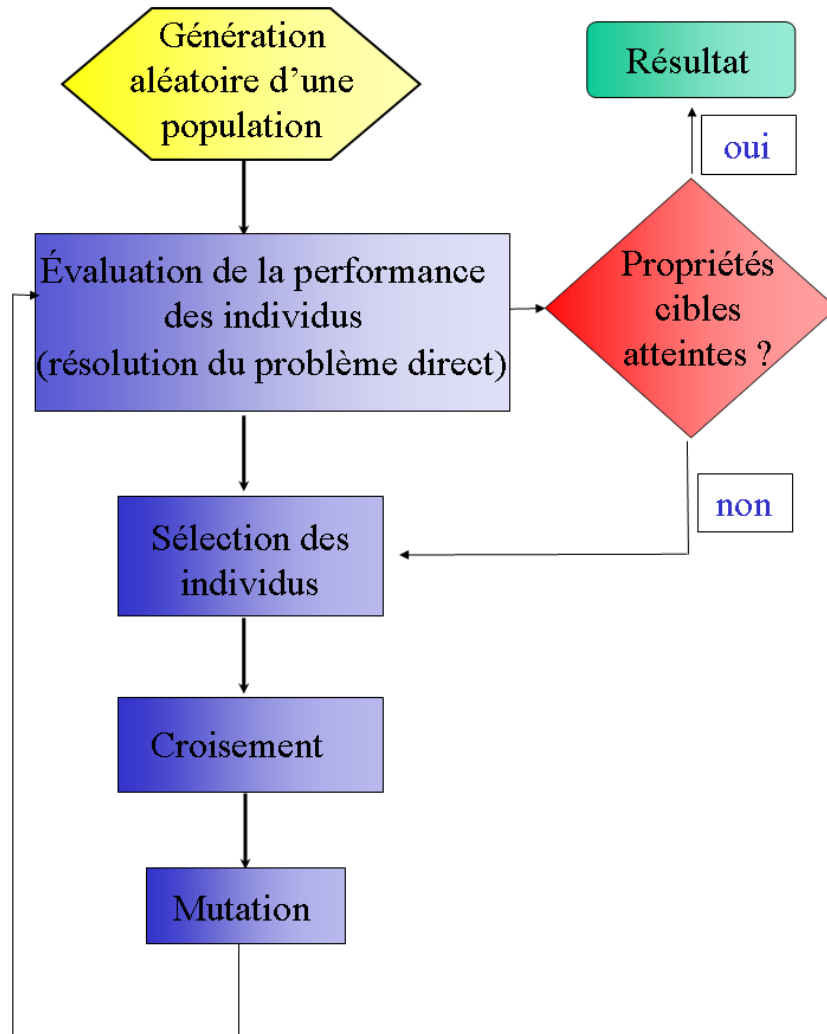


FIG. 5.2 – Organigramme d'un algorithme génétique.



identifiées par Darwin dans sa théorie de l'évolution et celles associées aux mécanismes de reproduction de la génétique moderne. Nous allons maintenant détailler ces différentes étapes.

## 1. Génération aléatoire d'une population

La première étape consiste à créer aléatoirement une population constituée d'un nombre fini d'individus (fig. 5.3). La taille de la population (i.e. le nombre d'individus) dépend fortement du problème que l'on souhaite résoudre et résulte le plus souvent d'un compromis entre temps de calcul et qualité de la solution recherchée.

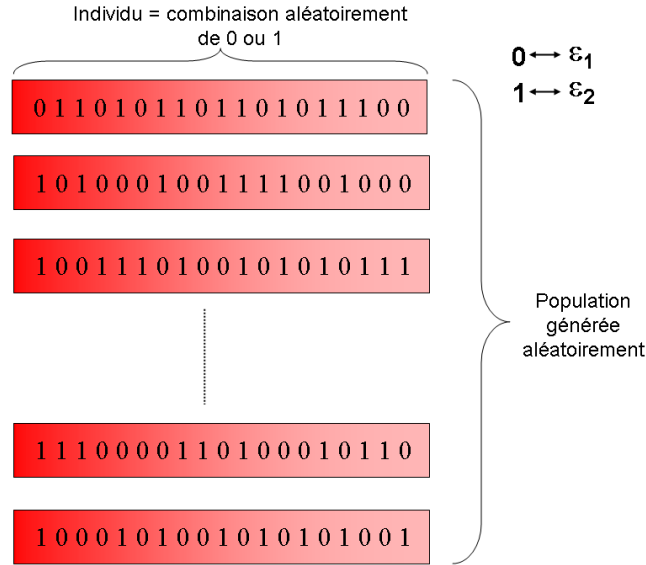


FIG. 5.3 – Représentation schématique d'une population de structures binaires générées aléatoirement. Les séquences de 0 et 1 représentent respectivement des structures composées de matériaux de permittivité diélectrique  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$ .

## 2. Évaluation

L'évaluation des performances des individus est l'étape qui distingue deux AGs et qui donne sa spécificité à un AG. C'est en effet à ce moment que les propriétés physiques à optimiser sont évaluées et que l'éloignement par rapport à la cible est calculé. On définit pour cela un critère  $J$  qui permet d'évaluer la performance des individus au sein de la population. Ce critère à optimiser est ce que l'on dénomme la fonction "fitness" (traduction anglaise du mot adaptation). Cette fitness mesure l'écart entre la solution calculée (problème direct) et la fonction objectif, c'est à dire la cible. En notant respectivement  $A_{cible}$  et  $A_{calc_j}$ , la propriété cible et les propriétés calculées de l'individu  $j$ , la fitness  $J$  se définit sous la forme

$$J = \|A_{cible} - A_{calc_j}\|^2,$$

où  $\| \cdot \|$  mesure l'écart entre la cible et la solution du problème direct  $A_{calc_j}$ . Le but d'un AG sera alors de déterminer l'extremum global de cette fonction dans l'espace des solutions admissibles. Notons que cette étape est généralement la plus consommatrice en temps de calcul car elle nécessite le calcul des propriétés radiatives des structures, c'est à dire d'effectuer la résolution du problème direct non linéaire suivant

Étant donnée  $V = (0, 1, \dots, 0) \in (0, 1)^N$  une structure multicouche.

Trouver la (ou les) propriété(s) radiative(s) monochromatique(s) et direction-

nelle(s)  $A_{calc_j}(V; \lambda, \theta)$  de cette structure sur le domaine spectral  $[\lambda_1, \lambda_2]$  et angulaire  $[\theta_1, \theta_2]$ .

### 3. Sélection

Une fois l'évaluation terminée, une sélection des individus à conserver pour l'étape du croisement est effectuée. Cette sélection est basée sur la valeur de la fitness de chaque individu. Pour cela, soit une valeur limite de fitness est prédéterminée et seuls les individus possédant une fitness inférieure à cette limite seront sélectionnés, soit un pourcentage d'individus retenus parmi la génération courante est choisi préalablement, ce pourcentage pouvant être fixé ou évolué au cours des générations.

### 4. Croisement

La sélection étant faite, on passe maintenant à l'étape cruciale de l'AG : le croisement. Pour ce faire, les individus sont alors regroupés par couples (les *parents*) et les gènes (ensemble des couches) sont copiés et recombinaés pour former deux *enfants* qui possèdent une combinaison des caractéristiques des deux parents. Une nouvelle génération est ainsi créée. La méthode utilisée dans ce mémoire est le croisement à un point, qui consiste à séparer en deux les gènes des parents, et de constituer les deux enfants en combinant les deux séquences de gènes issues de chaque parent (fig. 5.4).

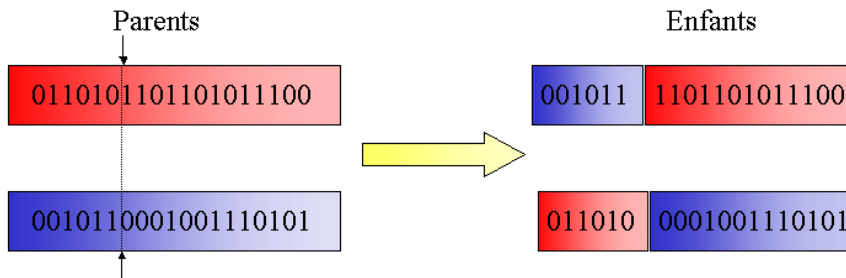


FIG. 5.4 – Représentation schématique du croisement à un point.

### 5. Mutation

La mutation est une étape accidentelle essentielle. Elle consiste à remplacer un gène (i.e. une couche) par un autre de manière aléatoire. Elle permet d'éviter une dérive génétique, c'est à dire d'éviter de converger vers des extremums locaux (fig. 5.5) pendant le processus d'optimisation. Pour mettre en œuvre ces mutations, nous générons un taux de mutation  $p_m$  qui définit la probabilité pour un gène (= une couche d'un des matériaux de base) dans une structure, à la  $n^{ieme}$  génération, d'être modifié ou non. Cette étape est essentielle pour conserver une certaine diversité dans la population *enfant*. Un choix approprié de ce paramètre est extrêmement important pour la convergence du processus de recherche. En effet, si  $p_m$  est trop grand, l'AG recherche aléatoirement dans tout l'espace des solutions possibles et la fitness de l'individu (=la structure) sélectionné peut être très éloignée de la fitness optimale. Au contraire, lorsque  $p_m$  est trop petit, l'algorithme de recherche converge rapidement, mais vers l'extremum local le plus proche. C'est pourquoi, un choix approprié de  $p_m$  est essentiel pour équilibrer la convergence locale et la recherche globale. L'expérience montre (Holland, 1992) que les mécanismes de croisement et de mutation sont efficaces si la fitness moyenne de toute la population, à une génération donnée, a une valeur elle même moyenne par rapport à la fitness optimale pour cette même génération. Il est donc nécessaire d'ajuster  $p_m$  à différents paliers du

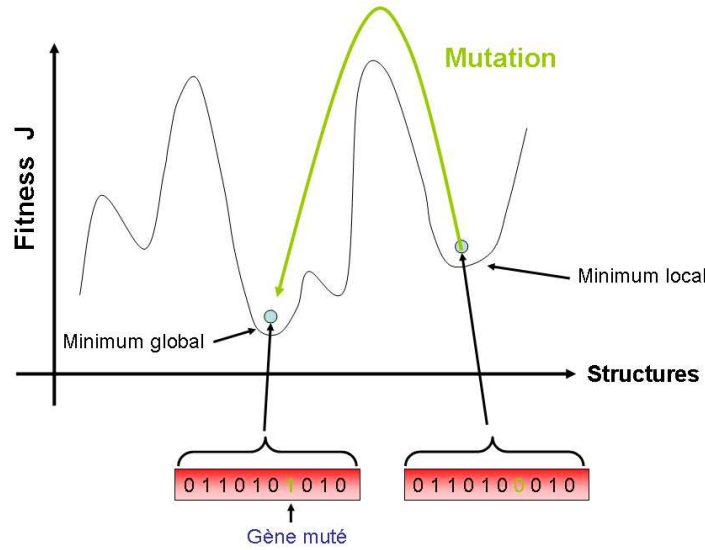


FIG. 5.5 – Illustration schématique du processus de mutation. La modification d'un gène permet d'échapper aux extremums locaux.

processus d'évolution. Dans ce mémoire, nous avons choisi d'ajuster le taux de mutation toutes les  $i^{\text{emes}}$  générations selon la loi d'incrémentatation suivante

$$\Delta p_m = \begin{cases} +\xi, & \gamma < 1/3 \\ 0, & 1/3 < \gamma < 2/3 \\ -\xi, & \gamma > 2/3 \end{cases}, \quad (5.2)$$

où  $\xi$  correspond au changement de la probabilité de mutation et  $\gamma$  est le rapport de la fitness moyenne de toute la population sur la fitness optimale.

## 5.2 Design de sources thermiques quasimonochromatiques et isotropes

### 5.2.1 Dans l'infrarouge moyen

Nous présentons ici le design inverse d'une source thermique quasimonochromatique et isotrope rayonnant dans l'infrarouge moyen. Pour concevoir cette structure multicouche nous nous sommes inspiré des résultats obtenus par Ben-Adballah & Ni (2005) au sujet de sources spectralement cohérentes fabriquées à base de cristaux photoniques dans lesquels un défaut structurel de carbure de silicium a été introduit. Nous avons donc repris les trois mêmes matériaux, à savoir le carbure de silicium (SiC), le tellure de cadmium (CdTe) et le germanium (Ge) et nous avons cherché à savoir s'il était possible d'appliquer notre stratégie de recherche de structures pour concevoir une source thermique quasimonochromatique sans en connaître a priori l'agencement des matériaux la constituant. Le domaine spectral considéré pour la synthèse de cette source est compris entre  $8 \mu\text{m}$  et  $14,5 \mu\text{m}$ . Sur cette plage fréquentielle, le germanium et le tellure de cadmium sont tous les deux des matériaux transparents et leur permittivité diélectrique peut être approchée (Palik, 1998) par les valeurs constantes et réelles :  $\varepsilon_{Ge} = 16$  et  $\varepsilon_{CdTe} = 7.29$ . Le SiC est le seul matériau absorbant dans cette gamme de longueur d'onde et sa constante diélectrique est correctement décrite par le modèle d'oscillateur

de Lorentz <sup>2</sup>

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left[ 1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right] \quad (5.3)$$

où  $\varepsilon_\infty = 6.7$  représente la contribution (pour les fréquences optiques) des ions du réseaux cristallins à la polarisation.  $\omega_L = 18.253 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$  représente la fréquence d'oscillation des phonons optiques longitudinaux et  $\omega_T = 14.937 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ , celle des phonons optiques transversaux.  $\Gamma = 89.66 \cdot 10^{10} \text{ rad.s}^{-1}$  est un facteur d'atténuation qui rend compte des pertes dans le matériau. En outre, tous ces matériaux sont supposés non magnétique sur la plage spectrale d'étude.

Nous allons maintenant détailler la forme de la fitness qui a été minimisée lors du design de sources thermiques cohérentes à base de structures multicouches 1D. Pour ce faire, nous définissons les propriétés radiatives cibles (l'émissivité  $\varepsilon_{cible}(\lambda, \theta)$  et la réflectivité  $r_{cible}(\lambda, \theta)$ ) que nous désirons obtenir. Le problème direct est ensuite résolu (calcul de l'émissivité et de la réflectivité) pour chaque individu par la méthode des matrices de transfert. Ensuite, l'écart entre les cibles et les propriétés radiatives effectives des différentes structures est calculé par une fonction fitness de la forme

$$\begin{aligned} J = & \sum_p \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} [\varepsilon_{cible}(\lambda, \theta) - \varepsilon_{calc}^p(\lambda, \theta)]^2 d\theta d\lambda \\ & + \sum_p \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} [r_{cible}(\lambda, \theta) - r_{calc}^p(\lambda, \theta)]^2 d\theta d\lambda \end{aligned} \quad (5.4)$$

où la somme discrète opère sur les deux états de polarisation de la lumière. Cette fitness permettra ainsi d'optimiser simultanément l'émissivité et la réflectivité spectrale et directionnelle pour les deux états de polarisation, ce qui par exemple n'est pas possible avec les réseaux de surface. Après plusieurs essais pour régler notre AG, nous avons constaté que retenir 60% de la population à chaque génération était un choix efficace pour sélectionner les structures *parents*. Ce pourcentage permet en effet de sélectionner les meilleures structures de la génération courante mais aussi de garder des individus dont les propriétés radiatives sont assez éloignées de la cible pour garantir un apport de "*sang neuf*" suffisant. Ces structures constituent un réservoir de gènes, qui peuvent a priori sembler inutiles seuls, mais qui combinés avec les gènes d'autres structures lors du processus de croisement et de mutation, permettent d'améliorer la convergence de l'AG. Nous avons en effet pu constater une convergence prématurée vers un extremum local lorsque qu'un pourcentage inférieur était choisi. Dans ce design de sources quasimonochromatiques isotropes, nous avons choisi les émissivité cibles suivantes

$$\varepsilon(\lambda) = \varepsilon_{max} \exp \left[ -\frac{(\lambda - \lambda^*)^2}{\alpha} \right]. \quad (5.5)$$

$\varepsilon_{max}$  représente l'amplitude maximale de la fonction ( $\varepsilon_{max} < 1$ ).  $\alpha$  permet de régler la largeur de la gaussienne et  $\lambda^*$  correspond à la longueur d'onde autour de laquelle la source rayonne. Nous avons choisi de représenter l'émissivité cible par une gaussienne car c'est la forme caractéristique du spectre d'émission de sources thermiques quasimonochromatiques et isotropes, bien qu'une Lorentzienne aurait aussi pu être utilisée. Le degré de cohérence de la source nanostructurée est quand à lui directement relié à son facteur de qualité  $Q$  défini par

$$Q = \frac{\lambda^*}{\Delta\lambda}, \quad (5.6)$$

<sup>2</sup>le lecteur pourra se reporter à l'annexe A pour plus de précisions sur la modélisation des permittivités diélectriques

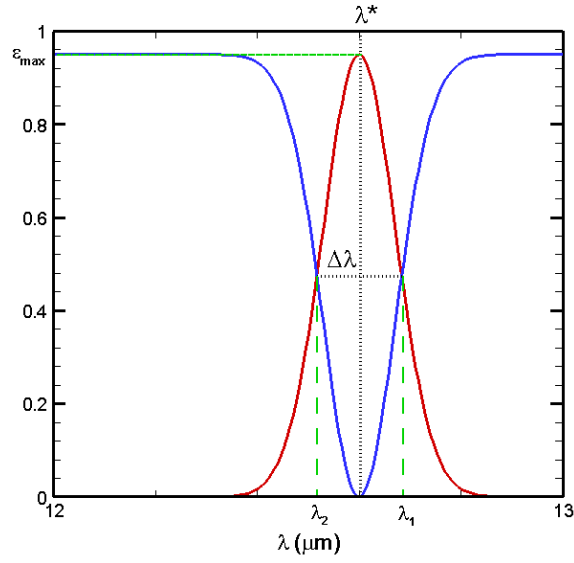


FIG. 5.6 – Émissivité (trait rouge) et réflectivité (trait bleu) spectrale

où  $\Delta\lambda$  représente la bande spectrale d'émission à mi hauteur. La fonction cible peut alors se reformuler en fonction de ce facteur. Ainsi, comme à mi-hauteur du pic d'émission, on a

$$f(\lambda_1) = \frac{\epsilon_{max}}{2} = \epsilon_{max} \exp\left[-\frac{(\lambda_1 - \lambda^*)^2}{\alpha}\right],$$

$$f(\lambda_2) = \frac{\epsilon_{max}}{2} = \epsilon_{max} \exp\left[-\frac{(\lambda_2 - \lambda^*)^2}{\alpha}\right],$$

on obtient deux équations reliant  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  à  $\alpha$  et  $\lambda^*$

$$\lambda_1 = \sqrt{\alpha \ln(2)} + \lambda^*,$$

$$\lambda_2 = -\sqrt{\alpha \ln(2)} + \lambda^*.$$

En insérant ces relations dans 5.6, il vient

$$Q = \frac{\lambda^*}{2\sqrt{\alpha \ln(2)}}, \quad (5.7)$$

de sorte qu'en remplaçant  $\alpha$  par son expression en fonction de  $Q$  et  $\lambda^*$  on obtient

$$\epsilon_{cible} = \epsilon_{max} \exp\left[-Q^2 \ln 16 (\lambda - \lambda^*)^2 / \lambda^{*2}\right], \quad (5.8)$$

Par ailleurs, afin de pouvoir utiliser cette structure comme matériau de revêtement, nous avons également fixé les propriétés de réflexion. Dans le cas d'un revêtement, il est souhaitable de chercher à atteindre une réflectivité de la forme

$$r_{cible} = 1 - \epsilon_{cible} - t_{cible} \quad \text{avec } t_{cible} \ll 1, \quad (5.9)$$

de sorte que, seule l'énergie émise autour de la longueur d'onde de résonance  $\lambda^*$  et provenant d'un éventuel substrat pourra être transférée au milieu multicouche, tout autre flux thermique incident étant réfléchi vers le substrat.

Dans cette étude, les cibles ont été définies autour de  $\lambda^* = 12.6 \mu\text{m}$ , qui est la longueur

d'onde du bord supérieur de la bande d'absorption des phonons pour le SiC. À cette longueur d'onde, les couches de SiC de la structure peuvent supporter des phonon-polaritons de surface. Ainsi, quand ces phonon-polaritons sont excités par une perturbation externe via la structure, l'énergie incidente peut être transférée aux phonons du SiC, ce qui entraîne une grande absorption de cette énergie par le SiC et donc, d'après la deuxième loi de Kirchoff (Modest, 1993), entraîne une forte émission thermique. Nous avons fixé le degré de cohérence à  $Q=80$ . Cette valeur de facteur de qualité correspond à celle obtenue par Ben-Adballah & Ni (2005) avec un cristal photonique dans lequel est inséré un défaut structural de carbure de silicium. Nous avons enfin fixé le maximum d'émissivité à  $\epsilon_{max} = 0.95$ . Les propriétés radiatives cibles en fonction de  $\lambda$  et  $\theta$  sont présentées sur la figure 5.7. Dans cette étude, le nombre

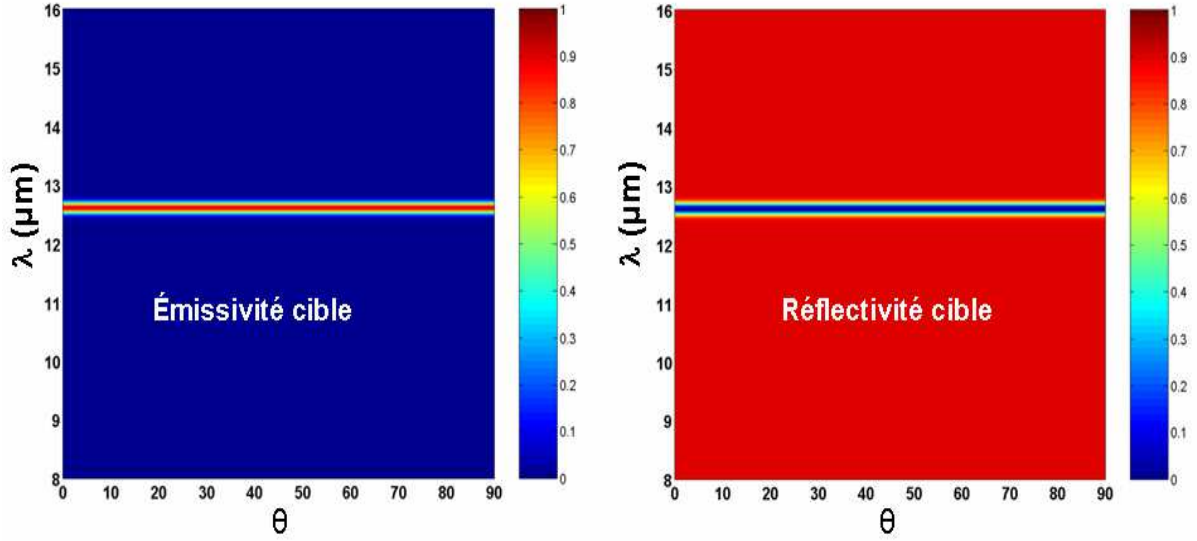


FIG. 5.7 – Émissivité et réflectivité cible en fonction de l'angle d'incidence et de la longueur d'onde.

de couches élémentaires a été fixé à  $N = 50$ , chaque couche ayant une épaisseur constante  $h = 100$  nm, ce qui conduit à une structure d'épaisseur totale  $L = 5 \mu\text{m}$ . La population est composée de  $N_{pop} = 100$  individus. Ce nombre d'individus est un juste compromis entre faire des simulations numériques avec un temps de calcul relativement court pour chaque génération et avoir une diversité suffisante au sein de la population pour obtenir une structure qui possède les propriétés radiatives requises. La fitness est quand à elle minimisée sur la gamme de longueur d'onde [ $\lambda_{min} = 12.2 \mu\text{m}$ ,  $\lambda_{max} = 12.8 \mu\text{m}$ ] et sur le domaine angulaire [ $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 80^\circ$ ].

Sur la figure 5.8b, on présente la structure obtenue après 3100 générations. On peut remarquer que cette structure est extrêmement désordonnée et difficilement prédictible a priori. Sur la figure 5.8a est présentée l'évolution de la fitness en fonction du nombre de générations. On peut remarquer que cette évolution n'est pas monotone. On peut voir en effet que la fitness varie très peu entre la 10<sup>ème</sup> et la 27<sup>ème</sup> génération puis elle chute brusquement. Ce palier trahit le fait que le processus d'optimisation se trouve confiné au niveau d'un minimum local de la fonction  $J$  à minimiser, pendant 17 générations. Sur la figure 5.9 sont schématisées les structures optimales à la 27<sup>ème</sup> et à la 28<sup>ème</sup> génération. Les numéros 0, 1 et 2 correspondent aux trois matériaux utilisés, respectivement le germanium, le tellure de cadmium et l'argent. On peut voir que, comme nous l'avons indiqué lors de la description de l'AG, c'est un processus de mutation (remplacement d'une couche de CdTe par une couche de Ge) qui a permis de s'extirper de ce minimum local et d'obtenir ainsi des structures avec des propriétés radiatives plus proches des cibles. Sur les figures 5.10 et 5.11, on présente les propriétés radiatives de la structure finale sur le domaine spectral élargi [8-14  $\mu\text{m}$ ]. Nous observons que les cibles sont

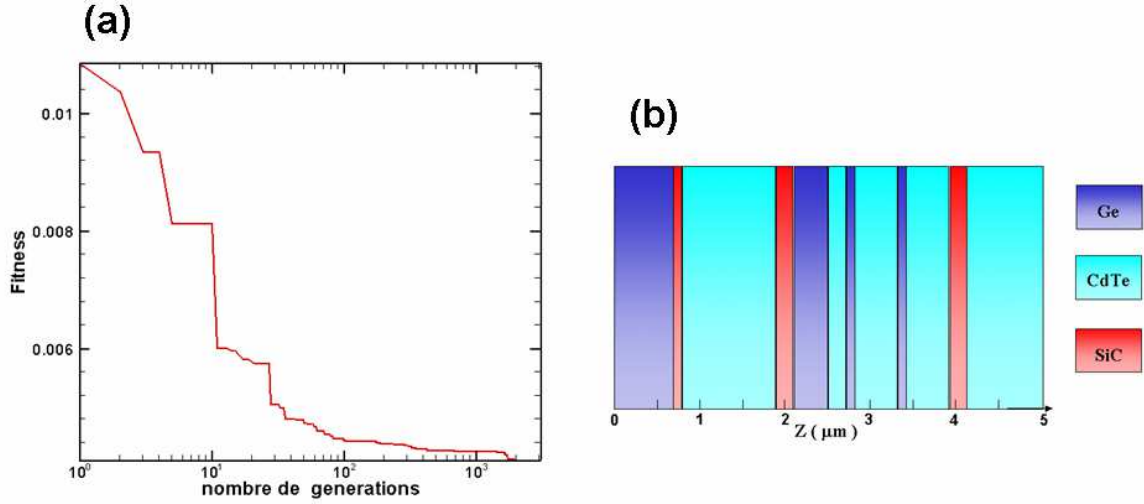


FIG. 5.8 – (a) Évolution de la fitness en fonction du nombre de générations. (b) Structure interne de la source thermique quasimonochromatique composée de 50 couches élémentaires de SiC, Ge et CdTe de  $h=100$  nm d'épaisseur obtenue par AG, après un processus itératif de 3100 générations.

bien atteintes. On peut voir également que cette source présente, en polarisation  $s$ , autour de  $\lambda^*$ , une bande interdite complète pour des longueurs d'onde comprises entre 11 et 14.5  $\mu\text{m}$ . En polarisation  $p$ , cette bande interdite disparaît en incidence rasante. Ces propriétés répondent bien aux objectifs fixés et permettent d'envisager ces matériaux comme revêtement de surface. Il est à noter aussi, que jusqu'à maintenant, des bandes interdites omnidirectionnelles aussi larges n'avaient été observées qu'avec des matériaux périodiques ou quasi-périodiques, tels que les cristaux photoniques.

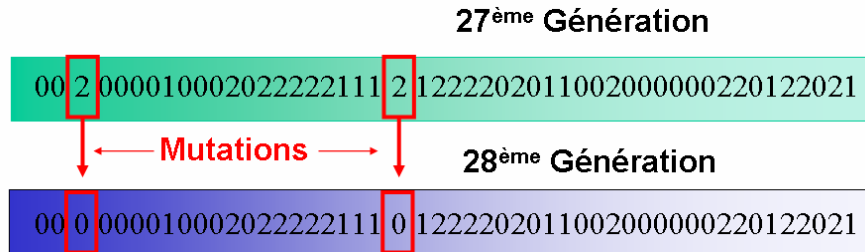


FIG. 5.9 – Structures optimales obtenues à la 27<sup>ème</sup> et à la 28<sup>ème</sup> génération après mutation de 2 couches de CdTe en 2 couches de Ge.

Revenons maintenant aux spectres d'émission de cette source. Sur la figure 5.10, on observe bien la présence d'un pic d'émission d'intensité  $\epsilon \approx \epsilon_{max}$  centré précisément à  $\lambda^*$  pour toutes les directions d'espace et ce pour les deux états de polarisation. L'interprétation de ce résultat est aisée. En effet la structure peut être vue comme un guide résonant de phonon-polaritons puisqu'elle agit comme un miroir parfait dans la bande interdite (fig.5.11) et qu'elle convertit tout photon incident à  $\lambda^*$  en vibration atomique (phonon) par un couplage résonant photon-phonon. Sur la figure 5.12, on remarque que, à  $\lambda = 12.6 \mu\text{m}$ , les parties réelles et imaginaires de  $\Im_{11}^N$  s'annulent simultanément et ce sur l'ensemble des valeurs de la composante parallèle du vecteur d'onde  $K$ , ce qui indique l'existence de résonances à cette longueur d'onde et pour toutes les incidences. Ce résultat correspond aux observations faites sur les spectres d'émission (fig. 5.10) pour les polarisations  $s$  et  $p$ . On observe aussi une autre annulation simultanée vers 10 microns mais uniquement en polarisation  $p$  et sur un certain interval angulaire. Ceci explique ainsi la localisation du mode résonant sur la figure 5.10b.

Enfin, le calcul du facteur de qualité de cette source thermique pour des angles de  $0^\circ$ ,  $30^\circ$  et  $60^\circ$

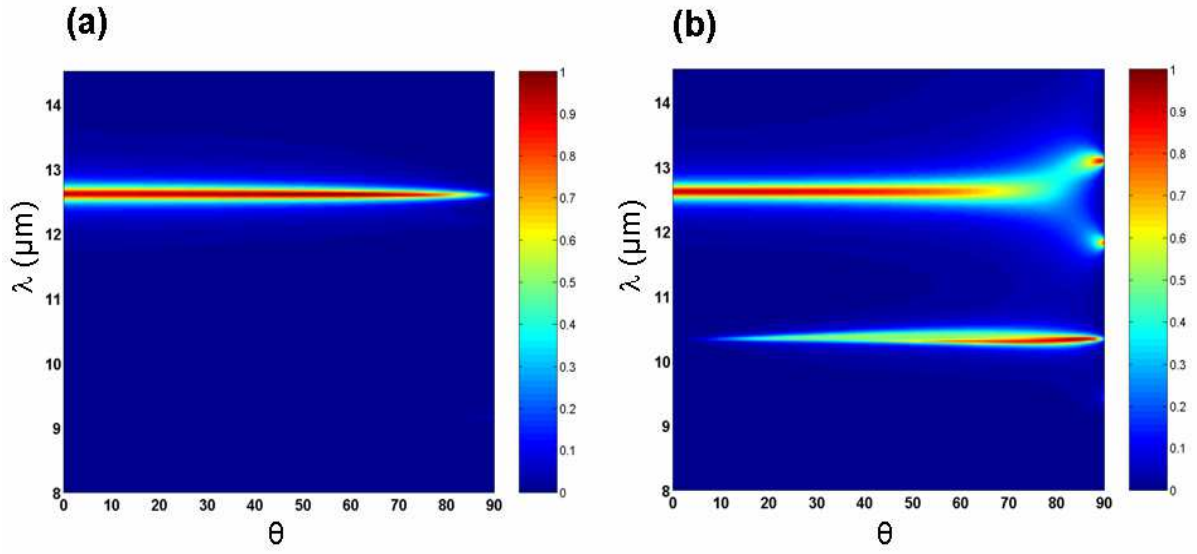


FIG. 5.10 – Émissivité spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  (a) et  $p$  (b) d'une source thermique quasimonochromatique à  $\lambda^* = 12.6 \mu\text{m}$  composée de 50 couches élémentaires de SiC, Ge et CdTe de  $h=100$  nm d'épaisseur obtenue par AG. La structure de la source est présentée sur la figure 5.8.

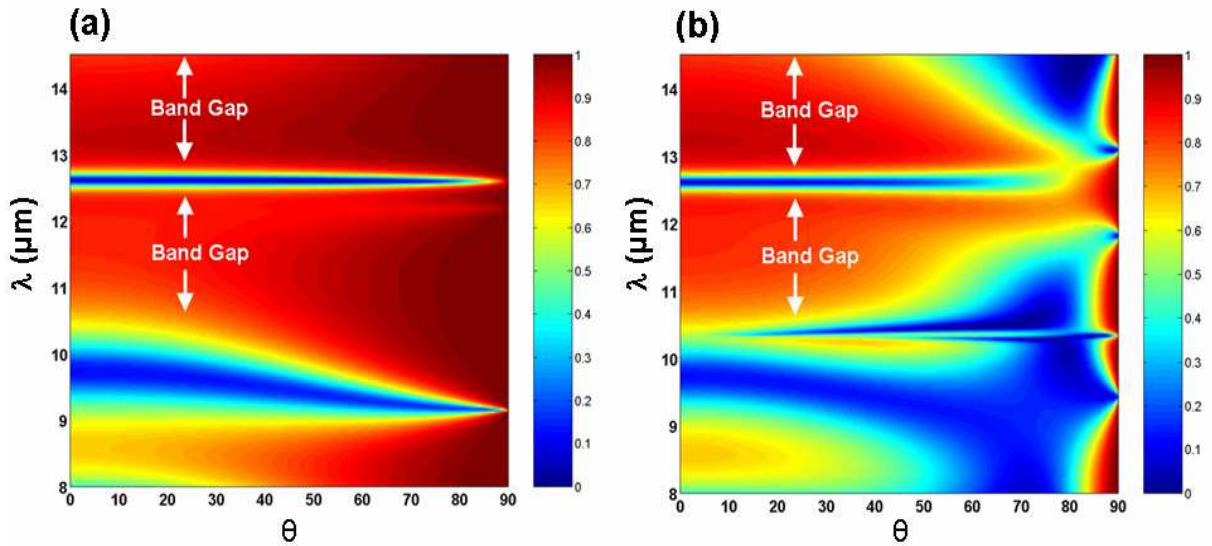


FIG. 5.11 – Réflectivité spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  (a) et  $p$  (b) d'une source thermique quasimonochromatique à  $\lambda^* = 12.6 \mu\text{m}$  composée de 50 couches élémentaires de SiC, Ge et CdTe de  $h=100$  nm d'épaisseur obtenue par AG. La structure de la source est présentée sur la figure 5.8.



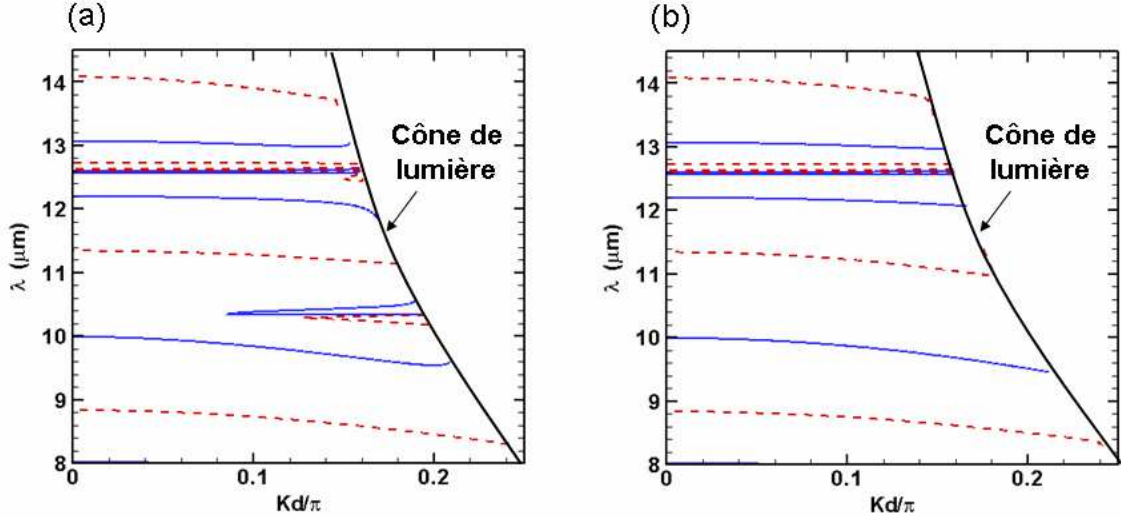


FIG. 5.12 – Relations de dispersion des modes propres en polarisation  $p$  (a) et  $s$  (b) en fonction de la longueur d'onde et de la composante parallèle du vecteur d'onde ( $d=1 \mu\text{m}$ ). En pointillé :  $\text{Re}[\mathfrak{S}_{11}^N]=0$  et en trait plein :  $\text{Im}[\mathfrak{S}_{11}^N]=0$ , avec  $\mathfrak{S}_{11}^N$  la composante de la matrice de transfert de la structure totale.

( tab. 5.1) montre que le degré de cohérence spectrale de la source est très proche de celui du rayonnement émis par la cible ( $Q_{\text{cible}}=80$ ). De surcroît, ces résultats sont comparables à ceux obtenus par Ben-Adballah & Ni (2005) avec un cristal photonique 1D contenant un défaut. Ils montrent ainsi qu'il est possible de concevoir une source thermique quasimonochromatique sans connaissance préalable sur sa structure interne. Ce premier résultat démontre les potentialités de la méthode développée pour la conception ab-initio de sources thermiques cohérentes.

$\theta$	$Q_s$	$Q_p$
$0^\circ$	75	70
$30^\circ$	75	70
$60^\circ$	80	45

TAB. 5.1 – Facteur de qualité  $Q$  suivant la direction et la polarisation, de la structure composée de 50 couches de SiC, de Ge et de CdTe de  $h=100 \text{ nm}$  d'épaisseur

### 5.2.1.1 Origine physique de la cohérence spectrale

Afin de déterminer l'origine physique de la cohérence spectrale du champ rayonné par la structure nanostructurée que nous avons obtenue, nous nous sommes intéressé au champ électrique à l'intérieur de la source lorsque celle-ci est soumise à une excitation externe propagative normalisée, sous une incidence oblique  $\theta$ . Le champ électrique interne est alors calculé à l'aide la méthode des matrices de transferts (*cf.* annexe B). Pour cela le coefficient de réflexion  $r(\lambda, \theta)$  de la structure et la matrice de transfert partielle  $\mathfrak{S} = \mathbf{T}(0, z)$ , qui correspond au dioptré compris entre la face éclairée (en  $z=0$ ) et le point courant  $z$ , sont d'abord calculés. Le champ électrique à l'abscisse  $z$  découle alors de la relation

$$E(z, \lambda, \theta) = \frac{\mathfrak{S}_{22} + \mathfrak{S}_{21} - r(\lambda, \theta) [\mathfrak{S}_{11} + \mathfrak{S}_{12}]}{\det \mathfrak{S}}. \quad (5.10)$$

L'intensité du champ électrique s'obtient simplement en calculant le module de cette expression. Ce champ nous permet de mettre en évidence la présence d'éventuels couplages entre

des modes propagatifs et des modes évanescents à travers la structure. La distribution spatiale de l'amplitude du champ électrique interne polarisé  $s$  est présentée sur la figure 5.13 (le résultat en polarisation  $p$ , très similaire, n'est pas présenté). Nous voyons sur cette figure que l'amplitude du champ électrique à  $\lambda = 12.6 \mu\text{m}$  devient par endroits très supérieure à celle du champ incident unitaire. Ce résultat, a priori étonnant, trahit en fait la présence de résonances internes liées au couplage de l'onde propagative incidente avec des modes localisés. On peut ainsi observer que ce couplage résonant est maximal à  $z=0.7 \mu\text{m}$ , abscisse qui correspond à l'interface entre une couche de germanium et la première couche de carbure de silicium. En outre l'amplitude du champ décroît progressivement quand on s'éloigne de cette interface. Ce résultat confirme donc que c'est effectivement le couplage entre une onde propagative incidente et une onde de surface, dont l'amplitude diminue exponentiellement en s'éloignant du SiC, qui a permis d'obtenir une émissivité globale cohérente. On remarque enfin que l'amplitude de ce champ électrique interne au voisinage de la couche de SiC décroît avec l'angle d'incidence. Ce résultat explique la dégradation progressive observée sur la figure 5.10 de l'amplitude d'émission pour les grands angles.

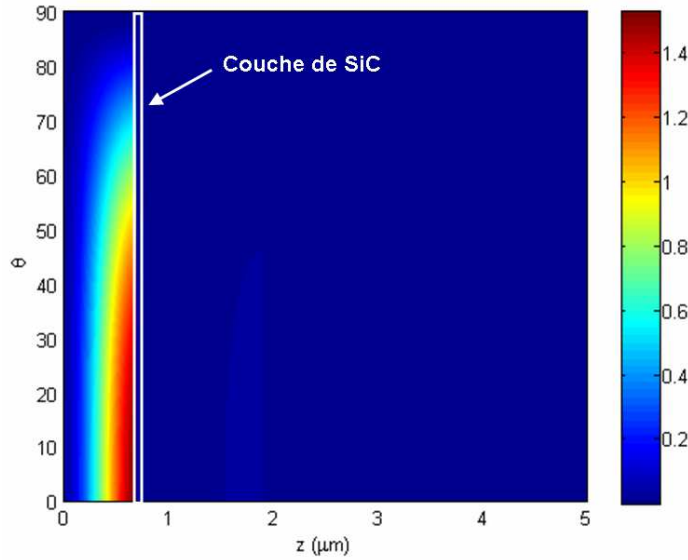


FIG. 5.13 – Distribution spatiale de l'intensité du champ électrique à l'intérieur de la structure lorsqu'elle est soumise à une excitation unitaire polarisée  $s$  à  $\lambda = 12.6 \mu\text{m}$ .

## 5.3 Design de sources partiellement cohérentes

### 5.3.1 Dans le proche infrarouge

Nous présentons ici le design inverse d'une source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge. Cette source est composée de couches d'argent (Ag), qui est un matériau absorbant dans ce domaine spectral, de silicium (Si) et de verre ( $\text{SiO}_2$ ), tous les deux transparents dans le proche infrarouge. La première source que nous avons conçue rayonne dans la gamme de longueur d'onde [ $\lambda_{\min} = 1.3 \mu\text{m}$ ,  $\lambda_{\max} = 1.7 \mu\text{m}$ ]. Elle est destinée à être utilisée comme émetteur sélectif dans un système de conversion d'énergie thermophotovoltaïque à cellule GaSb<sup>3</sup> (fig.5.14). Si, théoriquement l'efficacité d'une cellule TPV est supérieure à celle

<sup>3</sup>Le principe d'une cellule thermophotovoltaïque (TPV) est le même que celui d'une cellule photovoltaïque (solaire). Il s'agit de convertir un rayonnement électromagnétique émis par une source de chaleur en électricité. La différence entre les deux procédés réside dans la source d'énergie, c'est à dire le rayonnement qu'ils doivent convertir. Alors qu'une cellule solaire reçoit le rayonnement du soleil, qui est celui d'un corps noir dont la température de surface est  $T_s = 6000 \text{ K}$ , une cellule TPV reçoit un rayonnement d'une source thermique dont la température de surface est généralement bien inférieure à celle du soleil, entre 1500 et 2000 K. Le soleil émet

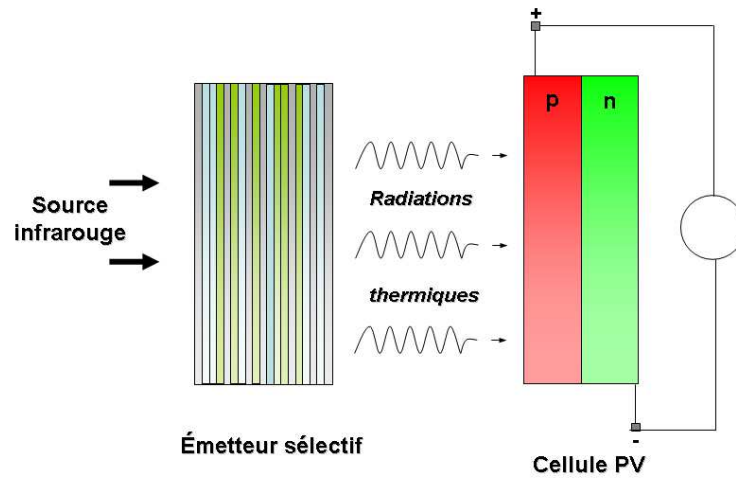


FIG. 5.14 – Schéma de principe d'un système de conversion d'énergie thermophotovoltaïque en champ lointain. Une source infrarouge émet à travers un filtre sélectif. Le rayonnement transmis est alors converti en électricité dans une cellule PV.

d'une cellule photovoltaïque, les rendements restent actuellement deux fois plus faibles (15 % pour les cellules TPV contre 20 à 30 % pour les cellules solaires) (Coutts, 1999, 2001). Ces faibles rendements sont en grande partie dus à l'inadéquation entre le spectre d'émission de la source thermique et le spectre d'absorption de la cellule TPV (Baldasaro et al., 2001). En effet seuls les photons d'énergie supérieure à celle du gap permettent de générer un photocourant. Les photons d'énergie plus faible ne contribuent pas à la production d'énergie, entraînant même un échauffement de la cellule. En outre, le surplus d'énergie des photons à courte longueur d'onde par rapport à l'énergie du gap est lui aussi perdu sous forme de chauffage dans la cellule. On comprend bien alors que la source idéale pour la conversion d'énergie thermophotovoltaïque serait une source n'émettant qu'à une longueur d'onde légèrement inférieure à celle du gap. De nombreux groupes de recherche se sont intéressés à ce problème et différentes solutions ont été envisagées pour concevoir cette source idéale (Pralle et al., 2002; Fleming et al., 2002; Licciulli et al., 2003; Sai et al., 2004; Sai & Yugami, 2004; O'Sullivan, 2004). Les premiers émetteurs sélectifs ont été réalisés en utilisant des terres rares qui émettent dans le gap de la cellule TPV. Cependant, l'émissivité de ces terres rares est aussi très élevée pour des longueurs d'onde supérieures à celle du gap, ce qui conduit à un échauffement néfaste de la cellule TPV (Coutts, 1999, 2001). Une autre voie a été explorée pour améliorer le rendement des cellules TPV. Il s'agit de placer un filtre entre la source et la cellule (fig. 5.14), de telle sorte que seules les longueurs d'onde correspondant à celles du gap de la cellule sont transmises vers le matériau PV, alors que les autres sont réfléchies vers l'émetteur. Récemment, les cristaux photoniques ont été utilisés comme revêtement de la cellule dans cette optique (Celanovic et al., 2004; O'Sullivan et al., 2005). Dans ce paragraphe nous allons appliquer notre technique de design ab-initio pour la conception d'une source sélective dans le proche infrarouge.

Dans cette gamme de longueur d'onde, les permittivités diélectriques du silicium et du verre

en majorité dans le domaine visible (90 % de l'énergie émise se fait entre 0.25 et 4  $\mu\text{m}$ ). Pour une cellule TPV, le rayonnement incident se situe dans l'infrarouge, entre 0.75 et 12  $\mu\text{m}$ . Les semiconducteurs utilisés pour la conversion dans le domaine thermique ont alors un gap à plus petite fréquence, comme par exemple le GaSb qui a un gap de 0.7 eV, ce qui correspond à une longueur d'onde de 1.7  $\mu\text{m}$

peuvent être approchées (Palik, 1998) par les valeurs réelles et constantes :  $\varepsilon_{Si} = 11.15$  et  $\varepsilon_{SiO_2} = 2.10$ . L'argent, est quant à lui correctement décrit par le modèle de Drude (cf. Annexe A)

$$\varepsilon_{Ag} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (5.11)$$

où  $\omega_p = 13.69 \cdot 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$  est la pulsation plasma et  $\gamma = 1/\tau = 2.73 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ , est un facteur d'amortissement permettant de tenir compte des pertes dans le milieu,  $\tau$  étant un temps de relaxation électronique moyen. L'émissivité cible que l'on cherche à atteindre est de nouveau une gaussienne de la forme

$$\epsilon_{cible} = \epsilon_{max} \exp \left[ -Q^2 \ln 16 (\lambda - \lambda^*)^2 / \lambda^{*2} \right], \quad (5.12)$$

où la fréquence de résonance  $\lambda^*$  peut subir une faible dérive avec l'angle d'émission  $\theta$

$$\lambda^* = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{90} \theta + \lambda_2. \quad (5.13)$$

Le facteur de qualité nous permet comme au paragraphe précédent de mesurer le degré de cohérence spectrale du champ émis par la source cible tandis que la dépendance en  $\theta$  de  $\lambda^*$  détermine la cohérence spatiale de l'émission thermique de cette source. Ainsi plus la différence entre  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sera grande, plus la longueur d'onde de résonance variera en fonction de la direction d'émission, ce qui se traduira par une augmentation du degré de cohérence spatiale de la source. Le gap de conversion du GaSb étant situé à  $\lambda_g = 1.7 \mu\text{m}$  nous avons recherché une structure qui émet légèrement en dessous de cette longueur d'onde. Aussi, nous avons choisi le domaine d'optimisation spectral [ $\lambda_1 = 1.42 \mu\text{m}$ ,  $\lambda_2 = 1.65 \mu\text{m}$ ]. Nous nous sommes de plus fixé un facteur de qualité de 300 dans le but de limiter les déperditions thermiques en dehors du gap de conversion et comme au paragraphe précédent, nous avons fixé le maximum d'émissivité à  $\epsilon_{max} = 0.95$  et une réflectivité cible

$$r_{cible} = 1 - \epsilon_{cible} - t_{cible} \quad \text{avec } t_{cible} \ll 1$$

Les réflectivité et émissivité cibles sont représentées sur la figure 5.15 et sont indépendantes de l'état de polarisation.

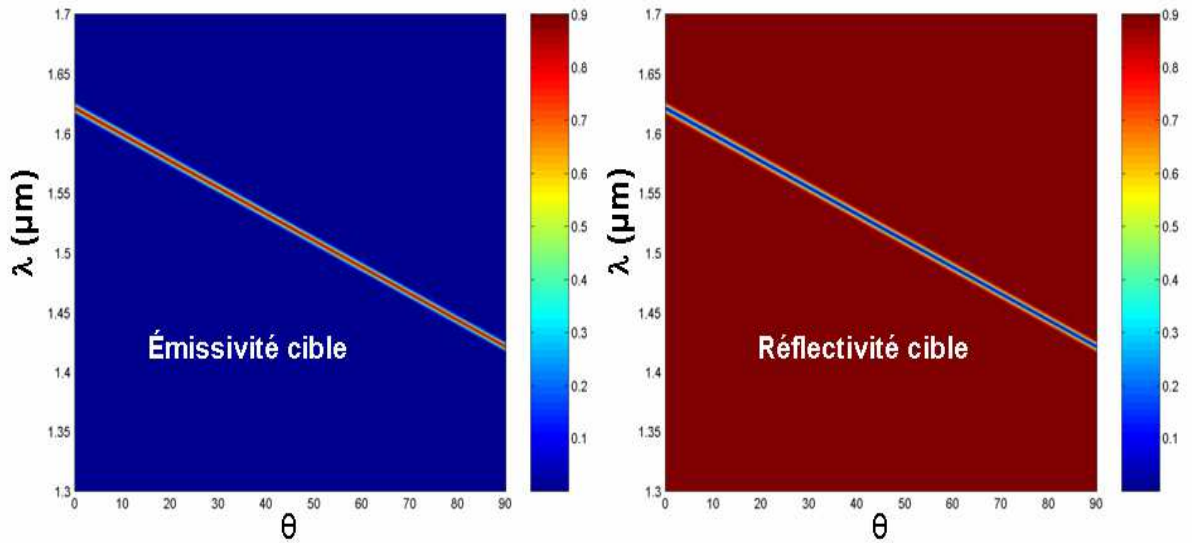


FIG. 5.15 – Émissivité et réflectivité cible en fonction de l'angle d'incidence et de la longueur d'onde.

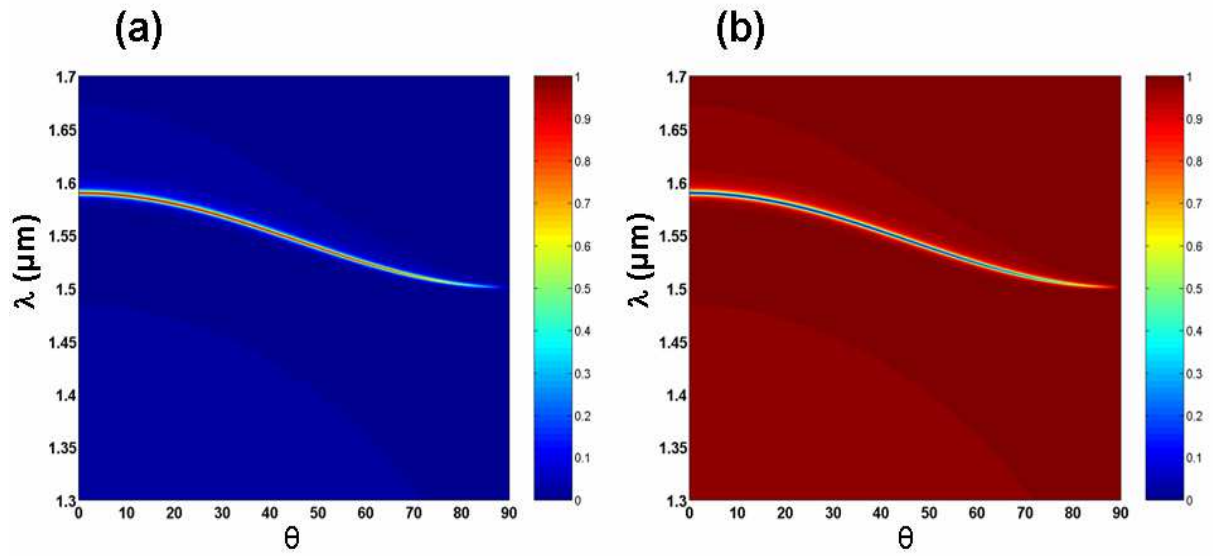


FIG. 5.16 – Émissivité (a) et réflectivité (b) spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  d'une source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge composée de 50 couches élémentaires d' Ag, SiO<sub>2</sub> et Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue après un processus itératif de 100 générations.

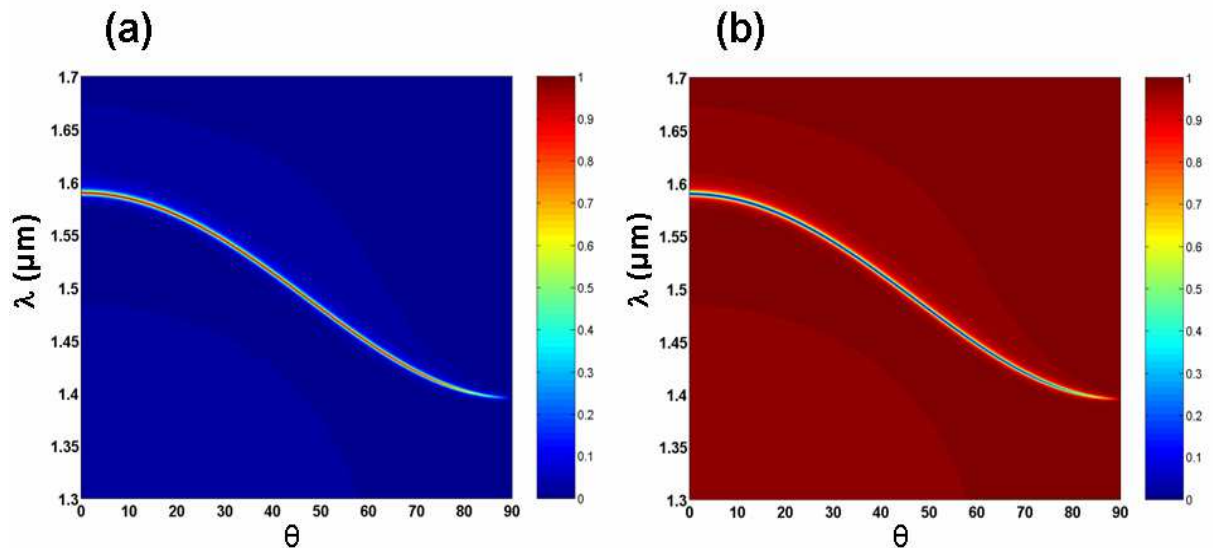


FIG. 5.17 – Émissivité (a) et réflectivité (b) spectrale et directionnelle en polarisation  $p$  d'une source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge composée de 50 couches élémentaires d'Ag, SiO<sub>2</sub> et Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue après un processus itératif de 100 générations.

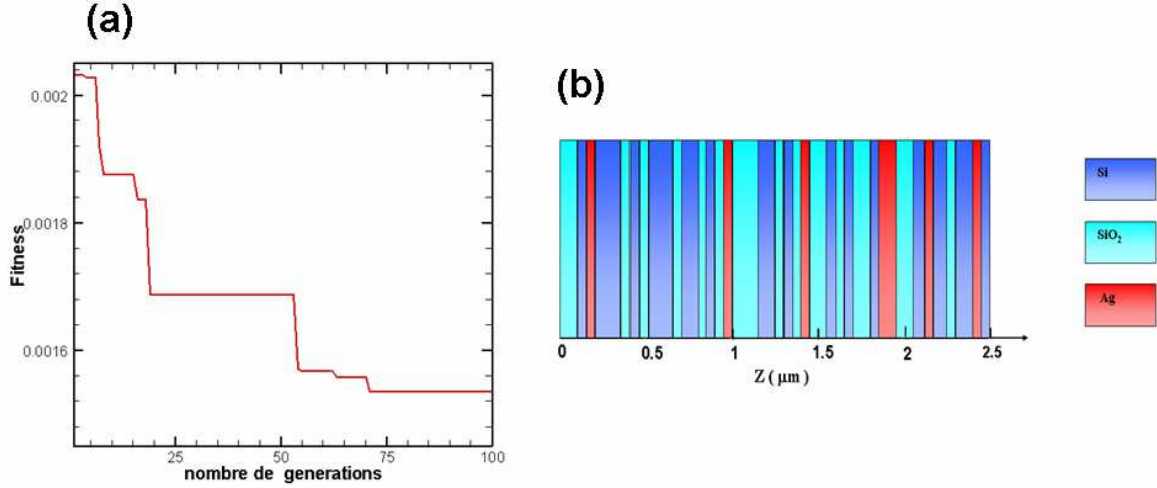


FIG. 5.18 – (a) Évolution de la fitness en fonction du nombre de générations. (b) Structure interne de la source thermique composée de 50 couches élémentaires d' Ag, SiO<sub>2</sub> et Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue après un processus itératif de 100 générations.

Pour l'optimisation de la structure, nous avons fixé les paramètres géométriques de la manière suivante. Le nombre de couches élémentaires est égale à  $N = 50$  et chaque couche a une épaisseur constante  $h = 50$  nm de sorte que la structure a une épaisseur totale  $L = 2.5$  μm. La fitness est quand à elle minimisée sur la gamme de longueur d'onde [ $\lambda_{min} = 1.3$  μm,  $\lambda_{max} = 1.7$  μm] et sur le domaine angulaire [ $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 90^\circ$ ]. Enfin, la population sur laquelle est recherchée la structure optimale contient 100 individus.

Sur les figures 5.16 et 5.17 sont présentés les résultats obtenus après 100 générations. Comme on peut le voir, les résultats sont très proches des cibles. Cette fois encore, il est important de noter que l'objectif a été atteint pour les deux états de polarisation de la lumière. Nous pouvons voir sur la figure 5.18b que la structure finale est un empilement extrêmement désordonnée et difficilement prédictible sans utiliser une méthode de design ab-initio. Sur la figure 5.18a qui représente l'évolution de la fitness en fonction du nombre de générations, on peut remarquer que cette fonction décroît par palier. Chaque diminution brutale de la fitness est généralement due à une mutation qui, comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, permet de "s'échapper" d'un extremum local.

### 5.3.1.1 Cohérence spectrale de la source

Pour déterminer le degré de cohérence spectrale de la source, nous avons calculé son facteur de qualité pour différents angles d'émission (tab. 5.2). Sur la figure 5.19, nous avons représenté l'émission de notre structure pour trois angles différents et ce pour les deux états de polarisation. On constate que la position du pic d'émission est situé à différentes longueurs d'onde, suivant la direction considérée. En revanche l'amplitude des pics est à peu près toujours la même (sauf en polarisation  $s$  à  $60^\circ$  ou elle est légèrement plus faible) et égale à  $\epsilon_{max}$ .

Par ailleurs, on note que le facteur de qualité augmente avec l'angle d'incidence, atteignant même une valeur maximum de 500 à  $60^\circ$  en polarisation  $s$ , ce qui correspond à une largeur spectrale à mi-hauteur du pic de résonance de 3 nm. L'émissivité maximale à cet angle est cependant légèrement inférieure à  $\epsilon_{max}$ . Ces facteurs de qualité sont à ce jour les plus élevés obtenus avec des structures monodimensionnelles dans le domaine du proche infrarouge (Lee & Zhang, 2006; Celanovic et al., 2005).

Le design ab-initio réalisé ici a donc permis de concevoir une source thermique présentant

$\theta$	$Q_s$	$Q_p$
$0^\circ$	436	436
$30^\circ$	460	430
$60^\circ$	500	480

TAB. 5.2 – Facteur de qualité  $Q$  suivant la direction et la polarisation de la structure composée de 50 couches d'Ag, de  $\text{SiO}_2$  et de Si de 50 nm d'épaisseur

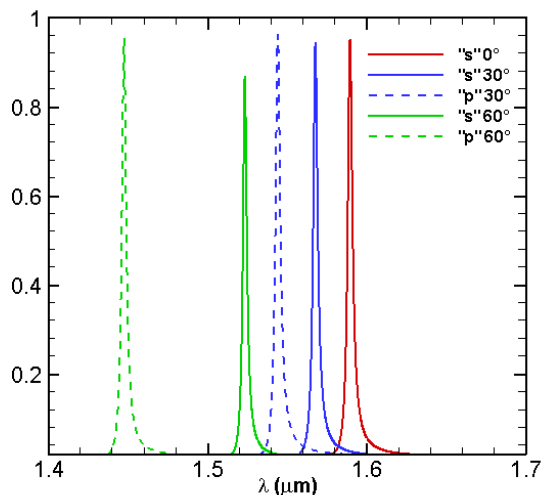


FIG. 5.19 – Émissivité spectrale à différents angles d'observation en polarisation  $s$  et  $p$  pour la source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge.

un degré de cohérence spectrale supérieur à la cible (en moyenne  $Q$  est 1,5 fois supérieur à  $Q_{cible}$ ). Un tel résultat mérite cependant quelques explications. La recherche de la structure optimale, comme nous l'avons expliqué lors de la description de l'algorithme génétique, se fait par minimisation de la fitness sur un domaine spectral et angulaire et non sur le facteur de qualité. C'est pourquoi il est tout à fait possible de minimiser la fitness tout en obtenant certaines caractéristiques meilleures que celles qui apparaissent dans la cible. On peut ainsi remarquer sur la figure 5.19 que, si le facteur de qualité est effectivement plus important que le facteur de qualité cible, les pics d'émission de la source ne sont pas situés aux mêmes fréquences pour les deux états de polarisation. En fait, l'optimisation étant globale, il n'y a pas distinction entre les deux états de polarisation. C'est pourquoi la cible n'est pas tout à fait atteinte pour chacune des polarisations. Cette faiblesse est cependant en partie compensée par un degré de cohérence spectrale supérieur à l'objectif.

### 5.3.1.2 Cohérence spatiale

Après avoir étudié la cohérence spectrale de la source thermique générée par AG, nous allons maintenant nous intéresser à sa directivité. Pour cela, nous avons tracé sur la figure 5.20a le spectre angulaire d'émission à  $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$ , qui est une longueur d'onde comprise dans le domaine spectral où l'on observe une émission thermique résonante. Sur cette figure, un pic apparaît, pour chaque polarisation. En polarisation  $p$ , le pic est centré à  $\theta = 44^\circ$  et a une largeur à mi-hauteur (FWHM pour full width at half maximum) de  $\Delta\theta = 1^\circ$ , soit 17 mrad. En revanche, en polarisation  $s$  le pic se décale à  $85^\circ$  et a une amplitude très faible ( $\approx 0.15$ ). Le spectre d'émission thermique ne varie en effet pas de la même manière avec  $\theta$  pour chaque polarisation. De plus, la pente de la bande d'émission résonante est plus importante en polarisation  $p$  qu'en polarisation  $s$  (fig. 5.16 et 5.17). Nous avons également tracé (fig. 5.20b)

le spectre angulaire d'émission à  $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$ , c'est à dire dans la zone de forte émission. On observe dans ce cas la présence de deux pics résonants à  $\theta = 27.7^\circ$  en polarisation  $\mathbf{p}$  et  $\theta = 42^\circ$  en polarisation  $\mathbf{s}$ . La FWHM est  $\Delta\theta=1.3^\circ$  en polarisation  $\mathbf{p}$  et  $\Delta\theta=2^\circ$  en polarisation  $\mathbf{s}$ . Or, on sait d'après ce que nous avons dit au chapitre 3 que la longueur de cohérence d'une source thermique est inversement proportionnelle à la largeur du pic d'émission (Greffet et al., 2002). On peut donc calculer ici cette longueur de cohérence. L'application de la relation 3.11 ( $L_{coh} \approx \lambda/\Delta\theta$ ) conduit alors à une longueur de cohérence de  $28 \lambda$  en polarisation  $\mathbf{p}$  et de  $44 \lambda$  en  $\mathbf{s}$ . Cette cohérence spatiale est un peu plus faible que celle obtenue avec des structures 2D ou 3D (Laroche, 2005). Cependant, la directivité obtenue avec cette structure multicouche monodimensionnelle est supérieure à celles obtenues jusqu'à maintenant avec des structures 1D (Celanovic et al., 2005; Lee & Zhang, 2006). De plus, elle est présente pour les deux états de polarisations.

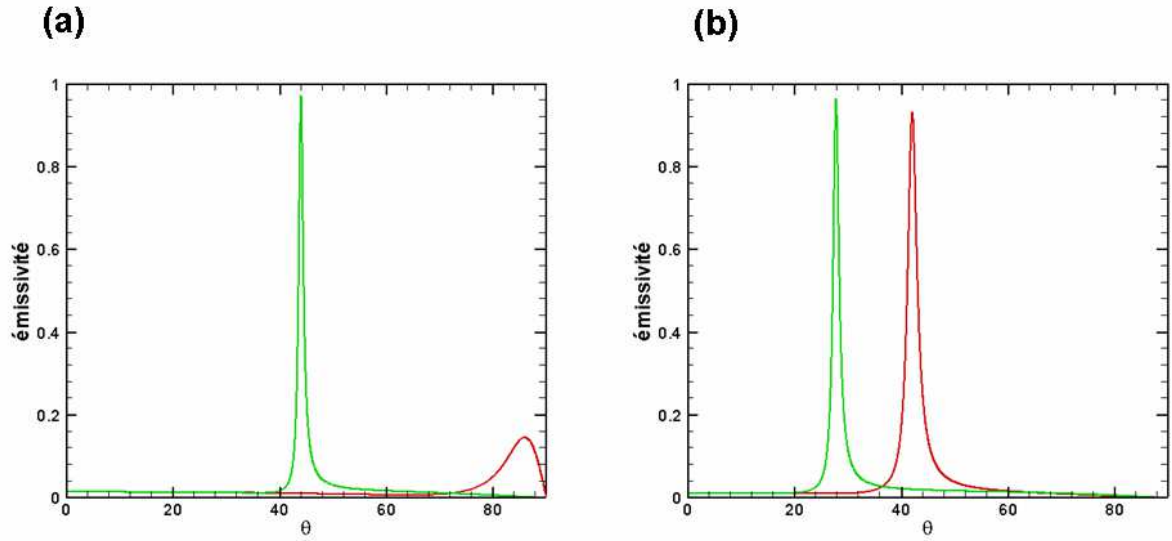


FIG. 5.20 – Spectre d'émission angulaire de la source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge en polarisation  $\mathbf{p}$  (en vert) et en polarisation  $\mathbf{s}$  (en rouge) à  $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$  (a) et à  $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$  (b).

### 5.3.1.3 Origine physique de la cohérence partielle

Afin d'analyser les mécanismes qui sont à l'origine de la cohérence partielle du champ rayonné par la structure nous avons calculé, comme au paragraphe précédent, le champ électrique à l'intérieur de la source lorsque celle-ci est soumise à une excitation externe (normalisée). Les résultats présentés sur la figure 5.21 montrent que la cohérence est directement reliée à la présence de modes localisés. En effet, on constate que lorsque la structure est éclairée par une onde à  $\lambda = 1.54 \mu\text{m}$  sous un angle de  $48,5^\circ$  en polarisation  $\mathbf{s}$  (resp.  $32^\circ$  en polarisation  $\mathbf{p}$ ), le champ interne est très fortement amplifié (de 2 ordres de grandeur) autour de la position  $z = 0.68 \mu\text{m}$  ( $\Delta z = 0.6 \mu\text{m}$ ) qui est précisément situé entre deux couches d'argent. Une telle résonance interne, entre deux couches d'argent, révèle le couplage d'ondes évanescentes supportées par les deux couches d'argent situées à droite et à gauche du point  $z=0.68 \mu\text{m}$ . Cette résonance démontre aussi que l'onde incidente propagative a pu se coupler avec ces plasmons de surface. Ainsi, l'énergie de l'onde incidente est transférée sous un certain angle ( $48,5^\circ$  en  $\mathbf{s}$  et  $32^\circ$  en  $\mathbf{p}$ ) aux plasmons de surface. Ce couplage contribue donc à la forte absorption de l'énergie incidente par les couches d'argent et entraîne (loi de Kirchoff) une forte émission de la structure dans cette direction et à cette longueur d'onde. Au contraire, pour toutes les autres directions, à cette fréquence, ainsi que pour tous les angles en dehors de la gamme de longueur d'onde [ $\lambda_1 = 1.42 \mu\text{m}$ ,  $\lambda_2 = 1.65 \mu\text{m}$ ], aucun couplage résonnant n'est observé et l'émission de



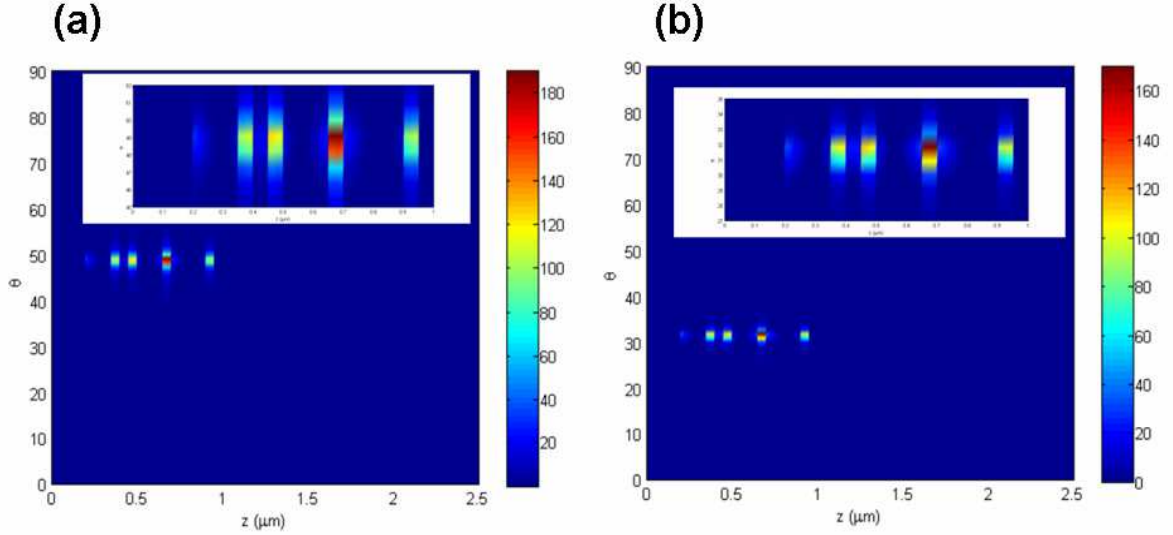


FIG. 5.21 – Distribution spatiale de l'intensité du champ électrique à l'intérieur de la structure obtenue par AG lorsqu'elle est soumise à une excitation unitaire à  $\lambda = 1.54 \mu\text{m}$  polarisée  $s$  (a) et polarisée  $p$  (b).

la structure est par conséquent négligeable. Le rôle joué par les modes propres dans l'émission thermique de la structure est aussi confirmée si nous regardons les relations de dispersion de ces modes, présentées sur la figure 5.22. On remarque en effet l'existence de modes propres aux mêmes longueurs d'ondes et direction d'émission.

### 5.3.2 Dans l'infrarouge thermique

Après avoir conçu une première source partiellement cohérente dans le proche infrarouge, nous avons voulu savoir si nous pouvions concevoir avec les mêmes matériaux une nouvelle source, mais à une autre longueur d'onde plus élevée. La forme des cibles a été conservée, mais la longueur d'onde  $\lambda^*$  a été décalée vers l'infrarouge thermique

$$\lambda^* = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{90} \theta + \lambda_2, \quad (5.14)$$

avec,  $\lambda_1 = 2.55 \mu\text{m}$  et  $\lambda_2 = 2.22 \mu\text{m}$ . Le facteur de qualité de la cible a quand à lui été fixé à 200. L'application de l'algorithme génétique sur 200 générations a permis d'obtenir (fig. 5.23) une structure répondant globalement aux spécificités demandées et ce, pour les deux états de polarisation. Les émissivités et réflectivités spectrales et directionnelles cibles et résultantes en polarisation  $s$  et en polarisation  $p$  sont présentées sur les figures 5.24 et 5.25.

#### 5.3.2.1 Cohérence spectrale de la source

Comme au paragraphe précédent, nous avons calculé le facteur de qualité obtenu pour différentes directions d'émission (tab. 5.3).

$\theta$	$Q_s$	$Q_p$
$0^\circ$	238	238
$30^\circ$	222	220
$60^\circ$	194	204

TAB. 5.3 – Facteur de qualité  $Q$  suivant la direction et la polarisation de la structure composée de 50 couches d'Ag, de  $\text{SiO}_2$  et de Si de  $h=50 \text{ nm}$  d'épaisseur obtenue après un processus de 200 générations.

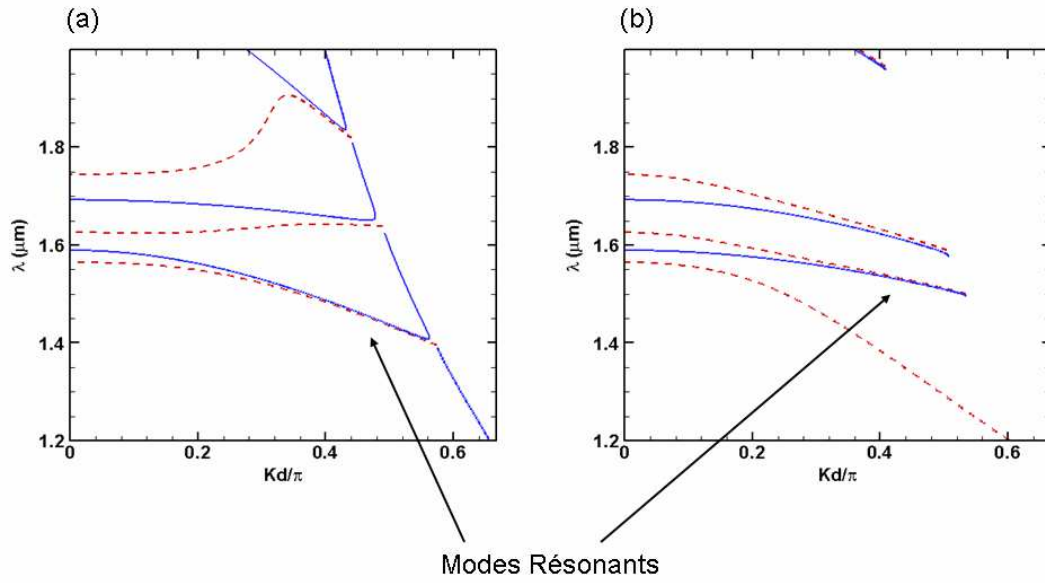


FIG. 5.22 – Relations de dispersion des modes propres de la structure obtenue par AG en polarisation  $p$  (a) et  $s$  (b), en fonction de la longueur d'onde et de la composante parallèle du vecteur d'onde ( $d=400$  nm). En pointillé :  $\text{Re}[\mathfrak{S}_{11}^N=0]$  et en trait plein :  $\text{Im}[\mathfrak{S}_{11}^N=0]$ , avec  $\mathfrak{S}_{11}^N$  la composante de la matrice de transfert de la structure totale.

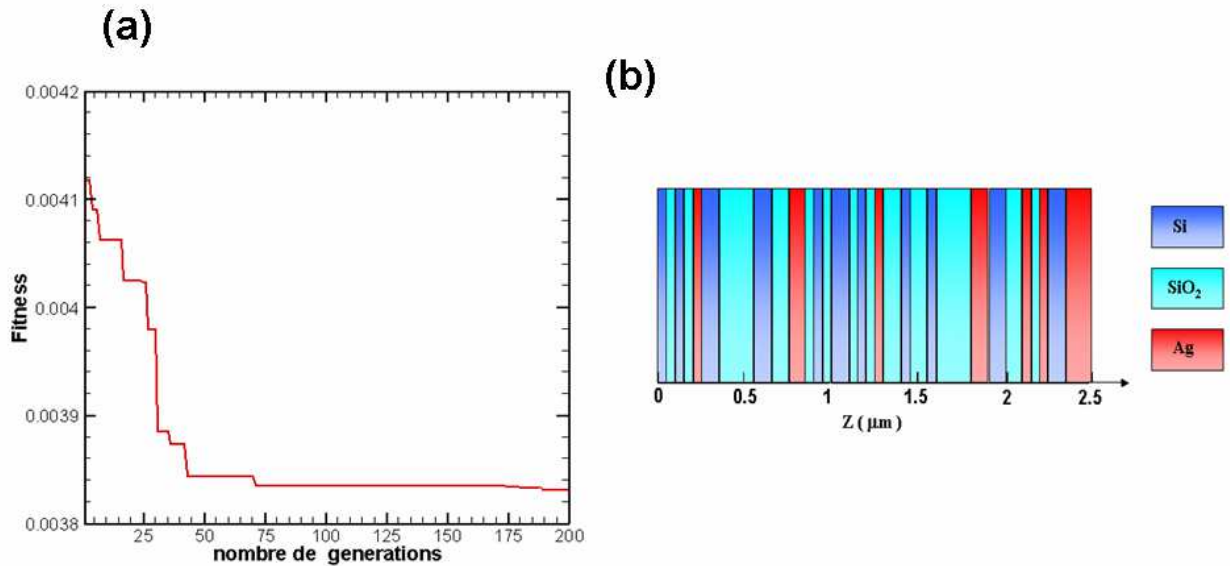


FIG. 5.23 – (a) Évolution de la fitness en fonction du nombre de générations. (b) Structure interne de la source partiellement cohérente dans l'infrarouge thermique composée de 50 couches élémentaires d'Ag, de  $\text{SiO}_2$  et de Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue par AG après un processus de 200 générations.

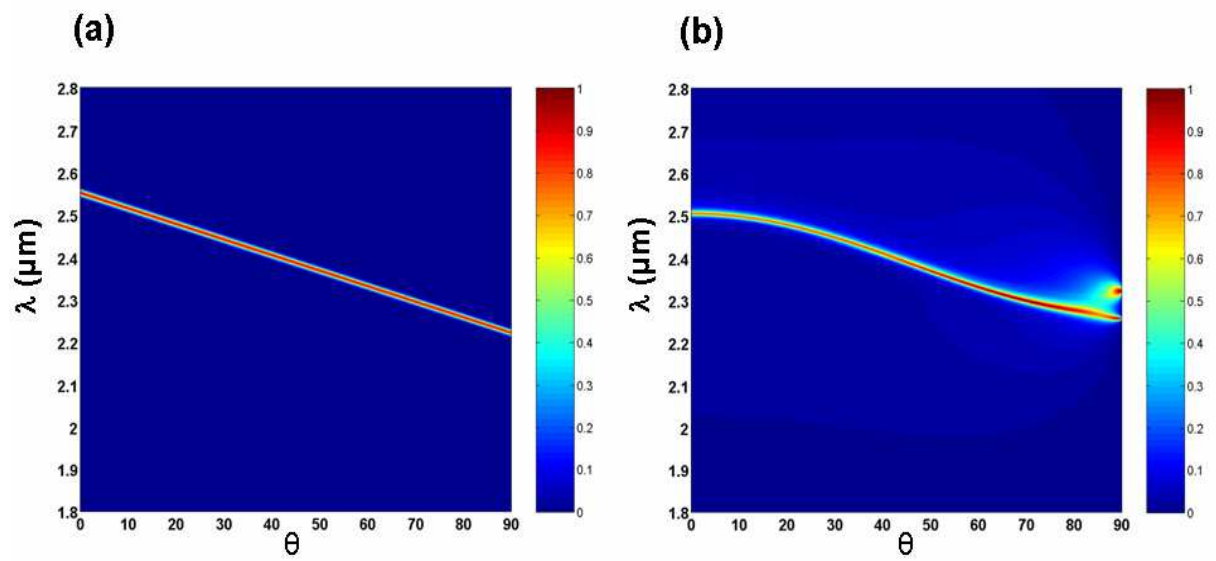


FIG. 5.24 – (a) Émissivité spectrale et directionnelle cible. (b) Émissivité spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  de la structure composée de 50 couches élémentaires d'Ag, de  $\text{SiO}_2$  et de Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue par AG après un processus de 200 générations. La structure interne de la source est présentée sur la figure 5.23.

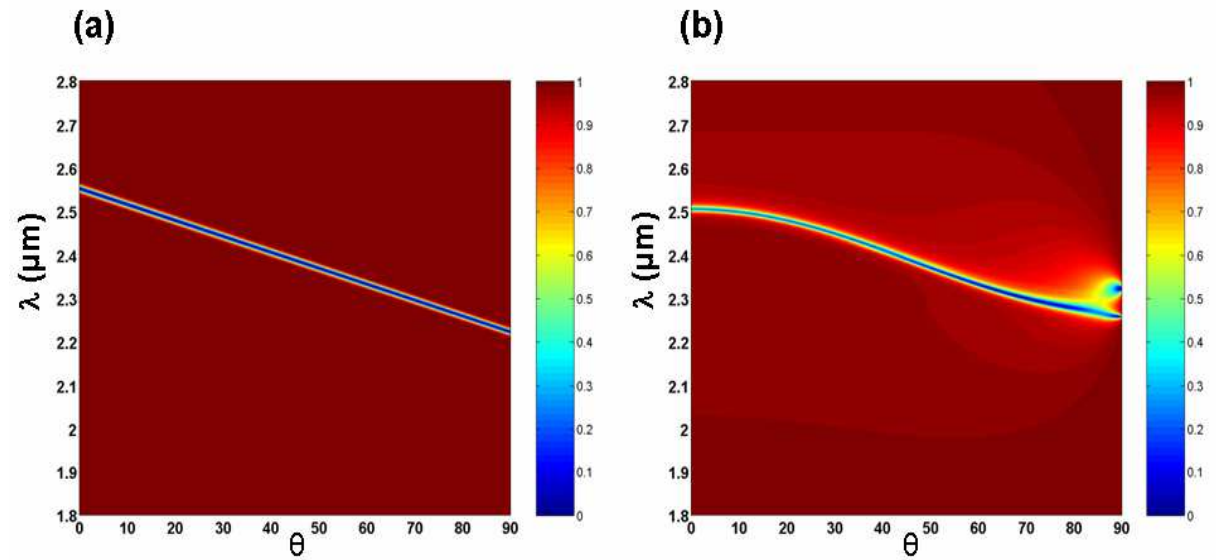


FIG. 5.25 – (a) Réflectivité spectrale et directionnelle cible. (b) Réflectivité spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  de la structure composée de 50 couches élémentaires d'Ag, de  $\text{SiO}_2$  et de Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue par AG après un processus de 200 générations. La structure de la source est présentée sur la figure 5.23.

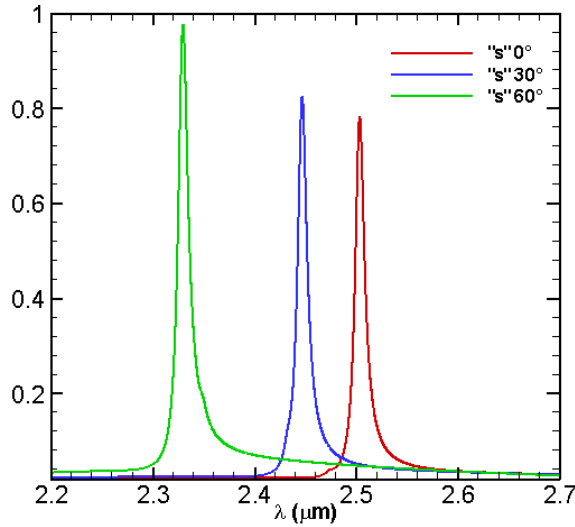


FIG. 5.26 – Spectre d'émission à différents angles en polarisation  $s$  de la source partiellement cohérente dans l'infrarouge thermique composée de 50 couches élémentaires d'Ag, de  $\text{SiO}_2$  et de Si de  $h=50$  nm d'épaisseur obtenue après un processus de 200 générations.

Nous pouvons tout d'abord remarquer que ce facteur de qualité est très proche de celui de la cible ( $Q_{cible}=200$ ) et ce quelque soit la polarisation considérée. On observe néanmoins une légère diminution de ce facteur avec l'angle d'observation, ce qui traduit une légère dégradation de la cohérence spectrale aux incidences rasantes. Cependant, si l'on regarde le spectre d'émission en polarisation  $s$  à  $\theta=0^\circ$ ,  $30^\circ$  et  $60^\circ$ , présenté sur la figure 5.26, on peut remarquer que l'amplitude d'émission augmente avec l'angle d'émission. Ainsi au facteur de qualité le plus important correspond la plus faible amplitude d'émission. Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'optimisation réalisée par AG est globale et une surévaluation d'un des paramètres, comme le facteur de qualité entraîne logiquement la sous évaluation d'un autre paramètre, comme l'amplitude d'émission.

### 5.3.2.2 Cohérence spatiale de la source

Comme au paragraphe précédent, l'étude de la cohérence spatiale du champ émis par la source passe par le calcul de la FWHM. Nous pouvons voir sur la figure 5.27, qui représente le spectre angulaire d'émission pour les deux polarisations de la lumière à  $\lambda=2.4 \mu\text{m}$ , qu'un pic d'émission apparaît à  $\theta = 42^\circ$  en polarisation  $s$  et à  $\theta = 34^\circ$  en polarisation  $p$ . La FWHM correspondante est de  $\Delta\theta = 3.5^\circ$  en polarisation  $s$  et de  $\Delta\theta = 2^\circ$  en polarisation  $p$ . Bien qu'inférieures aux largeurs angulaires obtenues avec la source partiellement cohérente présentée au paragraphe précédent, ces valeurs dénotent néanmoins d'une cohérence spatiale importante. On peut enfin observer sur cette figure que l'émissivité en polarisation  $s$  augmente légèrement autour de  $80^\circ$ . Aucune explication n'a été apportée sur l'origine physique de ce pic d'émission, observable uniquement en polarisation  $s$ . Cependant, il est probable qu'il soit directement relié à l'existence d'une onde de surface.

### 5.3.2.3 Origine physique de la cohérence partielle

Comme au paragraphe précédent, la recherche de l'origine physique de la cohérence partielle passe par le calcul de la distribution du champ électrique à l'intérieur de la structure lorsque celle-ci est soumise à une onde incidente propagative arrivant à sa surface avec un angle  $\theta$ . Les résultats présentés sur la figure 5.28 montrent clairement la présence d'une forte amplification de l'amplitude du champ autour de  $34^\circ$  en polarisation  $p$  et autour de  $42^\circ$  en polarisation

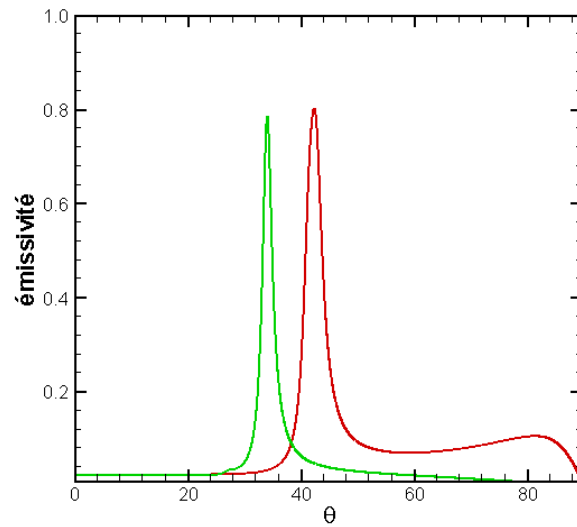


FIG. 5.27 – Spectre d'émission angulaire à  $\lambda = 2.4 \mu\text{m}$  de la source partiellement cohérente dans l'infrarouge thermique en polarisation  $p$  (en vert) et en polarisation  $s$  (en rouge).

$s$  et aux abscisses  $z$  comprises entre  $0.65$  et  $0.75 \mu\text{m}$ . Comme on peut le voir sur l'encart, la résonance est localisée à l'interface d'une couche de verre et d'argent et elle décroît à mesure que l'on s'éloigne de l'argent. Nous sommes donc en présence d'un couplage entre une onde propagative et une onde évanescente (plasmons de surface) apparaissant à la surface de l'argent. Une très légère amplification du champ est aussi perceptible à la surface de la première

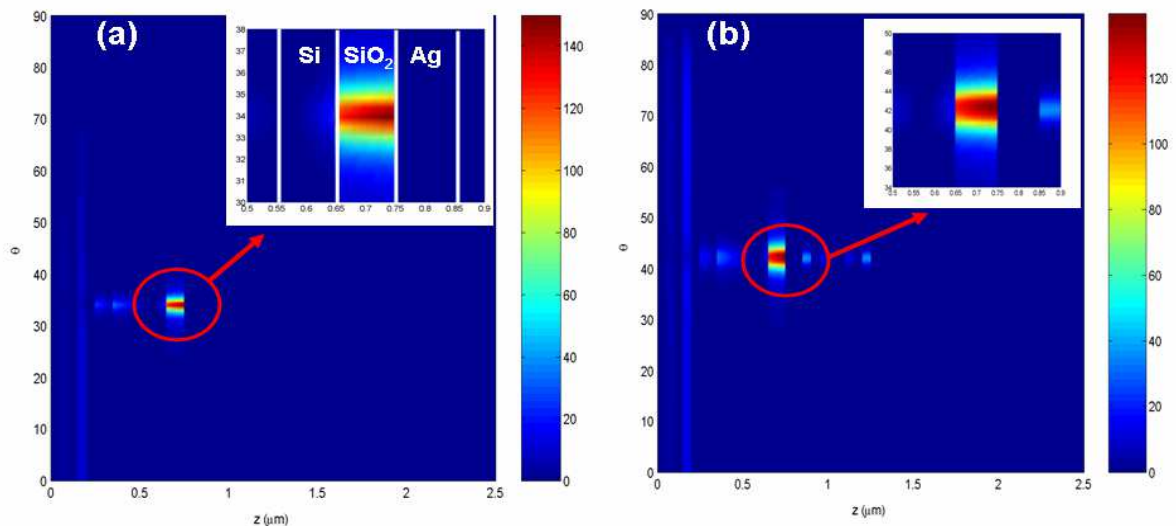


FIG. 5.28 – Distribution spatiale de l'intensité du champ électrique à l'intérieur de la structure obtenue par AG (fig. 5.23) lorsqu'elle est soumise à une excitation unitaire de longueur d'onde  $\lambda = 2.4 \mu\text{m}$  polarisée  $p$  (a) et polarisée  $s$  (b).

couche d'argent de la structure à l'abscisse  $z=0.2 \mu\text{m}$ , mais cette amplification est négligeable comparée à celle observée à la surface de la deuxième couche du matériau absorbant. Dans cette étude, le couplage entre les ondes propagatives et les ondes évanescentes responsables de la cohérence de la source thermique ne semble donc se faire qu'à l'interface d'une seule couche d'argent, contrairement à l'étude précédente où nous avons observé une résonance du champ

électrique entre deux couches d'argent et un couplage avec un état intriqué de plasmons.

### 5.3.3 Influence de la présence d'un substrat sur la cohérence de la structure

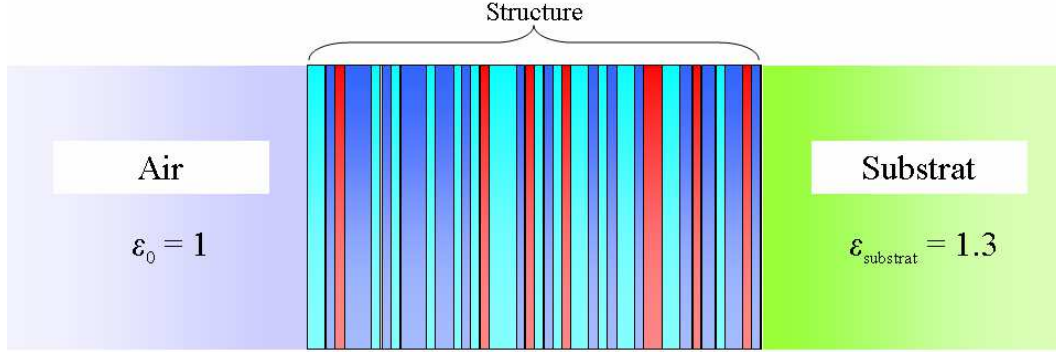


FIG. 5.29 – Structure interne de la source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge composée de 50 couches élémentaires d'Ag, SiO<sub>2</sub> et Si de h=50 nm d'épaisseur obtenue après un processus itératif de 100 générations, déposée sur un substrat.

Nous avons expliqué précédemment que l'un des intérêts des structures que nous avons conçues est qu'elles peuvent être utilisées comme revêtement. Or jusqu'ici le calcul des propriétés radiatives s'est fait en ne considérant que des structures entourées d'air. Pour vérifier que les propriétés radiatives de nos structures sont conservées en présence d'un substrat, nous les avons calculées en configuration réelle, c'est à dire en les plaçant entre deux milieux semi-infinis (fig.5.29), l'un de permittivité diélectrique  $\epsilon_0 = 1$  (l'air), l'autre de permittivité diélectrique  $\epsilon_{substrat} = 1.3$ .

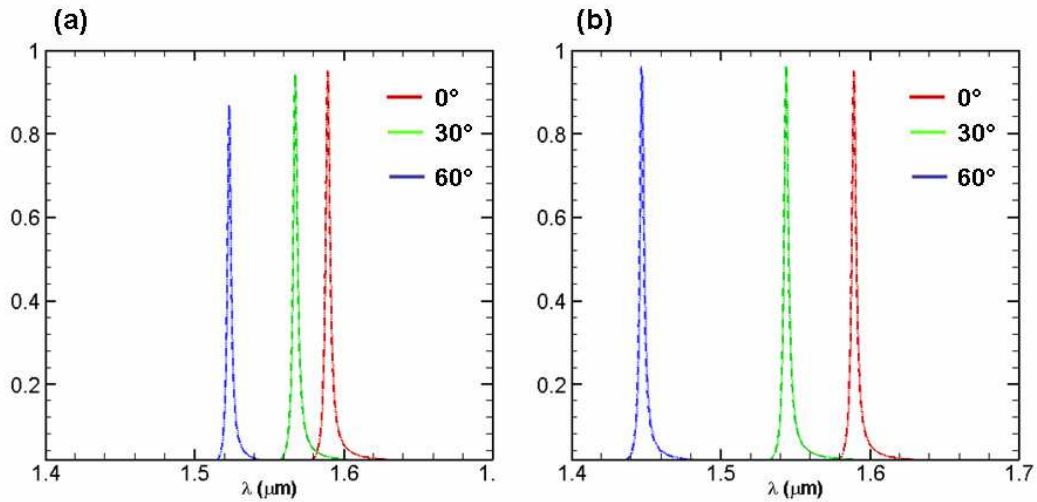


FIG. 5.30 – Spectre d'émission de la source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge composée de 50 couches élémentaires d'Ag, SiO<sub>2</sub> et Si de h=50 nm d'épaisseur dans le vide (pointillé) et déposée sur un substrat (trait discontinu) pour  $\theta = 0^\circ$ ,  $30^\circ$  et  $60^\circ$  en polarisation *s* (a) et en polarisation *p* (b).

On peut voir sur la figure 5.30 que le substrat n'engendre aucune modification des propriétés radiatives de la source. En fait ce résultat permet de vérifier que le substrat ne modifie pas le mécanisme de couplage entre les modes incidents et les plasmons de surface supportés par les couches d'argent.

### 5.3.4 Influence de la température

Jusqu'ici nous avons supposé que les propriétés optiques des matériaux étaient indépendantes de la température. Il s'agit donc ici d'étudier l'influence de la variation de température sur les propriétés thermiques d'émission et de réflexion des structures que nous avons obtenues précédemment par design inverse. L'objectif est de savoir si le champ de température affecte le degré de cohérence des sources thermiques. La structure étudiée est celle présentant une émission thermique partiellement cohérente dans l'infrarouge thermique obtenue précédemment (5.23b). On sait que l'augmentation de la température de la structure entraîne une augmentation de la fréquence de collision des électrons  $\gamma$  et donc une augmentation de l'absorption dans l'argent<sup>4</sup>. La fréquence de collision des électrons évolue en fonction de la température selon la loi (Celanovic et al., 2005; Ujihara, 1972) :

$$\gamma(T) = \left[ \frac{\gamma(T = 300K)}{300} \right]^{1.3} T^{1.3}. \quad (5.15)$$

Par contre, la fréquence plasma  $\omega_p$  reste constante sur la plage de température considérée (Ujihara, 1972).

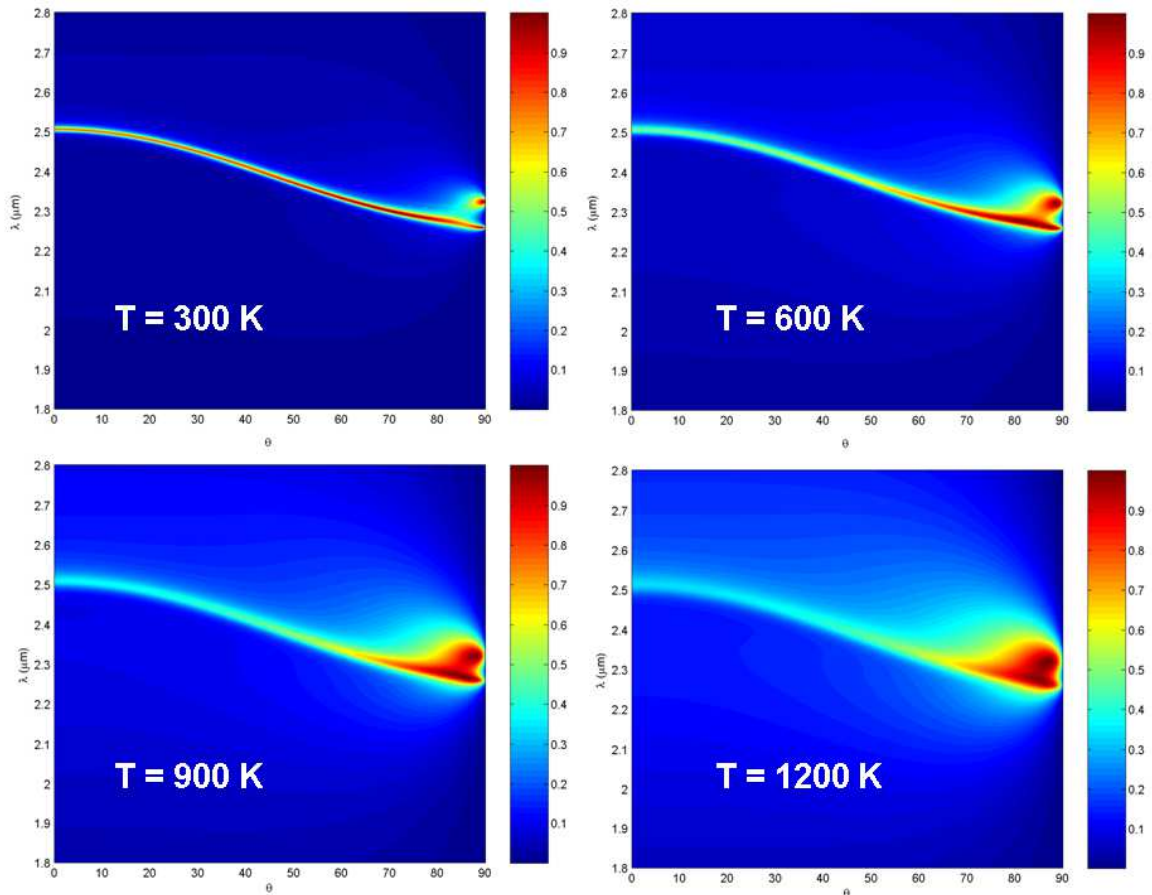


FIG. 5.31 – Émissivité spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  pour des températures de 300, 600, 900 et 1200 K.

Sur la figure 5.31 est représenté les spectres d'émission en polarisation  $s$  pour différentes températures. On constate alors qu'à mesure que la température augmente, l'intensité de l'émission

<sup>4</sup>Il est à noter que nous nous sommes limité ici à l'étude de la variation des pertes électroniques avec la température mais que d'autres contributions à la variations des propriétés optiques des matériaux avec la température, telle que l'influence sur les transitions inter et intra bandes (Rashidi-Huyeh & Palpant, 2006), existent et pourront être prises en compte lors d'une étude ultérieure sur cette dépendance en température

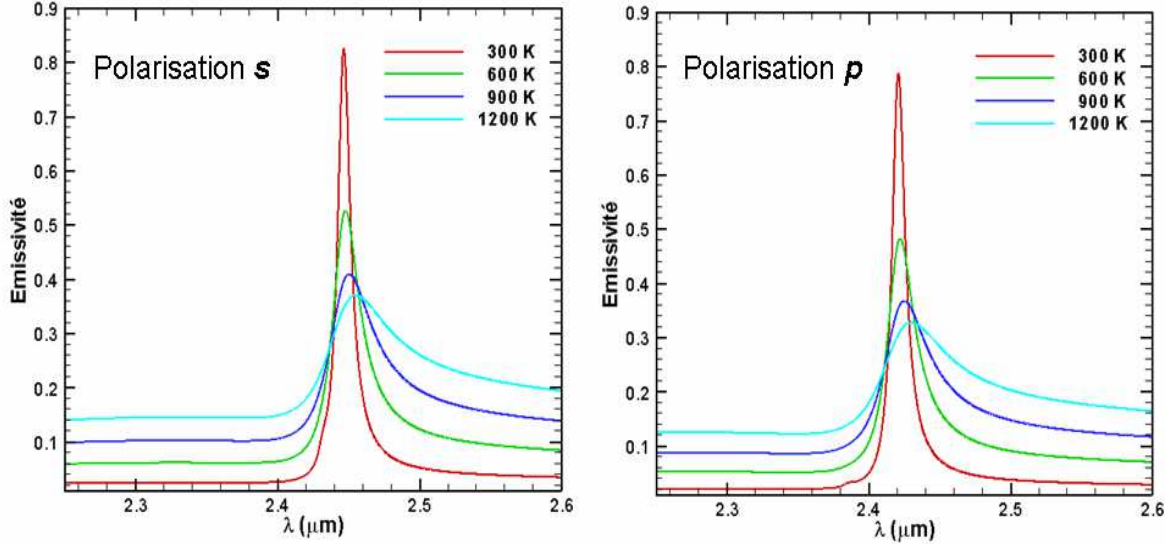


FIG. 5.32 – Émissivité spectrale et directionnelle en polarisation  $s$  et  $p$  pour un angle d'incidence de  $30^\circ$  et pour des températures de 300, 600, 900 et 1200 K.

décroit, sauf en incidence rasante où elle ne varie pratiquement pas. De la même manière, on observe que le facteur de qualité diminue aussi avec la température. Notre source conserve cependant un degré de cohérence assez important jusqu'à une température de 700 K mais se dégrade très fortement pour des températures plus élevées, passant, pour un angle d'émission de  $30^\circ$ , de 200 pour une température de 300 K à 16 pour une température de 1200 K [les résultats en polarisation  $p$  sont identiques à ceux obtenus en polarisation  $s$  et ne sont pas présentés ici].

Sur la figure 5.32 est représenté le spectre d'émission de la structure pour un angle d'incidence de  $30^\circ$  et pour différentes températures. On remarque alors que le pic d'émissivité, en plus de diminuer quand la température augmente, semble aussi se décaler légèrement vers des longueurs d'ondes plus grandes. Ce résultat est à rapprocher de ceux observés par Celanovic et al (Celanovic et al., 2005). En fait, lorsque la température augmente, l'absorption de la couche d'argent augmente aussi de sorte que le couplage entre l'onde propagative incidente et l'onde évanescente n'a lieu qu'aux incidences rasantes.

## 5.4 Conclusion

Dans cette partie, nous avons présenté le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ lointain. Pour réaliser ce design inverse, nous avons utilisé la théorie des matrices de transfert, pour résoudre le problème direct, et un algorithme génétique qui est une méthode d'optimisation stochastique globale. Cette utilisation combinée nous a permis de concevoir des sources thermiques quasimonochromatiques et isotropes dans le moyen infrarouge et des sources thermiques partiellement cohérentes dans le proche infrarouge. Les différentes structures et mécanismes de couplage que nous avons mis en évidence montrent la richesse de l'algorithme génétique et la diversité du champ des solutions possibles pour la conception ab-initio de sources thermiques cohérentes. Le processus d'optimisation par algorithme génétique est non seulement un outil de design performant mais il permet également de générer des mécanismes de couplages nouveaux et constitue donc de ce fait un outil d'investigation physique privilégié.





## Troisième partie

# Design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ proche



# Introduction

---

Après avoir démontré la possibilité de concevoir des systèmes micro et nanostructurés à émission thermique cohérente en champ lointain, nous nous intéresserons dans cette partie au design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ proche. Nous avons montré, dans la première partie, que l'approche radiométrique pour modéliser le rayonnement thermique n'est plus valable lorsque l'on veut étudier l'émission thermique à des distances sub-longueur d'onde de la surface des matériaux. Pour concevoir des sources thermiques en champ proche à haut degré de cohérence, une approche électromagnétique est alors nécessaire. Cet travail se fera ainsi dans le cadre de l'approche fluctuationnelle des équations de Maxwell. Afin de caractériser l'émission thermique en champ proche, nous présenterons le calcul exact de la densité locale d'énergie électromagnétique à la surface d'un matériau. Pour cela nous introduirons le formalisme des tenseurs de Green et la méthode des matrices de diffusion, adaptée à notre problème. Après avoir rappelé les expressions des tenseurs de Green dans l'espace libre et dans un milieu semi-infini, nous montrerons comment les obtenir dans le cas d'un milieu stratifié 1D. Nous étudierons alors la densité locale d'énergie électromagnétique au dessus de films fins de carbure de silicium, matériau polaire supportant des phonon-polaritons de surface et au dessus de films fins d'aluminium, matériau métallique supportant des plasmon-polaritons de surface. Nous montrerons ainsi que la densité d'énergie au dessus d'un film peut gagner plusieurs ordres de grandeurs par rapport à celle observée au dessus du matériau massif. Enfin, sur la base de ces premiers résultats, nous réaliserons le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ proche. Nous montrerons sur quelques exemples l'efficacité du processus d'optimisation de sources thermiques cohérentes en champ proche par algorithme génétique.

---

# Densité d'énergie électromagnétique

---

## 6.1 Introduction

Nous nous intéressons ici à une grandeur importante pour caractériser l'émission thermique : la densité spectrale locale d'énergie  $u(\mathbf{r}, \omega)$  d'un champ électromagnétique. La densité d'énergie est en effet une quantité permettant la compréhension de nombreux phénomènes physiques, en particulier celle des modes résonants et localisés.

La physique statistique nous permet de relier la densité locale d'états électromagnétique,  $\rho(\mathbf{r}, \omega)$  à la densité d'énergie par la relation

$$u(\mathbf{r}, \omega) = \rho(\mathbf{r}, \omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \rho(\mathbf{r}, \omega) \Theta(\omega, T), \quad (6.1)$$

où  $\Theta(\omega, T)$  est l'énergie moyenne d'un oscillateur quantique à la pulsation  $\omega$  et en équilibre thermique à la température  $T$ . Selon la statistique de Bose-Einstein, elle s'écrit sous la forme

$$\Theta(T, \omega) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\frac{\hbar\omega}{k_B T}) - 1} \quad (6.2)$$

où  $k_B$  et  $\hbar$  sont respectivement la constante de Boltzmann et la constante de Planck réduite. La relation 6.1 indique donc que la densité d'énergie en un point  $\mathbf{r}$  et à la pulsation  $\omega$  est le produit de l'énergie du photon par le nombre moyen de photons par état et par la densité locale d'états au point  $\mathbf{r}$  et à la pulsation  $\omega$ . La densité d'énergie électromagnétique est en outre la somme de la densité d'énergie électrique  $u_e$  et de la densité d'énergie magnétique  $u_m$  :

$$u(\mathbf{r}, \omega) = u_e(\mathbf{r}, \omega) + u_m(\mathbf{r}, \omega), \quad (6.3)$$

avec

$$u_e(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle \quad \text{et} \quad u_m(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \langle \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle. \quad (6.4)$$

Ici  $\langle \rangle$  représente la moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations des courants aléatoires  $\mathbf{j}$  et le signe "\*" indique le complexe conjugué. Pour évaluer cette densité d'énergie, nous utiliserons les relations linéaires entre les champs électriques et magnétiques et le vecteur courant

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mu_0 \int_V \overline{\overline{\mathbf{G}}^E}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}' \quad d\mathbf{r}' = dx' dy' dz', \quad (6.5)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \int_V \overline{\overline{\mathbf{G}}^H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}' \quad d\mathbf{r}' = dx' dy' dz'. \quad (6.6)$$

ou  $\overline{\overline{\mathbf{G}}^E}$  et  $\overline{\overline{\mathbf{G}}^H}$  représentent les tenseurs de Green électrique et magnétique respectivement (le signe "-" dans la relation 6.5 provient de la convention adoptée) et  $V$  représente le volume où

se situent les sources du rayonnement. Il s'en suit que la fonction d'autocorrélation du champ électrique s'exprime en fonction du tenseur de Green sous la forme

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle = \left\langle \left| -i\omega\mu_0 \int d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega) \right|^2 \right\rangle \quad (6.7)$$

$$= (\omega\mu_0)^2 \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \sum_{l,m,n=x,y,z} G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,n}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega)^* \times \langle \mathbf{j}_m(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}'', \omega)^* \rangle. \quad (6.8)$$

De manière analogue, la fonction d'autocorrélation du champ magnétique s'écrit

$$\langle \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle = \left\langle \left| \int d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega) \right|^2 \right\rangle \quad (6.9)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \sum_{l,m,n=x,y,z} G_{l,m}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,n}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega)^* \times \langle \mathbf{j}_m(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}'', \omega)^* \rangle. \quad (6.10)$$

La fonction de corrélation des courants fluctuants est alors évaluée à partir du théorème de fluctuation-dissipation (Callen, 1951; Rytov, 1958)

$$\langle \mathbf{j}_m(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}'', \omega)^* \rangle = -2 \frac{\omega \varepsilon_0}{\pi} \varepsilon''(\mathbf{r}') \Theta(T, \omega) \delta_{m,n} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''). \quad (6.11)$$

Ici les indices  $m, n = x, y, z$  correspondent aux différentes composantes spatiales des courants,  $\varepsilon_0$  est la permittivité diélectrique du vide,  $\varepsilon''(\mathbf{r})$  est la partie imaginaire de la constante diélectrique du milieu émettant,  $\delta_{m,n}$  est le symbole de Kronecker et  $\delta$  la distribution de Dirac [ le signe "-" dans l'équation 6.11 provient des conventions que nous avons choisies :  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon'(\mathbf{r}, \omega) + i\varepsilon''(\mathbf{r}, \omega)$  avec  $\varepsilon''(\mathbf{r}, \omega) < 0$ ].

Détaillons maintenant le calcul de la fonction de corrélation du champ électrique. L'application du théorème de fluctuation-dissipation sur la relation 6.7 conduit à

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle = -2\mu_0^2 \omega^2 \frac{\omega \varepsilon_0}{\pi} \Theta(T, \omega) \int d\mathbf{r}' \varepsilon''(\mathbf{r}') G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)^*, \quad (6.12)$$

où nous avons adopté la notation d'Einstein pour la sommation sur les indices répétés  $l$  et  $m$ . Comme  $\mu_0 \varepsilon_0 c^2 = 1$ , il est immédiat de voir que la densité d'énergie électrique prend la forme

$$u_e(\mathbf{r}, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \Theta(T, \omega) \int d\mathbf{r}' \varepsilon''(\mathbf{r}') G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)^*. \quad (6.13)$$

Pour calculer le produit contracté  $G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)^*$ , on procède de la manière suivante. D'après la symétrie du problème, le tenseur de Green peut se développer sous la forme

$$\overline{\overline{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \overline{g}(z, z', \mathbf{K}, \omega) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}. \quad (6.14)$$

Il s'agit de la transformée de Fourier spatiale 2D du tenseur encore appelé développement de Weyl. Ici on a posé  $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$ ,  $\mathbf{r}' = (\mathbf{R}', z)$  et  $\mathbf{k} = (\mathbf{K}, k_z)$ ,  $\mathbf{K}$  étant la composante parallèle du vecteur d'onde.

En insérant ce développement dans la relation 6.13 nous avons alors

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}' \varepsilon''(\mathbf{r}') G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)^* &= \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\mathbf{K}'}{(2\pi)^2} e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}} \\ &\times \int dz' \varepsilon''(z') g_{l,m}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega) g_{l,m}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega)^* \\ &\times \int d\mathbf{R}' e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}'}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

La symétrie azimutale du problème permet de simplifier l'égalité précédente sous la forme

$$\int d\mathbf{r}' \varepsilon''(\mathbf{r}') G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)^* = \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \int dz' \varepsilon''(z') g_{l,m}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega) g_{l,m}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega)^*, \quad (6.16)$$

de sorte que la densité d'énergie électrique  $u_e$  peut être calculée à l'aide des composantes de Fourier du tenseur de Green électrique pour donner

$$u_e(\mathbf{r}, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \Theta(T, \omega) \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \int dz' \varepsilon''(z') g_{l,m}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega) g_{l,m}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega)^*. \quad (6.17)$$

Or la symétrie azimutale de notre problème (les axes  $x$  et  $y$  jouent le même rôle) impose que tous les termes de l'intégrand de 6.17 ne dépendent que de  $K$  et non de  $\mathbf{k}$ . Il est alors possible d'effectuer la transformation suivante sur la variable d'intégration

$$\int d\mathbf{K} = \int \int dk_x dk_y = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} K dK d\theta = 2\pi \int_0^\infty K dK, \quad (6.18)$$

pour simplifier l'expression de la densité d'énergie électrique en

$$u_e(\mathbf{r}, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z') g_{l,m}^E(z, z', K, \omega) g_{l,m}^E(z, z', K, \omega)^*. \quad (6.19)$$

De manière analogue, la densité d'énergie magnétique en fonction du tenseur de Green magnétique s'écrit

$$u_m(\mathbf{r}, \omega) = -2 \frac{\omega}{\pi c^2} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z') g_{l,m}^H(z, z', K, \omega) g_{l,m}^H(z, z', K, \omega)^*. \quad (6.20)$$

Les relations 6.19 et 6.20 montrent que le calcul des densités d'énergie nécessite donc de connaître les composantes de Weyl des tenseurs de Green. C'est pourquoi le paragraphe suivant sera consacré à ce calcul, successivement dans l'espace libre, dans un milieu semi-infini (Mulet, 2003), puis dans le cas général d'un milieu multicouche.

## 6.2 Calcul des composantes de Weyl du tenseur de Green

### 6.2.1 Dans l'espace libre

#### 6.2.1.1 Cas du tenseur de Green électrique

Considérons pour commencer la transformée de Fourier spatiale du tenseur de Green électrique

$$\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}), \quad (6.21)$$



où  $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$  est le vecteur d'onde et  $d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$ . En effectuant le rotationnel de cette relation, on obtient après permutation du signe somme et de l'opérateur nabla

$$\nabla \wedge \left[ \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \nabla \wedge \left[ e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}) \right]. \quad (6.22)$$

En remarquant qu'appliquer l'opérateur rotationnel à une onde plane revient à effectuer une multiplication vectorielle par  $-i\mathbf{k}$ , il vient

$$\nabla \wedge \left[ \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] = \frac{-1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} [i\mathbf{k} \times \overline{\overline{g}}(\mathbf{k})] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (6.23)$$

En appliquant de nouveau le rotationnel à cette relation, on obtient

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \left[ \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} [i\mathbf{k} \times (i\mathbf{k} \times \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}))] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (6.24)$$

Or d'après une formule usuelle d'algèbre extérieure,

$$i\mathbf{k} \times (i\mathbf{k} \times \overline{\overline{g}}(\mathbf{k})) = ((\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}) \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}) - (\mathbf{k} \cdot \overline{\overline{g}}(\mathbf{k})) \mathbf{k}), \quad (6.25)$$

où les opérations élémentaires dans cette relation sont définies par

$$(\mathbf{k} \cdot \overline{\overline{g}})_m = k_n g_{mn}(\mathbf{k}),$$

$$(\mathbf{k} \cdot \overline{\overline{g}}) \mathbf{k} = (\overline{\overline{k}k}) \overline{\overline{g}},$$

$$(\overline{\overline{k}k})_{mn} = k_m k_n.$$

Ainsi la relation 6.25 prend la forme équivalente

$$[i\mathbf{k} \times (i\mathbf{k} \times \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}))] = ((\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}) \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}) - (\overline{\overline{k}k}) \overline{\overline{g}}(\mathbf{k})), \quad (6.26)$$

de sorte que

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \left[ \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left[ ((\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}) \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}) - (\overline{\overline{k}k}) \overline{\overline{g}}(\mathbf{k})) \right] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (6.27)$$

En rappelant que le tenseur de Green électrique est solution de l'équation

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.28)$$

et en insérant les égalités 6.21 et 6.27 dans cette équation, il vient

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left[ (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}) - (\overline{\overline{k}k}) - k_0^2 \varepsilon \right] \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

En rappelant que la transformée de Fourier spatiale d'une exponentielle complexe est un Dirac et en utilisant l'égalité  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = k^2$  on en déduit que

$$\left[ (k^2 - k_0^2 \varepsilon) \overline{\overline{I}} - \overline{\overline{k}k} \right] \overline{\overline{g}}(\mathbf{k}) = \overline{\overline{I}}. \quad (6.29)$$

Le tenseur de Green électrique prend alors la forme

$$\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left[ (k^2 - k_0^2 \varepsilon) \overline{\overline{I}} - \overline{\overline{k}k} \right]^{-1} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (6.30)$$

La suite du calcul nécessite l'inversion du tenseur  $\left[(k^2 - k_0^2 \varepsilon) \bar{I} - \overline{k k}\right]$ . Cette inversion a été faite par Mulet (2003) et on se contente ici de donner le résultat du calcul

$$\left[(k^2 - k_0^2 \varepsilon) \bar{I} - \overline{k k}\right]^{-1} = \frac{1}{k^2 - k_0^2 \varepsilon} \left[\bar{I} - \frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \overline{k k}\right]. \quad (6.31)$$

Ainsi la composante de Fourier du tenseur de Green électrique devient

$$\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{1}{(k^2 - k_0^2 \varepsilon)} \left[\bar{I} - \frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \overline{k k}\right] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (6.32)$$

Par ailleurs, le tenseur de Green admet le développement de Weyl suivant

$$\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{K} \overline{\overline{g}}(\mathbf{K}, z, z', \omega) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}, \quad (6.33)$$

où l'on a posé  $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$ ,  $\mathbf{r}' = (\mathbf{R}, z')$  et  $\mathbf{K} = (k_x, k_y, 0)$ .

En introduisant la grandeur

$$\beta = \beta' + i\beta'' = \sqrt{k_0^2 \varepsilon - K}, \quad \text{avec } \beta' \geq 0 \text{ et } \beta'' \leq 0, \quad (6.34)$$

on remarque alors que  $\mathbf{k} = (\mathbf{K}, \beta)$  et que les composantes de Weyl du tenseur de Green s'écrivent

$$\overline{\overline{g}}(\mathbf{K}, z, z', \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dk_z \frac{1}{(k_z^2 - \beta^2)} \left[\bar{I} - \frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \overline{k k}\right] e^{-ik_z \cdot (z - z')}. \quad (6.35)$$

Pour calculer ces composantes, il faut effectuer l'intégration de l'équation 6.35 dans le plan complexe en remarquant qu'il existe une singularité en  $k_z = \beta$ . Cette intégration se fait en distinguant d'une part le cas où  $z > z'$  et d'autre part le cas où  $z < z'$ . On procède alors de la manière suivante : d'une part on introduit les vecteurs

$$\mathbf{k}^+ = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z, \quad (6.36)$$

$$\mathbf{k}^- = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y - k_z \mathbf{e}_z, \quad (6.37)$$

où  $\mathbf{k}^+$  correspond à une propagation vers les  $z$  croissants ( $z > z'$ ) tandis que  $\mathbf{k}^-$  correspond à une propagation vers les  $z$  décroissants ( $z < z'$ ). On a alors

$$\overline{\overline{g}}(\mathbf{K}, z, z', \omega) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \int dk_z \frac{1}{(k_z^2 - \beta^2)} \left[\bar{I} - \frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \overline{k^+ k^+}\right] e^{-ik_z \cdot (z - z')} & \text{pour } z > z' \\ \frac{1}{2\pi} \int dk_z \frac{1}{(k_z^2 - \beta^2)} \left[\bar{I} - \frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \overline{k^- k^-}\right] e^{+ik_z \cdot (z - z')} & \text{pour } z < z'. \end{cases} \quad (6.38)$$

La différence de signe entre  $\mathbf{k}^+$  et  $\mathbf{k}^-$  permet de s'assurer que l'intégrale dans l'expression du tenseur de Green converge pour une onde évanescente, c'est à dire, lorsque  $\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = K$  est plus grand que  $k$ . En introduisant, conformément au formalisme de Sipe (Sipe, 1987), les vecteurs suivants qui sont respectivement dans le plan de polarisation des ondes  $\mathbf{s}$  et  $\mathbf{p}$

$$\mathbf{e}(\pm k_z) = \frac{\mathbf{k} \wedge \mathbf{e}_z}{|\mathbf{k} \wedge \mathbf{e}_z|} = \frac{1}{K} (\mathbf{e}_x k_y - \mathbf{e}_y k_x) \quad (6.39)$$

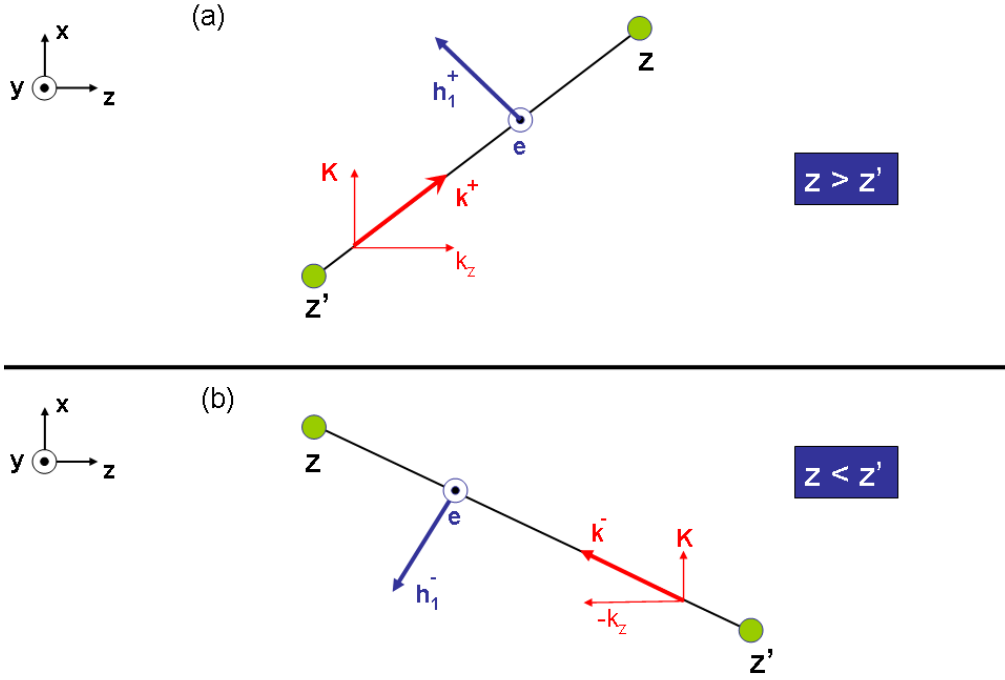


FIG. 6.1 – Vecteurs introduits dans le formalisme de Sipe dans l'espace libre dans le cas où  $z > z'$  (a) et dans le cas où  $z < z'$  (b).

$$\mathbf{h}(\pm k_z) = \frac{\mathbf{e}(\pm k_z) \wedge \mathbf{k}}{|\mathbf{e}(\pm k_z) \wedge \mathbf{k}|} = \frac{1}{k_0 n} \left( K \mathbf{e}_z \mp k_z \frac{\mathbf{K}}{|K|} \right), \quad (6.40)$$

on peut effectuer l'intégration dans le plan complexe (Tsang et al., 2000). Les composantes de Weyl du tenseur de Green s'écrivent alors en fonction des vecteurs de Sipe

$$\bar{g}(\mathbf{K}, z, z', \omega) = \begin{cases} \frac{i}{2k_z} [\mathbf{e}(+k_z)\mathbf{e}(+k_z) + \mathbf{h}(+k_z)\mathbf{h}(+k_z)] e^{-ik_z(z-z')} \\ -\frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \delta(z-z') \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \quad \text{pour } z > z' \\ \frac{i}{2k_z} [\mathbf{e}(-k_z)\mathbf{e}(-k_z) + \mathbf{h}(-k_z)\mathbf{h}(-k_z)] e^{+ik_z(z-z')} \\ -\frac{1}{k_0^2 \varepsilon} \delta(z-z') \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \quad \text{pour } z < z' \end{cases} \quad (6.41)$$

où  $\mathbf{e}\mathbf{e}$  et  $\mathbf{h}\mathbf{h}$  sont les tenseurs définis par le produit tensoriel des vecteurs de Sipe

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}\mathbf{e})_{\alpha\beta} &= e_\alpha e_\beta \\ (\mathbf{h}\mathbf{h})_{\alpha\beta} &= h_\alpha h_\beta \end{aligned}, \quad (6.42)$$

avec  $\alpha, \beta = x, y, z$  et où

$$\mathbf{e}_z \mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (6.43)$$

Finalement le tenseur de Green électrique dans l'espace libre s'écrit sous la forme

$$\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \begin{cases} \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \left\{ \frac{i}{2k_z} [\mathbf{e}(+k_z)\mathbf{e}(+k_z) + \mathbf{h}(+k_z)\mathbf{h}(+k_z)] e^{-ik_z(z-z')} \right\} \\ \quad - \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \frac{\delta(z-z')}{k_0 \varepsilon} \quad \text{pour } z > z' \\ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \left\{ \frac{i}{2k_z} [\mathbf{e}(-k_z)\mathbf{e}(-k_z) + \mathbf{h}(-k_z)\mathbf{h}(-k_z)] e^{+ik_z(z-z')} \right\} \\ \quad - \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \frac{\delta(z-z')}{k_0 \varepsilon} \quad \text{pour } z < z' \end{cases} \quad (6.44)$$

Cette notation est assez intuitive. En effet, le tenseur  $\mathbf{ee}$  signifie que l'on étudie la contribution, en un point d'abscisse  $z$ , d'une source de courant de polarisation  $\mathbf{s}$  située en  $z'$ . De même, le tenseur  $\mathbf{hh}$  signifie que l'on étudie la contribution en  $z$  d'une source de courant de polarisation  $\mathbf{p}$  située en  $z'$ . Le signe "+", (resp. "-") devant la composante orthogonale du vecteur d'onde signifie que la propagation se fait dans le sens des  $z$  croissants (resp. décroissants).

### 6.2.1.2 Cas du tenseur de Green magnétique

Nous allons nous intéresser maintenant au calcul du tenseur de Green magnétique. Le raisonnement sera identique à celui fait pour la détermination du tenseur de Green électrique. Pour ce faire, nous considérons un élément de courant ponctuel  $\mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega)$  situé au point  $\mathbf{r}'$  et rayonnant un champ magnétique  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$ . En combinant les équations de Maxwell dans le milieu, nous pouvons en déduire la relation entre l'élément de courant et le champ magnétique

$$\nabla \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \quad (6.45)$$

$$\nabla \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.46)$$

Le champ magnétique rayonné au point  $\mathbf{r}$  par la source de courant située en  $\mathbf{r}'$  est déterminé par la relation linéaire

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \int_V \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega) dr' \quad dr' = dx' dy' dz', \quad (6.47)$$

où  $\mathbf{j}$  représente une distribution volumique de courant. En éliminant le champ électrique des équations de Maxwell 6.45 et 6.46, on obtient l'équation à laquelle doit obéir le champ magnétique

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) - \omega^2 \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \wedge \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.48)$$

En utilisant alors la relation 6.47 et en s'appuyant sur les propriétés de la fonction de Dirac, il est facile de montrer que le tenseur de Green magnétique est régi par l'équation

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \omega^2 \mu_0 \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.49)$$

En reprenant la même démarche que celle utilisée pour le calcul du tenseur de Green électrique, on obtient, avec les notations de Sipe, l'expression suivante pour les composantes de Weyl du

tenseur de Green magnétique

$$\bar{g}^H(\mathbf{K}, z, z') = \begin{cases} \frac{k_0 n}{2k_z} [\mathbf{h}(+k_z)\mathbf{e}(+k_z) - \mathbf{e}(+k_z)\mathbf{h}(+k_z)] e^{-ik_z(z-z')} \\ \quad - \frac{iK}{k_0^2 \varepsilon} \delta(z-z') \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z \quad \text{pour } z > z' \\ \frac{k_0 n}{2k_z} [\mathbf{h}(-k_z)\mathbf{e}(-k_z) - \mathbf{e}(-k_z)\mathbf{h}(-k_z)] e^{+ik_z(z-z')} \\ \quad - \frac{iK}{k_0^2 \varepsilon} \delta(z-z') \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z \quad \text{pour } z < z' \end{cases} \quad (6.50)$$

où l'on a défini le tenseur

$$\mathbf{e}_y \mathbf{e}_z \equiv \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.51)$$

On peut remarquer la présence simultanée des vecteurs de Sipe  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{h}$  dans l'expression 6.50. Cela vient du fait que l'on considère une excitation en  $\mathbf{r}'$  due à des courants fluctuants électriques donc d'orientation différente de celle du champ magnétique induit au point d'observation  $\mathbf{r}$ . Enfin, nous verrons ultérieurement que le tenseur de Green magnétique peut se déduire du tenseur de Green électrique par une autre approche.

### 6.2.2 Dans un milieu semi-infini

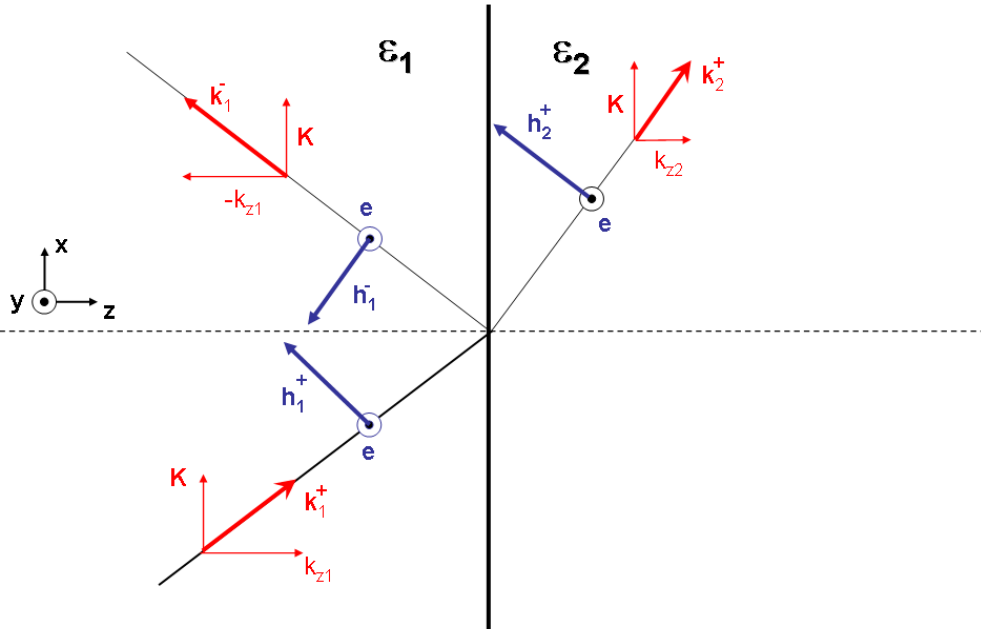


FIG. 6.2 – Vecteurs introduits dans le formalisme de Sipe pour une interface plane.

Nous présentons ici le calcul du tenseur de Green en réflexion, c'est à dire lorsque le point source et le point d'observation sont situés du même côté de l'interface, et en transmission,

c'est à dire lorsque les deux points sont situés de part et d'autre de l'interface. Les milieux sont supposés semi-infinis, linéaires, homogènes, isotropes et non magnétiques, de constantes respectives  $\varepsilon_1(\omega)$  et  $\varepsilon_2(\omega)$ . Nous utiliserons pour cela, les notations de Sipe décrites sur la figure 6.2 et données par les relations 6.39 et 6.40.

### 6.2.2.1 Cas du tenseur de Green électrique et magnétique en réflexion

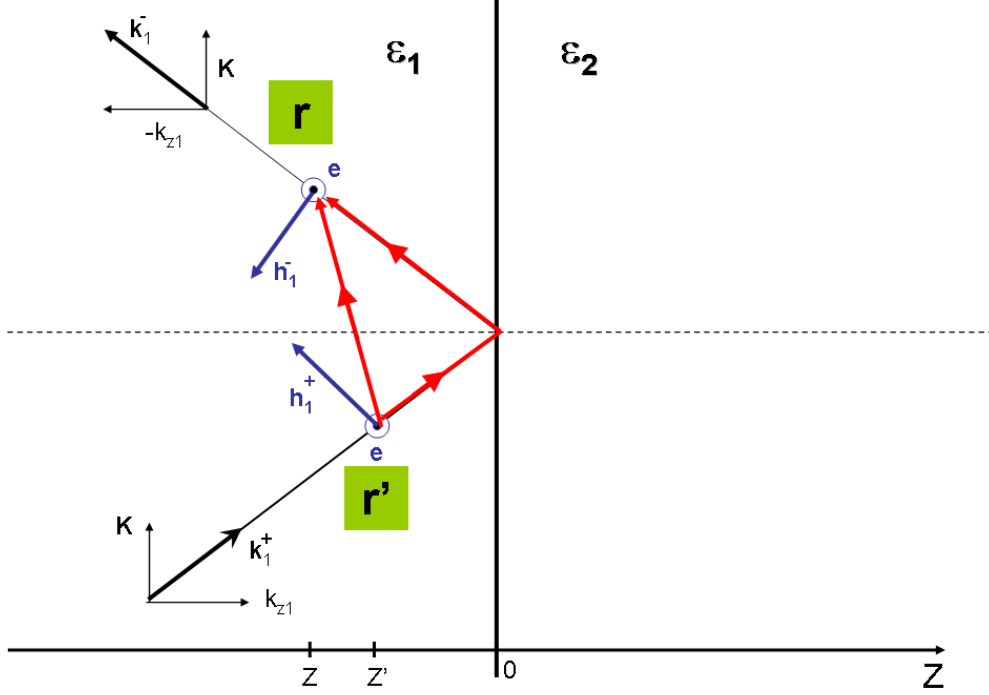


FIG. 6.3 – Vecteurs de Sipe et trajets optiques utilisés pour le calcul du tenseur de Green en réflexion. ( $\mathbf{r}'$  point source,  $\mathbf{r}$  point d'observation).

Nous considérons ici un point source situé en  $\mathbf{r}'$  qui émet dans tout l'espace et nous observons la réponse électromagnétique au point  $\mathbf{r}$ , due à ces excitations. Lorsque les deux points sont situés dans le même milieu (milieu 1) (fig. 6.3), les composantes de Weyl du tenseur de Green électrique et magnétique se décomposent sous la forme

$$\overline{\overline{g}}_{11}^E(\mathbf{K}, z, z') = \overline{\overline{g}}_0^E(\mathbf{K}, z, z') + \frac{i}{2k_{z_1}} (\mathbf{e} r_{12_s} \mathbf{e} + \mathbf{h}_1^- r_{12_p} \mathbf{h}_1^+) \exp(-ik_{z_1} |z + z'|) \quad (6.52)$$

$$\overline{\overline{g}}_{11}^H(\mathbf{K}, z, z') = \overline{\overline{g}}_0^H(\mathbf{K}, z, z') + \frac{k_0 n_1}{2k_{z_1}} (\mathbf{h}_1^- r_{12_s} \mathbf{e} - \mathbf{e} r_{12_p} \mathbf{h}_1^+) \exp(-ik_{z_1} |z + z'|), \quad (6.53)$$

où  $\overline{\overline{g}}_0^E$  et  $\overline{\overline{g}}_0^H$  sont les composantes de Weyl des tenseurs de Green dans l'espace libre tandis que  $\mathbf{h}_1^\pm = \mathbf{h}(\pm k_{z_1})$  représente le vecteur de Sipe pour la polarisation  $\mathbf{p}$  et  $r_{ij}$  le coefficient de réflexion de Fresnel défini au paragraphe 4.1. Les expressions 6.52 et 6.53 peuvent s'interpréter aisément. En effet, la source située au point  $\mathbf{r}'$  émet un rayonnement qui atteint le point d'observation  $\mathbf{r}$  suivant deux chemins possibles. Le premier est direct et fait apparaître le tenseur de Green  $\overline{\overline{g}}_0$  de l'espace libre. Le second chemin fait intervenir l'interface séparant les milieux 1 et 2. Sur ce trajet, le rayonnement a été réfléchi avant d'atteindre le point d'observation. Ceci explique la présence du coefficient de réflexion de Fresnel dans l'expression du tenseur construit à partir des vecteurs de Sipe. De surcroît, ces tenseurs permettent de distinguer les deux états de polarisation, leur conservation à l'interface et le sens de propagation de l'onde.

### 6.2.2.2 Cas du tenseur de Green électrique et magnétique en transmission

Supposons maintenant que le point d'observation  $\mathbf{r}$  soit dans le milieu 2 (fig. 6.4). Les expressions des tenseurs de Green deviennent alors

$$\bar{g}_{11}^E(\mathbf{K}, z, z') = \frac{i}{2k_{z1}} (\mathbf{e} t_{12s} \mathbf{e} + \mathbf{h}_2^+ t t_{12p} \mathbf{h}_1^+) \exp[-i(k_{z2}z - k_{z1}z')], \quad (6.54)$$

$$\bar{g}_{11}^H(\mathbf{K}, z, z') = \frac{k_0 n_2}{2k_{z1}} (\mathbf{h}_2^+ t t_{12s} \mathbf{e} - \mathbf{e} t_{12p} \mathbf{h}_1^+) \exp[-i(k_{z2}z - k_{z1}z')]. \quad (6.55)$$

Ici, le tenseur de Green dans l'espace libre n'apparaît pas puisque le point source  $\mathbf{r}'$  et le point

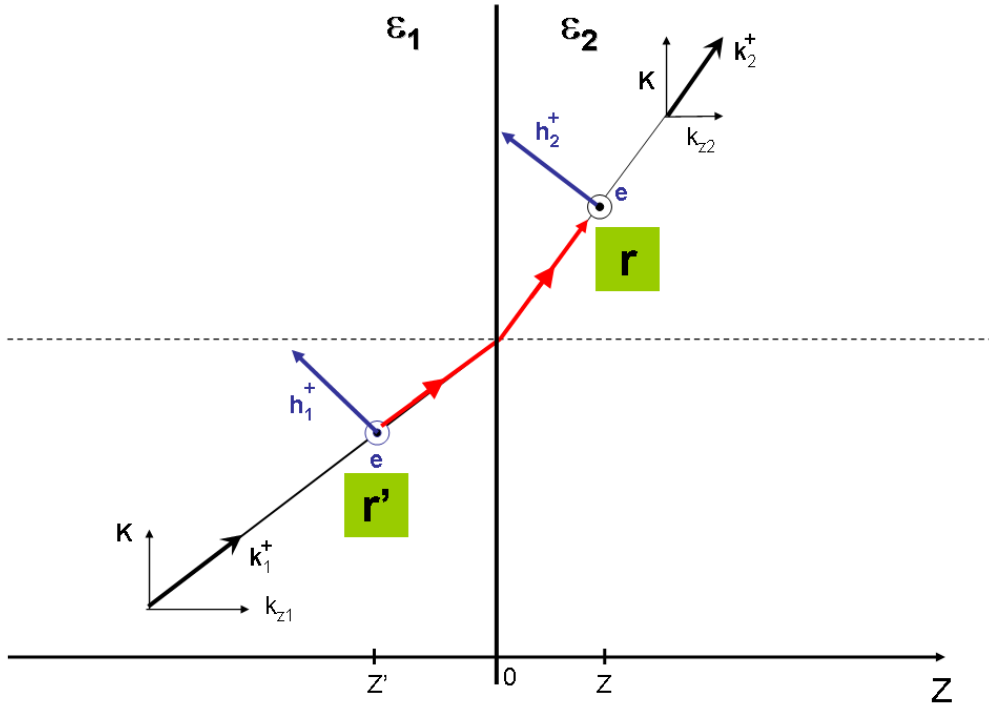


FIG. 6.4 – Vecteurs de Sipe et trajets optiques utilisés pour le calcul du tenseur de Green en transmission. ( $\mathbf{r}'$  point source,  $\mathbf{r}$  point d'observation).

d'observation  $\mathbf{r}$  sont dans des milieux d'indices de réfraction différents. Le rayonnement émit en  $\mathbf{r}'$  n'emprunte donc qu'un seul chemin pour traverser l'interface. Ce passage est décrit par la présence du coefficient de transmission de Fresnel dans les relations 6.54 et 6.55.

## 6.2.3 Dans un milieu multicouche

### 6.2.3.1 Cas du tenseur de Green électrique

Il s'agit ici de déterminer le tenseur de Green pour un milieu stratifié à  $N$  couches, d'épaisseur totale  $L$  (fig. 6.5). Pour ce faire, on considère un élément de courant situé en  $\mathbf{r}'$  qui rayonne dans tout l'espace à la pulsation  $\omega$  et on cherche à déterminer le champ électrique induit au point d'observation  $\mathbf{r}$ . L'interprétation physique des résultats des paragraphes 6.2.1.1 et 6.2.2 nous permet de déduire l'expression générale du tenseur de Green électrique d'une structure multicouche

$$\bar{G}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \frac{\delta(z - z')}{k_0^2 \varepsilon} + \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}, \quad (6.56)$$

avec

$$\bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}, \omega) = \frac{i}{2k_{z_s}} \begin{cases} A_{l_e} \mathbf{x}(+k_{z_l}) \mathbf{x}(+k_{z_s}) + \\ B_{l_e} \mathbf{x}(-k_{z_l}) \mathbf{x}(+k_{z_s}) + \\ C_{l_e} \mathbf{x}(+k_{z_l}) \mathbf{x}(-k_{z_s}) + \\ D_{l_e} \mathbf{x}(-k_{z_l}) \mathbf{x}(-k_{z_s}) \end{cases} , \quad (6.57)$$

Ici,  $\mathbf{x}$  désigne le vecteur unitaire introduit par Sipe. Il dépend de la polarisation de l'onde et est défini comme suit

$$\mathbf{x}(\pm k_z) = \begin{cases} \mathbf{e}(\pm k_z) & \text{pour les ondes polarisées } \mathbf{s} \\ \mathbf{h}(\pm k_z) & \text{pour les ondes polarisées } \mathbf{p} \end{cases} . \quad (6.58)$$

En rappelant que, de part la symétrie azimutale du problème

$$\int d\mathbf{K} = \int \int dk_x dk_y = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} K dK d\theta = 2\pi \int_0^\infty K dK, \quad (6.59)$$

le tenseur de Green électrique prend alors la forme suivante

$$\bar{G}(z, z', x, x', \omega) = \int_0^\infty \frac{K dK}{2\pi} \bar{g}(z, z', K, \omega) e^{-iK(x-x')} \quad (6.60)$$

avec

$$\bar{g}(z, z', K, \omega) = \frac{i}{2k_{z_s}} [A_l \mathbf{x}(+k_{z_l}) \mathbf{x}(+k_{z_s}) + B_l \mathbf{x}(-k_{z_l}) \mathbf{x}(+k_{z_s}) + C_l \mathbf{x}(+k_{z_l}) \mathbf{x}(-k_{z_s}) + D_l \mathbf{x}(-k_{z_l}) \mathbf{x}(-k_{z_s})] \quad (6.61)$$

Il est à noter qu'aucun terme croisé n'apparaît dans l'expression des tenseurs de Green car la polarisation se conserve à la traversée des interfaces. Les coefficients  $A_{l_e}$ ,  $B_{l_e}$ ,  $C_{l_e}$  et  $D_{l_e}$  qui apparaissent dans les tenseurs de Green correspondent aux différents termes du champ électrique se propageant dans la direction d'émission et dans la direction opposée, au point d'observation (fig. 6.5 et 6.6). Ces champs seront calculés par la méthode des matrices de diffusion. Sur la figure 6.5, le point source  $\mathbf{r}'$  est situé dans la couche de permittivité diélectrique  $\varepsilon_s$  et émet vers la droite en direction du point d'observation  $\mathbf{r}$  situé dans la couche de permittivité diélectrique  $\varepsilon_l$ . Deux situations sont alors possibles. La première correspond au transfert "direct" du rayonnement de  $\mathbf{r}'$  à  $\mathbf{r}$ . Dans ce cas, le vecteur de Sipe au point d'émission est de la forme  $\mathbf{x}(+k_{z_s})$ , la source émettant dans le sens des  $z$  croissants. La composante du champ en  $\mathbf{r}$  est notée  $A_{l_e}$  et le vecteur de Sipe au point d'observation est de la forme  $\mathbf{x}(+k_{z_l})$ . La deuxième situation correspond au cas où le rayonnement a été réfléchi à droite du point d'observation et dans ce cas, le champ  $B_{l_e}$  en  $\mathbf{r}$  se propage vers les  $z$  décroissants et le vecteur de Sipe associé est de la forme  $\mathbf{x}(-k_{z_l})$ . Il faut aussi considérer le cas où la source émet cette fois-ci vers la gauche (fig. 6.6). Deux situations sont alors possibles. L'une correspond au cas où le rayonnement subit une réflexion sur la gauche du point d'émission et l'autre où il est successivement réfléchi à gauche du point d'émission et à droite du point d'observation. Dans les deux cas le vecteur de Sipe au point source sera alors de la forme  $\mathbf{x}(-k_{z_s})$  puisque l'émission se fait dans le sens des  $z$  décroissants. Par ailleurs on notera  $C_{l_e}$  le champ en  $\mathbf{r}$  dans le premier cas et  $D_{l_e}$  dans le deuxième cas. Détaillons maintenant ces expressions suivant la polarisation de l'onde considérée.



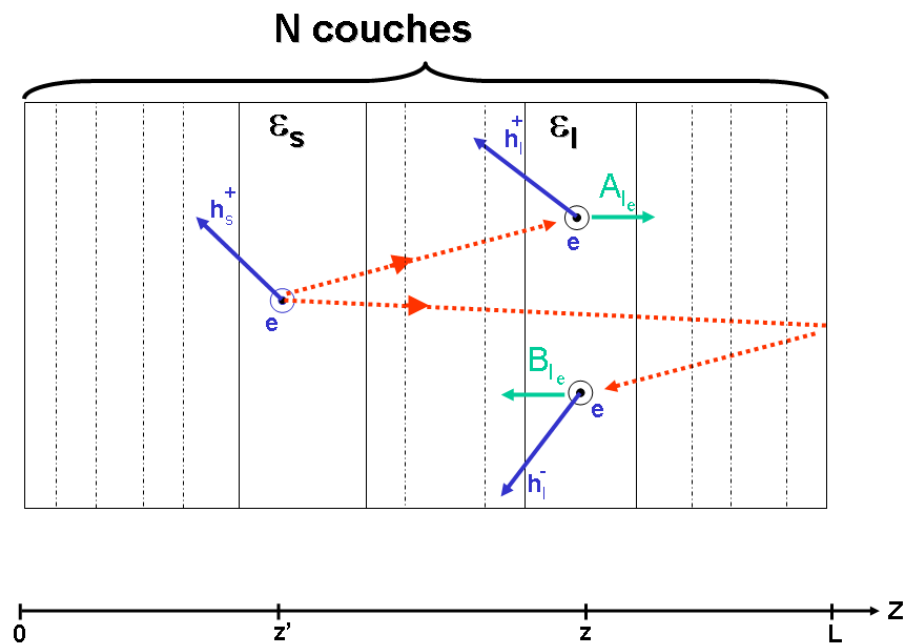


FIG. 6.5 – Vecteurs de Sipe et trajets optiques utilisés pour le calcul du tenseur de Green dans un milieu multicouche lorsque la source en  $\mathbf{r}'$  rayonne dans le sens des  $z$  croissants.

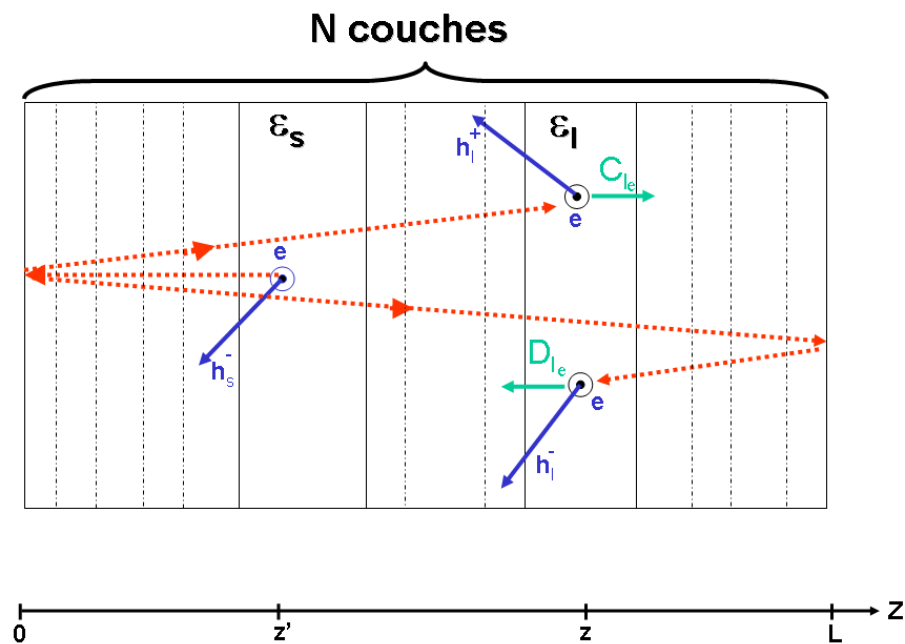


FIG. 6.6 – Vecteurs de Sipe et trajets optiques utilisés pour le calcul du tenseur de Green dans un milieu multicouche lorsque la source en  $\mathbf{r}'$  rayonne dans le sens des  $z$  décroissants.

### 6.2.3.2 Tenseur de Green électrique en polarisation $\mathbf{s}$

Comme nous l'avons défini précédemment, en polarisation  $\mathbf{s}$ , nous considérons le vecteur unitaire  $\mathbf{x}(\pm k_z) = \mathbf{e}(\pm k_z)$  qui a pour expression d'après l'équation 6.39

$$\mathbf{e}(\pm k_z) = \frac{1}{K}(\mathbf{e}_x k_y - \mathbf{e}_y k_x) \quad (6.62)$$

De part la symétrie du problème, nous pouvons réduire notre étude au cas où le vecteur d'onde  $\mathbf{K}$  n'a de composante que suivant l'axe  $x$ , le plan d'incidence étant le plan  $x-z$  :  $\mathbf{K} = k_x \mathbf{e}_x = K \mathbf{e}_x$ . Ainsi le vecteur  $\mathbf{e}$  se simplifie en

$$\mathbf{e}(\pm k_z) = \frac{-k_x \mathbf{e}_y}{K} = -\mathbf{e}_y \quad (6.63)$$

et

$$\mathbf{e}(\pm k_z) \mathbf{e}(\pm k_z) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.64)$$

Il résulte alors de l'expression 6.61 que le tenseur de Green électrique a une seule composante non nulle, la composante  $G_{22}^E$ , de sorte que

$$\overline{\overline{G}}_s^E = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & G_{22}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.65)$$

avec

$$G_{22}^E = \int \frac{K dK}{2\pi} \frac{i}{2k_{zs}} (A_{l_e} + B_{l_e} + C_{l_e} + D_{l_e}) e^{-iK(x-x')}. \quad (6.66)$$

### 6.2.3.3 Tenseur de Green électrique en polarisation $\mathbf{p}$

Pour une onde polarisée  $p$ , le vecteur unitaire  $\mathbf{x}(\pm k_z) = \mathbf{h}(\pm k_z)$  s'écrit d'après (6.40)

$$\mathbf{h}(\pm k_z) = \frac{1}{k_0 n} \left( K \mathbf{e}_z \mp k_z \frac{\mathbf{K}}{|K|} \right) \quad (6.67)$$

Par raison de symétrie  $\mathbf{K} = k_x \mathbf{e}_x = K \mathbf{e}_x$ , de sorte que

$$\mathbf{h}(\pm k_z) = \frac{1}{k_0 n} (K \mathbf{e}_z \mp k_z \mathbf{e}_x) \quad (6.68)$$

Ainsi,

$$\mathbf{h}(k_{z_l}) \mathbf{h}(k_{z_s}) = \frac{1}{k_0^2 n_l n_s} \begin{pmatrix} k_{z_l} k_{z_s} & 0 & -k_{z_l} K \\ 0 & 0 & 0 \\ -K k_{z_s} & 0 & K^2 \end{pmatrix}, \quad (6.69)$$

$$\mathbf{h}(-k_{z_l}) \mathbf{h}(k_{z_s}) = \frac{1}{k_0^2 n_l n_s} \begin{pmatrix} -k_{z_l} k_{z_s} & 0 & k_{z_l} K \\ 0 & 0 & 0 \\ -K k_{z_s} & 0 & K^2 \end{pmatrix}, \quad (6.70)$$

$$\mathbf{h}(k_{z_l}) \mathbf{h}(-k_{z_s}) = \frac{1}{k_0^2 n_l n_s} \begin{pmatrix} -k_{z_l} k_{z_s} & 0 & -k_{z_l} K \\ 0 & 0 & 0 \\ K k_{z_s} & 0 & K^2 \end{pmatrix} \quad (6.71)$$

et

$$\mathbf{h}(k_{z_l})\mathbf{h}(-k_{z_s}) = \frac{1}{k_0^2 n_l n_s} \begin{pmatrix} k_{z_l}k_{z_s} & 0 & k_{z_l}K \\ 0 & 0 & 0 \\ K k_{z_s} & 0 & K^2 \end{pmatrix}. \quad (6.72)$$

Dans ce cas, le tenseur de Green électrique a quatre composantes non nulles et il est de la forme

$$\overline{\overline{G}}_p^E = \begin{pmatrix} G_{11}^E & 0 & G_{13}^E \\ 0 & 0 & 0 \\ G_{31}^E & 0 & G_{33}^E \end{pmatrix}. \quad (6.73)$$

#### 6.2.3.4 Tenseur de Green magnétique en polarisation $\mathbf{p}$

Le calcul du tenseur de Green magnétique en polarisation  $\mathbf{p}$  est analogue au calcul du tenseur de Green électrique. On considère des éléments de courants situés en  $\mathbf{r}'$  qui rayonnent dans tout l'espace à la pulsation  $\omega$  et on cherche à obtenir le champ magnétique au point d'observation  $\mathbf{r}$ . L'interprétation physique des résultats des paragraphes 6.2.1.2 et 6.2.2 nous permet de déduire l'expression générale du tenseur de Green magnétique d'une structure multicouche monodimensionnelle

$$\overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{iK}{k_0^2 \varepsilon} \delta(z - z') \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z + \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \overline{\overline{g}}^H(z, z', \mathbf{K}, \omega) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}, \quad (6.74)$$

avec

$$\overline{\overline{g}}_s^H(z, z', K, \omega) \quad \overline{\overline{g}}_s^E(z, z', K, \omega) \quad \overline{\overline{g}}_p^E(z, z', K, \omega) = \frac{k_0}{2k_{z_s}} \quad (6.75)$$

Ici, les coefficients  $A_{l_h}$ ,  $B_{l_h}$ ,  $C_{l_h}$  et  $D_{l_h}$  correspondent aux champs magnétiques, dans la direction d'émission et la direction opposée, au point d'observation. Ces coefficients peuvent être calculés soit par la méthode des matrices de transfert, soit par la méthode des matrices de diffusion. Si le choix se porte sur les matrices de transfert, les vecteurs  $\mathbf{x}(\pm k_z)$  correspondent aux vecteurs polarisations définis par Sipe (1987). Cependant, si ces coefficients sont calculés à l'aide des matrices de diffusion, il est nécessaire d'utiliser des vecteurs polarisations "modifiés", une partie de l'information sur les propriétés radiatives des matériaux constituant la structure, étant déjà présente lors du calcul du champ magnétique avec les matrices de diffusion. Ce point est détaillé dans la section suivante. Nous considérons ici un champ magnétique en polarisation  $\mathbf{p}$ . En considérant, la symétrie azimutale du problème, le tenseur de Green associé à ce champ, a alors pour expression

$$\overline{\overline{G}}_p^H(z, z', x, x', \omega) = -\frac{iK}{k_0^2 \varepsilon} \delta(z - z') \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z + \int \frac{K dK}{2\pi} \overline{\overline{g}}_p^H(z, z', K, \omega) e^{-iK(x-x')}, \quad (6.76)$$

avec

$$\overline{\overline{g}}_p^H(z, z', K, \omega) = \frac{k_0}{2k_{z_s}} \begin{cases} A_{l_h} \mathbf{e}(+k_{z_l}) \mathbf{h}(+k_{z_s}) + \\ B_{l_h} \mathbf{e}(-k_{z_l}) \mathbf{h}(+k_{z_s}) + \\ C_{l_h} \mathbf{e}(+k_{z_l}) \mathbf{h}(-k_{z_s}) + \\ D_{l_h} \mathbf{e}(-k_{z_l}) \mathbf{h}(-k_{z_s}) \end{cases} . \quad (6.77)$$

Dans notre étude, les coefficients  $A_{l_h}$ ,  $B_{l_h}$ ,  $C_{l_h}$  et  $D_{l_h}$  sont calculés par la méthode des matrices

de diffusion. Les vecteurs  $\mathbf{h}(\pm k_z)$  ont une expression légèrement différente de celle établie par Sipe. Rappelons l'expression du vecteur polarisation  $\mathbf{h}$  telle que définie par Sipe

$$\mathbf{h}(\pm k_z) = \frac{1}{k_0 \sqrt{\varepsilon}} (K \mathbf{e}_z \mp k_z \mathbf{e}_x). \quad (6.78)$$

Lors de l'utilisation des matrices de diffusion, nous prendrons un vecteur polarisation "modifié" défini par

$$\mathbf{h}^*(\pm k_z) = \frac{1}{k_0} (K \mathbf{e}_z \mp k_z \mathbf{e}_x) \quad (6.79)$$

Détaillons maintenant l'expression des différents tenseurs  $\mathbf{e}\mathbf{h}^*$  et  $\mathbf{h}^*\mathbf{e}$

$$\mathbf{e}(k_{z_l})\mathbf{h}^*(k_{z_s}) = \frac{1}{k_0} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -k_{z_s} & 0 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.80)$$

$$\mathbf{e}(k_{z_l})\mathbf{h}^*(-k_{z_s}) = \frac{1}{k_0} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ +k_{z_s} & 0 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.81)$$

et

$$\mathbf{e}(-k_{z_l})\mathbf{h}^*(+k_{z_s}) = \mathbf{e}(+k_{z_l})\mathbf{h}^*(+k_{z_s}) \quad (6.82)$$

$$\mathbf{e}(-k_{z_l})\mathbf{h}^*(-k_{z_s}) = \mathbf{e}(+k_{z_l})\mathbf{h}^*(-k_{z_s}), \quad (6.83)$$

puisque, d'après la relation(6.63),

$$\mathbf{e}(-k_z) = \mathbf{e}(k_z). \quad (6.84)$$

Nous ne détaillerons pas ici le calcul direct du tenseur de Green magnétique en polarisation  $\mathbf{s}$  car ce dernier sera obtenu à partir du tenseur de Green électrique.

### 6.3 Relation entre les tenseurs de Green magnétique et électrique

Considérons les équations de Maxwell définies dans l'espace de Fourier temporel

$$\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \bar{\nabla} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \rho, \quad (6.85)$$

$$\bar{\nabla} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (6.86)$$

$$\bar{\nabla} \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega), \quad (6.87)$$

$$\bar{\nabla} \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.88)$$

[Par la suite, nous ne noterons plus la dépendance en  $\omega$ , étant bien entendu que nous travaillons en régime monochromatique.] En combinant les équations de Maxwell dans le milieu, on montre que la transformée de Fourier du champ électrique est solution de l'équation

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -i\omega \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (6.89)$$

où  $k_0 = \omega/c$  est le vecteur d'onde dans le vide et  $\varepsilon(\mathbf{r})$ , la permittivité diélectrique, constante par rapport au vecteur position  $\mathbf{r}$  dans chaque couche. Nous avons aussi vu (*cf.* chap. 6.1) que le champ électrique rayonné au point  $\mathbf{r}$  par la source de courant située en  $\mathbf{r}'$  est déterminée par la relation

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -i\omega\mu_0 \int_V d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}'), \quad (6.90)$$

où  $\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  est le tenseur de Green électrique. Ce dernier est alors solution de l'équation homogène suivante

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.91)$$

où  $\overline{\overline{I}}$  est le tenseur unité et  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  la distribution de Dirac.

De même, le champ magnétique rayonné au point  $\mathbf{r}$  par la source de courant située en  $\mathbf{r}'$  est déterminé par la relation

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}'), \quad (6.92)$$

où  $\overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  est le tenseur de Green magnétique. Ce tenseur est solution de l'équation

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \omega^2 \mu_0 \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.93)$$

D'un point de vue pratique, plutôt que d'utiliser cette équation, il est préférable d'utiliser la relation 6.87 pour établir un lien direct entre  $\overline{\overline{G}}^E$  et  $\overline{\overline{G}}^H$ . L'utilisation de cette relation permet de déduire, d'après 6.92, que

$$\int d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}') = \frac{i}{\omega\mu_0} \nabla \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (6.94)$$

En utilisant la relation 6.90, cette égalité conduit à

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}') = \nabla \wedge \left[ \int d\mathbf{r}' \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}') \right] = \int d\mathbf{r}' \left[ \left( \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}') \right] \quad (6.95)$$

Nous pouvons alors par identification calculer le tenseur de Green du champ magnétique à partir du tenseur de Green du champ électrique, par la relation

$$\overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \quad (6.96)$$

De manière réciproque, nous pouvons également déterminer la relation permettant de calculer le tenseur de Green électrique connaissant le tenseur de Green magnétique. En effet, en prenant le rotationnel de l'équation 6.96, il vient

$$\nabla \wedge \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \nabla \wedge \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (6.97)$$

Or d'après l'équation 6.91, nous avons également,

$$\nabla \wedge \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.98)$$

de sorte que

$$\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r})} \left( \nabla \wedge \overline{\overline{G}}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \overline{\overline{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right). \quad (6.99)$$

Pour calculer les composantes de Weyl des tenseurs de Green, nous allons maintenant déterminer les relations analogues à 6.96 et 6.99 dans l'espace réciproque. Nous considérons pour cela les transformées de Weyl des tenseurs de Green

$$\bar{\bar{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \quad (6.100)$$

En décomposant chaque tenseur dans la relation 6.96 en sa transformée de Weyl, il vient

$$\int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^H(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = \bar{\nabla} \wedge \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] \quad (6.101)$$

$$(6.102)$$

$$= \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \left[ \bar{\nabla} \wedge \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] \quad (6.103)$$

Ainsi, les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique pourront être calculées à partir de celles du tenseur de green électrique par la relation

$$\bar{g}^H(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right]. \quad (6.104)$$

De manière équivalente, on retrouve l'analogie de l'équation 6.99 dans l'espace réciproque. En effet, d'après l'équation 6.91 on a

$$\begin{aligned} \bar{\nabla} \wedge \bar{\nabla} \wedge \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] &= k_0^2 \varepsilon(z) \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] \\ &+ \bar{I} \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \delta(z - z') e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \end{aligned} \quad (6.105)$$

tandis que l'équation 6.97 nous conduit à

$$\bar{\nabla} \wedge \bar{\nabla} \wedge \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] = \bar{\nabla} \wedge \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^H(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right]. \quad (6.106)$$

Après identification de ces deux expressions, nous avons alors

$$\begin{aligned} \bar{\nabla} \wedge \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^H(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] &= k_0^2 \varepsilon(z) \left[ \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] \\ &+ \bar{I} \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \delta(z - z') e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \end{aligned} \quad (6.107)$$

En permutant l'intégrale et le rotationnel, et en identifiant les intégrands, on obtient alors

$$\bar{g}^E(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left\{ \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{g}^H(z, z', \mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right] - \bar{I} \delta(z - z') e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right\}. \quad (6.108)$$

Les symétries de notre problème nous permettent de simplifier les relations 6.104 et 6.108 en remarquant que  $\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}') = K(x - x')$ . Nous obtenons alors

$$\bar{\bar{g}}^H(z, z', K, \omega) e^{-iK(x-x')} = \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{\bar{g}}^E(z, z', K, \omega) e^{-iK(x-x')} \right], \quad (6.109)$$

et

$$\bar{\bar{g}}^E(z, z', K, \omega) e^{-iK(x-x')} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left( \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{\bar{g}}^H(z, z', K, \omega) e^{-iK(x-x')} \right] - \bar{\bar{I}} \delta(z - z') e^{-iK(x-x')} \right), \quad (6.110)$$

$$\bar{\bar{g}}^H e^{-iK(x-x')} = \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{\bar{g}}^E e^{-iK(x-x')} \right], \quad (6.111)$$

et

$$\bar{\bar{g}}^E e^{-iK(x-x')} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left( \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{\bar{g}}^H e^{-iK(x-x')} \right] - \bar{\bar{I}} \delta(z - z') e^{-iK(x-x')} \right), \quad (6.112)$$

qui sont les relations recherchées. Nous venons de montrer dans les paragraphes 6.2 et 6.3 comment obtenir les tenseurs de Green électrique et magnétique dans un milieu multicouche et comment relier l'un à l'autre, dans l'espace réel et dans l'espace réciproque. Nous avons vu également que les composantes de Weyl des tenseurs de Green s'expriment en fonction des champs électriques et magnétiques locaux. Nous allons maintenant présenter la méthode des matrices de diffusion qui nous permettra de calculer ces champs électriques et magnétiques dans des milieux multicouches 1D quelconques.

## 6.4 Matrices de diffusion pour des milieux multicouches

Le calcul du champ électromagnétique dans un milieu multicouche monodimensionnel est depuis longtemps essentiellement basé sur la technique des matrices de transfert. L'intérêt principal de cette technique est qu'elle est bien adaptée à la composition des éléments optiques élémentaires. Cependant, cette technique peut engendrer des instabilités numériques, notamment lors de l'étude des structures de grandes épaisseurs ou encore en présence d'ondes évanescentes (Ko & Inkson, 1988; Auslander & Hava, 1996; Cotter et al., 1995; Pastureauud et al., 2002). Ces instabilités sont dues à la présence simultanée d'ondes d'amplitude exponentiellement croissante et d'ondes d'amplitude exponentiellement décroissante. L'utilisation des matrices de diffusion permet de contourner cette difficulté. En effet, le principe des matrices de diffusion est de relier les champs entrants aux champs sortants ce qui permet de découpler le calcul des champs électromagnétiques se propageant vers la gauche de ceux se propageant vers la droite et ainsi de ne travailler qu'avec des exponentielles décroissantes. La méthode que nous décriront ici est basée sur les travaux de Auslander & Hava (1996). Nous présenterons ici séparément les calculs effectués dans le cas de la polarisation  $\mathbf{s}$  de ceux concernant la polarisation  $\mathbf{p}$ .

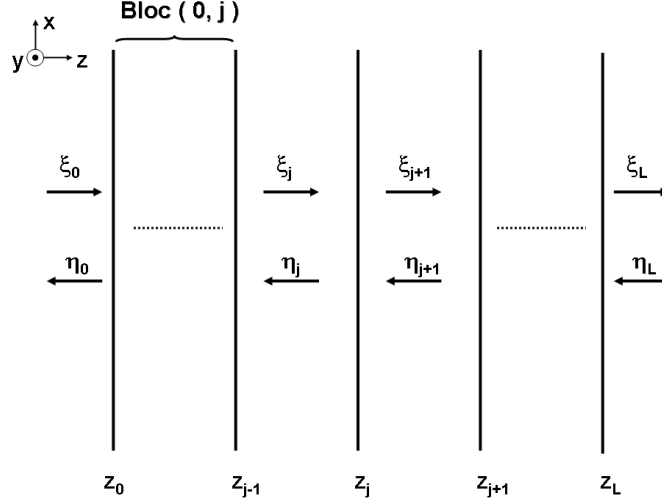


FIG. 6.7 – structure 1D étudiée.

### 6.4.1 Cas de la polarisation $s$

#### 6.4.1.1 Calcul du champ électrique

On considère ici un milieu linéaire, isotrope, non magnétique ( $\mu = 1$ ) et homogène par morceaux (fig. 6.7). Dans ce milieu, les équations de Maxwell s'écrivent

$$\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \overline{\nabla} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \rho, \quad (6.113)$$

$$\overline{\nabla} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0, \quad (6.114)$$

$$\overline{\nabla} \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -i\omega\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (6.115)$$

$$\overline{\nabla} \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}(\mathbf{r}) + i\omega\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (6.116)$$

En polarisation  $s$ , le champ électrique est porté par le vecteur  $\mathbf{e}_y$  de sorte que

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_y(x, z) \mathbf{e}_y. \quad (6.117)$$

En combinant les équations de Maxwell 6.115 et 6.116, on obtient l'équation qui régit l'évolution spatiale du champ électrique dans le milieu

$$\overline{\nabla} \wedge \overline{\nabla} \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \quad (6.118)$$

Comme

$$\overline{\nabla} \wedge \overline{\nabla} \wedge \mathbf{E} = \overline{\nabla}(\overline{\nabla} \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E}, \quad (6.119)$$

alors, d'après l'équation 6.113, la relation 6.118 se réduit en une équation d'Helmholtz

$$\Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \quad (6.120)$$

Pour résoudre cette équation, il convient de décomposer le champ électrique dans l'espace de Fourier. Compte tenu de la symétrie azimutale du problème, le champ électrique peut se développer sous la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{E}(K, 0, z) e^{-iKx} dK. \quad (6.121)$$



En substituant ce développement dans l'équation Helmholtz, il est facile de voir que les composantes de Fourier  $\mathbf{E}(K, 0, z) = E_y(z)\mathbf{e}_y$  du champ sont solution de l'équation

$$\frac{d^2}{dz^2}E_y + (\varepsilon_j k_0^2 - K^2) E_y = 0 \quad , \quad z_{j-1} < z < z_j \quad , \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (6.122)$$

Pour résoudre cette équation, nous séparons  $E_y$  en deux contributions, l'une correspondant à une onde se propageant vers les  $z$  croissants et l'autre à une onde se propageant vers les  $z$  décroissants.

$$E_y(z) = \xi_j e^{-ik_{z_j}(z-z_{j-1})} + \eta_j e^{+ik_{z_j}(z-z_{j-1})}. \quad (6.123)$$

La condition de continuité des composantes tangentielles des champs à l'interface permet alors d'écrire les conditions de raccordement suivantes

$$\mathbf{E}_j(z_j) \cdot \mathbf{e}_y = \mathbf{E}_{j+1}(z_j) \cdot \mathbf{e}_y, \quad (6.124)$$

$$\bar{\nabla} \wedge \mathbf{E}_j \cdot \mathbf{e}_z = \bar{\nabla} \wedge \mathbf{E}_{j+1} \cdot \mathbf{e}_z. \quad (6.125)$$

En insérant la forme 6.123 du champ électrique dans ces relations, il vient

$$\xi_j e^{-ik_{z_j}(z-z_{j-1})} + \eta_j e^{+ik_{z_j}(z-z_{j-1})} = \xi_{j+1} + \eta_{j+1}, \quad (6.126)$$

$$-k_{z_j} \xi_j e^{-ik_{z_j}(z-z_{j-1})} + k_{z_j} \eta_j e^{+ik_{z_j}(z-z_{j-1})} = k_{z_{j+1}} (-\xi_{j+1} + \eta_{j+1}). \quad (6.127)$$

On voit alors qu'en posant

$$C_j = e^{ik_{z_j} h_j} \quad , \quad h_j = z_j - z_{j-1} \quad (6.128)$$

$$Q_j = k_{z_j}, \quad (6.129)$$

$$S(0, j+1) = f(S(0, j)) \quad (6.130)$$

ces équations se réduisent à la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha e^{ik_{z_j} h_j} & \beta e^{ik_{z_j} h_j} \\ \gamma e^{-ik_{z_j} h_j} & \delta e^{-ik_{z_j} h_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{j+1} \\ \eta_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (6.131)$$

avec,

$$\bar{U} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_j (1 + Q_{j+1} Q_j^{-1}) & C_j (1 - Q_{j+1} Q_j^{-1}) \\ C_j^{-1} (1 - Q_{j+1} Q_j^{-1}) & C_j^{-1} (1 + Q_{j+1} Q_j^{-1}) \end{pmatrix}. \quad (6.132)$$

Nous disposons maintenant d'une relation matricielle qui nous permet de calculer les amplitudes du champ électrique dans une couche à partir de celles de la couche précédente. Il s'agit de la démarche classique suivie dans la théorie des matrices de transfert. On voit ainsi que les matrices de transfert font simultanément appel aux termes  $C_j^{\pm 1} = e^{\pm ik_{z_j} h_j}$  ce qui peut engendrer des instabilités numériques lorsque l'épaisseur d'une couche  $h_j$  est grande, lorsque le nombre totale de couches est important ou encore lorsque des ondes évanescentes sont présentes. Pour avoir un outil de calcul stable des champs électromagnétiques, indépendamment de l'épaisseur

des couches, il est donc nécessaire de calculer séparément les amplitudes des champs *entrants* et *sortants* dans chaque couche. Pour cela on considère qu'une relation linéaire de la forme

$$\xi_j = \widehat{S}_j \eta_j, \quad (6.133)$$

existe entre elles. Ici,  $\widehat{S}_j$  représente la matrice de diffusion de la couche  $j$ .

Considérons désormais la matrice de diffusion reliant les amplitudes de champs à l'entrée de la première couche de notre structure,  $(\xi_0, \eta_0)$ , à ceux dans la  $j^{\text{ème}}$  couche  $(\xi_j, \eta_j)$ . On a

$$\begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_0 \end{pmatrix} = S(0, j) \begin{pmatrix} \xi_0 \\ \eta_j \end{pmatrix}. \quad (6.134)$$

Pour calculer  $S(0, j)$ , pour tout  $j$ , il nous faut maintenant déterminer les relations entre la matrice  $S(0, j)$  et la matrice  $S(0, j+1)$ . Pour cela il suffit de prendre l'équation 6.134 et de remplacer les amplitudes  $\xi_j$  et  $\eta_j$  par leur expression en fonction de  $\xi_{j+1}$  et  $\eta_{j+1}$  obtenue avec l'équation 6.131. Il vient alors

$$\begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11}\xi_{j+1} + u_{12}\eta_{j+1} \\ \eta_0 \end{pmatrix}, \quad (6.135)$$

et

$$\begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}\xi_0 + S_{12}\eta_j \\ S_{21}\eta_0 + S_{22}\eta_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}\xi_0 + S_{12}(u_{21}\xi_{j+1} + u_{22}\eta_{j+1}) \\ S_{21}\eta_0 + S_{22}(u_{21}\xi_{j+1} + u_{22}\eta_{j+1}) \end{pmatrix}. \quad (6.136)$$

L'égalité entre les équations 6.135 et 6.136 nous permet alors d'obtenir un système d'équations reliant les amplitudes de champ  $(\xi_0, \eta_0)$  à l'extérieur de la structure à celles  $(\xi_{j+1}, \eta_{j+1})$  de la couche  $j+1$

$$(u_{11} - S_{12}u_{21})\xi_{j+1} = S_{11}\xi_0 + (S_{12}u_{22} - u_{12})\eta_{j+1}, \quad (6.137)$$

$$-S_{22}u_{21}\xi_{j+1} + \eta_0 = S_{21}\xi_0 + S_{22}u_{22}\eta_{j+1}. \quad (6.138)$$

En écrivant cette relation sous forme matricielle, il vient

$$\begin{pmatrix} u_{11} - S_{12}u_{21} & 0 \\ -S_{22}u_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{j+1} \\ \eta_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12}u_{22} - u_{12} \\ S_{21} & S_{22}u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_0 \\ \eta_{j+1} \end{pmatrix}. \quad (6.139)$$

Soit, de façon équivalente

$$\begin{pmatrix} \xi_{j+1} \\ \eta_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} - S_{12}u_{21} & 0 \\ -S_{22}u_{21} & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12}u_{22} - u_{12} \\ S_{21} & S_{22}u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_0 \\ \eta_{j+1} \end{pmatrix}. \quad (6.140)$$

Nous obtenons finalement une expression de la matrice  $S(0, j+1)$  dont les termes dépendent des éléments de la matrice  $S(0, j)$

$$S(0, j+1) = \begin{pmatrix} u_{11} - S_{12}u_{21} & 0 \\ -S_{22}u_{21} & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12}u_{22} - u_{12} \\ S_{21} & S_{22}u_{22} \end{pmatrix}. \quad (6.141)$$

Chaque terme  $S_{ij}$  de la matrice  $S(0, j+1)$  pourra donc être calculé à partir du terme  $S_{ij}$  de la matrice  $S(0, j)$ .

$$S_{11}(j+1) = S_{11}(j) (u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} \quad (6.142)$$

$$S_{12}(j+1) = (u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} (S_{12}(j)u_{22} - u_{12}) \quad (6.143)$$

$$S_{21}(j+1) = S_{22}(j)u_{21}S_{11}(j+1) + S_{21} \quad (6.144)$$

$$S_{22}(j+1) = S_{22}(j)u_{21}S_{12}(j+1) + S_{22}u_{22}, \quad (6.145)$$

avec,

$$(u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} = 2 \left[ C_j \left( 1 + Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) - S_{12}C_j^{-1} \left( 1 - Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) \right]^{-1} \quad (6.146)$$

$$= 2C_j^{-1} \left[ \left( 1 + Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) - S_{12}C_j^{-2} \left( 1 - Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) \right]^{-1} \quad (6.147)$$

$$(S_{12}u_{22} - u_{12}) = \frac{1}{2} \left[ S_{12}C_j^{-1} \left( 1 + Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) - C_j \left( 1 - Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) \right] \quad (6.148)$$

$$= \frac{1}{2} C_j \left[ S_{12}C_j^{-2} \left( 1 + Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) - \left( 1 - Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) \right], \quad (6.149)$$

et le produit de ces deux termes (nécessaire au calcul de la composante  $S_{12}(j+1)$ ) a pour expression

$$(u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} (S_{12}u_{22} - u_{12}) = \frac{\left[ S_{12}C_j^{-2} \left( 1 + Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) - \left( 1 - Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) \right]}{\left[ \left( 1 + Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) - S_{12}C_j^{-2} \left( 1 - Q_{j+1}Q_j^{-1} \right) \right]}. \quad (6.150)$$

En considérant l'initialisation suivante

$$S(0, 0) = Id = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.151)$$

nous pouvons calculer par récurrence la matrice de diffusion correspondant au système étudié. Il est important de noter ici que, contrairement à ce que nous avons avec les matrices de transfert, le calcul de la matrice de diffusion  $S(0, j+1)$  ne fait intervenir que les termes  $C_j^{-1}$  et  $C_j^{-2}$  (les termes  $C_j$  s'annulant). Ainsi, seules des exponentielles décroissantes interviendront lors de l'utilisation de ces matrices de diffusion, ce qui assurera la stabilité du calcul.

## 6.4.2 Cas de la polarisation $p$

### 6.4.2.1 Calcul du champ magnétique

En polarisation  $p$ , le champ électrique est dans le plan d'incidence,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_x(x, z)\mathbf{e}_x + E_z(x, z)\mathbf{e}_z$  et le champ magnétique est transverse  $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = H_y(x, z)\mathbf{e}_y$ . Nous allons alors déterminer comme précédemment l'expression des matrices de diffusion permettant le calcul des amplitudes  $(\xi_j, \eta_j)$  du champ magnétique dans chaque couche.

De manière analogue à ce que nous avons fait pour le champ électrique, en combinant les équations de Maxwell 6.115 et 6.116, on obtient l'équation d'Helmholtz pour le champ magnétique

$$\bar{\nabla} \wedge \bar{\nabla} \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}) - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0. \quad (6.152)$$

et d'après l'équation 6.114, l'équation 6.152 peut s'écrire sous la forme

$$\Delta \mathbf{H}(\mathbf{r}) + k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0. \quad (6.153)$$

Pour résoudre l'équation 6.153, l'on décompose aussi le champ magnétique dans l'espace de Fourier. En prenant en compte la symétrie azimutale de notre problème, le champ magnétique s'écrit

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{H}(K, 0, z) e^{-iKx} dK. \quad (6.154)$$

En substituant l'équation 6.154 dans l'équation 6.153, nous vérifions que l'amplitude  $\mathbf{H}(K, 0, z) = H_y(z) \mathbf{e}_y$  des modes de Fourier sont solution de l'équation

$$\frac{d^2}{dz^2} H_y + (\varepsilon_j k_0^2 - K^2) H_y = 0 \quad , \quad z_{j-1} < z < z_j \quad , \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (6.155)$$

Nous séparons alors le champ électrique  $H_y$  en deux composantes, l'une pour le champ se propageant vers z croissants, l'autre vers les z décroissants.

$$H_y(z) = \xi_j e^{-ik_{z_j}(z-z_{j-1})} + \eta_j e^{+ik_{z_j}(z-z_{j-1})}. \quad (6.156)$$

Les conditions de continuité des composantes tangentielles des champs à l'interface permettent alors d'écrire les équations de continuité suivantes

$$\mathbf{H}_j(z_j) \cdot \mathbf{e}_y = \mathbf{H}_{j+1}(z_j) \cdot \mathbf{e}_y \quad (6.157)$$

$$\mathbf{E}_j(z_j) \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{E}_{j+1}(z_j) \cdot \mathbf{e}_x. \quad (6.158)$$

Or, d'après l'équation 6.116,

$$-\frac{i}{\omega \varepsilon} \nabla \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (6.159)$$

et l'équation 6.158 peut alors s'écrire sous la forme

$$\frac{1}{\omega \varepsilon_j} \nabla \wedge \mathbf{H}_j = \frac{1}{\omega \varepsilon_{j+1}} \nabla \wedge \mathbf{H}_{j+1}. \quad (6.160)$$

En insérant la forme 6.156 du champ magnétique, les conditions de continuité 6.157 et 6.160 se traduisent par

$$\xi_j e^{-ik_{z_j}(z-z_{j-1})} + \eta_j e^{+ik_{z_j}(z-z_{j-1})} = \xi_{j+1} + \eta_{j+1} \quad (6.161)$$

$$-\frac{k_{z_j}}{\varepsilon_j} \xi_j e^{-ik_{z_j}(z-z_{j-1})} + \frac{k_{z_j}}{\varepsilon_j} \eta_j e^{+ik_{z_j}(z-z_{j-1})} = \frac{k_{z_{j+1}}}{\varepsilon_{j+1}} (-\xi_{j+1} + \eta_{j+1}). \quad (6.162)$$

Après quelques calculs que nous ne détaillerons pas ici, on obtient une relation matricielle entre les amplitudes de champs  $(\xi_j, \eta_j)$  et  $(\xi_{j+1}, \eta_{j+1})$

$$\begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_j \end{pmatrix} = \overline{\overline{U}} \begin{pmatrix} \xi_{j+1} \\ \eta_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{j+1} \\ \eta_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (6.163)$$

avec

$$\overline{\overline{U}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_j \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) & C_j \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \\ C_j^{-1} \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) & C_j^{-1} \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \end{pmatrix}. \quad (6.164)$$

La démarche pour retrouver les expressions permettant le calcul des termes de la matrice  $S(0, j+1)$  en fonction de ceux de la matrice  $S(0, j)$  est identique à celle établie pour le champ électrique en polarisation  $\mathbf{s}$ .

$$S_{11}(j+1) = S_{11}(j) (u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} \quad (6.165)$$

$$S_{12}(j+1) = (u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} (S_{12}(j)u_{22} - u_{12}) \quad (6.166)$$

$$S_{21}(j+1) = S_{22}(j)u_{21}S_{11}(j+1) + S_{21} \quad (6.167)$$

$$S_{22}(j+1) = S_{22}(j)u_{21}S_{12}(j+1) + S_{22}u_{22}, \quad (6.168)$$

avec,

$$(u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} = 2 \left[ C_j \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) - S_{12} C_j^{-1} \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \right]^{-1} \quad (6.169)$$

$$= 2C_j^{-1} \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) - S_{12} C_j^{-2} \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \right]^{-1} \quad (6.170)$$

$$(S_{12}u_{22} - u_{12}) = \frac{1}{2} \left[ S_{12} C_j^{-1} \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) - C_j \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \right] \quad (6.171)$$

$$= \frac{1}{2} C_j \left[ S_{12} C_j^{-2} \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) - \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \right] \quad (6.172)$$

et

$$(u_{11} - S_{12}u_{21})^{-1} (S_{12}u_{22} - u_{12}) = \frac{\left[ S_{12} C_j^{-2} \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) - \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \right]}{\left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) - S_{12} C_j^{-2} \left( 1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} Q_{j+1} Q_j^{-1} \right) \right]}. \quad (6.173)$$

## 6.5 Conclusion

Nous venons d'expliquer comment, par une approche électromagnétique, déterminer la densité locale d'énergie électromagnétique pour des milieux stratifiés. Nous avons pour cela calculé les tenseurs de Green qui sont la réponse électromagnétique du milieu à une excitation ponctuelle. Après avoir rappelé l'expression de ces tenseurs dans l'espace libre et dans un milieu semi-infini, nous les avons explicité dans le cas général des milieux multicouches. Afin de calculer ces tenseurs de Green dans un milieu multicouche, nous avons adapté la méthode des matrices de diffusion à notre étude qui est, contrairement aux matrices de transfert, un outil de calcul des champs électrique et magnétique robuste et stable, notamment en présence d'ondes évanescentes. L'ensemble de ces outils nous permettront dans les chapitres suivants de calculer la densité locale d'énergie électromagnétique, dans un premier temps, au voisinage de films fins de matériaux polaires (le carbure de silicium) et métallique (l'aluminium), puis à la surface de milieux multicouches, pour enfin finir par le design ab-initio de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente en champ proche.

# Densité d'énergie au dessus d'un film

---

La composante champ proche du rayonnement thermique à la surface d'un matériau massif a été prédite théoriquement il y a une cinquantaine d'années par Rytov (1953). Cette composante non radiative ne transfère pas d'énergie à longue distance du milieu. La densité d'énergie qui lui est associée décroît très rapidement lorsque l'on s'éloigne de la surface. Des expérimentations ont montré que la densité d'énergie électromagnétique en champ proche excède de plusieurs ordres de grandeurs la densité d'énergie en champ lointain (De Wilde et al., 2006). Alors que l'émission thermique des matériaux massifs a été largement décrite en champ proche et en champ lointain, il n'en est rien pour les systèmes bornés dont la taille est comparable à la longueur d'onde d'émission. C'est le cas par exemple des films fins dont le comportement radiatif en champ lointain a été étudié ces dix dernières années (Kollyukh et al., 2003; Ben-Abdallah, 2004) mais dont le comportement en champ proche n'a été que très peu observé (Biehs et al., 2007), notamment au voisinage des résonances des polaritons de surface. Dans le chapitre suivant on s'intéresse précisément à ce problème. On calculera en particulier la densité d'énergie électromagnétique au dessus de films fins métalliques et de films fins de matériaux polaires à une distance arbitraire de leur surface. De nouveaux effets de champs proche seront mis en évidence et ces effets seront exploités dans les chapitres suivants pour modifier la densité d'énergie électromagnétique à la surface de matériaux multicouches nanostructurés et pour concevoir de nouvelles sources thermiques cohérentes et à haut pouvoir d'émission en champ proche.

## 7.1 Théorie

Nous considérons ici le problème de l'émission thermique dans le vide et à une distance  $z_2 \geq 0$  d'un film nonmagnétique (fig. 7.1) d'épaisseur  $L$  ayant une permittivité diélectrique  $\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$  avec  $\varepsilon''(\omega) < 0$ . Cette émission est due aux fluctuations de courant électrique  $\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \omega)$  au sein du film. Nous supposons ici que les deux milieux de part et d'autre du film (substrat et vide) sont complètement transparents et ont une permittivité diélectrique réelle notée  $\varepsilon_3$  et  $\varepsilon_1$  respectivement.

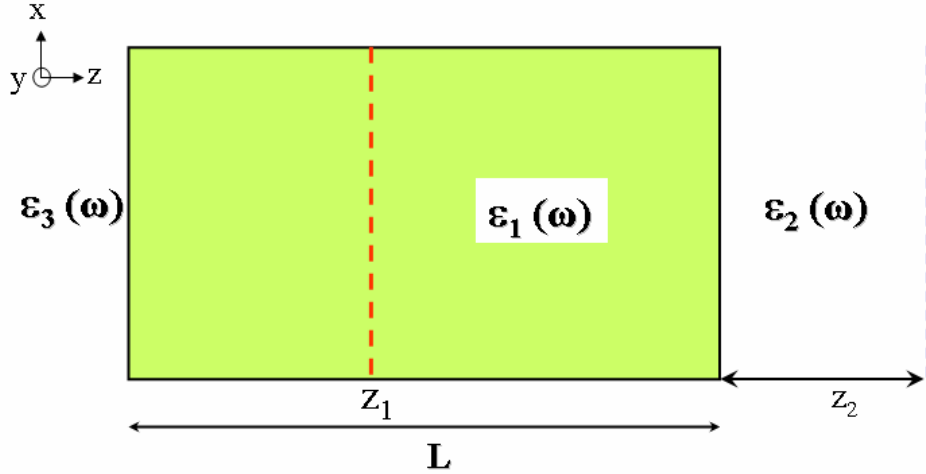
### 7.1.1 Tenseur de Green

Les composantes de Fourier des champs électrique  $\mathbf{E}$  et magnétique  $\mathbf{H}$  à l'extérieur du film sont reliées aux vecteurs courants dans le film par les relations linéaires suivantes

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_2, \omega) = -i\omega\mu_0 \int_V \overline{\overline{\mathbf{G}}}^E(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \quad (7.1)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}_2, \omega) = \int_V \overline{\overline{\mathbf{G}}}^H(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1, \quad (7.2)$$

où  $\overline{\overline{\mathbf{G}}}^E(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega)$  et  $\overline{\overline{\mathbf{G}}}^H(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega)$  représentent, respectivement, les tenseurs de Green du champ électrique et magnétique entre le point d'observation  $\mathbf{r}_2$  et le point source  $\mathbf{r}_1$ . Nous avons vu


 FIG. 7.1 – Configuration du système étudié.  $z_1$  point source,  $z_2$  point d'observation.

au chapitre précédent que, d'après la symétrie azymutale du problème, ces tenseurs admettent le développement de Weyl suivant

$$\overline{\overline{G}}^j(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{K} \overline{\overline{g}}^j(\mathbf{K}, z_2, z_1, \omega) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)} \quad j = E, H \quad (7.3)$$

Ce développement est en fait une transformation de Fourier spatiale dans les plans parallèles aux interfaces du film. C'est pourquoi nous avons décomposé le vecteur position  $\mathbf{r}$  en sa composante parallèle  $\mathbf{R}=(x,y)$  et en sa composante longitudinale  $z$ . En focalisant d'abord notre attention sur le champ électrique et en faisant appel au formalisme de Sipe décrit au chapitre précédent, les composantes de Weyl  $\overline{\overline{g}}^E(\mathbf{K}, z_2, z_1, \omega)$  de  $\overline{\overline{G}}^E(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega)$  peuvent s'écrire

$$\overline{\overline{g}}^E(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) = \frac{i}{2k_{z_1}} \sum_j [Al_{e_j} \mathbf{x}(k_{z_2}) \mathbf{x}(k_{z_1}) + Cl_{e_j} \mathbf{x}(k_{z_2}) \mathbf{x}(-k_{z_1})], \quad (7.4)$$

où la sommation opère sur les deux états de polarisation et où  $k_{z_i} = \sqrt{\varepsilon_i k_0^2 - \mathbf{K}^2}$ . Les coefficients  $Al_{e_j}$  et  $Cl_{e_j}$  représentent le champ électrique au point d'observation  $z_2$  dû à un champ unitaire qui se propage à partir du point source  $z_1$  respectivement vers la droite et vers la gauche. Ces coefficients peuvent aisément être calculés à partir de la méthode des matrices de transfert (*cf.* annexe D) pour donner

$$Al_{e_j} = t_{12_j} e^{-i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1} (L - z_1)]}, \quad (7.5)$$

$$Cl_{e_j} = t_{12_j} r_{13_j} e^{-i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1} (L + z_1)]} \quad (7.6)$$

avec  $t_{12_j}$  et  $r_{13_j}$  les coefficients de transmission et de réflexion de Fresnel respectivement entre les milieux 1 et 2 et entre les milieux 1 et 3 pour la polarisation  $j$ . Les vecteurs  $\mathbf{x}$  utilisés dans l'expression 7.4 sont les vecteurs de Sipe définis par

$$\mathbf{x}(\pm k_z) = \begin{cases} \mathbf{e}(\pm k_z) = -\mathbf{e}_y, & \text{en polarisation } \mathbf{s}, \\ \mathbf{h}(\pm k_z) = \frac{1}{k_0 \sqrt{\varepsilon}} (K \mathbf{e}_z \mp k_z \mathbf{e}_x), & \text{en polarisation } \mathbf{p}. \end{cases} \quad (7.7)$$

En insérant les relations 7.5 à 7.7 dans 7.4, on peut alors déterminer la forme explicite des composantes de Weyl du tenseur de Green électrique

$$\overline{\overline{g}}_s^E(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) = \frac{i}{2k_{z_1}} t_{12_s} e^{-i(k_{z_2} z_2 + k_{z_1} L)} \times [e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13_s} e^{-ik_{z_1} z_1}] \mathbf{e}_y \mathbf{e}_y, \quad (7.8)$$

en polarisation  $\mathbf{s}$  et

$$\begin{aligned} \bar{g}_p^E(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) &= \frac{i}{2 k_{z_1}} \frac{t_{12p}}{k_0^2 n_1 n_2} e^{-i(k_{z_2} z_2 + k_{z_1} L)} \left\{ k_{z_1} \left[ e^{ik_{z_1} z_1} - r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right] (k_{z_2} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_x - K \mathbf{e}_z \mathbf{e}_x) \right. \\ &\quad \left. + K \left[ e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right] (K \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z - k_{z_2} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_z) \right\}, \end{aligned} \quad (7.9)$$

en polarisation  $\mathbf{p}$ .

### 7.1.2 Densité d'énergie électromagnétique

En reprenant les expressions des densités d'énergie électrique et magnétique établies au paragraphe 6.1, nous avons

$$u_e(z_2, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \varepsilon''(z_1) \Theta(T, \omega) \int_0^\infty K \frac{dK}{(2\pi)} \int_0^L dz_1 g_{l,m}^E(z_2, z_1, K, \omega) g_{l,m}^E(z_2, z_1, K, \omega)^*. \quad (7.10)$$

et

$$u_m(z_2, \omega) = -2 \frac{\omega}{\pi c^2} \varepsilon''(z_1) \Theta(T, \omega) \int_0^\infty K \frac{dK}{(2\pi)} \int_0^L dz_1 g_{l,m}^H(z_2, z_1, K, \omega) g_{l,m}^H(z_2, z_1, K, \omega)^*. \quad (7.11)$$

Dans ces deux relations, nous avons adopté la convention d'Einstein, c'est-à-dire que nous avons supposé une sommation implicite sur les indices répétés  $l$  et  $m$ . En utilisant les expressions analytiques 7.8 et 7.9 des composantes de Weyl du tenseur de Green électrique, la contribution des deux états de polarisation à la densité d'énergie électrique peut être calculée par

$$\begin{aligned} u_e^s(z_2, \omega) &= -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \varepsilon''(z_1) \Theta(T, \omega) \int_0^\infty K \frac{dK}{(8\pi)} \left| \frac{t_{12s}}{k_{z_1}} \right|^2 e^{2(k_{z_2}'' z_2 + k_{z_1}'' L)} \\ &\quad \times \int_0^L dz_1 |e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13s} e^{-ik_{z_1} z_1}|^2 \end{aligned} \quad (7.12)$$

$$\begin{aligned} u_e^p(z_2, \omega) &= -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \varepsilon''(z_1) \Theta(T, \omega) \int_0^\infty K \frac{dK}{(8\pi)} \left| \frac{t_{12s}}{k_{z_1}} \right|^2 \frac{K^2 + |k_{z_2}|^2}{k_0^4 |n_2|^2 |n_1|^2} e^{2(k_{z_2}'' z_2 + k_{z_1}'' L)} \\ &\quad \times \int_0^L dz_1 \left[ |k_{z_1}|^2 \left| e^{ik_{z_1} z_1} - r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + K^2 \left| e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right|^2 \right] \end{aligned} \quad (7.13)$$

[de part la convention adoptée, nous avons  $k_{z_i}'' < 0$  dans ces relations, de sorte que les intégrales sont bien évidemment toujours convergentes]. Pour calculer la densité d'énergie magnétique nous avons besoin de connaître les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique. Ces expressions peuvent être obtenues à partir de la relation entre  $\bar{g}^E$  et  $\bar{g}^H$  (cf. paragraphe 6.3) que l'on rappelle ci-dessous

$$e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)} \times \bar{g}^H(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) = \nabla \wedge \left( e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)} \times \bar{g}^E(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) \right). \quad (7.14)$$

Alors, en utilisant les relations 7.8 et 7.9 et les résultats établis en annexe C, nous obtenons

$$\begin{aligned} \bar{g}_s^H(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) &= \frac{t_{12s}}{2 k_{z_1}} e^{-i(k_{z_2} z_2 + k_{z_1} L)} \times \\ &\quad \left[ e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13s} e^{-ik_{z_1} z_1} \right] (k_{z_2} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_y - K \mathbf{e}_z \mathbf{e}_y), \end{aligned} \quad (7.15)$$



en polarisation  $s$  et

$$\begin{aligned} \bar{g}_p^H(z_2, z_1, \mathbf{K}, \omega) &= \frac{t_{12p} (k_{z_2}^2 + K^2)}{2 k_{z_1} k_0^2 n_2 n_1} e^{-i(k_{z_2} z_2 + k_{z_1} L)} \times \\ &\quad \left\{ k_{z_1} \left[ e^{ik_{z_1} z_1} - r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right] \mathbf{e}_y \mathbf{e}_x \right. \\ &\quad \left. - K \left[ e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right] \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z \right\}, \end{aligned} \quad (7.16)$$

en polarisation  $p$ . Finalement, il découle de 7.11 que

$$\begin{aligned} u_m^s(z_2, \omega) &= -2 \frac{\omega}{\pi c^2} \varepsilon''(z_1) \Theta(T, \omega) \int_0^\infty K \frac{dK}{(8\pi)} \left| \frac{t_{12s}}{k_{z_1}} \right|^2 \left( |k_{z_2}|^2 + K^2 \right) e^{2(k_{z_2}'' z_2 + k_{z_1}'' L)} \\ &\quad \times \int_0^L dz_1 \left| e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13s} e^{-ik_{z_1} z_1} \right|^2 \end{aligned} \quad (7.17)$$

$$\begin{aligned} u_m^p(z_2, \omega) &= -2 \frac{\omega}{\pi c^2} \varepsilon''(z_1) \Theta(T, \omega) \int_0^\infty K \frac{dK}{(8\pi)} \left| \frac{t_{12s}}{k_{z_1}} \right|^2 \frac{|K^2 + k_{z_2}^2|^2}{k_0^4 |n_2|^2 |n_1|^2} e^{2(k_{z_2}'' z_2 + k_{z_1}'' L)} \\ &\quad \times \int_0^L dz_1 \left[ |k_{z_1}|^2 \left| e^{ik_{z_1} z_1} - r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + K^2 \left| e^{ik_{z_1} z_1} + r_{13p} e^{-ik_{z_1} z_1} \right|^2 \right] \end{aligned} \quad (7.18)$$

## 7.2 Émission thermique en champ proche au dessus d'un film de carbure de silicium

Nous présentons ici l'étude du comportement radiatif en champ proche dans l'infrarouge [8 – 14  $\mu\text{m}$ ] d'un film fin de matériau polaire : le carbure de silicium (SiC). La permittivité diélectrique du SiC dans cette gamme de longueur d'onde est correctement décrite par le modèle de l'oscillateur de Lorentz (Palik, 1998)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left[ 1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right], \quad (7.19)$$

où  $\varepsilon_\infty = 6.7$  représente la contribution (pour les fréquences optiques) des ions du réseaux cristallins à la polarisation.  $\omega_L = 18.253 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$  et  $\omega_T = 14.937 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$  représentent respectivement les pulsations longitudinale et transverse des phonons optiques.  $\Gamma = 89.66 \cdot 10^{10} \text{ rad.s}^{-1}$  est un facteur d'atténuation qui rend compte des pertes dans le matériau. Dans nos simulations le film est supposé immergé dans le vide de sorte que  $\varepsilon_3 = \varepsilon_2 = 1$ .

Sur la figure 7.2, on représente la densité d'énergie à la surface de films de différentes épaisseurs lorsque le point d'observation est situé à  $z_2 = 10 \text{ nm}$  de la surface. Nous pouvons voir qu'un pic de densité apparaît à  $\lambda^* = 10.55 \mu\text{m}$  qui correspond à la longueur d'onde de résonance des phonon-polaritons de surface du SiC massif (i.e  $\text{Re}[\varepsilon(\lambda^*)] = -1$ ) et ce quelque soit l'épaisseur du film. En outre, on observe que l'intensité de ces pics croît à mesure que l'épaisseur des films diminue. Pour une épaisseur de 10 nm, la densité d'énergie est ainsi augmentée de plus d'un ordre de grandeur par rapport à celle obtenue avec une épaisseur de 10  $\mu\text{m}$ , qui correspond à l'épaisseur où l'on retrouve le comportement du matériau massif (Mulet, 2003). Si l'on élargit le spectre d'étude entre 10 et 15  $\mu\text{m}$  (fig. 7.2 (b)), on peut voir qu'en dehors de la fréquence de résonance, la densité d'énergie est identique quelque soit l'épaisseur du film, ce qui semble bien indiquer que cet effet résulte de la présence des phonon-polaritons de surface. Si on observe maintenant l'évolution de la densité d'énergie en fonction de l'épaisseur du

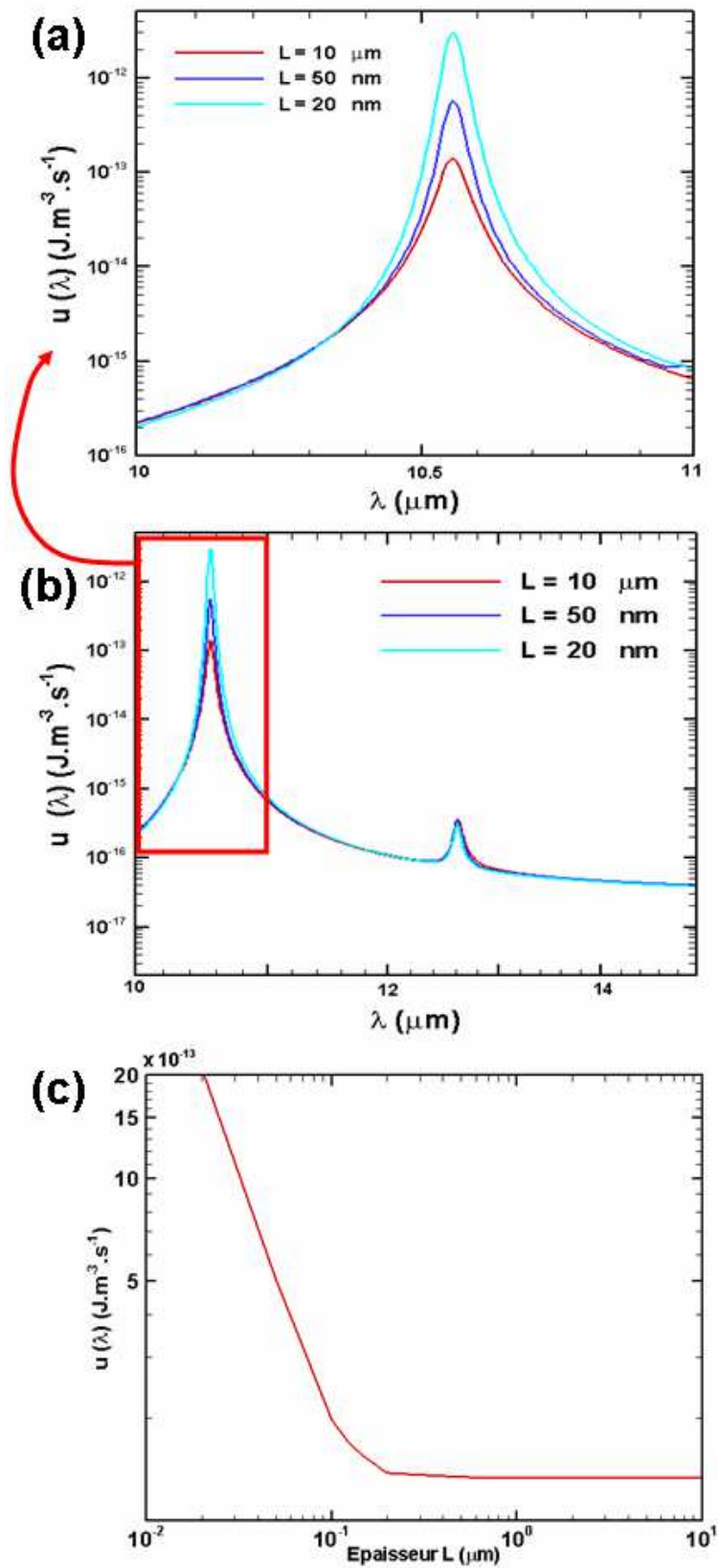


FIG. 7.2 – Densité d'énergie des modes évanescents à une distance  $z_2=10 \text{ nm}$  de la surface d'un film de carbure de silicium de différentes épaisseurs en fonction de la longueur d'onde ((a) : entre 10 et 11  $\mu\text{m}$  et (b) : entre 10 et 15  $\mu\text{m}$ ) et en fonction de l'épaisseur à  $\lambda= 10.55 \mu\text{m}$  (c).

film à la fréquence de résonance des polaritons de surface (fig. 7.2 (c)), trois zones distinctes apparaissent. La première zone correspond à des épaisseurs comprises entre 4 et 100 nm. Dans ce domaine, la densité d'énergie augmente de manière exponentielle plus l'épaisseur diminue. La deuxième zone correspond à des épaisseurs comprises entre 100 nm et 1  $\mu\text{m}$ . La variation de densité d'énergie est plus faible dans cette zone, jusqu'à être quasiment imperceptible pour des épaisseurs supérieures à 500 nm, où l'on récupère pratiquement le comportement du matériau massif. La taille du film n'a alors plus d'effet sur l'émission thermique. Enfin, sur la dernière partie, pour des épaisseurs supérieures à 1  $\mu\text{m}$ , la densité d'énergie est constante et égale à celle observée pour un milieu semi-infini (Mulet, 2003). La figure 7.3 confirme ce résultat puisque l'on voit que la densité spectrale d'énergie, en évanescent, pour un milieu semi-infini et pour un film de 5  $\mu\text{m}$  est identique. De plus, ce résultat valide notre simulation numérique puisque que pour de grandes épaisseurs de film, nous retrouvons les résultats obtenus par Mulet (2003) au dessus d'un milieu semi-infini. Par ailleurs, nous avons aussi observé (fig. 7.4) qu'en champ

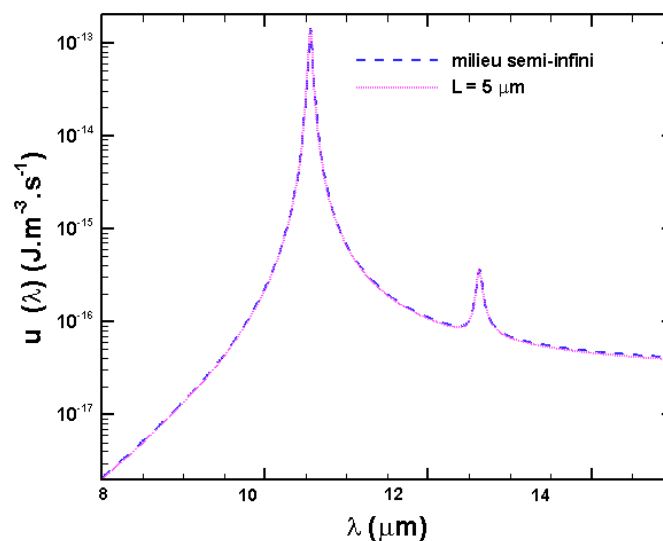


FIG. 7.3 – Densité d'énergie monochromatique des modes évanescents à  $z_2=10$  nm du milieu semi-infini et d'un film de 5  $\mu\text{m}$  d'épaisseur de carbure de silicium.

proche, la contribution énergétique au dessus d'un film des ondes polarisées  $\mathbf{p}$  est largement supérieure à celle des ondes polarisées  $\mathbf{s}$ , rejoignant ainsi les observations faites pour un milieu semi-infini par Mulet (2003) et De Wilde et al. (2006). Nous avons aussi étudié l'influence de la hauteur d'observation sur la densité d'énergie électromagnétique en champ proche au dessus d'un film. Les résultats présentés sur la figure 7.5 montrent que plus l'on s'éloigne de l'interface Sic/vide plus la densité diminue et le pic de densité qui apparaissait clairement à 10.55  $\mu\text{m}$  en champ proche ( $z < 1$   $\mu\text{m}$ ) s'estompe jusqu'à quasiment disparaître en champ lointain ( $z > 10$   $\mu\text{m}$ ), illustrant une fois encore le rôle joué par les phonon-polaritons de surface. L'amplitude de densité d'énergie diminue approximativement de 5 ordres de grandeur en passant du champ proche au champ lointain. Ceci confirme donc que l'augmentation importante de la densité d'énergie en champ proche est due aux phonon-polaritons de surface. Enfin nous avons évolué la contribution des ondes propagatives sur la densité d'énergie électromagnétique pour des épaisseurs de film de 50 nm et 10  $\mu\text{m}$  et à deux hauteur d'observation,  $z=10$  nm et  $z=10$   $\mu\text{m}$ . Les résultats présentés sur la figure 7.6 montrent que la contribution des modes propagatifs à la densité d'énergie électromagnétique est bien identique en champ proche et en champ lointain. Si maintenant on compare la contribution des modes propagatifs à la densité d'énergie électromagnétique pour les deux épaisseurs de film, on peut voir que pour une épaisseur de 10  $\mu\text{m}$ , le spectre de densité est à rapprocher de celui d'un milieu semi-infini (Mulet, 2003), mais celui obtenu pour une épaisseur de 50 nm présente une nette différence. La contribution des

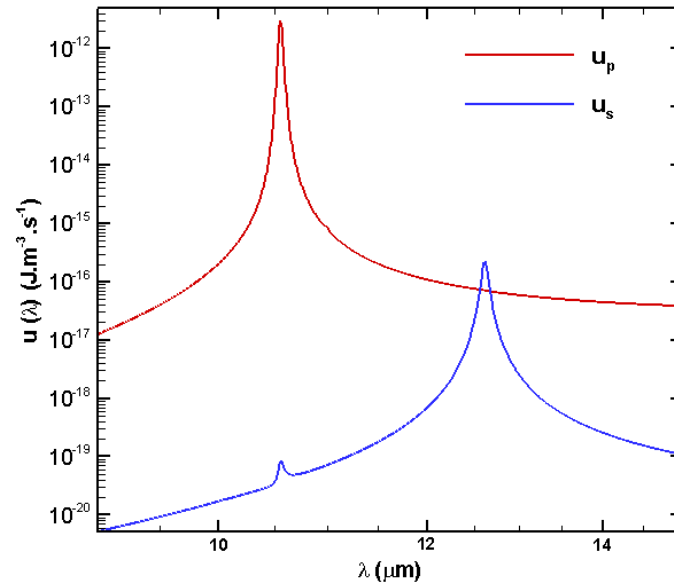


FIG. 7.4 – Densité d'énergie électromagnétique des modes évanescents à  $z_2=10$  nm au dessus d'un film de 20 nm d'épaisseur de carbure de silicium en polarisation  $s$  (trait bleu) et  $p$  (trait rouge).

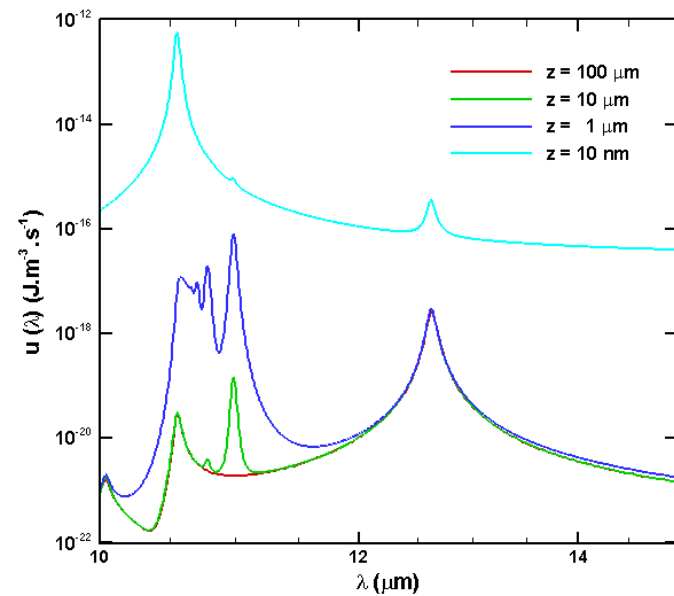


FIG. 7.5 – Densité d'énergie des modes évanescents au dessus d'un film de carbure de silicium de 50 nm d'épaisseur pour différentes hauteurs d'observation  $z_2$  (échelle lin-log).

modes propagatifs à la densité d'énergie électromagnétique est ainsi plus faible lorsque que l'on diminue l'épaisseur du film et un pic apparaît à  $\lambda=12.6 \mu\text{m}$ , qui est la longueur d'onde du bord supérieur de la bande d'absorption des phonons pour le SiC.

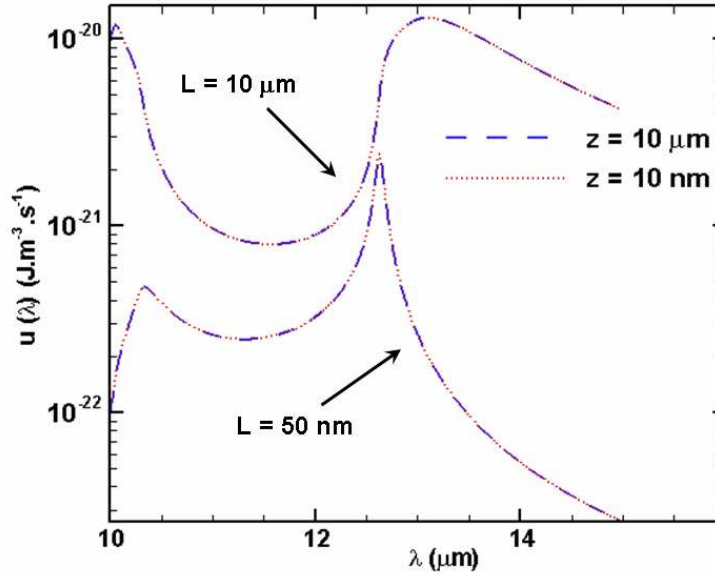


FIG. 7.6 – Densité d'énergie des modes propagatifs au dessus d'un film de carbure de silicium d'épaisseur de 50 nm et de 10  $\mu\text{m}$  pour des hauteurs d'observation  $z_2=10 \text{ nm}$  et  $z_2=10 \mu\text{m}$  (échelle lin-log).

### 7.3 Émission thermique en champ proche au dessus d'un film d'aluminium

Dans ce paragraphe nous étudions l'émission thermique en champ proche de films d'aluminium dans le proche uv et dans le visible, domaine spectral d'existence des plasmons de surface. Sur cette plage de longueurs d'onde, la permittivité diélectrique de l'aluminium est bien décrite par le modèle de Drude de l'électron libre

$$\varepsilon_{Ag}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (7.20)$$

avec  $\gamma = 7.596 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ , le facteur d'amortissement permettant de tenir compte des pertes dans le milieu et  $\omega_p = 1.747 \times 10^{16} \text{ rad.s}^{-1}$ , la fréquence plasma. Dans nos simulations le film est supposé immergé dans le vide de sorte que  $\varepsilon_3 = \varepsilon_2 = 1$ . D'autre part, pour des raisons de stabilité numérique, nous avons calculé la densité locale d'états (LDOS) du champ électrique et magnétique plutôt que la densité locale d'énergie. Ce choix, n'a aucune conséquence sur l'analyse qualitative que nous poursuivons ici. En effet, ces grandeurs sont directement reliées l'une à l'autre, la densité d'énergie étant simplement la LDOS multipliée par la distribution de Bose-Einstein. Sur la figure 7.7a nous avons représenté les résultats obtenus pour les modes évanescents pour différentes épaisseurs de film lorsque le point d'observation est situé à  $z_2=10 \text{ nm}$  de la surface. On peut voir que pour une épaisseur de 200 nm, on retrouve la densité locale d'états obtenue avec un milieu semi-infini (Joulain et al., 2003), avec l'apparition d'un pic autour de  $\lambda^*=160 \text{ nm}$ , qui correspond à la longueur d'onde de résonance des plasmon-polaritons de surface de l'aluminium massif (i.e  $Re[\varepsilon(\lambda^*) = -1]$ ). C'est donc tout naturellement autour de la fréquence de résonance de ces plasmons de surface que nous observons un pic de densité locale d'états. Ce qui est remarquable ici, c'est que la LDOS augmente fortement dès que l'on réduit l'épaisseur du film en dessous de 200 nm. Pour un film de 10 nm, cette

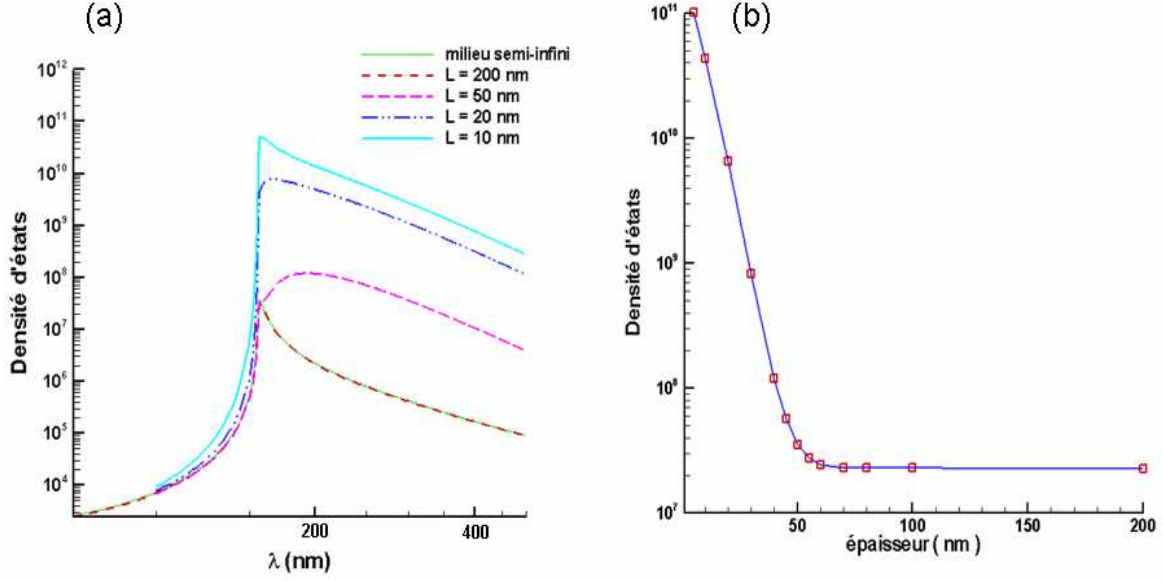


FIG. 7.7 – Densité locale d'états des modes évanescents à une distance  $z_2=10$  nm de films d'aluminium de différentes épaisseurs en fonction de la longueur d'onde (a) et en fonction de l'épaisseur à  $\lambda=160$  nm (b).

augmentation, est d'ailleurs de 4 ordres de grandeur supérieure à celle du matériaux massif (ce régime est atteint dès que l'épaisseur du film dépasse 200 nm). Cette augmentation de densité s'accompagne cependant d'une perte de cohérence spectrale autour de la fréquence de résonance.

Sur la figure 7.8 nous avons vérifié, en calculant la LDOS électrique et magnétique pour les deux états de polarisation, que les modes évanescents polarisés  $\mathbf{p}$  sont les principaux contributeurs à la LDOS totale du film. En outre, il est possible de voir que la LDOS des modes évanescents polarisés  $\mathbf{s}$  ne varie pratiquement pas avec l'épaisseur du film alors que celle des modes évanescents polarisés  $\mathbf{p}$  augmente d'environ trois ordres de grandeurs lorsque l'épaisseur du film passe de 200 nm (comportement du matériau massif) à 10 nm.

Afin d'apporter des éléments de réponse sur l'origine physique de cette exaltation de la LDOS, une étude du comportement de l'intégrand de la LDOS électrique en polarisation  $\mathbf{p}$  (*cf.* relation 7.13) en fonction de la composante parallèle du vecteur d'onde et de l'épaisseur du film est nécessaire. Il a été démontré par Boersch et al. (1966); Swan et al. (1967) puis par (Sarid, 1981) que dans le cas d'un film, deux plasmons de surface (un symétrique et un antisymétrique) coexistent. Un grand intérêt a été porté aux relations de dispersion de ces plasmons de surface lorsque l'épaisseur du film est petite (Kliwer & Fuchs, 1967; Burke et al., 1985; Dionne et al., 2005). Ces études ont montré que si l'épaisseur du film est assez grande, les ondes évanescentes de part et d'autre du film sont indépendantes et donc ne se couplent pas. En revanche, si l'épaisseur est suffisamment petite, on observe alors un clivage (qui s'accroît plus l'épaisseur diminue) dans la relation de dispersion des plasmons de surface et les deux ondes évanescentes se recouvrent (Kliwer & Fuchs, 1967; Sarid, 1981). Ce couplage est très certainement responsable de cette augmentation de la LDOS.

## 7.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons démontré que comparativement à ce que l'on obtient pour un matériau massif, la densité spectrale d'énergie à la surface d'un film fin est très significativement augmentée au voisinage de la longueur d'onde de résonance des polaritons de surface

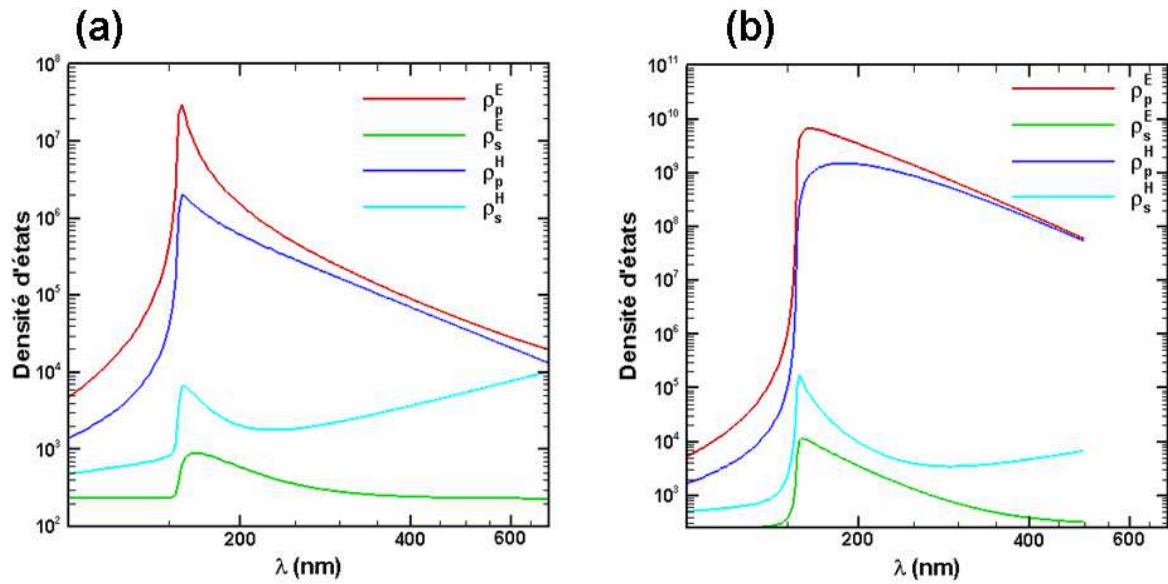


FIG. 7.8 – Densité locale d'états électrique et magnétique des modes évanesçents à une distance  $z_2=10$  nm de la surface d'un film d'aluminium de 200 nm d'épaisseur (a) et d'un film d'aluminium de 20 nm d'épaisseur (b).

supportés par le film, lorsque l'épaisseur du film est inférieure à cette longueur d'onde. Il est probable que les modes guidés à l'intérieur du film jouent un rôle dans cette augmentation. Des travaux complémentaires permettront de vérifier cette hypothèse. Enfin nous avons observé que cette exaltation de la densité d'énergie s'accompagne d'une diminution de la cohérence spectrale de l'émission en champ proche. Cet effet peut s'avérer problématique pour les applications pratiques dans le domaine de la conversion d'énergie comme la conversion thermophotovoltaïque de champ proche. En effet, l'étalement du spectre d'émission de part et d'autre du gap de conversion induit le chauffage du matériau semi-conducteur (la cellule TPV) ce qui fait chuter le rendement. Nous verrons au chapitre suivant que l'on peut "récupérer" de la cohérence tout en conservant, voir en augmentant, l'intensité de la densité d'énergie, en utilisant des structures en couches minces convenablement agencées.

# Amplification de la densité d'énergie au dessus d'une structure multicouche

---

## 8.1 Motivations

Nous avons vu au chapitre précédent que la densité d'énergie électromagnétique en champ proche au dessus d'un film mince pouvait gagner plusieurs ordres de grandeur par rapport à celle d'un matériau massif. Nous avons également constaté que cette forte augmentation s'accompagne par une perte de cohérence spectrale. Dans ce paragraphe nous allons voir qu'il est possible d'obtenir une densité d'énergie beaucoup plus grande au dessus d'un matériau nanostructuré multicouche tout en améliorant la cohérence spectrale du champ émis. Pour cela, nous allons adapter au champ proche la méthode de design ab-initio introduit au chapitre 5 pour sculpter les propriétés d'émission en champ lointain. Le principe d'optimisation par AG est identique à celui présenté au chapitre 5, en revanche la cible à atteindre et la fitness sont bien évidemment modifiées pour tenir compte de la spécificité de la physique des transferts en champ proche.

## 8.2 Théorie

Nous considérons ici l'émission thermique à une distance  $z_2$  de la surface d'une structure multicouche 1D d'épaisseur totale  $L$  et entourée de vide (fig. 8.1). D'après la théorie de l'électrodynamique fluctuationnelle, l'émission thermique est due aux fluctuations de courant  $\mathbf{j}(z_1, \omega)$  au sein de la structure. Pour calculer la densité d'énergie électromagnétique, il est nécessaire de connaître les composantes de Weyl des tenseurs de Green de ces structures. Le paragraphe suivant concerne donc la détermination des expressions de ces composantes.

### 8.2.1 Tenseurs de Green

Dans un premier temps, nous allons calculer les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique  $\overline{\overline{G}}_p^H(z_2, z_1, x_2, x_1, \omega)$  en polarisation  $\mathbf{p}$ . D'après la définition établie au paragraphe 6.2.3.4, les composantes de Weyl  $\overline{\overline{g}}_p^H(z_2, z_1, K, \omega)$  de ce tenseur peuvent s'écrire

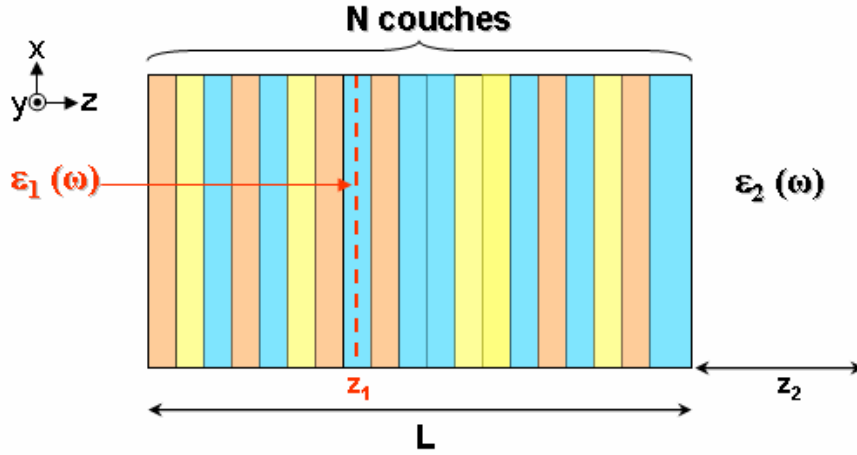
$$\overline{\overline{g}}_p^H(z_2, z_1, K, \omega) = \frac{k_0}{2k_{z_1}} [Al_{h_p} \mathbf{e}(+k_{z_2}) \mathbf{h}^*(+k_{z_1}) + Cl_{h_p} \mathbf{e}(+k_{z_2}) \mathbf{h}^*(-k_{z_1})], \quad (8.1)$$

où  $k_{z_i} = \sqrt{\varepsilon_i k_0^2 - K^2}$ . Les vecteurs  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{h}^*$  sont les vecteurs polarisation (*cf.* paragraphe 6.2.3.4) définis par

$$\mathbf{e}(\pm k_z) = -\mathbf{e}_y \quad \text{en polarisation } \mathbf{s}, \quad (8.2)$$

$$\mathbf{h}^*(\pm k_z) = \frac{1}{k_0} (K \mathbf{e}_z \mp k_z \mathbf{e}_x) \quad \text{en polarisation } \mathbf{p}. \quad (8.3)$$




 FIG. 8.1 – Configuration géométrique du système.  $z_1$  point source,  $z_2$  point d'observation.

Quand aux coefficients  $Al_{hp}$  et  $Cl_{hp}$ , ils représentent le champ magnétique au point d'observation  $z_2$  du à un champ unitaire qui se propage à partir du point source  $z_1$  respectivement vers la droite et vers la gauche. Ces coefficients sont calculés à partir des matrices de diffusion (annexe D) et ont pour expression

$$Al_{hp} = S_{11}(j, nbc + 1) e^{-i(k_{z_2}z_2 - k_{z_j}(z_1 - z_{j-1}))} \quad (8.4)$$

$$Cl_{hp} = S_{11}(j, nbc + 1) S_{12}(0, j) e^{-i(k_{z_2}z_2 + k_{z_j}(z_1 - z_{j-1}))}. \quad (8.5)$$

En considérant le produit tensoriel  $\mathbf{e}\mathbf{h}^*$  calculé au paragraphe 6.2.3.4, on peut alors déterminer la forme explicite des composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique en polarisation  $\mathbf{p}$

$$\bar{g}_p^H(z_2, z_1, K, \omega) = \frac{1}{2} \left[ (Cl_{hp} - Al_{hp}) \mathbf{e}_y \mathbf{e}_x + \frac{K}{k_{z_1}} (Cl_{hp} + Al_{hp}) \mathbf{e}_y \mathbf{e}_z \right]. \quad (8.6)$$

Intéressons nous maintenant aux composantes de Weyl du tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{p}$ . Nous avons établi (annexe C) la relation

$$\bar{g}_p^E(z_2, z_1, K, \omega) e^{-iK(x_2 - x_1)} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon_2} \left[ \nabla \wedge \bar{g}_p^H(z_2, z_1, K, \omega) e^{-iK(x_2 - x_1)} - \delta(z_2 - z_1) e^{-iK(x_2 - x_1)} (\mathbf{e}_x \mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z) \right], \quad (8.7)$$

entre les composantes de Weyl des tenseurs de Green électrique et magnétique en polarisation  $\mathbf{p}$ . En insérant l'expression 8.6 dans cette relation, on obtient alors

$$\begin{aligned} \bar{g}_p^E(z_2, z_1, K, \omega) &= \frac{i}{2 k_0^2 \varepsilon_2} \left[ (Cl_{hp} - Al_{hp}) (k_{z_2} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_x - K \mathbf{e}_z \mathbf{e}_x) \right. \\ &\quad \left. + (Cl_{hp} + Al_{hp}) \left( \frac{k_{z_2} K}{k_{z_1}} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_z - \frac{K^2}{k_{z_1}} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \right) \right]. \end{aligned} \quad (8.8)$$

De manière analogue, il est possible d'exprimer les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique à partir de celles du tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{s}$ . Nous avons déterminé en annexe C la relation

$$\bar{g}_s^H(z_2, z_1, K, \omega) e^{-iK(x_2 - x_1)} = \nabla \wedge \bar{g}_s^E(z_2, z_1, K, \omega) e^{-iK(x_2 - x_1)}, \quad (8.9)$$

entre les composantes de Weyl des tenseurs de Green électrique et magnétique en polarisation  $\mathbf{s}$ . Or, l'expression de la composante de Weyl  $\bar{g}_s^E(z_2, z_1, K, \omega)$  du tenseur de Green électrique est de la forme ( cf. paragraphe 6.2.3.1)

$$\bar{g}_s^E(z_2, z_1, K, \omega) = \frac{i}{2k_{z_1}} (A_{l_{e_s}} + C_{l_{e_s}}), \quad (8.10)$$

où les termes  $A_{l_{e_s}}$  et  $C_{l_{e_s}}$  (calculés en annexe) représentent le champ électrique en polarisation  $\mathbf{s}$  au point d'observation  $z_2$  du à un champ unitaire qui se propage à partir du point source  $z_1$  respectivement vers la droite et vers la gauche. Le calcul de ces coefficients est effectué en annexe D. Ainsi, en insérant la relation 8.9 dans 8.10, on obtient les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique pour la polarisation  $\mathbf{s}$

$$\bar{g}_s^H(z_2, z_1, K, \omega) = -\frac{1}{2k_{z_1}} (A_{l_{e_s}} + C_{l_{e_s}}) (k_{z_2} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_y - K \mathbf{e}_z \mathbf{e}_y). \quad (8.11)$$

### 8.2.2 Densité d'énergie

Nous venons de détailler comment obtenir les composantes de Weyl des tenseurs de Green électrique et magnétique. Nous allons maintenant déterminer les expressions des densités d'énergie électrique et magnétique au dessus de la structure en séparant les contributions dues aux ondes polarisées  $\mathbf{p}$  de celles dues aux ondes polarisées  $\mathbf{s}$ . En reprenant l'expression des densités d'énergie définie au paragraphe 6.1 et l'expression des composantes de Weyl obtenue au paragraphe précédent, la densité d'énergie électrique en polarisation  $\mathbf{s}$  s'écrit

$$u_e^s(z, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z_1) g_{22}^E(z, z', K, \omega) g_{22}^E(z, z', K, \omega)^*, \quad (8.12)$$

tandis qu'en polarisation  $\mathbf{p}$ , elle prend la forme

$$u_e^p(z, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z_1) g_{l,m}^E(z, z', K, \omega) g_{l,m}^E(z, z', K, \omega)^*, \quad (8.13)$$

avec  $l, m = 1, 3$ . La contribution de la polarisation  $\mathbf{s}$  à la densité d'énergie magnétique sera quand à elle déterminée en calculant

$$\begin{aligned} u_m^s(z, \omega) = & -2 \frac{\omega}{\pi c^2} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z_1) [g_{12}^H(z, z', K, \omega) g_{12}^H(z, z', K, \omega)^* \\ & + g_{32}^H(z, z', K, \omega) g_{32}^H(z, z', K, \omega)^*], \end{aligned} \quad (8.14)$$

tandis qu'en  $\mathbf{p}$  elle s'écrit

$$\begin{aligned} u_m^p(z, \omega) = & -2 \frac{\omega}{\pi c^2} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z_1) [g_{21}^H(z, z', K, \omega) g_{21}^H(z, z', K, \omega)^* \\ & + g_{23}^H(z, z', K, \omega) g_{23}^H(z, z', K, \omega)^*]. \end{aligned} \quad (8.15)$$

## 8.3 Design inverse de sources thermiques en champ proche à haute densité d'énergie

Nous présentons ici le design ab-initio d'une source thermique nanostructurée ayant une densité locale d'états électromagnétique<sup>1</sup> en champ proche bien supérieure à celle du matériau

<sup>1</sup>pour des raisons de stabilité numérique, nous avons de nouveau calculé la densité locale d'états (LDOS) du champ électrique et magnétique plutôt que la densité d'énergie. Ce choix n'a aucune conséquence sur l'analyse qualitative que nous poursuivons ici, ces grandeurs sont en effet directement reliées l'une à l'autre, la densité d'énergie étant simplement la LDOS multipliée par la distribution de Bose-Einstein.

massif. Les structures étudiées ont la même configuration que celles présentées au chapitre 5. Elles sont composées de trois matériaux, l'aluminium, le verre et un matériau transparent présentant un fort contraste d'indice de réfraction avec celui du verre. Nous nous plaçons entre 100 et 500 nm, dans le proche u.v, où des plasmon-polaritons de surface sont susceptibles d'apparaître à la surface des couches d'aluminium. Dans ce domaine de longueur d'onde, seul l'aluminium est un matériau absorbant et sa permittivité diélectrique est correctement modélisée par le modèle de Drude

$$\varepsilon_{Al}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (8.16)$$

avec  $\gamma = 7.596 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ , le facteur d'amortissement et  $\omega_p = 1.747 \times 10^{16} \text{ rad.s}^{-1}$ , la fréquence plasma. Sur cette plage spectrale, le verre est un matériau transparent et sa constante diélectrique peut être approchée par la valeur réelle et constante (Palik, 1998)  $\varepsilon_{SiO_2} = 2.75$ . Le troisième matériau possède quand à lui une permittivité diélectrique  $\varepsilon_t = 16$ .

Pour réaliser ce design ab-initio, on choisit une LDOS cible de la forme

$$\rho_{cible}(\lambda^* = 160 \text{ nm}) = \alpha, \quad (8.17)$$

où  $\alpha$  représente l'intensité de la LDOS que l'on souhaite atteindre. Le choix de cette cible n'autorise qu'une optimisation localisée en fréquence de la LDOS. L'écart entre la cible et la LDOS calculée pour une structure  $\Lambda$  est alors mesurée à l'aide de la fitness

$$J = |\rho_{cible} - \rho_{calc}| \quad (8.18)$$

$\rho_{calc}$  étant obtenue en résolvant le problème direct. Le choix de  $\lambda^* = 160 \text{ nm}$  correspond à la longueur d'onde où nous avons observé une forte augmentation de la LDOS à la surface de films fins ( fig. 7.7) et qui est proche de  $\omega_p/\sqrt{2}$  la fréquence d'apparition des plasmons de surface de l'aluminium. Dans ce processus d'optimisation, nous nous sommes limités à des structures composées de  $N = 10$  et  $N = 20$  couches élémentaires d'épaisseur constante  $h = 10 \text{ nm}$ . Comme pour le design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ lointain (cf. chap. 5), nous avons appliqué l'algorithme génétique sur une population finie de  $N=50$  individus.

Sur la figure 8.2 (resp. fig. 8.3), est présentée la LDOS à  $z_2 = 10 \text{ nm}$  de la surface de la structure obtenue après 1 génération (ce qui correspond simplement à la structure optimale dans la distribution initiale) (resp. 20 générations) lorsque la cible  $\alpha = 10^{10}$  (resp.  $\alpha = 10^{11}$ ). Il apparaît clairement sur ces deux exemples que la cible est atteinte. En outre, la comparaison de l'amplitude de la LDOS obtenue après optimisation avec celles observées à la surface de film fins d'aluminium montrent que l'on atteint dans le premier cas une intensité équivalente, à  $\lambda^* = 160 \text{ nm}$ , à celle d'un film de 20 nm d'épaisseur et équivalente à celle d'un film de 10 nm dans le second cas (cf. chap. 7). Qui plus est, nous observons que le degré de cohérence spectral du rayonnement émis par ces structures à  $\lambda^*=160 \text{ nm}$  est bien plus grand que celui d'un film et il est même comparable, voir meilleur, que celui du matériau massif. Enfin sur la figure 8.3c, on vérifie que contrairement au cas où  $\alpha=10^{10}$ , pour  $\alpha=10^{11}$  la cible n'est pas atteinte avant la 20<sup>ème</sup> génération.

Revenons maintenant sur le résultat obtenu avec la configuration à 10 couches élémentaires (fig.8.2). Comme nous l'avons vu, la cible est atteinte dès la première génération lorsque  $\alpha = 10^{10}$  et lorsque l'on applique l'algorithme génétique sur une population de 50 individus. Ce résultat semble indiquer que dans l'espace des structures admissibles (qui contient  $3^{10} \simeq 59000$  structures), il est facile d'obtenir ce niveau d'émission à  $\lambda^*=160 \text{ nm}$ . Afin d'évaluer le maximum de LDOS que l'on peut obtenir avec ce type de configuration, nous avons effectué deux nouvelles recherches avec des cibles respectives de  $\alpha = 5.10^{10}$  et  $\alpha = 10^{11}$ . Sur la

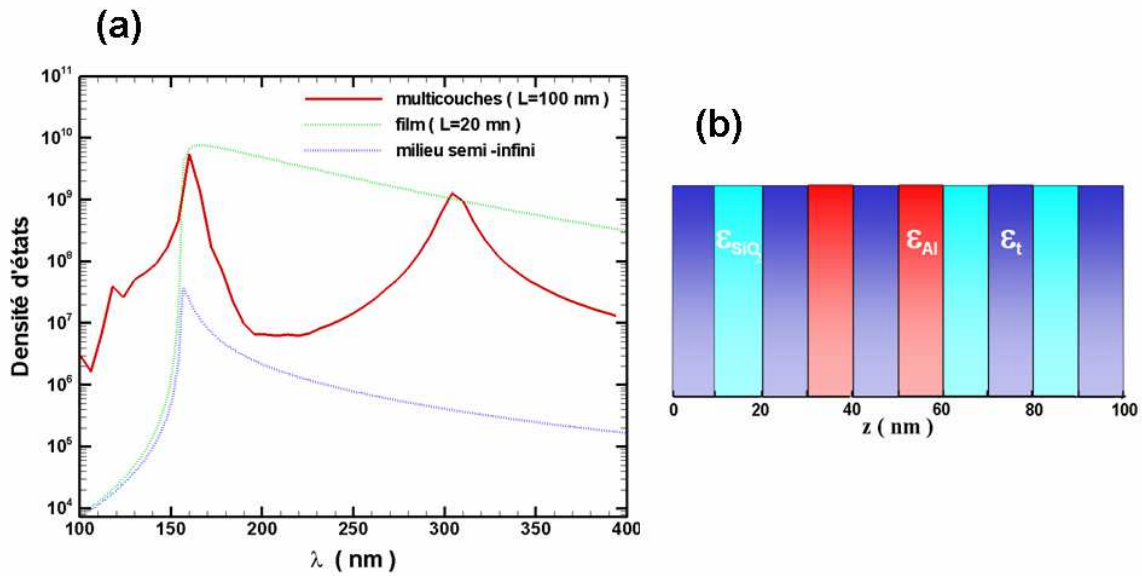


FIG. 8.2 – (a) Densité locale d'états des modes évanescents à  $z_2=10$  nm de la structure obtenue par le processus d'optimisation pour 1 génération (rouge), d'un film d'aluminium de 20 nm (vert) et du matériau massif (bleu). (b) Structure interne de la source thermique composée de 10 couches élémentaires d'aluminium, de verre et d'un deuxième matériau transparent, de  $h=10$  nm d'épaisseur, conçue par AG.

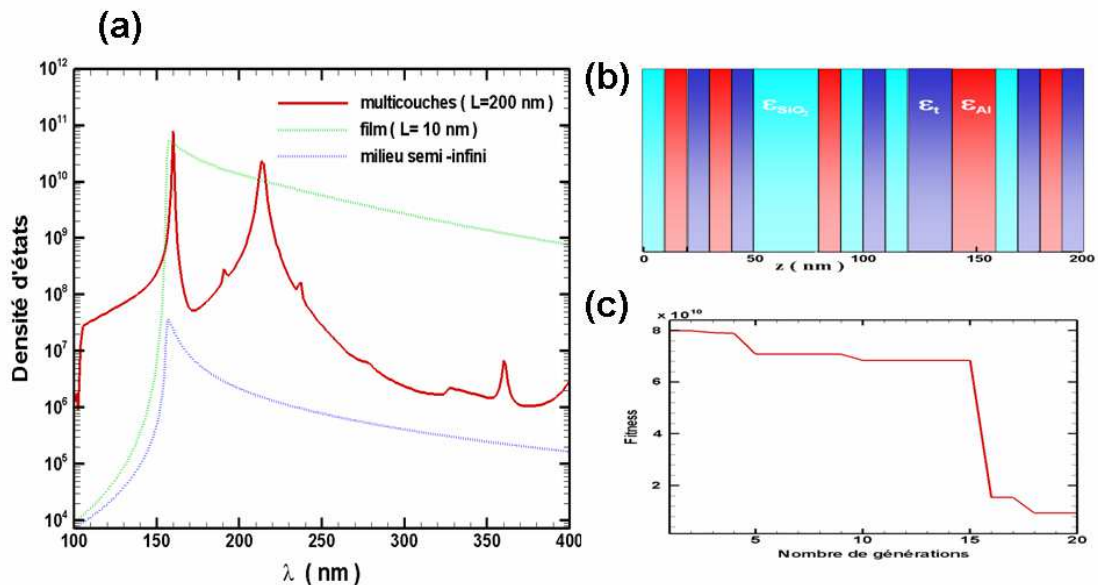


FIG. 8.3 – (a) Densité locale d'états des modes évanescents à  $z_2=10$  nm de la structure obtenue par AG pour 20 générations (rouge), d'un film d'aluminium de 20 nm (vert) et du matériau massif (bleu). (b) Structure interne de la source thermique composée de 20 couches élémentaires d'aluminium, de verre et d'un deuxième matériau transparent, de  $h=10$  nm d'épaisseur, conçue par AG. (c) Évolution de la fitness en fonction du nombre de générations ( $\alpha = 10^{11}$ ).

figure 8.4a on présente les LDOS obtenues à  $z_2 = 10$  nm de la surface après 30 générations. On constate alors que les structures générées sont identiques (*cf.* encart 8.4b) alors qu'aucune des deux cibles n'est atteinte. Le maximum de LDOS ( $\rho = 2.10^{10}$ ) est atteint, pour  $\alpha = 5.10^{10}$ , à la 7<sup>eme</sup> génération. [L'évolution de la fitness pour  $\alpha = 10^{11}$  est identique et n'est pas présentée ici]. On a ainsi pu mettre en évidence un seuil d'intensité pour la LDOS, pour ce type de configuration. Malheureusement, les temps de calculs (une semaine) n'ont pas permis de faire une étude paramétrique systématique pour identifier le nombre de couches, leur épaisseur, ni même le nombre d'individus optimums. D'autre part, elle n'a pas permis d'entreprendre une étude détaillée des mécanismes physiques qui sont à l'origine de cette exaltation de la LDOS. Pour cela il serait intéressant de calculer la LDOS au sein de la structure afin d'exhiber les modes et les mécanismes responsables de ces résultats. Il est cependant probable que des effets de couplage résonants des plasmon-polaritons supportés par les couches d'aluminium soient à l'origine de cette augmentation de la LDOS. Des effets analogues ont d'ailleurs été montrés très récemment par (Dahan et al., 2007) avec des cavités couplés.

Ces couplages des plasmons de surface ne sont cependant envisageables que lorsque la distance entre les couches d'aluminium est inférieure à la longueur d'atténuation de ces modes. Or on sait que ces longueurs d'atténuation dépendent de l'épaisseur des films d'aluminium (Burke et al., 1985; Dionne et al., 2005). En considérant dans un premier temps, les longueurs d'atténuation des ondes évanescentes à la surface de milieux semi-infinis, on disposera d'un ordre de grandeur de ces longueurs, ce qui nous permettra de vérifier si cette hypothèse du couplage entre plasmons de surface est fondée ou non. En appelant  $\delta_{SiO_2}$  et  $\delta_t$ , les longueurs

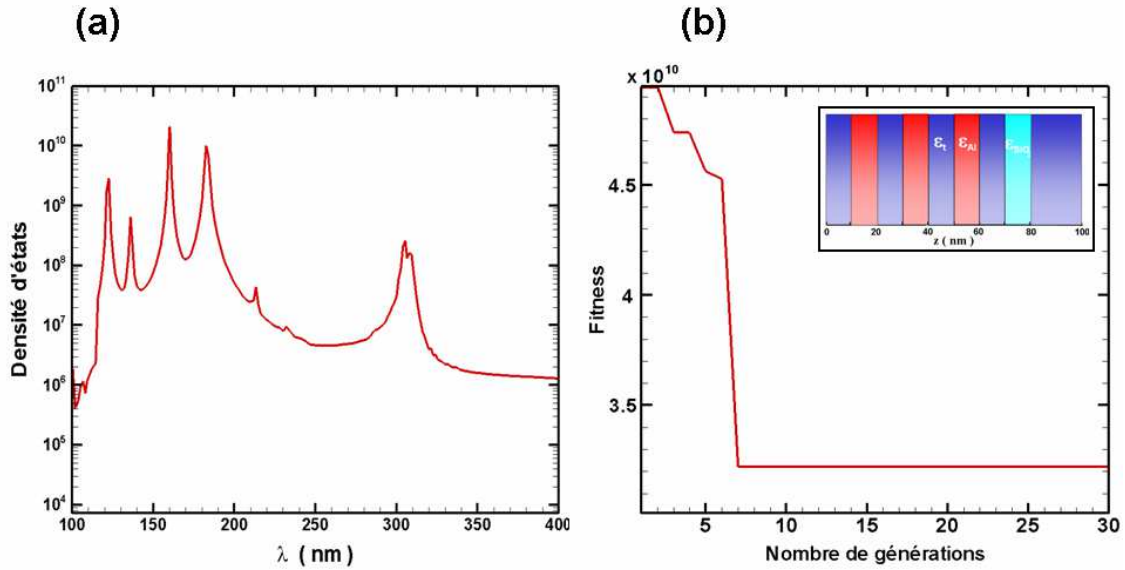


FIG. 8.4 – (a) Densité locale d'états des modes évanescents à  $z_2=10$  nm de la surface de la structure obtenue par AG après 30 générations lorsque  $\alpha = 5 * 10^{10}$  et  $\alpha = 10^{11}$ . (b) Évolution de la fitness en fonction du nombre de générations ( $\alpha = 5.10^{10}$ ). La structure présentée dans l'encart est le résultat du processus d'optimisation pour les deux cibles

d'atténuation ou épaisseur de peau des plasmons de surface de l'aluminium respectivement dans le verre et dans le deuxième matériau transparent, on a (*cf.* annexe E)

$$\delta_{SiO_2} = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{|\epsilon_{SiO_2} + \epsilon'_{Al}|}{\epsilon_{SiO_2}^2}} \quad (8.19)$$

$$\delta_t = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{|\epsilon_t + \epsilon'_{Al}|}{\epsilon_t^2}}, \quad (8.20)$$

où  $\varepsilon'_{Al}$  est la partie réelle de la constante diélectrique de l'aluminium. Or, À  $\lambda=160$  nm,  $\varepsilon'_{Al} = -1.2$ , de sorte que  $\delta_{SiO_2} = 11,5$  nm et  $\delta_t = 6$  nm. Si l'on compare ces longueurs aux échelles caractéristiques dans les structures générées par AG (fig. 8.3), on constate que les couches d'argent à droite de la structure sont séparées par deux couches de matériaux transparents et sont distantes de 20 nm. Cette distance est du même ordre de grandeur que la somme des épaisseurs de peau (*i.e.*  $\delta_{SiO_2} + \delta_t = 17,5$  nm). On peut alors supposer qu'un couplage entre les ondes de surface supportées par l'aluminium est possible. D'autre part, si de manière identique, on calcule  $\delta_{Al/SiO_2}$  et  $\delta_{Al/t}$  les longueurs d'atténuation des plasmons de surface dans l'aluminium lorsque ce matériau est en contact respectivement avec le verre et le deuxième matériau transparent, on obtient

$$\delta_{Al/t} = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{|\varepsilon'_{Al} + \varepsilon_t|}{\varepsilon'_{Al}}} = 80 \text{ nm} \quad (8.21)$$

$$\delta_{Al/SiO_2} = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{|\varepsilon'_{Al} + \varepsilon_{SiO_2}|}{\varepsilon'_{Al}}} = 260 \text{ nm}. \quad (8.22)$$

Ces deux longueurs de pénétration des plasmons dans l'aluminium sont beaucoup plus grandes que les épaisseurs des couches d'aluminium. Il semble dès lors légitime de penser qu'un deuxième type de couplage soit possible entre les ondes de surface de part et d'autre des couches d'aluminium. Cependant, si ces premiers ordres de grandeur permettent d'envisager des mécanismes de couplage entre plasmons de surface dans les structures multicouches obtenues par AG, seul le calcul de la LDOS au sein du matériau nanostructuré permettra de vérifier cette hypothèse.

## 8.4 Design inverse de sources thermiques cohérentes en champ proche à haute densité d'énergie

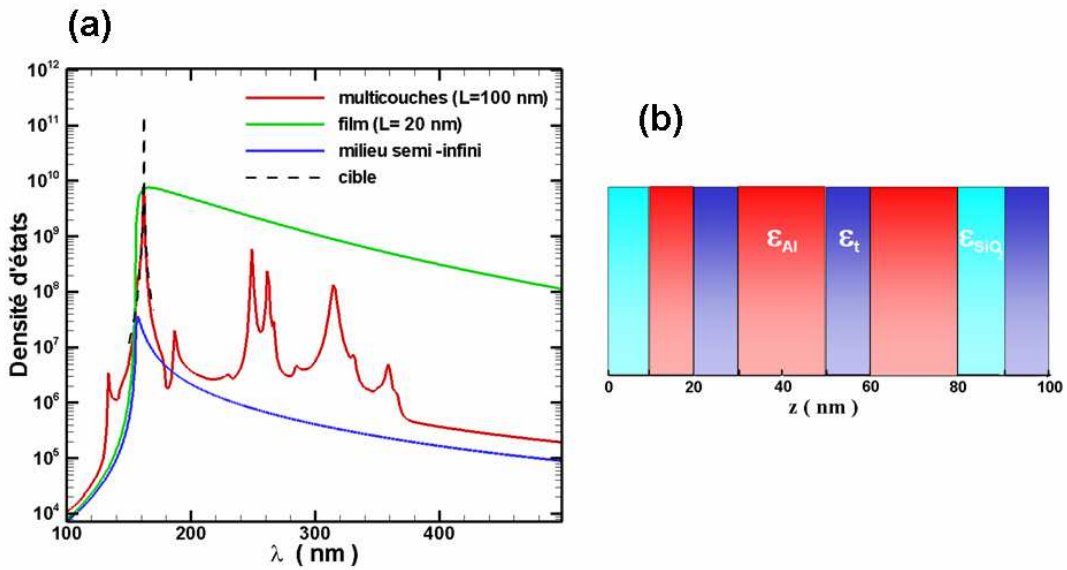


FIG. 8.5 – Densité locale d'états des modes évanescents à  $z_2=10$  nm de la structure composée de 10 couches élémentaires de  $h=10$  nm d'épaisseur d'aluminium, de verre et d'un  $2^{eme}$  matériau transparent, obtenue par AG après 5 générations, d'un film d'aluminium de 20 nm, du matériau massif et de la cible. (b) Structure interne de la source thermique.

Dans ce dernier paragraphe, nous présentons le design de sources thermiques cohérentes en champ proche. La densité locale d'états cible est définie sur le domaine spectral  $[\lambda_1 = 150 \text{ nm}, \lambda_2 = 170 \text{ nm}]$ , dans lequel les films élémentaires d'aluminium supportent des plasmons de surface. L'optimisation a été réalisée avec une population de 50 structures de  $N=10$  couches élémentaires d'épaisseur  $h=5 \text{ nm}$  ou  $h=10 \text{ nm}$ .

$$J = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} [\rho_{cible}(\lambda) - \rho_{calc}(\lambda)]^2 d\lambda \quad (8.23)$$

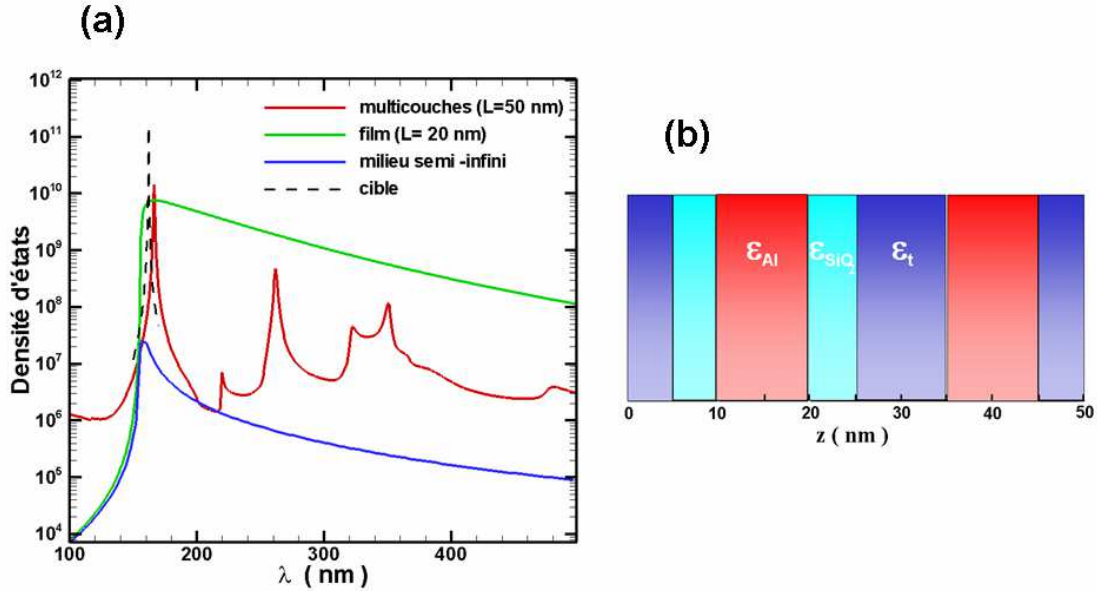


FIG. 8.6 – (a) Densité locale d'états des modes évanescents à  $z_2=10 \text{ nm}$  de la structure composée de 10 couches élémentaires de  $h=5 \text{ nm}$  d'épaisseur d'aluminium, de verre et d'un 2<sup>ème</sup> matériau transparent, obtenue par AG après 5 générations, d'un film d'aluminium de 20 nm, du matériau massif et de la cible. (b) Structure interne de la source thermique.

Sur les figures 8.6 et 8.5 est présentée la LDOS à  $z = 10 \text{ nm}$  des structures obtenues respectivement après 3 et 5 générations. Pour les deux études, on observe que les LDOS cible sont presque atteintes. Par ailleurs, le degré de cohérence du rayonnement émis par les deux structures en champ proche est nettement plus important que celui du matériau massif. De surcroît, l'intensité de l'émission de ces sources à  $\lambda^*=160 \text{ nm}$  est de 3 ordres de grandeur plus importante que celle de l'aluminium massif. Elle est même très légèrement supérieure à celle d'un film d'aluminium de 20 nm (*cf.* chap. 7).

## 8.5 Conclusion

La méthode de design ab-initio de sources thermiques cohérentes à haute densité d'énergie développée dans ce chapitre ouvre de nombreuses perspectives pour la conception de matériaux fonctionnalisés pour la conversion d'énergie en champ proche ou pour la nanolitographie. Elle a permis d'obtenir simultanément des sources dont le rayonnement présente un degré de cohérence spectral identique ou supérieur à celui émis par un matériau massif et dans le même temps d'obtenir des densités locales d'états électromagnétiques équivalentes à celle observée à la surface de films métalliques nanométriques. L'origine de l'amélioration du degré de cohérence spectral obtenue dans ce chapitre reste pour le moment inexplicé. Néanmoins, on peut aisément supposer, compte tenu des épaisseurs des couches qui compose la structure, que les plasmons de surface supportés par les couches d'aluminium sont susceptibles de se coupler. Pour vérifier cette hypothèse, il sera nécessaire de calculer la LDOS à l'intérieur de la source thermique.

# Conclusion de la partie III

---

Dans cette partie, nous nous sommes intéressé à l'émission thermique en champ proche de matériaux micro et nanostructurés. Pour réaliser cette étude, nous avons calculé la densité locale d'énergie électromagnétique à la surface de ces matériaux. Après avoir rappelé le formalisme des tenseurs de Green dans l'espace libre et dans un milieu semi-infini, nous avons déterminé les expressions de ces tenseurs dans le cas de milieux multicouches 1D. Nous avons aussi présenté la méthode des matrices de diffusion adaptée à notre étude. L'ensemble de ces outils nous a alors permis de calculer la densité locale d'énergie électromagnétique au dessus de films fins de carbure de silicium (matériau semi-conducteur) et de films fins d'aluminium (matériau métallique). Il est alors apparu que la densité d'énergie au dessus de ces films, à la fréquence de résonance des polaritons de surface, est exaltée de plusieurs ordres de grandeur par rapport à celle observée au dessus d'un matériau massif. Cependant, cette augmentation de l'intensité de la densité d'énergie s'accompagne aussi d'une perte de cohérence de l'émission thermique. Nous nous sommes alors appliqué à "récupérer" cette cohérence. Nous avons pour cela utilisé de nouveau le processus d'optimisation qu'est l'algorithme génétique. Malgré des temps de calcul extrêmement longs, les premiers résultats ont permis d'obtenir des densité locales d'états (LDOS) de fortes intensités. En outre, le degré de cohérence spectral de ces sources thermiques est bien plus grand que celui d'un film et il est même comparable, voir meilleur, que celui du matériau massif. Enfin, le développement futur d'un outil d'analyse pertinent tel que le calcul de la LDOS au sein de la structure devrait permettre d'exhiber les mécanismes physiques à l'origine de ces premiers résultats prometteurs.





# Conclusion générale

---

Dans ce travail nous avons introduit une méthode rationnelle pour le design inverse de matériaux nanostructurés pour la conception de sources thermiques cohérentes en champ lointain et en champ proche.

Le design en champ lointain repose sur l'utilisation combinée de la théorie des matrices de transfert et d'un procédé d'évolution par algorithme génétique. La technique mise en place a permis non seulement de concevoir de façon efficace des sources quasimonochromatiques dans l'infrarouge moyen et partiellement cohérentes dans l'infrarouge thermique et le proche infrarouge mais également d'identifier de nouveaux mécanismes de couplage mode propagatifs/modes évanescents qui sont à l'origine de la cohérence du champ électromagnétique. Ainsi nous avons montré qu'un guide de phonon-polaritons était capable de se coupler avec une onde propagative de façon omnidirectionnelle à travers une structure désordonnée. Nous avons également montré qu'une source dans notre structure pouvait posséder une bande interdite quasi complète sur une large gamme spectrale ce qui n'avait été observé par le passé que dans des milieux périodiques (cristaux photoniques) ou quasi-périodiques (quasi-cristaux). La conception de sources thermiques partiellement cohérentes en champ lointain a permis de montrer qu'il existe de multiples mécanismes pour contrôler la direction d'émission d'une source. Parmi les mécanismes identifiés, il y a le couplage directionnel entre des photons incidents et des états intriqués de plasmons de surface.

Le design en champ proche s'est fait quand à lui dans le cadre de l'électrodynamique fluctuatoire et de la théorie des matrices de diffusion. Beaucoup plus lourd à mettre en place, le design ab-initio en champ proche a livré de premiers résultats très prometteurs. Ces résultats reposent avant tout sur les observations que nous avons faites concernant le comportement radiatif des films minces en champ proche. En effet, on a pu établir que la densité d'énergie électromagnétique au voisinage de la surface d'un milieu borné de petite taille (de l'ordre de la longueur d'onde d'émission) pouvait dépasser de 2 à 3 ordres de grandeur celle mesurée à la surface d'un matériau massif. Cependant le gain en densité s'accompagne par une perte de cohérence spectrale. L'utilisation de la technique de design inverse développée dans cette thèse a permis de contourner cet obstacle. On a ainsi montré qu'il était possible d'augmenter de 1 à 2 ordres de grandeur la densité d'énergie électromagnétique à la surface d'un matériau multicouche nanostructuré par rapport à celle d'un film fin tout en conservant voir en améliorant le degré de cohérence spectral du rayonnement. Ces premiers résultats sont très encourageants mais de nouveaux développements sont nécessaires afin de pouvoir mettre en exergue les mécanismes physiques sous-jacents. Il serait ainsi intéressant d'étudier la densité d'énergie électromagnétique à l'intérieur de la structure. Tout comme l'étude de la distribution interne du champ électrique nous a permis de localiser les couplages ondes propagatives/ondes évanescentes en champ lointain, la distribution interne de la densité d'énergie nous permettrait de situer l'ensemble des modes évanescents présents au sein des structures obtenues. Ce calcul nécessite cependant de développer plus encore la théorie des matrices de diffusion présentée dans ce travail. Le design ab-initio de sources thermiques cohérentes en champ proche réalisé

dans cette thèse est extrêmement coûteux en temps de calcul. Pour remédier à ce problème, une parallélisation du code de calcul a été initiée. Les algorithmes génétiques se prêtent en effet très bien au calcul parallèle, les propriétés radiatives de chaque individu pouvant être estimées simultanément à chaque génération. Le gain de temps de calcul permettra alors de minimiser la fitness sur un domaine spectral plus large et ainsi d'éliminer les pics de densité d'énergie parasites observés à  $\lambda \neq \lambda^*$ .

Ces résultats laisse entrevoir de nombreuses perspectives de développement et d'applications notamment dans les nouvelles technologies de conversion d'énergie comme la conversion thermophotovoltaïque de champ proche mais également dans celui de la nanolitographie. Un autre développement envisageable est le design inverse de métamatériaux. Dans ce travail, nous nous sommes en effet limités au design de matériaux non magnétiques. Or, l'intégration de couches magnétiques devrait permettre de synthétiser des métamatériaux plans, c'est à dire des matériaux dont les permittivité diélectrique et perméabilité magnétique effectives sont simultanément négatives. Il sera alors possible d'améliorer le contrôle directionnel des sources thermiques multicouches en champ lointain et d'amplifier la densité d'énergie en champ proche. On peut aussi envisager de transposer les principes développés dans cette thèse à d'autres domaines comme la conversion thermoélectrique qui représente un enjeu majeur en énergétique. Contrairement au design de sources thermiques cohérentes il s'agirait ici de "sculpter" les propriétés de transport électrique et les propriétés de transfert de chaleur, le but étant d'améliorer le premier tout en inhibant le second.

# Modélisation des propriétés électromagnétiques des matériaux

---

Nous nous intéressons ici à la modélisation des propriétés électromagnétiques des différents matériaux que nous avons utilisé dans ce mémoire. Les propriétés électromagnétiques d'un matériau sont entièrement définies par sa constante (permittivité) diélectrique  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) = \varepsilon_r(\omega) - i\varepsilon_i(\omega)$  avec  $\varepsilon_i(\omega) > 0$ . Nous détaillerons donc ici les différents modèles de permittivité diélectrique existant suivant la classe de matériaux considérée dans ce travail (métaux, matériaux polaires et semi-conducteurs) .

## A.1 Les métaux

Un premier modèle simple, le modèle de Drude sans pertes (ou modèle plasma) décrit un métal comme un gaz d'électrons libres. En effet, les propriétés électriques d'un métal sont essentiellement liées aux électrons de conduction, c'est à dire aux électrons libres de se déplacer dans le cristal métallique. ce modèle prend la forme

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (\text{A.1})$$

où  $\omega_p$  est la pulsation plasma et est définie par

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m^*}. \quad (\text{A.2})$$

$N$  est le nombre d'électrons de conduction par unité de volume et  $m^*$  la masse effective des électrons de conduction (Kittel 1998). Cette masse effective rend compte de la capacité des électrons à se déplacer à l'intérieur du solide. On peut aussi définir la longueur d'onde plasma

$$\lambda_p = \frac{2\pi c}{\omega_p}. \quad (\text{A.3})$$

Ainsi, pour des métaux tels que l'argent ou le cuivre,  $N$  variant de  $10^{18}$  à  $10^{22}$  électrons par unité de volume,  $\lambda_p$  varie de quelques centaines de nanomètres à quelques dizaines de micromètres. Ainsi, la constante diélectrique donnée par ce modèle, suivant la longueur d'onde considérée, est réelle, positive ou négative, ce qui rend les métaux *classiques* très souvent opaques dans le visible et transparent dans l'ultraviolet. Avec un tel modèle, l'indice de réfraction  $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$  possède deux domaine distincts de variation

$$\begin{aligned} \text{pour } \omega \leq \omega_p, \varepsilon(\omega) \leq 0 \text{ et } n(\omega) &= i \sqrt{\frac{\omega_p^2}{\omega^2} - 1} \Rightarrow \text{réflexion totale} \\ \text{pour } \omega > \omega_p, \varepsilon(\omega) > 0 \text{ et } n(\omega) &= \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \Rightarrow \text{transmission} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Mais ce modèle de Drude sans perte ne prend pas en compte la relaxation des électrons pour des grandes longueurs d'ondes. On utilise alors le modèle de Drude avec perte défini par

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (\text{A.5})$$

où  $\gamma = 1/\tau > 0$ , est un facteur d'amortissement permettant de tenir compte des pertes dans le milieu,  $\tau$  étant un temps de relaxation électronique moyen.

Les expressions ci dessous des parties réelles et imaginaires de la permittivité diélectrique permettent de vérifier que les conventions choisies ( $\varepsilon''(\omega) < 0$ ) sont respectées

$$\varepsilon'(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \quad \varepsilon''(\omega) = \frac{-\omega_p^2\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (\text{A.6})$$

Le tableau ci-dessous donnent les valeurs de pulsations plasma et des facteurs d'amortissements de quelques métaux ( Ordal et al. (1983, 1985); Palik (1998)).

Métal	$10^{15} \times \omega_p (\text{rad.s}^{-1})$	$10^{13} \times \gamma (\text{s}^{-1})$
Ag	13.69	2.73
Al	17.47	7.596
Au	13.71	4.05
Cu	11.23	1.38

TAB. A.1 – Pulsations plasma et facteur d'amortissement de différents métaux

À titre d'exemple, nous avons tracé sur les figures A.1 à A.4 les parties réelles et imaginaires de la constante diélectrique et de l'indice de réfraction de l'argent en fonction de la longueur d'onde.

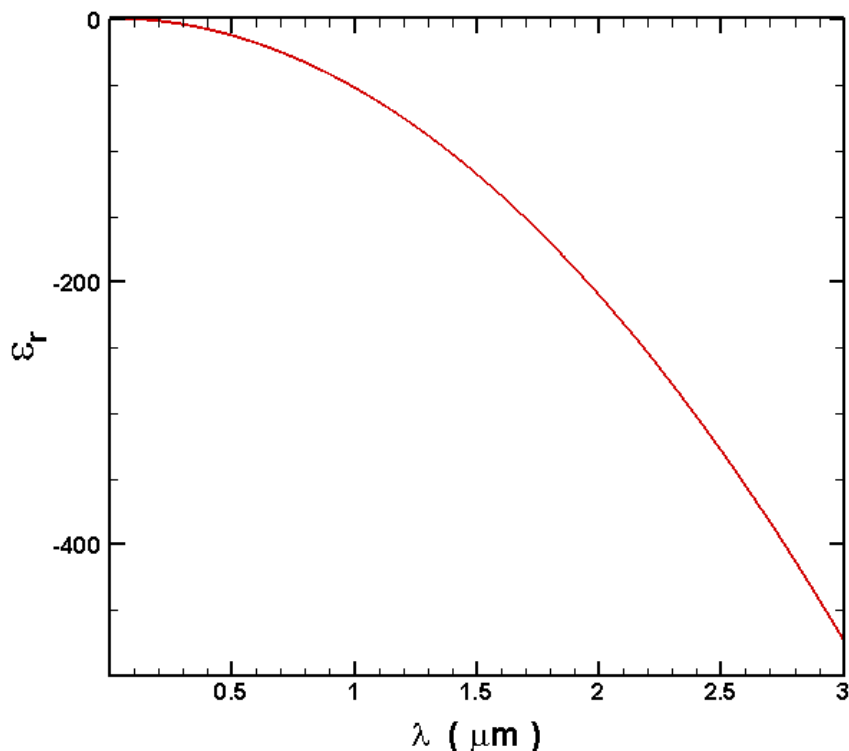


FIG. A.1 – Partie réelle de la constante diélectrique de l'argent.

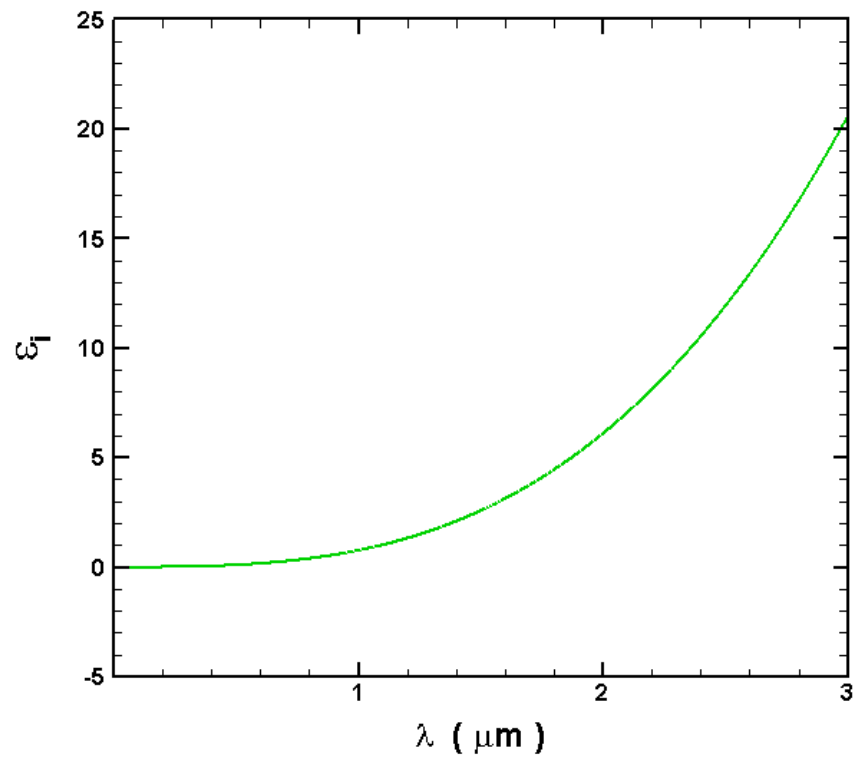


FIG. A.2 – Opposé de la partie imaginaire de la constante diélectrique de l'argent.

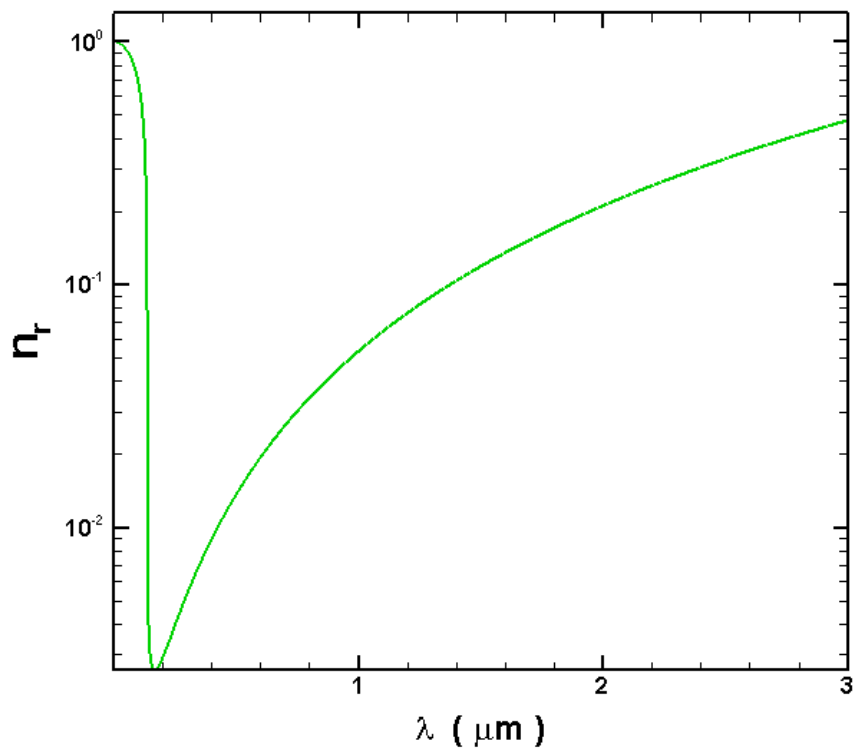


FIG. A.3 – Partie réelle de l'indice de réfraction de l'argent.

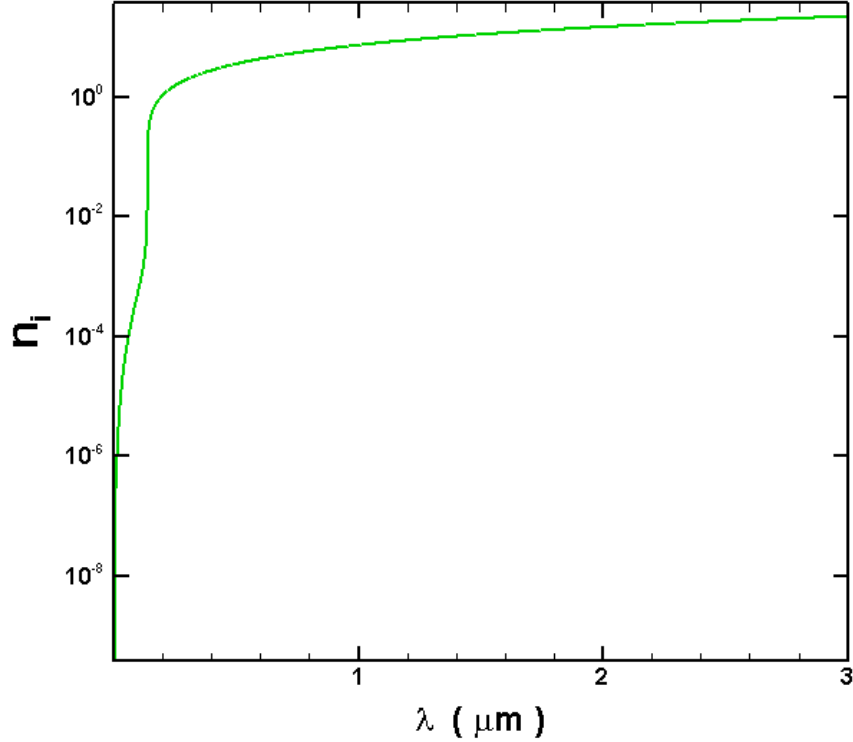


FIG. A.4 – Opposé de la partie imaginaire de l'indice de réfraction de l'argent.

Il est cependant nécessaire de noter que ce modèle ne reflète plus tout à fait la réalité dans le domaine des hautes fréquences - à partir de  $10^{15}$  environ - et ce à cause des transitions interbandes. Des données plus précises sont alors nécessaires. Celles-ci sont obtenues à partir de mesures optiques, spectroscopiques ou encore ellipsométriques et sont disponible sous forme tabulés [Palik 1985,1991,1998]. Sur la figure suivante, est représenté les parties réelles et imaginaires de l'indice de réfraction de l'argent obtenues par le modèle de Drude et par les données brutes tabulées. Les différences entre proviennent essentiellement du fait que la constante diélectrique s'écrit en réalité sous la forme

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (\text{A.7})$$

où  $\varepsilon_r(\omega)$  permet de prendre en compte la contribution des transitions interbandes aux hautes fréquences.

## A.2 Les matériaux polaires et les semi-conducteurs

La deuxième catégorie de matériaux que nous avons étudiés sont les cristaux polaires et les semi-conducteurs, matériaux qui ont les mêmes propriétés vis à vis d'un champ électromagnétique. Nous nous sommes plus particulièrement intéressé au semi-conducteur qu'est le carbure de silicium (SiC). Pour modéliser sa constante diélectrique, nous avons utilisé le modèle d'oscillateur de Lorentz, valable pour  $\omega$  compris entre  $10^{14}$  et  $10^{15}$  rad.s<sup>-1</sup>, soit une longueur d'onde comprise entre 2 et 16  $\mu\text{m}$ .

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left[ 1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right] \quad (\text{A.8})$$

où  $\varepsilon_\infty$  représente la contribution (pour les fréquences optiques) des ions du réseaux cristallins à la polarisation.  $\omega_L$  représente la fréquence d'oscillation des phonons optiques longitudinaux

et  $\omega_T$ , celle des phonons optiques transversaux. Comme précédemment pour les métaux,  $\Gamma$  est un facteur d'atténuation qui rend compte des pertes dans le matériau.

Pour le SiC,  $\varepsilon_\infty = 6.7$ ,  $\omega_L = 18.253 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ,  $\omega_T = 14.937 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$  et  $\Gamma = 89.66 \cdot 10^{10} \text{ rad.s}^{-1}$ .

Nous avons tracé sur les figures A.5 à A.8, les parties réelles et imaginaires de la constante diélectrique ainsi que de l'indice de réfraction du SiC en fonction de la fréquence.

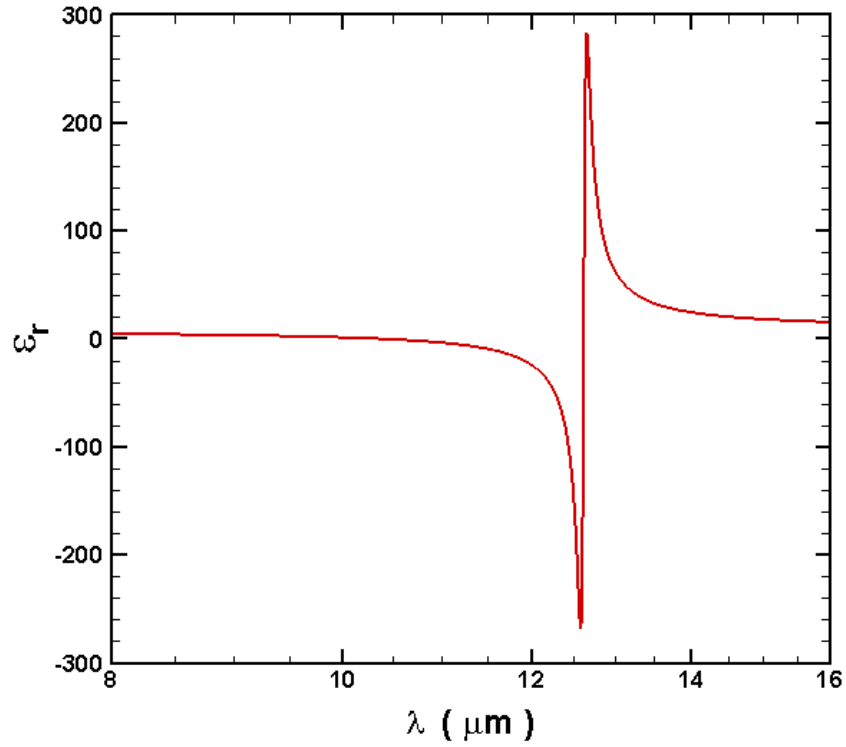


FIG. A.5 – Partie réelle de la constante diélectrique du SiC.



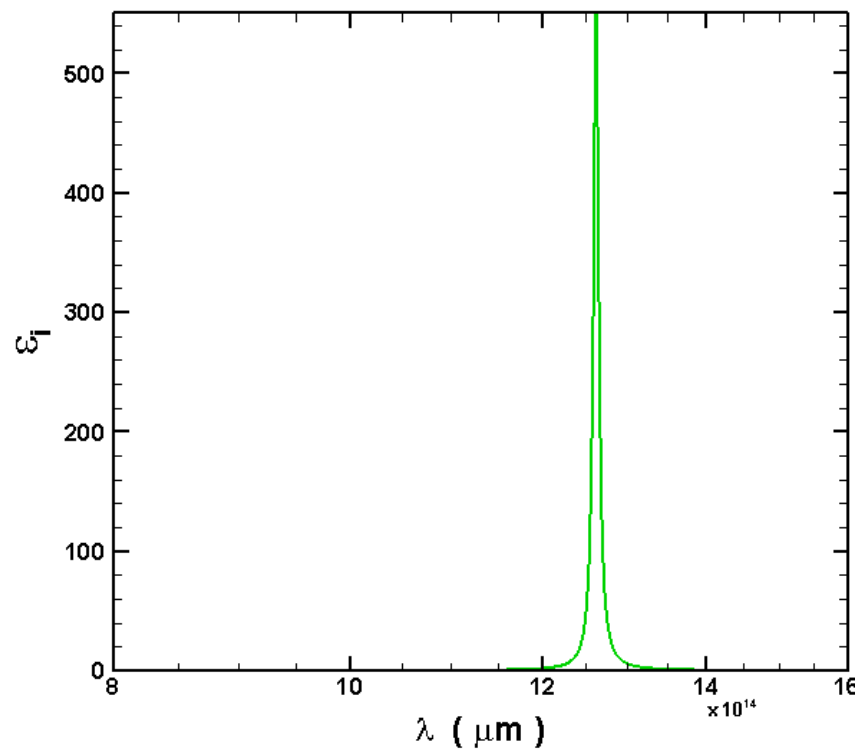


FIG. A.6 – Opposé de la partie imaginaire de la constante diélectrique du SiC.

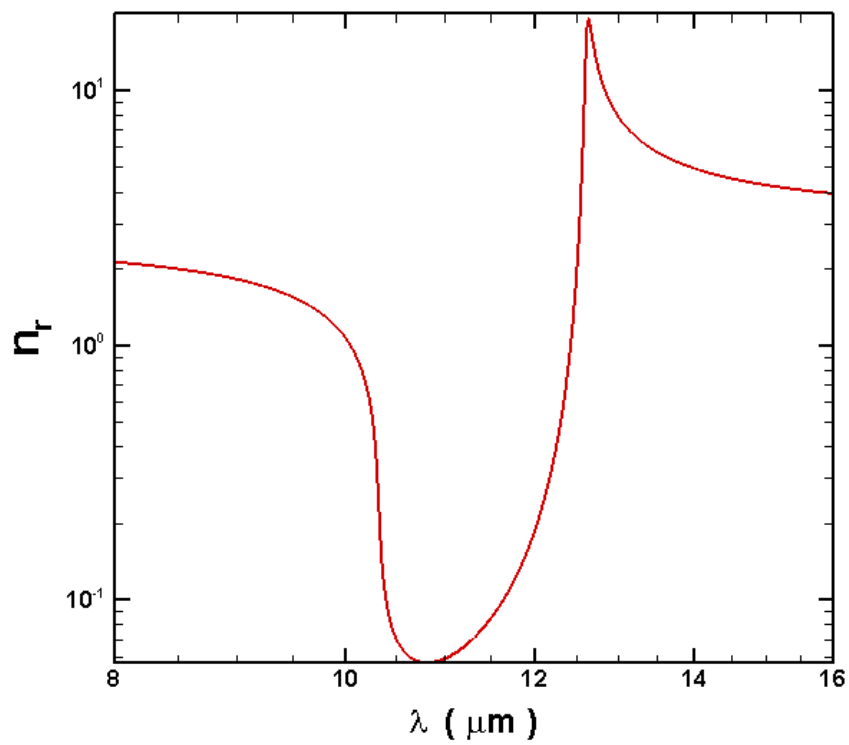


FIG. A.7 – Partie réelle de l'indice de réfraction du SiC.

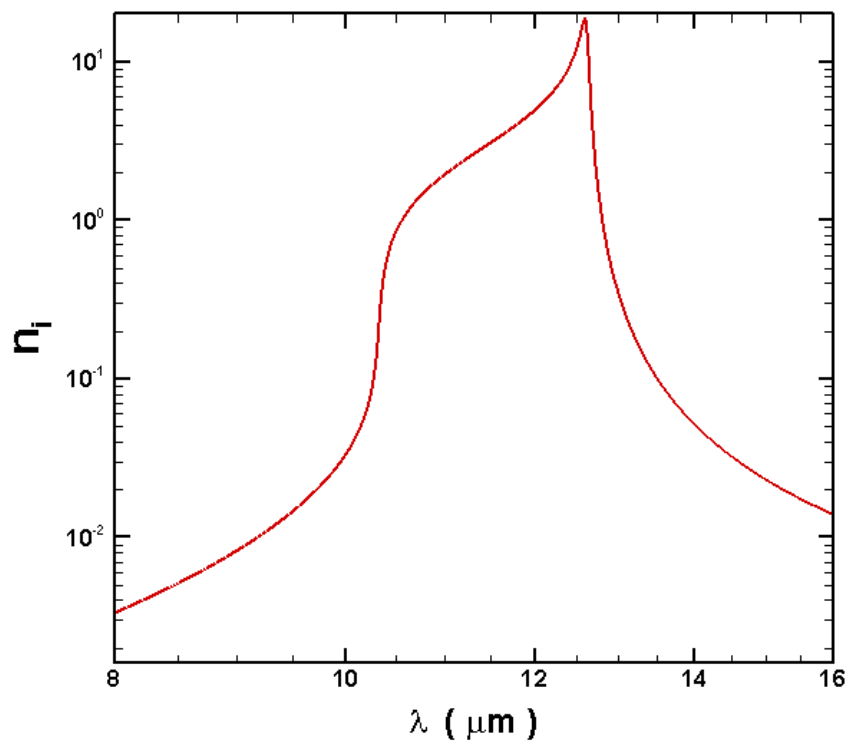


FIG. A.8 – Opposé de la partie imaginaire de l'indice de réfraction du SiC.



# Calcul du champ électrique par la méthode des matrices de transfert

Nous allons détailler dans cette annexe le calcul du champ électrique au sein d'une structure 1D à l'aide de la méthode des matrices de transfert. Nous étudierons tout d'abord le cas d'un film homogène puis nous généraliserons la méthode à un empilement multicouche.

## B.1 Cas d'un film homogène

Le système étudié est présenté sur la figure B.1. Pour calculer la distribution interne du

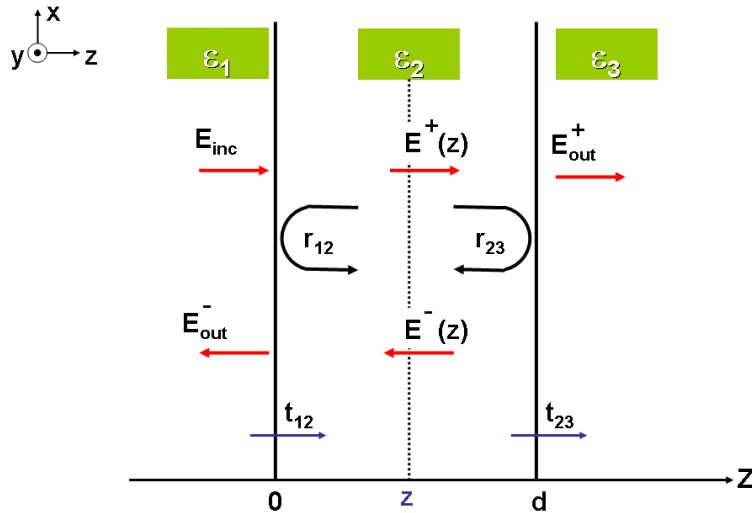


FIG. B.1 – Configuration géométrique du système.

champ électrique, il suffit de scinder en deux l'équation matricielle reliant les champs entrants et sortants de la couche, à la position  $z$  où l'on souhaite connaître le champ électrique  $E(z)$ . Pour le premier bloc, le champ incident traverse l'interface séparant les milieux 1 et 2 puis se propage dans la couche jusqu'au point d'abscisse  $z$ . Nous avons alors la relation matricielle suivante

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_{inc} \\ r E_{inc} \end{pmatrix} &= D_{12} P_{2z} \begin{pmatrix} E^+(z) \\ E^-(z) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{z2}z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z2}z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^+(z) \\ E^-(z) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Pour le deuxième bloc, l'onde se propage du point d'abscisse  $z$  jusqu'à l'interface séparant les milieux 2 et 3 et la traverse, ce qui nous donne

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} E^+(z) \\ E^-(z) \end{pmatrix} &= P_{2(d-z)} D_{23} \begin{pmatrix} t E_{inc} \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{t_{23}} \begin{pmatrix} e^{ik_{z2}(d-z)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z2}(d-z)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & r_{23} \\ r_{23} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t E_{inc} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})
 \end{aligned}$$

Ces deux relations permettent, indépendamment, d'exprimer le champ électrique  $E(z) = E^+ - E^-$  en fonction du champ incident  $E_{inc}$  et du coefficient de réflexion  $r$  (en considérant l'équation B.1), ou du coefficient de transmission  $t$  (en considérant l'équation B.2).

## B.2 Cas d'un système multicouche

Le système étudié est présenté sur la figure B.2. De manière analogue au cas d'une seule couche, il est nécessaire de scinder l'équation matricielle reliant les champs entrants et sortants du système, à la position  $z$  où l'on souhaite connaître le champ électrique.

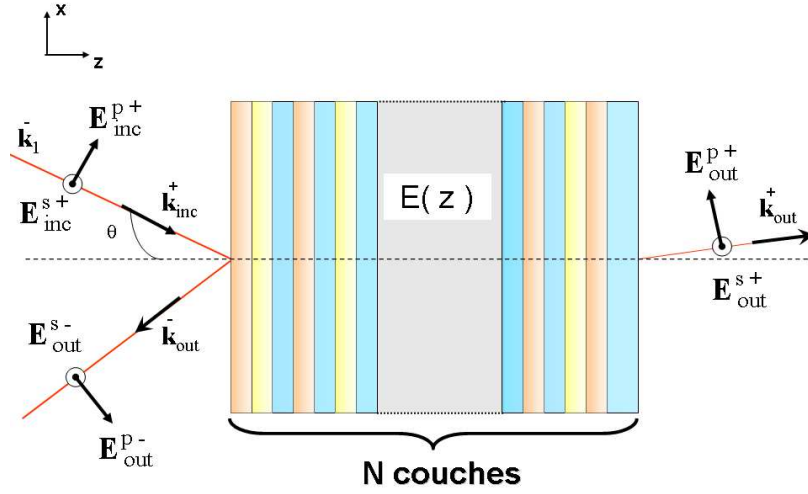


FIG. B.2 – Configuration géométrique du système.

Les champs entrants et sortants de la structure sont reliés par

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r(\lambda, \theta) \end{pmatrix} = \mathfrak{S}^k \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

où

$$\mathfrak{S}^N = \left( \prod_{j=0}^{N-1} T_{j,j+1} T_{j+1}^{pro} \right) T_{N,N+1}. \quad (\text{B.4})$$

$\mathfrak{S}^N$  est la matrice de transfert de la structure définie comme le produit des matrices de passage de l'interface entre les milieux  $i$  et  $j$ ,

$$T_{i,j} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

et les matrices de propagation dans les couches  $j$ ,

$$T_j^{pro} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_j} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

$j=0$  correspond au milieu semi-infini situé à gauche du système tandis que  $j=N+1$  correspond au milieu situé à droite. Il faut alors prendre en compte la matrice de transfert  $\mathfrak{S}^k$  définie entre l'entrée de la structure et la position  $z$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r(\lambda, \theta) \end{pmatrix} = \mathfrak{S}^k \begin{pmatrix} E_k^+(\lambda, \theta) \\ E_k^-(\lambda, \theta) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Cette relation nous permet ainsi d'obtenir une expression du champ électrique en fonction du coefficient de réflexion total du système et du champ électrique incident

$$E(z_0) = E_k^+ - E_k^- = \frac{\mathfrak{S}_{22}^k + \mathfrak{S}_{21}^k - r(\mathfrak{S}_{11}^k + \mathfrak{S}_{12}^k)}{\det \mathfrak{S}^k} \quad (\text{B.8})$$



## Rotationnel d'un tenseur d'ordre 2

---

Les relations entre les tenseur de Green électrique et magnétique font intervenir le rotationnel d'un tenseur d'ordre 2. Nous allons détailler ici le calcul de ce rotationnel dans le cas particulier des tenseurs de Green électrique et magnétiques.

Pour calculer le rotationnel d'un tenseur d'ordre 2, il est nécessaire de considérer chaque colonne de ce tenseur comme un vecteur de la base  $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ . Il faut alors calculer le rotationnel des vecteurs constitués de chaque colonne du tenseur.

### C.1 Cas du tenseur de Green électrique

Nous travaillons ici avec les composantes de Weyl des tenseurs de Green définies au paragraphe 6.2.3. Nous avons déterminé dans cette section que le tenseur de Green électrique pour un milieu multicouche monodimensionnel s'écrit sous la forme

$$\bar{\bar{g}}^E(z, z', K) = \begin{pmatrix} g_{11}^E & 0 & g_{13}^E \\ 0 & g_{22}^E & 0 \\ g_{31}^E & 0 & g_{33}^E \end{pmatrix}, \quad (\text{C.1})$$

avec

$$\bar{\bar{g}}_s^E(z, z', K) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

le tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{s}$  et

$$\bar{\bar{g}}_p^E(z, z', K) = \begin{pmatrix} g_{11}^E & 0 & g_{13}^E \\ 0 & 0 & 0 \\ g_{31}^E & 0 & g_{33}^E \end{pmatrix}, \quad (\text{C.3})$$

le tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{p}$ . Nous avons aussi déterminé (paragraphe 6.3) que les composantes de Weyl du tenseur magnétique peuvent être obtenues à partir de celles du tenseur électrique par la relation

$$\bar{\bar{g}}^H(z, z', K) e^{-iK(x-x')} = \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{\bar{g}}^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} \right]. \quad (\text{C.4})$$

En posant, pour des raisons de clarté de rédaction,

$$\bar{\bar{g}}_f(z, z', x, x', K) = \bar{\bar{g}}(z, z', K) e^{-iK.(x-x')}, \quad (\text{C.5})$$

nous obtenons alors

$$\bar{\bar{g}}_f^H(z, z', x, x', K) = \bar{\nabla} \wedge \left[ \bar{\bar{g}}_f^E(z, z', x, x', K) \right]. \quad (\text{C.6})$$



Détaillons maintenant le calcul du rotationnel des composantes de Weyl du tenseur de Green électrique

$$\nabla \wedge \left[ \bar{g}_f^E(z, z', x, x', K) \right] = \nabla \wedge \begin{pmatrix} g_{11_f}^E & 0 & g_{13_f}^E \\ 0 & g_{22_f}^E & 0 \\ g_{31_f}^E & 0 & g_{33_f}^E \end{pmatrix} = \nabla \wedge (\mathbf{V}_1 \ \mathbf{V}_2 \ \mathbf{V}_3), \quad (\text{C.7})$$

avec

$$\mathbf{V}_1 = \begin{pmatrix} g_{11_f}^E \\ 0 \\ g_{31_f}^E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ g_{22_f}^E \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V}_3 = \begin{pmatrix} g_{13_f}^E \\ 0 \\ g_{33_f}^E \end{pmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

Calculons maintenant le rotationnel de ces trois vecteurs

$$\nabla \wedge (\mathbf{V}_1) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} g_{31_f}^E \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{11_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{31_f}^E \\ -\frac{\partial}{\partial y} g_{11_f}^E \end{pmatrix}, \quad (\text{C.9})$$

$$\nabla \wedge (\mathbf{V}_2) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} g_{22_f}^E \\ 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} g_{22_f}^E \end{pmatrix}, \quad (\text{C.10})$$

et

$$\nabla \wedge (\mathbf{V}_3) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} g_{33_f}^E \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{13_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{33_f}^E \\ -\frac{\partial}{\partial y} g_{13_f}^E \end{pmatrix}. \quad (\text{C.11})$$

Sachant que  $\bar{g}_f^E(z, z', x, x', k_{//})$  ne dépend pas de la variable d'espace  $y$ , nous obtenons finalement

$$\nabla \wedge (\mathbf{V}_1) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{11_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{31_f}^E \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.12})$$

$$\nabla \wedge (\mathbf{V}_2) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} g_{22_f}^E \\ 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} g_{22_f}^E \end{pmatrix} \quad (\text{C.13})$$

et

$$\nabla \wedge (\mathbf{V}_3) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{13_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{33_f}^E \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.14})$$

Le rotationnel des composantes de Weyl du tenseur de Green électrique a alors pour expression

$$\nabla \wedge \left[ \bar{\bar{g}}_f^E(z, z', x, x', K) \right] = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} g_{22_f}^E & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{11_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{31_f}^E & 0 & \frac{\partial}{\partial z} g_{13_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{33_f}^E \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} g_{22_f}^E & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.15})$$

de sorte que, d'après la relation C.4, les composantes de Weyl du tenseur magnétique s'exprime, en fonction de celles du tenseur de Green électrique, sous la forme

$$\begin{aligned} \bar{\bar{g}}^H(z, z', K) e^{-iK(x-x')} &= \nabla \wedge \bar{\bar{g}}^E(z, z', K) e^{-iK(x-x')} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} g_{22_f}^E & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{11_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{31_f}^E & 0 & \frac{\partial}{\partial z} g_{13_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{33_f}^E \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} g_{22_f}^E & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Le tenseur de Green magnétique dans l'espace de Fourier spatial a donc quatre composantes non nulles

$$\bar{\bar{g}}^H(z, z', K) = \begin{pmatrix} 0 & g_{12}^H & 0 \\ g_{21}^H & 0 & g_{23}^H \\ 0 & g_{32}^H & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.17})$$

chacune pouvant se calculer à partir des dérivées spatiales des composantes de Weyl du tenseur de Green électrique.

## C.2 Cas du tenseur de Green magnétique

Nous allons maintenant appliquer le calcul du rotationnel d'un tenseur d'ordre 2 au tenseur de Green magnétique. En rappelant la relation entre les composantes de Weyl des tenseurs de Green magnétique et électrique, nous déterminerons alors explicitement le calcul des composantes de Weyl du tenseur électrique à partir des dérivées spatiales de celles du tenseur de Green magnétique. En suivant le même raisonnement qu'au paragraphe précédent, nous obtenons l'expression suivante pour le rotationnel de  $\bar{\bar{g}}^H(z, z', K)$

$$\nabla \wedge \bar{\bar{g}}^H(z, z', K) e^{-iK(x-x')} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} g_{21_f}^H & 0 & -\frac{\partial}{\partial z} g_{23_f}^H \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} g_{12_f}^H - \frac{\partial}{\partial x} g_{32_f}^H & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} g_{21_f}^H & 0 & \frac{\partial}{\partial x} g_{23_f}^H \end{pmatrix}. \quad (\text{C.18})$$

Or, nous avons déterminé (paragraphe 6.3) que les composantes de Weyl du tenseur électrique peuvent être obtenues à partir de celles du tenseur magnétique par la relation

$$\begin{aligned} \bar{\bar{g}}^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} &= \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left[ \nabla \wedge \left( \bar{\bar{g}}^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} \right) \right. \\ &\quad \left. - \bar{\bar{I}} \delta(z - z') e^{-iK.(x-x')} \right], \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

de sorte que

$$\bar{g}^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left[ \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} g_{21_f}^H & 0 & -\frac{\partial}{\partial z} g_{23_f}^H \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} g_{12_f}^H - \frac{\partial}{\partial x} g_{32_f}^H & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} g_{21_f}^H & 0 & \frac{\partial}{\partial x} g_{23_f}^H \end{pmatrix} - \delta(z - z') e^{-iK.(x-x')} \bar{I} \right] \quad (\text{C.20})$$

### C.3 Relations entre les tenseurs de Green suivant la polarisation

Si l'on regarde attentivement les relations entre les composantes de Weyl des tenseurs de Green magnétique et électrique, suivant la polarisation considérée, on peut remarquer que

$$\bar{g}_s^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} = \begin{pmatrix} 0 & g_{12_f}^H & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{32_f}^H & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} g_{22_f}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} g_{22_f}^E & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.21})$$

Les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique en polarisation  $\mathbf{s}$  sont donc obtenues à partir de celles du tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{s}$

$$\bar{g}_s^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} = \nabla \wedge \bar{g}_s^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')}. \quad (\text{C.22})$$

De manière identique, les composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique en polarisation  $\mathbf{p}$  sont obtenues à partir de celles du tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{p}$

$$\begin{aligned} \bar{g}_p^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ g_{21_f}^H & 0 & g_{23_f}^H \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} g_{11_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{31_f}^E & 0 & \frac{\partial}{\partial z} g_{13_f}^E - \frac{\partial}{\partial x} g_{33_f}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

de sorte que,

$$\bar{g}_p^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} = \nabla \wedge \bar{g}_p^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} \quad (\text{C.24})$$

De même, l'équation C.20 indique que, en polarisation  $\mathbf{s}$

$$\begin{aligned} \bar{g}_s^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22_f}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} g_{12_f}^H - \frac{\partial}{\partial x} g_{32_f}^H & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \delta(z - z') e^{-iK.(x-x')} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

soit,

$$\bar{g}_s^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left[ \nabla \wedge \bar{g}_s^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} - \delta(z - z') e^{-iK.(x-x')} \mathbf{e}_y \mathbf{e}_y \right] \quad (\text{C.26})$$

et, en polarisation  $\mathbf{p}$ ,

$$\begin{aligned} \bar{g}_p^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} &= \begin{pmatrix} g_{11}^E & 0 & g_{13}^E \\ 0 & 0 & 0 \\ g_{31}^E & 0 & g_{33}^E \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left[ \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} g_{21_f}^H & 0 & -\frac{\partial}{\partial z} g_{23_f}^H \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} g_{21_f}^H & 0 & \frac{\partial}{\partial x} g_{23_f}^H \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. - \delta(z - z') e^{-iK.(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{C.27}) \end{aligned}$$

soit,

$$\bar{g}_p^E(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} = \frac{1}{k_0^2 \varepsilon(z)} \left[ \nabla \wedge \bar{g}_p^H(z, z', K) e^{-iK.(x-x')} - \delta(z - z') e^{-iK.(x-x')} (\mathbf{e}_x \mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z) \right]. \quad (\text{C.28})$$

On remarque alors que le calcul du rotationnel des composantes de Weyl des tenseurs de Green conserve la polarisation de l'onde. Ainsi, la connaissance des composantes de Weyl du tenseur de Green électrique en polarisation  $\mathbf{s}$  ( $\bar{g}_s^E$ ) et des composantes de Weyl du tenseur de Green magnétique en polarisation  $\mathbf{p}$  ( $\bar{g}_p^H$ ), obtenues à l'aide des matrices de diffusion, puis l'utilisation des relations C.22 et C.28 nous permettront alors d'avoir l'ensemble des composantes de Weyl des tenseurs de Green. Il sera alors possible de calculer la densité d'énergie électromagnétique totale.



# Calcul des termes $Al_j$ et $Cl_j$ du champ électrique pour l'étude de la densité d'énergie au dessus d'un film mince et d'une structure multicouche

---

Nous considérons ici le problème de l'émission thermique dans le vide à une distance  $z_2$  d'une structure monodimensionnelle. Il s'agit plus particulièrement du calcul détaillé des champs électrique et magnétique au point d'observation  $z_2$  induit par l'émission d'un champ unitaire par une source de courant au point  $z_1$ . La première section se rapporte au cas d'un film mince traité au chapitre 7. Les champs  $Al_j$  et  $Cl_j$  ( $j=e$  ou  $h$ ) seront alors calculés par la méthode des matrices de transfert. La deuxième section concerne l'obtention de ces mêmes champs mais dans le cas du calcul de la densité d'énergie électromagnétique au dessus d'une structure multicouche (chap. 8). L'expression des champs  $Al_j$  et  $Cl_j$  sera alors déterminée par la méthode des matrices de diffusion.

## D.1 Cas d'un film mince

Le calcul de la densité d'énergie électromagnétique à une distance  $z_2$  au dessus d'un film fin nécessite le calcul des termes  $Al_e$  et  $Cl_e$  du champ électrique. Le système étudié est représenté sur la figure D.1.

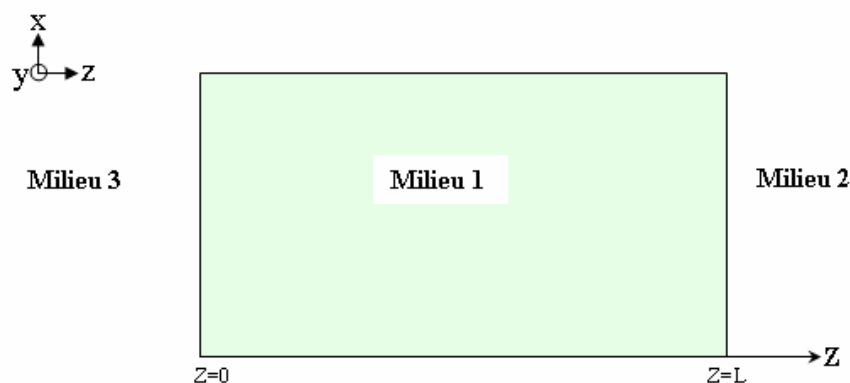


FIG. D.1 – Géométrie du système étudié.

Pour une source émettant vers la gauche (fig. D.2), la théorie des matrices de transfert nous

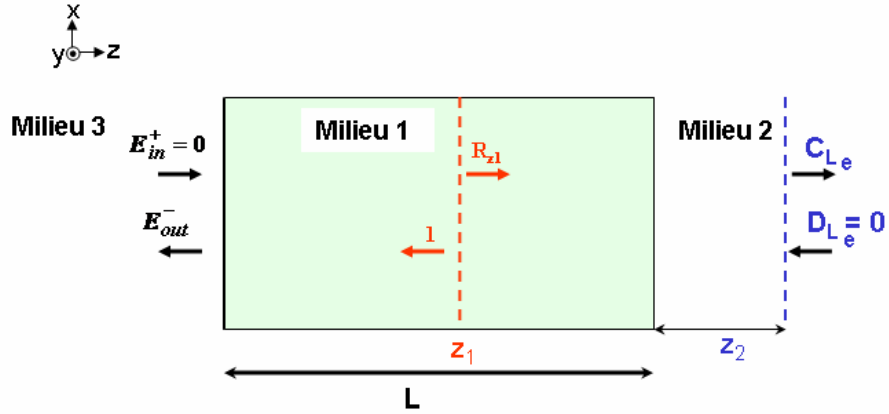


FIG. D.2 – Calcul du coefficient  $Cl_e$  du champ électrique au point d'observation  $z_2$  induit par une source au point  $z_1$  qui émet un champ électrique unitaire vers la gauche.

donne la relation matricielle suivante

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 \\ E_{out}^- \end{pmatrix} &= \frac{1}{t_{31}} \begin{pmatrix} 1 & r_{31} \\ r_{31} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_1} z_1} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z_1} z_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{z_1} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{t_{31}} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_1} z_1} & -r_{12} e^{-ik_{z_1} z_1} \\ -r_{12} e^{ik_{z_1} z_1} & e^{-ik_{z_1} z_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{z_1}^+ \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (D.1)$$

On obtient ainsi l'expression du champ au point source  $z_1$  se propageant vers la droite, après réflexion du champ unitaire émis au même point vers la gauche

$$R_{z_1}^+ = -r_{31} e^{-2i k_{z_1} z_1} \quad (D.2)$$

et

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} R_{z_1}^+ \\ 1 \end{pmatrix} &= \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_1}(L-z_1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z_1}(L-z_1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_2} z_2} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z_2} z_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Cl_e \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} e^{i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1}(L-z_1)]} & r_{12} e^{-i[k_{z_2} z_2 - k_{z_1}(L-z_1)]} \\ r_{12} e^{i[k_{z_2} z_2 - k_{z_1}(L-z_1)]} & e^{-i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1}(L-z_1)]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Cl_e \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (D.3)$$

De sorte que, en rappelant les relations de réciprocité des coefficients de réflexion de Fresnel

$$r_{13} = -r_{31}, \quad (D.4)$$

le champ  $Cl_e$  au point d'observation  $z_2$  se propageant vers la droite, suite à une émission au point source  $z_1$  vers la gauche, s'exprime alors sous la forme

$$Cl_e = t_{12} r_{13} e^{-i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1}(L+z_1)]}. \quad (D.5)$$

Pour une source unitaire émettant vers la droite (fig. D.3), nous avons les relations suivantes, en termes de matrices de transfert

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ R_{z_1}^- \end{pmatrix} &= \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_1}(L-z_1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z_1}(L-z_1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & r_{31} \\ r_{31} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{z_2} z_2} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z_2} z_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} e^{i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1}(L-z_1)]} & r_{12} e^{-i[k_{z_2} z_2 - k_{z_1}(L-z_1)]} \\ r_{12} e^{i[k_{z_2} z_2 - k_{z_1}(L-z_1)]} & e^{-i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1}(L-z_1)]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{l_e} \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (D.6)$$

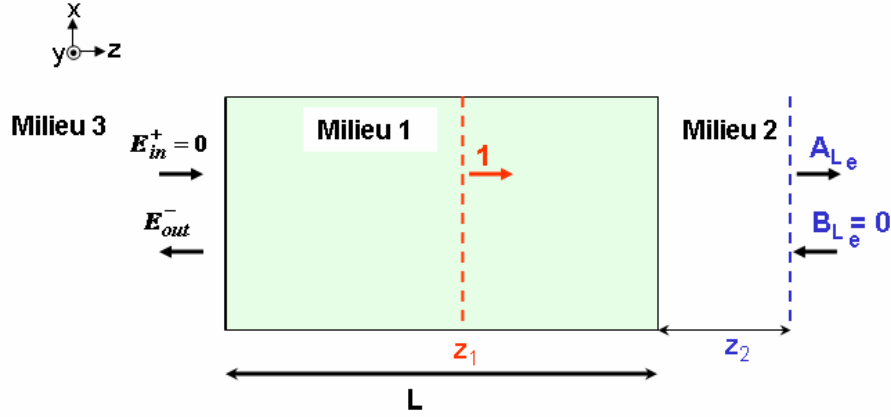


FIG. D.3 – Calcul du coefficient  $A_{l_e}$  du champ électrique au point d'observation  $z_2$  en polarisation  $s$  induit par une source au point  $z_1$  qui émet un champ électrique unitaire vers la droite.

De sorte que, le champ  $A_{l_e}$  au point d'observation  $z_2$  se propageant vers la droite, suite à une émission au point source  $z_1$  vers la droite, s'exprime alors sous la forme

$$A_{l_e} = t_{12} e^{-i[k_{z_2} z_2 + k_{z_1} (L - z_1)]}. \quad (\text{D.7})$$

## D.2 Cas d'un milieu multicouche

Pour calculer les composantes de Weyl des tenseurs de green électrique et magnétique, il est nécessaire de connaître les coefficients  $A_{l_j}$ ,  $B_{l_j}$ ,  $C_{l_j}$  et  $D_{l_j}$  ( $j = e$  ou  $h$ ) des champs électrique et magnétique pour les deux états de polarisation  $s$  et  $p$ .

Ces coefficients représentent les champs au point d'observation  $z_2$  lorsqu'une source unitaire rayonne dans le milieu vers la gauche ou vers la droite. Pour obtenir, au point d'observation  $z_2$  le champ électrique  $E(z)$  du à l'excitation d'une source au point  $z_1$ , il est nécessaire de scinder l'étude en deux selon le sens de propagation de l'onde issue de la source. Le premier cas correspond au calcul du champ noté  $C_{l_j}$  pour une source émettant vers la gauche (fig. D.4).

Considérons la matrice de diffusion reliant les amplitudes de champs à l'entrée de la première couche de notre structure  $(\xi_0, \eta_0)$ , à celles dans la  $j^{\text{ème}}$  couche  $(\xi_j, \eta_j)$  (couche où se situe le point source).

$$\begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_0 \end{pmatrix} = S(0, j) \begin{pmatrix} \xi_0 \\ \eta_j \end{pmatrix}. \quad (\text{D.8})$$

Aucun champ n'est appliqué à l'extérieur de la structure, de sorte que :  $\xi_0 = 0$ . La relation matricielle ci-dessus se simplifie alors en

$$\xi_j = S_{12}(0, j) \eta_j \quad (\text{D.9})$$

$$\eta_0 = S_{22}(0, j) \eta_j. \quad (\text{D.10})$$

Par ailleurs l'amplitude  $\eta_j$  du champ, qui résulte de la propagation vers la gauche de l'onde d'amplitude unitaire provenant du point source  $z_1$  à travers la couche  $j$  a pour expression

$$\eta_j = e^{-ik_{z_j}(z_1 - z_{j-1})}. \quad (\text{D.11})$$



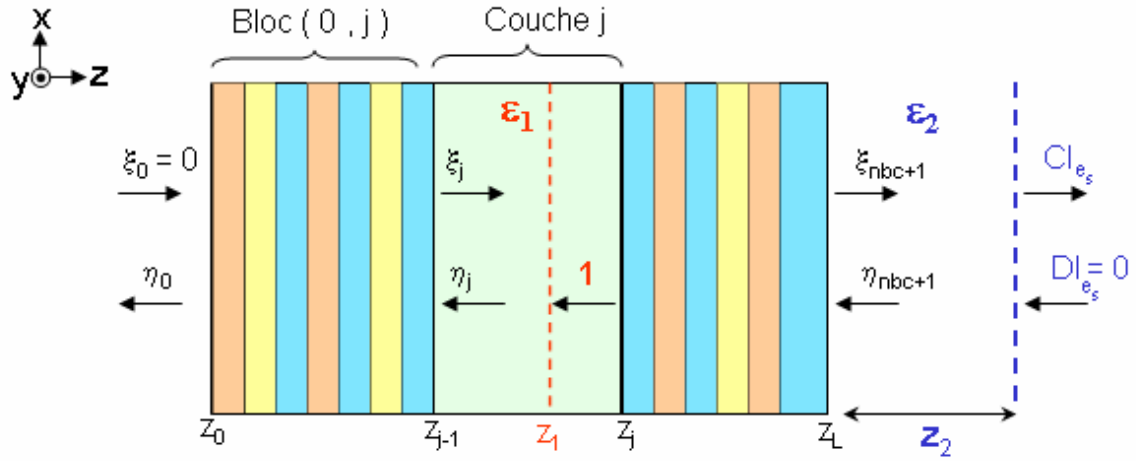


FIG. D.4 – Calcul du coefficient  $Cl_{e_s}$  du champ électrique au point d'observation  $z_2$  en polarisation  $s$  induit par une source au point  $z_1$  qui émet un champ unitaire vers la gauche.

Nous en déduisons alors, d'après D.9 et D.10 les amplitudes sortantes du champ pour le bloc  $(0, j)$  en fonction des coefficients de la matrice de diffusion correspondante

$$\xi_j = S_{12}(0, j) e^{-ik_{z_j}(z_1 - z_{j-1})} \quad (D.12)$$

$$\eta_0 = S_{22}(0, j) e^{-ik_{z_j}(z_1 - z_{j-1})} \quad (D.13)$$

Pour obtenir le terme  $Cl_{e_s}$  du champ électrique, il faut maintenant relier les amplitudes du champ de la  $j^{ieme}$  couche aux amplitudes  $\xi_{nbc+1}$  et  $\eta_{nbc+1}$  du champ, à l'extrémité droite de la structure. Pour cela, nous considérons la matrice de diffusion  $S(j, nbc + 1)$  du bloc complémentaire au bloc  $(0, j)$  ( $nbc$  étant le nombre de couches de la structure).

$$\begin{pmatrix} \xi_{nbc+1} \\ \eta_j \end{pmatrix} = S(j, nbc + 1) \begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_{nbc+1} \end{pmatrix} \quad (D.14)$$

Cette fois encore aucun champ ne se propage de l'extérieur vers la structure, de sorte que  $\eta_{nbc+1} = 0$ . La relation matricielle ci-dessus se simplifie donc et en reprenant l'expression de l'amplitude  $\xi_j$  définie plus haut (D.12), l'amplitude du champ à l'extérieur de la structure qui se propage vers la droite s'écrit sous la forme

$$\xi_{nbc+1} = S_{11}(j, nbc + 1) S_{12}(0, j) e^{-ik_{z_j}(z_1 - z_{j-1})}. \quad (D.15)$$

En outre, le coefficient  $Cl_{e_s}$  associé au champ électrique se propageant vers la droite a pour expression

$$Cl_{e_s} = \xi_{nbc+1} e^{-ik_{z_{nbc+1}} z}, \quad (D.16)$$

ce qui donne finalement, d'après la relation D.15

$$Cl_{e_s} = S_{11}(j, nbc + 1) S_{12}(0, j) e^{-i(k_{z_{nbc+1}} z_2 + k_{z_j}(z_1 - z_{j-1}))}. \quad (D.17)$$

Nous allons maintenant nous intéresser au calcul du coefficient  $Al_{e_s}$  du champ électrique au point d'observation  $z_2$ , induit par l'émission d'un champ unitaire vers la droite d'une source placée en  $z_1$  (figure D.5). Pour cela, il est nécessaire de relier les amplitudes du champ dans la  $j^{\text{ème}}$  couche à celles sortant de la structure. En considérant la matrice de diffusion  $S(j, nbc+1)$ , nous avons alors

$$\xi_j = e^{+ik_{z_j}(z_1-z_{j-1})} \quad (\text{D.18})$$

et,

$$\begin{pmatrix} \xi_{nbc+1} \\ \eta_j \end{pmatrix} = S(j, nbc+1) \begin{pmatrix} \xi_j \\ \eta_{nbc+1} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.19})$$

où  $\eta_{nbc+1} = 0$ . On obtient alors, en remplaçant  $\xi_j$  dans la relation matricielle ci-dessus par son expression donnée en D.18, l'amplitudes  $\xi_{nbc+1}$  du champ à l'extérieur de la structure et qui se propage vers la droite

$$\xi_{nbc+1} = S_{11}(j, nbc+1) e^{+ik_{z_j}(z_1-z_{j-1})}. \quad (\text{D.20})$$

Or, le coefficient  $Al_{e_s}$  peut s'exprimer sous la forme

$$Al_{e_s} = \xi_{nbc+1} e^{-ik_{z_{nbc+1}} z_2}, \quad (\text{D.21})$$

de sorte que, d'après la relation D.20,

$$Al_{e_s} = S_{11}(j, nbc+1) e^{-i(k_{z_{nbc+1}} z_2 - k_{z_j}(z_2 - z_{j-1}))}. \quad (\text{D.22})$$

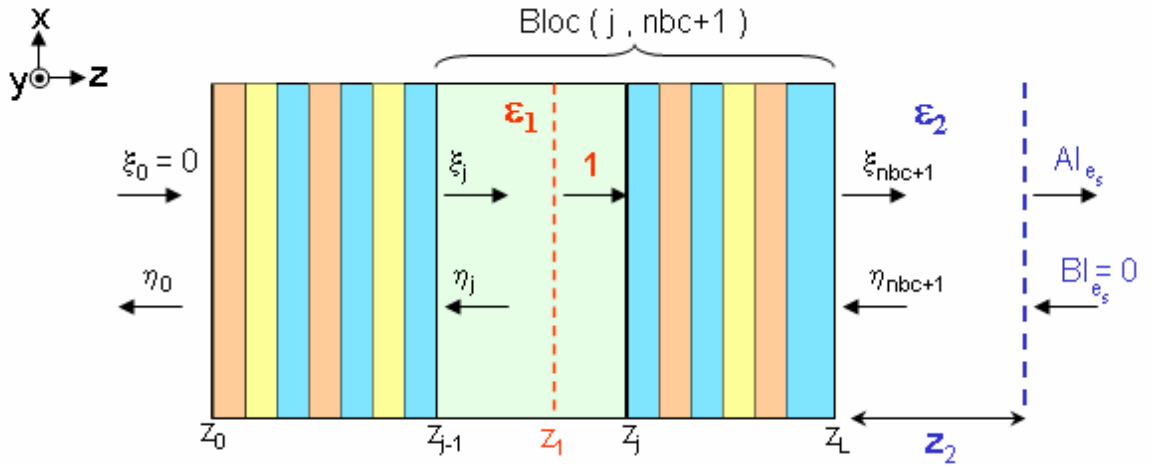


FIG. D.5 – Calcul du coefficient  $Al_{e_s}$  du champ électrique au point d'observation  $z_2$  en polarisation  $s$  induit par une source au point  $z_1$  qui émet un champ unitaire vers la droite.

Nous utilisons de nouveau la méthode des matrices de diffusion pour calculer les composantes du champ magnétique. La démarche étant identique à celle utilisée pour le champ électrique, nous ne détaillons pas les calculs et donnons directement les résultats.

Le coefficient  $Cl_{h_p}$  associé au champ magnétique en polarisation  $p$  lorsque la source en  $z_1$  émet vers la gauche de la structure, a pour expression :

$$Cl_{h_p} = S_{11}(j, nbc+1) S_{12}(0, j) e^{-i(k_{z_{nbc+1}} z_2 + k_{z_j}(z_1 - z_{j-1}))}. \quad (\text{D.23})$$

Quant au coefficient  $Al_{h_p}$  du champ magnétique qui correspondant au cas où la source émet vers la droite de la structure, il a pour expression

$$Al_{h_p} = S_{11}(j, nbc + 1) e^{-i(k_{z_{nbc+1}} z_2 - k_{z_j}(z_1 - z_{j-1}))}. \quad (\text{D.24})$$

Les expressions des matrices  $S(j, nbc + 1)$  et  $S(0, j)$  pour le champ magnétique sont bien évidemment différentes de celles utilisées pour l'obtention du champ électrique (*cf.* chap. 6.4).

# Introduction à la physique des polaritons

---

Cette annexe concerne les polaritons et plus particulièrement les polaritons de surface. Nous commencerons par un bref rappel sur la physique des polaritons de volume, ce qui nous permettra d'aborder plus facilement les phénomènes physiques liés aux polaritons de surface. Les polaritons de surface résultent du couplage entre une onde électromagnétique (donc un photon) et un plasmon dans le cas d'un métal (on parle alors de plasmon-polariton) ou un phonon optique dans le cas d'un cristal polaire (on parle alors de phonon-polariton). Ces polaritons de surface apparaissent à l'interface de deux milieux. Ils ont la particularité d'être caractérisés par un champ électromagnétique qui est maximum à l'interface, se propage le long de celle-ci et dont l'amplitude décroît exponentiellement lorsque l'on s'éloigne perpendiculairement à l'interface. C'est cette spécificité électromagnétique qui leur a donné le nom d'ondes de surface ou ondes évanescentes. Nous verrons donc ici qu'elles sont les conditions d'existence à l'interface entre deux milieux semi-infinis de ces ondes de surface en résolvant les équations de Maxwell pour ce type d'onde. Nous en déduirons leur relation de dispersion dans le cas d'une interface plane séparant un métal ou un cristal du vide.

## E.1 Les polaritons de volume

### E.1.1 Relation de dispersion pour les ondes électromagnétiques

Considérons un milieu infini, homogène, linéaire et isotrope, non magnétique, caractérisé, d'un point de vue électromagnétique, par sa constante diélectrique  $\varepsilon(\omega)$ . En résolvant les équations de Maxwell pour un champ électromagnétique de pulsation  $\omega$ , nous obtenons la relation dispersion

$$\mathbf{k} = k^2 = (k' + ik'')^2 = \mu_0 \varepsilon_0 \omega^2 \varepsilon(\omega). \quad (\text{E.1})$$

Cette relation de dispersion nous permet de décrire le comportement d'ondes électromagnétiques dans le milieu en fonction de la valeur de la permittivité diélectrique (Kittel, 1972) :

1. Si  $\varepsilon$  est réel et positif, pour  $\omega$  réel, le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  est réel. On sera donc en présence d'une onde transverse se propageant sans atténuation dans le milieu. Les matériaux caractérisés par une telle permittivité diélectrique sont dit *transparent* puisque l'onde se propage sans être perturbée par le milieu qu'elle traverse.
2. Si  $\varepsilon$  est réel et négatif, pour  $\omega$  réel, le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  est alors imaginaire pur. L'onde est alors évanescente avec une longueur d'atténuation de  $1/k''$ .
3. Si  $\varepsilon$  est complexe : pour  $\omega$  réel, le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  est complexe. L'onde peut alors se propager, avec une atténuation dans le milieu.

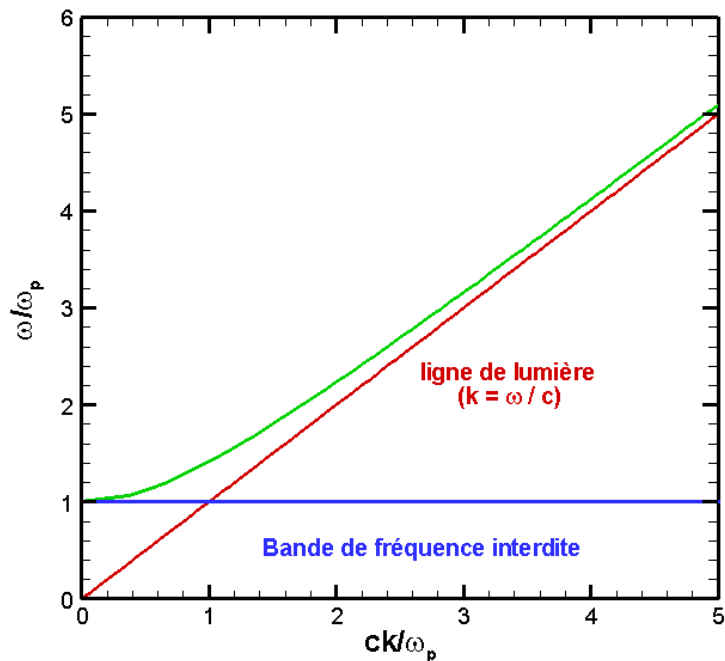


FIG. E.1 – Relation de dispersion pour les polaritons de volume dans un métal sans pertes. Matériau considéré : aluminium.  $\omega_p = 17.47 \cdot 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$ .

### E.1.2 Les plasmon-polaritons de volume

Le gaz d'électrons libres dans un métal peut être vu comme un plasma, c'est à dire un *gaz* d'électrons libres de se déplacer. Les oscillations collectives de ce plasma sont à l'origine de modes optiques dits longitudinaux qui se propagent dans le sens des oscillations (Kittel, 1972). Cette oscillation a une énergie qui est quantifiée et ce quantum d'énergie est appelé plasmon. Ce milieu peut être décrit par une constante diélectrique

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (\text{E.2})$$

où  $\omega_p$ , est appelée pulsation plasma. Ce modèle de permittivité diélectrique est connu sous le nom de modèle de Drude d'un métal sans perte. La relation de dispersion des modes électromagnétiques dans ce milieu est alors

$$c^2 k^2 = \omega^2 - \omega_p^2 \quad (\text{E.3})$$

Cette relation de dispersion est donnée sur la figure E.1. Pour  $\omega < \omega_p$ , aucune onde ne peut se propager dans le plasma. Inversement, pour  $\omega > \omega_p$ , une onde transverse peut se propager sans atténuation dans le milieu.

Un plasmon peut par exemple être excité par un champ électrique. Considérons le milieu schématisé sur la figure E.2. Au repos, le plasma est constitué d'électrons et d'ions positifs en même proportion. Si ce milieu est soumis à un champ électrostatique les électrons vont se mettre en mouvement et se déplacer par rapport aux charges positives restées immobiles. Une fois le champ électrostatique coupé, un champ électrique est présent dans le métal et il va mettre en mouvement les charges et donc amorcer une oscillation. L'onde électromagnétique entraînant l'oscillation de plasma est ce qu'on appelle un plasmon-polariton.

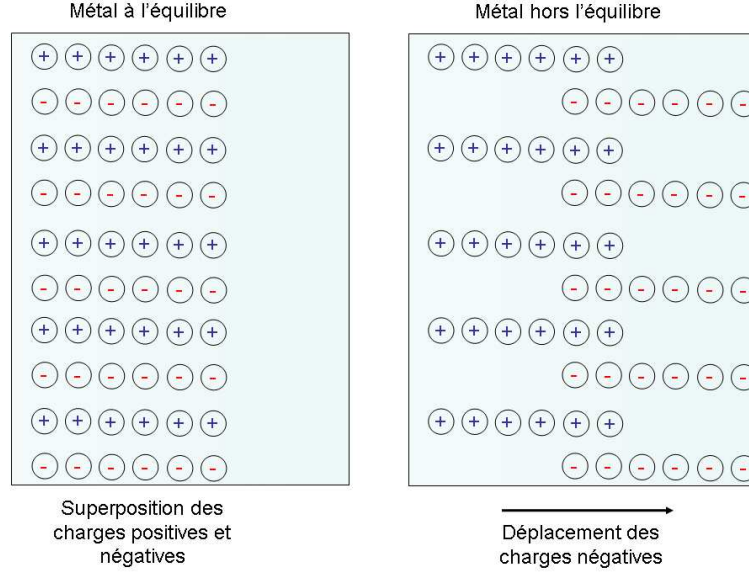


FIG. E.2 – Schématisation de la création de plasmon -polariton de volume sous l'effet d'un champ électrique.

### E.1.3 Les phonon-polaritons de volume

Après avoir vu l'interaction entre un plasmon (quantum d'énergie dans un métal) et un photon (quantum d'énergie électromagnétique), nous allons détailler celle entre ce même photon et un phonon qui est un quantum d'énergie de vibration du réseau cristallin. Les phonons sont associés aux ondes élastiques qui se propagent dans un cristal. Il existe des phonons longitudinaux où la vibration se fait parallèlement à la propagation et les phonons transverses où la vibration se fait cette fois perpendiculairement au vecteur d'onde. Pour un cristal monoatomique, il existe donc un phonon acoustique longitudinal et deux phonons acoustiques transverses (Kittel, 1972). La relation de dispersion présente alors trois branches distinctes, une pour chaque mode. Pour les cristaux possédant plus d'un atome par maille élémentaire de nouvelles branches apparaissent dans la relation de dispersion. On parle alors de phonons optiques. Dans un cristal polaire tel que le SiC ou le NaCl, les atomes peuvent créer des dipôles oscillants et ainsi se coupler au champ électromagnétique. Ce couplage phonon-photon est appelé phonon-polariton. Cette interaction entre un phonon optique transverse et un photon peut être modélisé par une permittivité diélectrique définie par :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left[ 1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right] \quad (\text{E.4})$$

où  $\varepsilon_\infty$  représente la contribution (pour les fréquences optiques) des ions du réseaux cristallins à la polarisation.  $\omega_L$  représente la fréquence d'oscillation des phonons optiques longitudinaux et  $\omega_T$ , celle des phonons optiques transversaux. Ce modèle de permittivité diélectrique est appelé modèle d'oscillateur de Lorentz.

## E.2 Les polaritons de surface

Nous allons décrire ce que sont les polaritons de surface dans le cas particulier d'une interface plane séparant deux milieux de permittivité diélectrique  $\varepsilon_1(\omega)$  et  $\varepsilon_2(\omega)$ . Ces milieux sont linéaires, isotropes, homogènes et non magnétiques. Pour un point  $\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$ , on notera :  $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$ ,  $\mathbf{R}$  étant la composante du vecteur parallèle au plan (x-y). Nous définissons le champ électrique d'une onde plane sous la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E} \exp[-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}] = \mathbf{E} \exp[-i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{R} + k_z z)] \quad (\text{E.5})$$

avec  $\mathbf{K}$ , la composante parallèle du vecteur d'onde et  $k_z$ , celle perpendiculaire. Elle est alors définie telle que :

$$k_z^2 = k_0^2 \varepsilon(\omega) - K^2 \quad \text{avec} \quad \text{Im}(k_z) < 0 \quad \text{et} \quad \text{Re}(k_z) > 0 \quad \text{si} \quad \text{Im}(k_z) = 0. \quad (\text{E.6})$$

Nous définissons aussi la permittivité diélectrique  $\varepsilon$  sous la forme

$$\varepsilon(\omega) = \mathbf{Re}[\varepsilon(\omega)] + i \mathbf{Im}[\varepsilon(\omega)] = \varepsilon_r(\omega) - i \varepsilon_i(\omega) \quad \text{avec} \quad \varepsilon_i(\omega) > 0. \quad (\text{E.7})$$

Pour déterminer les conditions d'existence des polaritons de surface nous allons résoudre le problème électromagnétique en cherchant les solutions des équations de Maxwell pour des ondes se propageant parallèlement à l'interface et dont l'amplitude décroît exponentiellement en s'éloignant perpendiculairement à l'interface. Nous distinguerons pour cela les ondes suivant leur polarisation  $\mathbf{s}$  ou  $\mathbf{p}$ .

### Polarisation $\mathbf{s}$

En polarisation  $\mathbf{s}$ , seule la composante orthogonale  $E_y$  du champ électrique est non nulle

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_{y1} \mathbf{e}_y \exp(-i(Kx - k_{z1} z)) \quad z < 0 \quad (\text{E.8})$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_{y2} \mathbf{e}_y \exp(-i(Kx + k_{z2} z)) \quad z > 0 \quad (\text{E.9})$$

En considérant la continuité des composantes tangentielles dans champs électrique et magnétique à l'interface, nous avons les relations de continuité suivantes :

$$E_{y1} = E_{y2} \quad (\text{E.10})$$

$$E_{y1} k_{z1} = -E_{y2} k_{z2}, \quad (\text{E.11})$$

de sorte que

$$k_{z1} + k_{z2} = 0, \quad (\text{E.12})$$

Or d'après la définition de la composante perpendiculaire du vecteur d'onde,  $\text{Im}(k_{z1})$  et  $\text{Im}(k_{z2})$  sont de même signe et par conséquent la relation E.12 n'a pas de solution : aucune onde de surface ne peut exister à l'interface.

### Polarisation $\mathbf{p}$

En polarisation  $\mathbf{p}$ , la composante orthogonale  $E_y$  du champ électrique est nulle

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = (E_{x1} \mathbf{e}_x + E_{z1} \mathbf{e}_z) \exp(-i(Kx - k_{z1} z)) \quad z < 0 \quad (\text{E.13})$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = (E_{x2} \mathbf{e}_x + E_{z2} \mathbf{e}_z) \exp(-i(Kx + k_{z2} z)) \quad z > 0 \quad (\text{E.14})$$

La continuité des composantes tangentielles nous dit que

$$E_{x1} = E_{x2} \quad (\text{E.15})$$

Nous nous sommes de plus placé dans un milieu homogène et non chargé, donc :  $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0$  ce qui nous donne une relation entre les composantes tangentielles et orthogonales

$$E_{z1} = -\frac{K}{k_{z1}} E_{x1} \quad (\text{E.16})$$

$$E_{z2} = -\frac{K}{k_{z2}} E_{x2} \quad (\text{E.17})$$

nous savons aussi que

$$\varepsilon_1 E_{z_1} = \varepsilon_2 E_{z_2} \quad (\text{E.18})$$

Les équations E.15 à E.18 nous donnent alors une condition sur  $k_{z_1}$  et  $k_{z_2}$  pour qu'une onde évanescente existe qui est

$$\varepsilon_2 k_{z_1} + \varepsilon_1 k_{z_2} = 0 \quad (\text{E.19})$$

En substituant  $k_{z_1}$  et  $k_{z_2}$  par leur expression en fonction de  $K$ , nous obtenons la relation de dispersion des ondes de surface en polarisation  $\mathbf{p}$  (Raether, 1988)

$$K = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1(\omega)\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega)}} \quad (\text{E.20})$$

Considérons maintenant le cas particulier où le milieu 2 est un milieu sans perte de constante diélectrique  $\varepsilon_2$  réelle. La relation E.19 nous donne une première condition d'existence des polaritons de surface :

$$\varepsilon_1(\omega) < 0, \quad (\text{E.21})$$

et la relation de dispersion E.20 nous donne une condition supplémentaire d'existence de polaritons de surface :

$$\mathbf{Re}(\varepsilon_1) < -\varepsilon_2 \quad (\text{E.22})$$

Si de plus on considère que le milieu 2 est constitué d'air, de permittivité diélectrique  $\varepsilon_0 = 1$ , la relation de dispersion devient :

$$K = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1(\omega)}{\varepsilon_1(\omega) + 1}} \quad (\text{E.23})$$

et il faut alors que la partie réelle de la permittivité du milieu "actif" soit inférieure à -1 pour que des ondes évanescentes puissent apparaître à l'interface séparant le milieu du vide.

### E.2.1 Les plasmon-polaritons de surface

Nous venons de montrer qu'une onde évanescente ne peut exister à une interface plane séparant de l'air d'un milieu de permittivité  $\varepsilon(\omega)$  qu'en polarisation  $\mathbf{p}$  et si  $\mathbf{Re}[\varepsilon(\omega)] < -1$ . Nous allons donc étudier ces conditions d'existence pour un métal dont la constante diélectrique est modélisée par le modèle de Drude sans perte

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (\text{E.24})$$

Ce modèle de permittivité nous indique que des ondes de surface peuvent apparaître pour  $\omega < \omega_p/\sqrt{2}$ . Notons aussi, que dans ces conditions, la valeur de la composante parallèle du vecteur d'onde  $K$  est alors supérieur à  $\omega/c$ . Nous retrouvons ainsi qu'en mode évanescent, la composante orthogonale du vecteur d'onde est un imaginaire pur, négatif<sup>1</sup>  $k_z = i \text{Im}(k_z) < 0$  et que l'onde est bien exponentiellement décroissante dans la direction  $z$  perpendiculaire à l'interface.

Réécrivons maintenant la relation de dispersion E.23 pour ce modèle de Drude sans perte

$$K = \frac{k_0}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{(\omega - \omega_p)(\omega + \omega_p)}{(\omega - \omega_p/\sqrt{2})(\omega + \omega_p/\sqrt{2})}} \quad (\text{E.25})$$

Cette relation de dispersion est représentée sur la figure E.3. On remarque que

<sup>1</sup>pour un milieu d'indice de réfraction réel uniquement, dans le cas d'un indice complexe,  $k_z$  est complexe



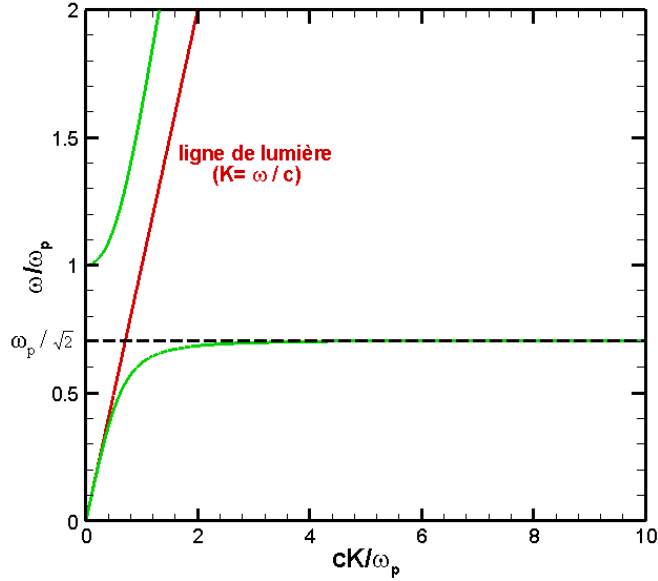


FIG. E.3 – Relation de dispersion pour les phonon-polaritons de volume dans un cristal dipolaire de carbure de silicium ( $\omega_L=18.253 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ,  $\omega_T=14.937 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ,  $\omega_{sup}=17.851 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ).

1. Si  $\omega \ll \omega_p$ ,  $K = \omega/c$ , qui est la relation de dispersion d'un photon dans le vide.
2. Si  $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$ ,  $K \rightarrow \infty$ , et on a alors une asymptote horizontale pour la relation de dispersion représenté dans le plan  $(K,\omega)$ .

La branche apparaissant pour  $\omega > \omega_p$  ne peut être associée aux plasmon-polaritons de surface. Elle est en effet au dessus de la ligne de lumière et correspond par conséquent à une onde propagative. Seule la branche en dessous de  $\omega_p$  est associée à une onde évanescente.

Il est important de noter que dans cette étude nous avons considéré un métal sans pertes avec une permittivité diélectrique réelle. Dans le cas général qui prend en compte les pertes dans le matériau,  $\varepsilon(\omega)$  est complexe et le problème se complique. Il faut en effet considérer un  $\omega$  et un  $K$  complexe pour obtenir les conditions d'existence des ondes de surface. Mais le nombre d'inconnues étant supérieur au nombre d'équations disponibles, il faut alors considérer séparément les cas  $\omega$  réel,  $K$  complexe et inversement  $\omega$  complexe et  $K$  réel. Néanmoins la relation de dispersion que nous venons de déterminer permet de mettre en exergue un comportement caractéristique des plasmons de surface : un branche linéaire proche du cône de lumière et une branche asymptotique qui dépend de la fréquence plasma du matériau considéré.

### E.2.1.1 Extension spatiales des champs

Nous allons ici donner une expression de la longueur de pénétration (aussi appelée épaisseur de peau) des plasmons de surface dans les deux milieux. Pour cela, il est nécessaire d'introduire la distinction entre les ondes propagatives et les ondes évanescentes. Cette distinction se fait sur la nature du vecteur d'onde orthogonal  $k_{z_i}$ . Pour des milieux non dissipatifs et non magnétiques, nous avons

Si  $K < k_0\sqrt{\varepsilon}$  : ondes propagatives alors  $k_z = \text{Re}(k_z) = |k_z|$  et  $\text{Im}(k_z) = 0$

Si  $K > k_0\sqrt{\varepsilon}$  : ondes évanescentes alors  $k_z = i \text{Im}(k_z) = i|k_z|$  et  $\text{Im}(k_z) < 0$

En régime évanescent, le vecteur d'onde s'exprime alors sous la forme

$$k^2 = k_0^2 \varepsilon = K^2 + (ik_z)^2, \quad (\text{E.26})$$

soit,

$$k^2 = K^2 - k_z^2. \quad (\text{E.27})$$

De même, le champ électrique peut se mettre sous la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E} e^{-k_{z1} z_1} e^{-i K x} \quad z < 0 \quad (\text{E.28})$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E} e^{+k_{z2} z_2} e^{-i K x} \quad z > 0, \quad (\text{E.29})$$

où  $e^{\pm k_{z_i} z_i}$  ( $i=1,2$ ) traduisent l'évanescence des ondes électriques dans les deux milieux. L'épaisseur de peau peut alors être caractérisée par la longueur

$$\delta_i = -1/k_{z_i} \quad k_{z_i} < 0.$$

En considérant les équations E.19 et E.26, on peut exprimer les composantes  $k_{z_i}$  des vecteurs d'ondes uniquement en fonction des permittivité des milieux 1 et 2

$$k_{z1} = -k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2}{|\varepsilon_1 + \varepsilon_2|}} \quad (\text{E.30})$$

$$k_{z2} = -k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_2^2}{|\varepsilon_1 + \varepsilon_2|}}, \quad (\text{E.31})$$

De sorte que les épaisseurs de peau sont données par

$$\delta_1 = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{|\varepsilon_1 + \varepsilon_2|}{\varepsilon_1^2}} \quad (\text{E.32})$$

$$\delta_2 = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{|\varepsilon_1 + \varepsilon_2|}{\varepsilon_2^2}}. \quad (\text{E.33})$$

Ces expressions nous permettrons alors d'avoir un ordre de grandeur sur la longueur d'atténuation de l'onde évanescente dans le milieu métallique mais aussi dans le milieu diélectrique juxtaposé et ainsi juger de l'influence des couches entourant celles métalliques dans les matériaux nanostructurés que nous étudions au chapitre 8.

## E.2.2 Les phonon-polaritons de surface

Étudions maintenant les conditions d'existence des phonon-polaritons de surface. Pour cela, nous considérons le cas d'un cristal polaire diatomique tel que le SiC. Nous avons déjà vu que la permittivité diélectrique d'un tel matériau peut être modélisée par un modèle d'oscillateur

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left[ 1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right] \quad (\text{E.34})$$

De même que pour l'étude des plasmon-polaritons, nous considérons ici un cristal sans perte afin de pouvoir obtenir une relation de dispersion en fonction de  $\omega$  et  $K$  réels. Nous noterons  $\omega_{sup}$  la valeur de la fréquence pour laquelle  $\text{Re}(\varepsilon) = -1$ . Nous avons alors

$$\omega_{sup} = \sqrt{\frac{\varepsilon_\infty \omega_L^2 + \omega_T^2}{\varepsilon_\infty + 1}} \quad (\text{E.35})$$

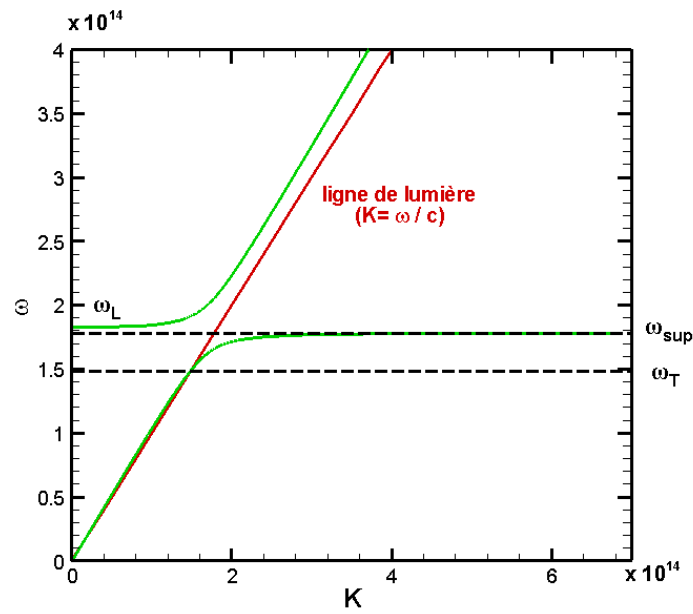


FIG. E.4 – Relation de dispersion pour les phonon-polaritons de volume dans un cristal dipolaire de carbure de silicium ( $\omega_L = 18.253 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ,  $\omega_T = 14.937 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ,  $\omega_{sup} = 17.851 \cdot 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ ).

Cette fréquence limite, en dessous de laquelle des ondes de surface sont susceptibles d'exister, correspond à l'asymptote horizontale de la relation de dispersion lorsque  $K \rightarrow \infty$  comme on peut le voir sur la figure E.4. Il est à noter que, comme pour les métaux, seule la branche en dessous de la ligne de lumière correspond à la relation de dispersion des phonon-polaritons de surface.

# Bibliographie

---

- Auslander, J. E. & Hava, S. (1996). Scattering-matrix propagation algorithm in full-vectorial optics of multilayer grating structures. *Opt. Lett.*, *21*, 1765.
- Baldasaro, P. F., Raynolds, J. E., Charache, G. W., DePoy, D. M., Ballinger, C. T., & Donovan, T. (2001). Thermodynamic analysis of thermophotovoltaic efficiency and power density tradeoffs. *J. Appl. Phys.*, *89*, 3319.
- Battula, A. & Chen, S. C. (2006). Monochromatic polarized coherent emitter enhanced by surface plasmons and a cavity resonance. *Phys. Rev. B*, *74*, 245407.
- Bäck, T., Fogel, D. B., & Michalewicz, Z. (1997). *Handbook of Evolutionary Computation*. Oxford University Press, Bristol and New York.
- Ben-Abdallah, P. (2004). Thermal antenna behavior for thin-solid structures. *J. Opt. Soc. Am. A*, *21*, 1368.
- Ben-Adballah, P. & Ni, B. (2005). Single-defect bragg stacks for high-power narrow-band thermal emission. *J. Appl. Phys.*, *97*, 104910.
- Biehs, S.-A., Reddig, D., & Holthaus, M. (2007). Thermal radiation and near-field energy density of thin metallic films. *Eur. Phys. J. B*, *55*, 237.
- Biswas, R., Ozbay, E., Temelkuran, B., Bayindir, M., & Sigalas, M. M. (2001). Exceptionnal directionnal sources with photonic bandgap crystals. *J. Opt. Soc. Am B*, *17*.
- Boersch, H., Geiger, J., Imbusch, A., & Niedrig, N. (1966). High resolution investigation of the energy losses of 30 keV electrons in aluminum foils of various thicknesses. *Phys. Rev.*, *22*, 146.
- Brown, E. R. & McMahon, O. B. (1995). High zenithal directivity from a dipole antenna on a photonic crystal. *Appl. Phys. Lett.*, *68*, 1300.
- Burke, J. J., Stegeman, G. I., & Tamir, T. (1985). Surface polaritons-like waves guides by thin, lossy metal film. *Phys. Rev. B*, *33*, 5186.
- Callen, H. B. (1951). Irreversibility and generalized noise. *Phys. Rev.*, *83*, 34.
- Carminati, R. & Greffet, J. J. (1999). Near-field effects in spatial coherence of thermal sources. *Phys. Rev. Lett.*, *82*, 1660.
- Celanovic, I., O'sullivan, F., Ilak, M., Kassakian, J., & Perreault, D. (2004). Design and optimization of one dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications. *Opt. Lett.*, *29*, 863.
- Celanovic, I., Perreault, C. J., & Kassakian, Z. M. (2005). Resonant-cavity enhanced thermal emission. *Phys. Rev. B*, *72*, 075127.

- 
- Cornelius, C. M. & Dowling, J. P. (1999). Modification of the planck blackbody radiation by photonic band-gap structures. *Phys. Rev. A*, 59, 4736.
- Cotter, N. P. K., Preist, T. W., & Sambles, J. R. (1995). Scattering-matrix approach to multilayer diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12, 1097.
- Coutts, T. J. (1999). A review of progress in thermophotovoltaic generation of electricity. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 3, 77.
- Coutts, T. J. (2001). A overview of thermophotovoltaic generation of electricity. *Solar energy materials and solar cells*, 66, 443.
- Cravalho, E. G., Tien, C. L., & Caren, R. P. (1967). Effect of small spacings on radiative transfer between two dielectrics. *J. Heat Transfer*, 89, 351.
- Dahan, N., Niv, A., Biener, G., Gorodetski, Y., Kleiner, V., & Hasman, E. (2007). Enhanced coherency of thermal emission : beyond the limitation imposed by delocalized surface waves. *Phys. Rev. B*, 76, 045427.
- Darwin, C. (1859). *The Origin of Species : By Means of Natural Selection or the Preservation of Favoured Races in the Struggle for Life*. Bantam Classics.
- De Wilde, Y., Formanek, F., Carminati, R., Gralak, B., Lemoine, P. A., Mulet, J. P., Joulain, K., Chen, Y., & Greffet, J. J. (2006). Thermal radiation scanning tunnelling microscopy. *Nature*, 444, 740.
- Dionne, J. A., Sweatlock, L. A., & Atwater, H. A. (2005). Planar metal plasmon waveguides : frequency-dependent dispersion, propagation, localization and loss beyond the free electron model. *Phys. Rev. B*, 72, 075405.
- Enoch, S., Tayeb, G., Sabouroux, P., Guérin, N., & Vincent, P. (2002). A metamaterial for directive emission. *Phys. Rev. Lett.*, 89, 213902.
- Fleming, J. G., Lin, S. Y., El Kady, I., Biswas, R., & Ho, K. M. (2002). All metallic three dimensionnal photonic cristal with a large infrared bandgap. *Nature*, 417, 52.
- Greffet, J. J., Carminati, R., Joulain, K., Mulet, J. P., Mainguy, S., & Chen, Y. (2002). Coherent emission of light by thermal sources. *Nature*, 416, 61.
- Hesketh, P. J., Zemel, J. N., & Gebhart, B. (1986). Organ pipe radiant modes of periodic micromachinedsilicon surfaces. *Nature*, 324, 549.
- Holland, J. H. (1975). *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. U. Michigan Press, Ann Arbor, Mich.
- Holland, J. H. (1992). *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. MIT Press/Bradford Books Edition, Cambridge, MA.
- Iida, M., Tani, M., Sakai, K., & Watanabe, M. (2004). Simple layer-by layer photonic crystal for the control of the thermal emission. *Phys. Rev. B*, 69, 245119.
- John, S. (1987). Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 58, 2486.
- Joulain, K., Carminati, R., Mulet, J. P., & Greffet, J. J. (2003). Definition and measurement of the local density of electromagnetic states close to an interface. *Phys. Rev. B*, 68, 245405.
- Joulain, K. & Loizeau, A. (2007). Coherent thermal emission by microstructured waveguides. *JQSRT*, 104, 208.

- 
- Joulain, K., Mulet, J. P., Marquier, F., Carminati, R., & Greffet, J. J. (2005). Surface electromagnetic waves thermally excited : Radiative heat transfer, coherence properties and casimir forces revisited in the near field. *Surf. Science Reports*, 57, 59.
- Katayama-Yoshida, H. & Sato, K. (2003). Materials design for semiconductor spintronics by ab initio electronic-structure calculation. *Physica B*, 327, 337.
- Kesler, M. P., Maloney, J. G., Shirley, B. L., & Smith, G. S. (1996). Antenna design with the use of photonic band gap materials as all dielectric planar reflectors. *Microwave Opt. Technol. Lett.*, 11, 169.
- Kittel, C. (1972). *Introduction à la physique de l'état solide*. Bordas, Paris.
- Kliwer, K. L. & Fuchs, R. (1967). Collective electronic motion in a metallic slab. *Phys. Rev.*, 153, 498.
- Ko, D. Y. K. & Inkson, J. C. (1988). Scattering-matrix approach to multilayer diffraction. *Phys. Rev. B*, 38, 9945.
- Kohn, W. & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev A*, 140, 1133.
- Kollyukh, O. G., Liptuga, A. I., Morozhenko, V., & Pipa, V. I. (2003). Thermal radiation of plane-parallel semitransparent layers. *Opt. Com.*, 225, 349.
- Landau, L. D., Lifschitz, E. M., & Pitaevskii, L. P. (1980). *Physique statistique*. Oxford : Pergamon Press.
- Laroche, M. (2005). *Rôle des ondes de surface dans la modification des propriétés radiatives de matériaux microstructurés. Application à la conception de sources infrarouges et à l'effet thermophotovoltaïque*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris - France.
- Laroche, M., Carminati, R., & Greffet, J. J. (2006). Coherent thermal antenna using a photonic crystals slab. *Phys. Rev. Lett.*, 96, 123903.
- Le Gall, J., Olivier, M., & Greffet, J. J. (1997). Experimental observation of photonic crystal emission near a photonic band edge. *Phys. Rev. B*, 55, 10105.
- Lee, B. J. & Zhang, Z. M. (2006). Design and fabrication of planar multilayer structures with coherent thermal emission characteristics. *Journal of Appl. Phys.*, 100, 063529.
- Lee, B. J. & Zhang, Z. M. (2007). Coherent thermal emission from modified periodic multilayer structures. *Journal of Heat Transfer*, 129, 17.
- Licciulli, A., Diso, D., Torsello, G., Tundo, S., Maffezzoli, A., Lomascolo, M., & Mazzer, M. (2003). The challenge of high-performance selective emitters for thermophotovoltaic applications. *Semicond. Sci. Tech.*, 18, 174.
- Lin, S. Y., Fleming, J. G., & El Kady, I. (2003). Experimental observation of photonic crystal emission near a photonic band edge. *Appl. Phys. Lett.*, 83, 593.
- Lin, S. Y., Hietala, V. M., Lyo, S. K., & Zaslavsky, A. (1996). Photonic band gap quantum well and quantum box structures : A high-q resonant cavity. *Appl. Phys. Lett*, 68, 3233.
- Loomis, J. L. & Marris, H. J. (1994). Theory of heat transfer by evanescent electromagnetic waves. *Phys. Rev. B*, 50, 18517.
- Mandel, L. & Wolf, S. (1995). *Optical coherence and quantum optics*. Cambridge University Press.

- 
- Marquier, F. (2004). *Intéraction des ondes de surface avec des microstructures périodiques. Émission thermique cohérente et transmission résonante*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris - France.
- Maystre, D. & Nevière, N. (1977). Quantitative theoretical study of the plasmon anomalies of diffraction gratings. *J. Opt.*, *8*, 165.
- Modest, M. F. (1993). *Radiative Heat Transfer*. McGraw-Hill, New-York.
- Mulet, J. P. (2003). *Modélisation du rayonnement thermique par une approche électromagnétique. Rôle des ondes de surface dans le transfert d'énergie aux courtes échelles et dans les forces de Casimir*. PhD thesis, Université de Paris XI - France.
- Narayanaswamy, A. & Chen, G. (2004). Thermal emission control with one-dimensional metallodielectric photonic crystals. *Phys. Rev. B*, *70*, 125101.
- Niebergall, L., Stepanyuk, V. S., Berakdar, J., & Bruno, P. (2006). Controlling the spin polarization of nanostructures on magnetic substrates. *Phys. Rev. Lett.*, *96*, 127204.
- Ordal, M. A., Bell, R. J., Alexander, R. W. J., Long, L. L., & Querry, M. R. (1985). Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared : Al, co, cu, au, fe, pb, mo, ni, pd, pt, ag, ti, v, and w. *Appl. Opt.*, *24*, 4493.
- Ordal, M. A., Long, L. L., Bell, R. J., Bell, S. E., Bell, R. R., Alexander, R. W. J., & Ward, C. A. (1983). Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared : Al, co, cu, au, fe, pb, mo, ni, pd, pt, ag, ti, v, and w. *Appl. Opt.*, *22*, 1099.
- O'Sullivan, F. (2004). *Fabrication and testing of an infrared spectral control component for thermophotovoltaic power conversion application*. PhD thesis, Massachusetts Institut of Technology - USA.
- O'Sullivan, F., Celanovic, I., Jovanovic, N., & Kassakian, J. (2005). Optical characteristics of one dimensionnal Si/Sio<sub>2</sub> photonic crystals for thermophotovoltaic applications. *J. Appl. Phys.*, *97*, 033529.
- Ozbay, E., Tuttle, G., Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., & Ho, K. M. (1995). Defect structures in a layer-by-layer photonic band gap crystal. *Phys. Rev. B*, *51*, 13961.
- Palik, E. D. (1998). *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, London.
- Pastureau, T., Laude, V., & Ballandras, S. (2002). Stable scattering-matrix method for surface acoustic waves in piezoelectric multilayers. *Appl. Phys. Lett.*, *80*, 2544.
- Planck, M. (1901). *Annalen der Physik*, *4*, 553.
- Polder, D. & Van Hove, M. (1971). Theory of radiative heat transfer between closely spaced bodies. *Phys. Rev. B*, *4*, 3303.
- Pralle, M. U., Moelders, N., McNeal, M. P., Puscasu, I., Greenwald, A. C., Daly, J. T., Johnson, E. A., George, T., Choi, D. S., El Kady, I., & Biswas, R. (2002). Photonic crystal enhanced narrow-band infrared emitters. *Appl. Phys. Lett.*, *81*, 4685.
- Raether, H. (1988). *Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on gratings*. Springer-Verlag, Berlin.
- Rashidi-Huyeh, M. & Palpant, B. (2006). Conunterintuitive thermo-optical response of metal-dielectric nanocomposite materials as a result of local electromagnetic field enhancement. *Phys. Rev. B*, *74*, 075405.

- 
- Rytov, S. M. (1953). Theory of electrical fluctuations and heat emission. *Akademi Nauk SSSR*, 6, 130.
- Rytov, S. M. (1958). Correlation theory of thermal fluctuations in a isotropic medium. *Sov. Phys. JETP*.
- Sai, H., Kamikawa, T., Kanamori, Y., Hane, K., Yugami, H., & Yamaguchi, M. (2004). in proceedings of the sixth nrel conference on thermophotovoltaic generation of electricity. *AIP. Conf. Proc.*, 738, 206.
- Sai, H. & Yugami, H. (2004). Thermophotovoltaic generation with selective radiators based on tungsten surface gratings. *Appl. Phys. Lett.*, 85, 3399.
- Sang, H., Li, Z. Y., & Gu, B. Y. (2004). Stack-sequence dependent defect modes in one dimensional photonic crystals. *Phys. Lett. A*, 331, 414.
- Sang, H. Y., Li, Z. Y., & Gu, B. Y. (2005). defect modes in multiple constituent one dimensional photonic crystals examined by an analytic bloc- mode approach. *Chin. Phys. Lett.*, 22, 365.
- Sarid, D. (1981). Long-range surface-plasma waves on very thin metal films. *Phys. Rev. Lett.*, 47, 1927.
- Shchegrov, A. V., Joulain, K., Carminati, R., & Greffet, J. J. (2000). Near field spectral effect due to electromagnetic surface excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 85, 1548.
- Shelby, R., Smith, D. R., & Schultz, S. (2001). Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, 292, 77.
- Siegel, R. & Howell, J. R. (2001). *Thermal Radiation Heat Transfer (4th edition)*. Taylor and Francis, New York.
- Sigalas, M. M., Biswas, R., Li, Q., Crouch, D., Leung, W., Lough, B., Nielsen, S., McCalmont, S., Tuttle, G., & Ho, K. M. (1997). Dipole antennas on photonic band gap crystals : experiment and simulation. *Microwave Opt. Technol. Lett.*, 15, 153.
- Sipe, J. E. (1987). New green-function formalism for surface optics. *J. Opt. Soc. Am. B*, 4, 481.
- Smith, D. R. & Kroll, N. (2000). Negative refractive index in left-handed materials. *Phys. Rev. Lett.*, 85, 2933.
- Smith, D. R., Padilla, W. J., Vier, D. C., Nemat-Nasser, S. C., & Schultz, S. (2000). Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Phys. Rev. Lett.*, 84, 4184.
- Soukoulis, C., Linden, S., & Wegener, M. (2007). Negative refractive index at optical wavelengths. *Science*, 315, 47.
- Swan, J. B., Otto, A., & Fellenzer, H. (1967). Observed retardation effects on the energy of the w+- surface plasmons in thin aluminum foils. *Phys. Stat. Sol.*, 23, 171.
- Tsang, L., Kong, J. A., & Ding, K. H. (2000). *Scattering of electromagnetic waves : theory and applications*. Wiley-Interscience Publication, New York.
- Ujihara, K. (1972). Reflectivity of metals at high temperatures. *J. Appl. Phys.*, 43, 2376.
- Veselago, V. G. (1968). The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$ . *Sov. Phys. Usp.*, 10, 509.



- 
- Wang, F. M., Liu, H., Li, T., Dong, Z. G., Zhu, S. N., & Zhang, X. (2007). Metamaterial of rod pairs standing on gold plate and its negative refraction property in the far-infrared frequency regime. *Phys. Rev. E*, *75*, 016604.
- Yablonovitch, E. (1987). Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, *58*, 2059.
- Yablonovitch, E., Gmitter, T. J., Meade, M. D., Rappe, A. M., Brommer, K., & Joannopoulos, J. D. (1991). donor and acceptor modes in photonic band structure. *Phys. Rev. Lett.*, *67*, 3380.
- Yannopoulos, V. (2006). Thermal emission from three-dimensional arrays of gold nanoparticles. *Phys. Rev. B*, *73*, 113108.
- Yeh, P. (1998). *Optical Waves in Layered Media*. Wiley-Interscience Publication, New York.
- Zhang, S., Fan, W., Panoiu, N. C., Malloy, K. J., Osgood, R. M., & Brueck, S. R. J. (2005). Experimental demonstration of near-infrared negative-index metamaterial. *Phys. Rev. Lett.*, *95*, 137404.