



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES - SECTEUR PGCM
ÉCOLE DOCTORALE EMMA - ED 409
DÉPARTEMENT DE FORMATION DOCTORALE : MÉCANIQUE ÉNERGÉTIQUE

Thèse

présentée pour l'obtention du grade de
Docteur de l'Université Henri Poincaré - Nancy université
en Mécanique Énergétique

Réalisation et modélisation d'un microscope à sonde locale appliqué à l'étude du rayonnement thermique en champ proche

par Jérôme MULLER

soutenue le 21 Septembre 2011 devant la commission d'examen :

Président	F. BAIDA	Professeur, Université de Franche-Comté
Rapporteurs	K. JOULAIN	Professeur, Université de Poitiers
	A. VIAL	Enseignant-chercheur, UTT
Examineurs	R. VAILLON	Chargé de recherche au CNRS, INSA de Lyon
	Y. de WILDE	Directeur de recherche, ESPCI ParisTech
Directeur de thèse	D. LACROIX	Professeur, Nancy Université
Co-directeur de thèse	G. PARENT	Maître de conférences, Nancy Université

Au frère, aux parents

Remerciements

Un grand merci à tous ceux qui en ont envie.

Table des matières

Introduction générale	2
I La microscopie optique en champ proche	7
1 Le champ Proche Optique	11
1.1 Champ proche, champ lointain	12
1.1.1 Cas général	12
1.1.2 Exemple d'application : antenne radioélectrique et dipôle oscillant	12
1.2 Les ondes de surface	15
1.2.1 Ondes évanescentes	15
1.2.2 Réflexion totale	15
1.2.3 Théorie des polaritons	16
1.2.4 Densité d'énergie électromagnétique au dessus d'une interface . .	20
2 La microscopie optique en champ proche	25
2.1 La microscopie optique classique	26
2.1.1 Principes de base	26
2.1.2 Limitations	26
2.2 Les nouvelles microscopies	28
2.2.1 Les microscopes électroniques	28
2.2.2 Les microscopes à sondes locales	29
2.3 La technologie SNOM	33
2.3.1 Expérience de Syngge	33
2.3.2 Les différents modes SNOM	34
2.3.3 Description d'un dispositif ASNOM complet	36
2.4 Montage et développement d'un microscope TRSTM	37
2.4.1 Dispositif et système d'asservissement de la pointe	37
2.4.2 Système optique	38
2.4.3 Traitement du signal	40
2.4.4 Manipulations et difficultés rencontrées	41

II	Développement et validation des modèles numériques	45
3	Développement des modèles numériques	51
3.1	Calcul du champ proche	52
3.1.1	Le modèle FDTD	52
3.1.2	Stabilité du schéma FDTD	56
3.1.3	Dispersion numérique	56
3.1.4	Les conditions de bord	57
3.1.5	Les sources d'excitation	61
3.1.6	Description des milieux dispersifs et absorbants	66
3.1.7	Description des géométries complexes	68
3.2	Calcul du champ lointain	70
3.2.1	Théorème des courants équivalents de surface	71
3.2.2	Transformation champ proche/champ lointain : formalisme classique	73
3.2.3	Transformation champ proche/champ lointain via les tenseurs de Green	74
4	Validation des modèles	81
4.1	Étude d'un dipôle oscillant	82
4.1.1	Cas d'un dipôle dans le vide	82
4.1.2	Cas d'un dipôle au dessus d'une interface	83
4.2	Étude d'une sphère	86
4.2.1	Cas d'une sphère dans le vide	87
4.2.2	Cas d'une sphère au dessus d'un interface : illumination directe	89
4.2.3	Cas d'une sphère au dessus d'un interface : illumination par une onde évanescente	93
4.3	Étude d'un système résonant	95
4.3.1	Cas d'une sphère de SiC dans le vide	95
4.3.2	Cas d'une sphère de SiC au dessus d'une interface	97
4.3.3	Cas d'une sphère de SiO ₂ au dessus d'une interface	98
III	Application à l'étude d'un microscope TRSTM	101
5	Modélisation de pointes TRSTM simples	105
5.1	Étude d'une pointe en tungstène	106
5.1.1	Paramètres de calcul	106
5.1.2	Calcul des champs proche et lointain	107
5.1.3	Modélisation de l'optique de collection	108
5.2	Influence du matériau de la pointe	112
5.2.1	Description des matériaux étudiés	112
5.2.2	Allure du champ lointain	112

5.2.3	Estimation du signal collecté	114
5.3	Influence de la profondeur de pénétration de l'onde évanescente	115
5.3.1	Profondeur de pénétration d'une onde évanescente	115
5.3.2	Allure du champ lointain	116
5.3.3	Estimation du signal collecté	117
5.4	Influence de la distance pointe/interface	118
5.4.1	Principe et utilité de la simulation	118
5.4.2	Estimation du signal collecté	119
5.5	Influence de la forme de la pointe	120
5.5.1	Description des différentes formes étudiées	121
5.5.2	Allure du champ lointain	121
5.5.3	Estimation du signal collecté	122
5.6	Influence de la longueur d'onde d'étude	124
5.6.1	Cas d'une pointe de tungstène	125
5.6.2	Cas d'une pointe de SiC	126
5.6.3	Cas d'une pointe de verre SiO ₂	127
6	Modélisation de pointes TRSTM résonantes	129
6.1	Résonance des sphères	130
6.1.1	Modes de surfaces dans les petites particules	130
6.1.2	Étude d'une sphère de SiC	131
6.1.3	Étude d'une sphère de verre SiO ₂	135
6.2	Étude d'un système pointe/sphère	138
6.2.1	Paramètres de calcul	139
6.2.2	Cas d'une sphère de SiC	140
6.2.3	Cas d'une sphère de verre SiO ₂	142
	Conclusion et perspectives	148
	Annexes	154
A	Bases de l'électromagnétisme	155
A.1	Équations de Maxwell et équation d'onde	158
A.1.1	Les équations de Maxwell	158
A.1.2	Établissement de l'équation d'onde	159
A.2	Application à l'onde plane	160
A.2.1	Propagation d'une onde plane dans un milieu infini	160
A.2.2	Interaction avec une interface plane	161

B	Fonctions diélectriques : base de données	165
B.1	Les modèles	166
B.1.1	Quelques rappels sur la fonction diélectrique	166
B.1.2	Le modèle de Drude	167
B.1.3	Le modèle de Lorentz	167
B.1.4	Les modèles composites	168
B.2	Les différents cas étudiés	168
B.2.1	Le carbure de silicium (SiC)	168
B.2.2	Le verre (SiO ₂)	169
B.2.3	Le silicium (Si)	170
B.2.4	Le silicium dopé (n-Si)	171
B.2.5	Le tungstène (W)	172
C	Fabrication d'une sonde en tungstène	175
C.1	Description générale	175
C.2	Fabrication du méplat	176
C.2.1	Préparation du support	176
C.2.2	Polissage du levier	177
C.2.3	Résultats	178
C.3	Fabrication de la pointe	178
C.3.1	Principes de la réaction	178
C.3.2	Montage	179
C.3.3	Manipulations et résultats	181
D	Traitement du signal	185
D.1	Généralités	186
D.1.1	Généralités sur l'échantillonnage	186
D.1.2	Fréquence d'échantillonnage - fréquence d'acquisition	187
D.2	Système de détection synchrone	187
D.2.1	Principe d'un lock-in	187
D.2.2	Signal de référence	188
D.2.3	Tests	189
D.3	Suppression du bruit de mesure	190
D.3.1	Principes	190
D.3.2	Rééchantillonnage	190
D.3.3	Tests	191
	Bibliographie	192

Introduction générale

Observer et comprendre le monde jusque dans ses éléments les plus fins constitue une quête perpétuelle de la recherche scientifique. Les sciences de l'infiniment petit, issues de cette course vers le nanomonde, ont vu apparaître de nombreuses technologies destinées à caractériser et donc optimiser des matériaux nanostructurés en plein essor, que ce soit dans le domaine de la recherche ou de l'industrie. Parmi les outils de mesures et d'imagerie les plus prisés actuellement, nous pouvons citer, à titre d'exemple, les microscopes électroniques (MEB, MET) ou encore les microscopes à sonde locale (STM, AFM, SNOM,...).

Dans ce travail de thèse, nous nous intéressons essentiellement à la nanothermique, et plus particulièrement à la caractérisation thermique et radiative (et donc optique) des surfaces en zone de champ proche. En effet, s'il est courant d'étudier les propriétés radiatives d'une surface en zone de champ lointain (c'est-à-dire où les ondes électromagnétiques émises par ladite surface suivent globalement la loi de Planck, et présentent un comportement typiquement incohérent, aussi bien spatialement que temporellement), de récentes études [1, 2, 3, 4, 5, 6] ont réussi à démontrer l'importance des ondes de surface, observables uniquement à une distance sub-longueur d'onde. Celles-ci se caractérisent, d'une part, par une forte augmentation de la densité d'énergie électromagnétique lorsque l'on se rapproche de la surface, et d'autre part, par l'apparition d'un phénomène de cohérence spatiale et temporelle de sources thermiques, pourtant incohérentes en champ lointain. C'est dans ce contexte qu'a été introduite la microscopie dite TRSTM (Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy), en 2006, par l'équipe de Y. de Wilde [7]. Ce type de microscopie s'appuie sur la technologie ASNOM (Apertureless Scanning Near-field Optical Microscopy), laquelle consiste à positionner une sonde à proximité de la surface d'un échantillon, i.e. en zone de champ proche optique. Le but est d'utiliser l'extrémité de la sonde comme nanodiffuseur perturbant les ondes évanescentes confinées au niveau de l'interface et diffractant donc un signal sous forme d'ondes propagatives mesurables en champ lointain. La particularité du microscope TRSTM est que la présence des ondes de surface ne nécessite aucune source d'excitation externe, ce qui permet de mesurer directement le champ proche thermique au niveau de l'extrémité de la sonde. L'image thermique s'obtient alors en scannant l'intégralité de la surface de l'échantillon. Elle présente potentiellement une résolution proche du rayon de courbure de la sonde (quelques nanomètres), c'est-à-dire bien en deçà de ce que l'on obtient dans le cas d'un système optique classique (de l'ordre de la dizaine de microns dans l'infrarouge moyen, du fait de la limite de la diffraction). Cependant, si il est possible d'estimer l'allure théorique du champ proche thermique au dessus d'un échantillon à une longueur d'onde et une température données (par calcul de la EM-LDOS, i.e. la densité locale d'états photoniques [7]), son interaction avec une sonde de forme et de matériau particuliers est actuellement très peu connue, ce qui rend difficile l'interprétation des images obtenues via la technique TRSTM.

Une des voies envisageables pour résoudre ce problème est la modélisation d'un tel microscope, et notamment de la diffusion d'une onde de surface par une pointe diffusante. C'est donc dans cette dynamique de recherche que s'inscrit mon travail de thèse. La difficulté est alors de déterminer les modèles les plus adéquats pour décrire un tel dispositif.

En effet, il existe actuellement de nombreuses méthodes permettant de déterminer la diffusion de la lumière par une particule se trouvant à proximité d'une interface. Parmi les plus importantes, nous pouvons citer la MMP (Multiple Multipole Method) développée par Hafner [8], la DSM (Discrete Source Method) introduite par Eremin et al. [9], ainsi que la T-matrix [10, 11, 12]. Cependant, une des limitations majeures de ces trois méthodes est liée à l'apparition de complications lors de l'étude de particules inhomogènes ou à géométrie complexe. Pour décrire de tels objets, la DDA (Discrete Dipole Approximation) [13, 14], et plus particulièrement la DDSURF [15] et la DDA-SI¹ [16] (méthodes DDA prenant en compte la présence d'une interface), constituent une approche complète basée sur la discrétisation de l'objet étudié par un ensemble fini de dipôles. Leur inconvénient principal est la rapide augmentation de la RAM nécessaire lorsque la forme de la particule se complexifie. En effet, pour limiter les effets de marches à niveau de sa surface (cette pixellisation étant due à la discrétisation spatiale de l'objet), un plus grand nombre de dipôles est indispensable.

Une autre possibilité est l'utilisation de la méthode FDTD (Finite-Difference Time-Domain) [17], laquelle consiste à résoudre les équations de Maxwell par le biais d'une discrétisation spatiale et temporelle, ainsi que d'une approximation des dérivées partielles par la méthode des différences finies. Cette technique est elle aussi assez gourmande en ressource dans le cas d'objets à géométrie complexe, mais il existe différentes solutions destinées à limiter ces ressources nécessaires, telles que les maillages non-uniformes, les maillages tétraédriques, ou les sous-maillages. Une autre contrainte est liée au fait que, contrairement aux méthodes décrites précédemment, la FDTD ne permet d'obtenir le champ électromagnétique qu'à proximité de la particule. La détermination du champ lointain nécessite alors une transformation champ proche/champ lointain (NFTFF - Near Field To Far Field transformation) [18, 19] pouvant prendre en compte la présence d'un substrat. Cependant, il existe de nombreux avantages liés à l'emploi de la FDTD. En effet, une des grandes forces de la FDTD est que le calcul se fait dans le domaine temporel. Cela permet, par le biais d'une transformée de Fourier, d'obtenir nos résultats dans le domaine fréquentiel sur un large spectre, et ce grâce à un seul et unique calcul numérique. C'est donc en se basant sur ces considérations que nous avons choisi d'utiliser la méthode FDTD/NFTFF pour modéliser le comportement optique de la pointe d'un microscope optique en champ proche, et plus particulièrement d'un microscope TRSTM.

Ce manuscrit est constitué de trois parties, chacune d'entre elles se décomposant en deux chapitres :

La première partie est dédiée à l'étude des ondes de surface et de la microscopie optique en champ proche. Le chapitre 1 développe les notions de champ proche et d'ondes évanescentes, d'abord dans le cas général, puis en se restreignant au champ proche optique. Une étude approfondie portant sur l'estimation de la densité d'énergie électromagnétique à proximité d'une interface plane entre deux milieux y est aussi détaillée.

¹<http://www.scattport.org/index.php/programs-menu/volume-integral-menu/448-dda-si-home-page>

En ce qui concerne le second chapitre, il se focalise essentiellement sur les travaux expérimentaux menés durant mon Master Recherche puis dans le cadre de ma thèse au laboratoire. Ainsi, après une introduction aux différentes technologies de microscopies existant aujourd'hui, notamment les microscopes AS-NOM et TRSTM, une description détaillée de notre montage TRSTM, encore en développement, y est donnée. Ce chapitre nous permet donc de mettre en avant les difficultés inhérentes à ce type de microscopie, ainsi que les méthodes permettant d'y faire face.

La seconde partie, constituée des chapitres 3 et 4, porte sur le développement et la validation des modèles numériques destinés à décrire le comportement d'une sonde TRSTM. La modélisation que l'on propose se scinde en deux étapes, à savoir d'une part la FDTD destinée au calcul dans le domaine temporel du champ proche électromagnétique diffusé par une particule de forme quelconque placée à proximité d'un échantillon, et d'autre part la méthode de transformation champ proche/champ lointain (NFTFF) permettant d'obtenir le champ électrique lointain dans le domaine fréquentiel. Ces modèles sont ensuite validés via l'étude d'un certain nombre de cas-tests tels que le dipôle ou la sphère au dessus d'une interface. Dans ce dernier cas, la validation est faite par comparaison des résultats obtenus avec ceux donnés par la T-matrix [12].

La dernière partie est composée des chapitres 5 et 6. Elle se concentre sur l'utilisation des modèles numériques décrits et validés dans la deuxième partie dans le but de modéliser une sonde TRSTM éclairée par une onde évanescente. Un certain nombre de critères y sont étudiés, tels que la forme ou le matériau de la pointe, sa distance par rapport à l'interface, la profondeur de pénétration et la polarisation de l'onde de surface, ou encore la longueur d'onde. Ensuite, une étude poussée portant sur l'optimisation des sondes TRSTM par l'ajout de particules diffusantes sphériques à l'extrémité des dites sondes y est développée.

À la fin de ce mémoire, une synthèse de mes travaux de recherche est proposée. Les perspectives qu'il serait possible de donner à ce travail y sont discutées.

Première partie

**La microscopie optique en champ
proche**

Nomenclature

- Repères :

(x, y, z) : coordonnées cartésiennes

(ρ, θ) : coordonnées polaires

(r, θ, ϕ) : coordonnées sphériques

- Scalaires :

c : vitesse de la lumière dans le vide

h : constante de Planck

\hbar : constante de Planck réduite

i : unité imaginaire

J_n : fonction de Bessel d'ordre n

k : nombre d'onde

k_0 : nombre d'onde dans le vide

$K_{||}$: norme du vecteur \mathbf{K}

k_B : constante de Boltzmann

n_m : indice optique du milieu m

p : quantité de mouvement

q : charge électrique

r^s : coefficient de réflexion de Fresnel d'une onde polarisée TE

r^p : coefficient de réflexion de Fresnel d'une onde polarisée TM

T : température

t^s : coefficient de transmission de Fresnel d'une onde polarisée TE

t^p : coefficient de transmission de Fresnel d'une onde polarisée TM

u_0^ω : densité d'énergie électromagnétique monochromatique associée au rayonnement d'un corps noir

u_{eva}^ω : densité d'énergie électromagnétique monochromatique des ondes non-propagatives

u_{prop}^ω : densité d'énergie électromagnétique monochromatique des ondes propagatives

u_{tot}^ω : densité d'énergie électromagnétique monochromatique totale

u_{tot} : densité d'énergie électromagnétique totale

w : composante normale à l'interface du vecteur \mathbf{k}

- Vecteurs :

\mathbf{E}	: champ électrique
\mathbf{H}	: excitation magnétique
$\mathbf{k} = (\mathbf{K}, w)$: vecteur d'onde
\mathbf{k}_0	: vecteur d'onde dans le vide
$\mathbf{K} = (u, v)$: composante tangente à l'interface du vecteur \mathbf{k}
\mathbf{p}	: moment dipolaire électrique
$\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$: vecteur position
$\mathbf{R} = (x, y)$: composante tangente à l'interface du vecteur \mathbf{r}
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$: vecteurs unitaires

- Lettres grecques :

δ_{lim}	: limite de résolution d'un microscope optique
ε	: permittivité diélectrique
ε_0	: permittivité diélectrique du vide
ϵ	: permittivité (fonction) diélectrique relative
λ	: longueur d'onde
λ_e	: longueur d'onde d'un électron
λ_p	: longueur d'onde d'un photon
μ	: perméabilité magnétique
μ_0	: perméabilité magnétique du vide
ν	: fréquence
ω	: pulsation
θ_{ob}	: demi-angle d'ouverture de l'objectif d'un microscope optique

- Opérateurs :

Im	: partie imaginaire
Re	: partie réelle

Chapitre 1

Le champ Proche Optique

Sommaire

1.1 Champ proche, champ lointain	12
1.1.1 Cas général	12
1.1.2 Exemple d'application : antenne radioélectrique et dipôle oscillant	12
1.2 Les ondes de surface	15
1.2.1 Ondes évanescentes	15
1.2.2 Réflexion totale	15
1.2.3 Théorie des polaritons	16
1.2.4 Densité d'énergie électromagnétique au dessus d'une interface .	20

Introduction

Nous abordons, dans ce chapitre introductif, les notions de champ proche et de champ lointain. Pour cela, nous rappelons brièvement la théorie relative à ces deux concepts, d'abord dans le domaine général, puis dans celui propre à l'électromagnétisme. Nous nous concentrons ensuite sur des cas particuliers s'approchant plus ou moins des thèmes centraux de la thèse, à savoir l'antenne radioélectrique et le dipôle électrique oscillant. Ainsi, à travers ces exemples simples, connus de tous, nous essayons d'illustrer la complexité des modèles physiques associés et de pointer les difficultés à l'origine des travaux de recherche que nous avons entrepris. Après cela, nous poursuivons notre étude qui se porte cette fois sur les ondes de surface, ce qui nous amène à parler du phénomène de réflexion totale, puis de celui plus complexe des polaritons de surface.

1.1 Champ proche, champ lointain

1.1.1 Cas général

Les notions de champ proche et de champ lointain ne sont pas propres à l'électromagnétisme. Pour prendre l'exemple des ondes sonores, les technologies basées sur l'étude du champ proche acoustique connaissent actuellement un essor considérable [20, 21]. Nous allons donc, pour commencer, expliquer les spécificités de telles notions, sans pour autant se cantonner à un domaine en particulier.

Pour cela, plaçons-nous dans le cas d'une source d'ondes, celles-ci étant caractérisées par une certaine longueur d'onde λ . Si nous observons l'allure de ces ondes en un point donné \mathbf{r} , \mathbf{r} étant le vecteur direction reliant la source au point d'observation, nous pouvons distinguer trois cas dépendant des grandeurs $r = |\mathbf{r}|$ et λ :

- Si $r \ll \lambda$, nous pouvons nous considérer en zone de champ proche. Ici, les ondes dites non-propagatives sont prédominantes. Elles sont notamment caractérisées par une amplitude nettement supérieure à ce que l'on peut observer loin de la source, mais qui décroît très rapidement lorsque l'on s'en éloigne.
- Si $r \gg \lambda$, nous sommes alors en zone de champ lointain. Ici, les ondes non-propagatives, du fait de leur rapide atténuation, sont négligeables et seules les ondes dites propagatives peuvent être détectées.
- Entre ces deux extrêmes existe une zone dite transitoire, où les deux catégories d'ondes coexistent. Cependant, il est très peu aisé d'en déterminer les limites avec précision.

Le champ proche optique (ou champ proche électromagnétique) obéit parfaitement aux règles présentées ci-dessus. Néanmoins, il est possible d'affiner quelque peu le positionnement des frontières séparant les différentes zones. Ainsi, il est d'usage de se considérer en zone de champ proche lorsque nous nous trouvons à une distance r inférieure à $\lambda/2\pi$. A contrario, si $r > 2\lambda$, nous pouvons nous considérer en zone de champ lointain. Cependant, il faut tout de même garder à l'esprit que ces valeurs n'ont pour d'autre but que de nous donner une idée, a priori, du comportement du champ en fonction de la distance d'observation. Ces frontières doivent donc être adaptées en fonction du problème étudié, comme nous le verrons par la suite.

1.1.2 Exemple d'application : antenne radioélectrique et dipôle oscillant

Il existe un grand nombre de catégories d'antennes, chacune d'entre elles ayant ses propres spécificités. Cependant, ce chapitre n'a pour autres buts que d'illustrer les notions de champs proche et lointain introduites précédemment. Nous n'entrerons donc pas dans les détails, et nous nous cantonnerons au cas simple de l'antenne dipolaire, à savoir un des systèmes existants les plus simples. En effet, ce dispositif se limite à deux fils conducteurs

alimenté par un courant alternatif (FIG. 1.1). Pour une telle antenne, la convention veut que l'on se considère en zone de champ lointain lorsque la distance antenne-point d'observation est supérieure à $\frac{2D^2}{\lambda}$ [22] où D est une longueur caractéristique de l'antenne (ici, le diamètre du fil).

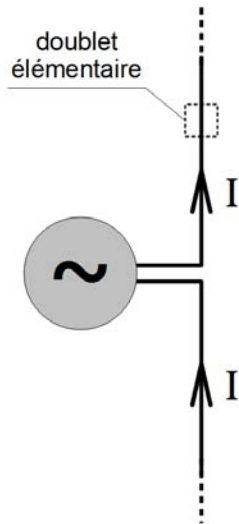


FIG. 1.1: Illustration schématique d'une antenne dipolaire

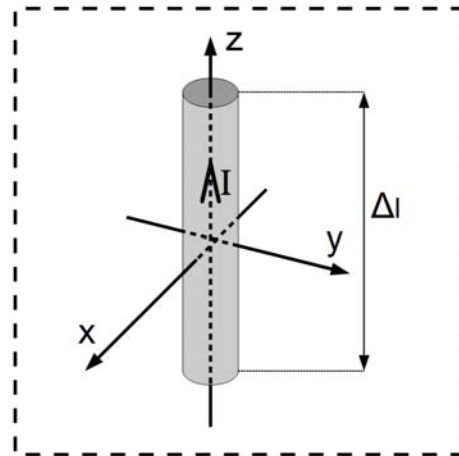


FIG. 1.2: Doublet élémentaire issu de la décomposition d'une antenne dipolaire

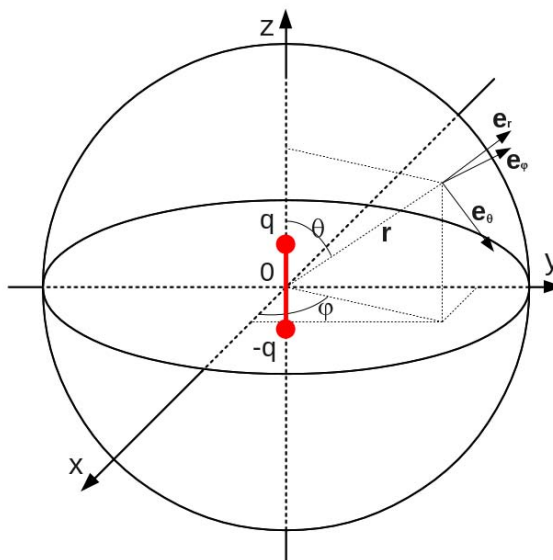


FIG. 1.3: Dipôle oscillant et coordonnées sphériques

1.1. CHAMP PROCHE, CHAMP LOINTAIN

Il existe un moyen simple d'étudier un tel système, basé sur sa décomposition en une succession d'antennes élémentaires en émission, aussi appelées doublets élémentaires. Il s'agit d'éléments conducteurs de faible longueur par rapport à la longueur d'onde d'émission ($\Delta l \ll \lambda$), et parcourus par un courant alternatif de la forme $I = I_0 \cos \omega t$ où $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ est la pulsation du signal (FIG. 1.2). Ces doublets sont bien sûr irréalisables physiquement, et ne sont qu'une vue de l'esprit d'une portion de notre antenne réelle. Cependant, l'avantage d'une telle décomposition apparaît clairement, puisqu'elle nous amène à étudier le cas d'un dipôle électrique oscillant dont nous connaissons parfaitement la solution. Un dipôle électrique oscillant, ou dipôle de Hertz, se caractérise essentiellement par son moment dipolaire électrique $\mathbf{p}(t)$. On se place ici dans le cas d'un dipôle, dans le vide, oscillant suivant l'axe des z (FIG. 1.3), tel que $\mathbf{p}(t) = p(t)\hat{\mathbf{z}}$. Les expressions analytiques des champs électrique et magnétique nous sont alors données, en coordonnées sphériques, par :

$$\mathbf{E}(r, \theta, \phi, t) = \begin{cases} E_r = \frac{2 \cos(\theta)}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{p(t)}{r^3} + \frac{\dot{p}(t)}{r^2 c} \right] \\ E_\theta = \frac{\sin(\theta)}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{p(t)}{r^3} + \frac{\dot{p}(t)}{r^2 c} + \frac{\ddot{p}(t)}{r c^2} \right] \\ E_\phi = 0 \end{cases} \quad (1.1)$$

et

$$\mathbf{H}(r, \theta, \phi, t) = \begin{cases} H_r = 0 \\ H_\theta = 0 \\ H_\phi = \frac{\sin(\theta)}{4\pi} \left[\frac{\dot{p}(t)}{r^2} + \frac{\ddot{p}(t)}{r c} \right] \end{cases} \quad (1.2)$$

Nous supposons maintenant que $p(t)$ admet une dépendance temporelle sinusoïdale de la forme $p(t) = p_0 \cos(\omega t)$, c'est-à-dire sous sa forme complexe, $p(t) = p_0 \exp(-i \omega t) = p_0 \exp(-i \frac{2\pi c}{\lambda} t)$ (le signe de l'exponentielle est choisi arbitrairement). ω est la pulsation de l'onde, λ sa longueur d'onde et c sa vitesse dans le vide. Nous en déduisons les expressions suivantes des champs :

$$\mathbf{E}(r, \theta, \phi, t) = \begin{cases} E_r = \frac{2 \cos(\theta)}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r^3} - i \frac{2\pi}{r^2 \lambda} \right] p_0 \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \\ E_\theta = \frac{\sin(\theta)}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r^3} - i \frac{2\pi}{r^2 \lambda} - \frac{4\pi^2}{r \lambda^2} \right] p_0 \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \\ E_\phi = 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

et

$$\mathbf{H}(r, \theta, \phi, t) = \begin{cases} H_r = 0 \\ H_\theta = 0 \\ H_\phi = \frac{c \sin(\theta)}{4\pi} \left[-i \frac{2\pi}{r^2 \lambda} - \frac{4\pi^2}{r \lambda^2} \right] p_0 \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \end{cases} \quad (1.4)$$

où $|\mathbf{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le vecteur d'onde. Nous voyons bien que, dans le cas présent, le champ électrique à proximité du dipôle sera dominé par les termes en r^{-3} . A contrario, les termes en r^{-1} des composantes E_θ et H_ϕ s'imposeront loin de la source.

À titre d'exemple, la figure 1.4 nous permet d'observer la décroissance du module de E_r et E_θ en fonction de la distance r . Pour cet exemple, nous avons choisi une longueur d'onde $\lambda = 10\mu\text{m}$ et un angle d'observation $\theta = 45^\circ$. ε_0 et p_0 ont été choisis comme étant égaux à 1.

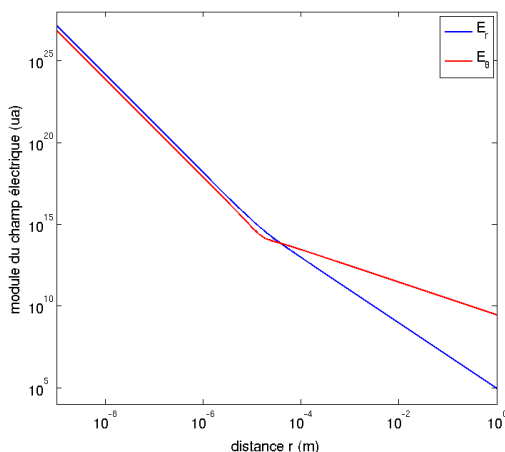


FIG. 1.4: Illustration de la décroissance du champ électrique émis par un dipôle oscillant en fonction de la distance - courbe bleue : module de la composante E_r , courbe rouge : module de la composante E_θ

Sur cette figure, le champ électrique change drastiquement de comportement à une distance proche de la dizaine de microns, ce qui correspond à la longueur d'onde λ . Il s'agit de la zone transitoire champ proche/champ lointain décrite précédemment. De plus, nous pouvons voir que la composante E_r devient négligeable par rapport à E_θ lorsque la distance r devient grande par rapport à λ , ce qui induit que le champ devient purement transverse.

1.2 Les ondes de surface

1.2.1 Ondes évanescentes

À la notion de champ proche s'associe souvent celle d'ondes évanescentes. Ces dernières sont marquées par une intensité présentant un niveau maximal au niveau de leur source, et qui décroît de manière exponentielle lorsque l'on s'en éloigne. Du fait de cette décroissance exponentielle, ces ondes ne peuvent se trouver qu'en champ proche, le champ lointain étant gouverné par conséquent par les ondes propagatives.

1.2.2 Réflexion totale

La réflexion totale, dont le principe constitue un des fondements majeurs du comportement optique des guides d'ondes (tels que les fibres optiques), est un exemple récurrent

1.2. LES ONDES DE SURFACE

de l'étude des ondes évanescentes. Newton avait d'ailleurs observé ce phénomène grâce à une expérience qui porte encore son nom, et dont nous rappelons ici le principe [23]. Le dispositif de cette expérience est avant tout constitué d'un prisme dont une des faces est éclairée par un faisceau lumineux en situation de réflexion totale (FIG. 1.5). Pour ce faire, il suffit que l'angle d'incidence θ soit supérieur à l'angle critique θ_c , lequel s'exprime sous la forme :

$$\theta_c = \sin^{-1}\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \quad (1.5)$$

où n_2 est l'indice optique du prisme et n_1 celui du milieu ambiant (en l'occurrence l'air). Le rayonnement étant totalement réfléchi, la logique veut donc que rien ne soit transmis au travers de l'interface. Cependant, Newton avait remarqué que lorsque l'on approchait une lentille à proximité du point d'impact, un signal lumineux d'intensité non négligeable, et donc observable, était tout de même transmis (FIG. 1.6), et ce même en l'absence totale de contact entre le prisme et la lentille.

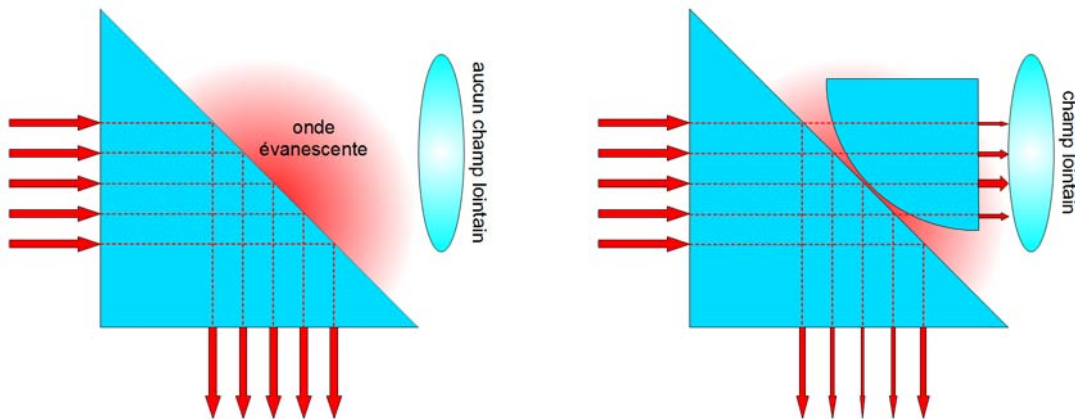


FIG. 1.5: Expérience de Newton : réflexion totale à la surface d'un prisme

FIG. 1.6: Expérience de Newton : réflexion totale frustrée à l'aide d'une lentille

L'interprétation est la suivante : l'illumination en réflexion totale de la surface du prisme crée une onde évanescente qui reste confinée à proximité de cette surface, et n'est donc pas détectable en champ lointain. Si l'on approche une lentille, celle-ci va alors entrer en zone de champ proche et va perturber ces ondes évanescentes, dont une partie va être convertie en ondes propagatives mesurables en champ lointain. Pour une étude plus approfondie de ce phénomène, la mise en équation du problème est détaillée dans l'annexe A, et n'est donc pas développée dans ce chapitre.

1.2.3 Théorie des polaritons

La théorie des polaritons décrit l'interaction entre une onde électromagnétique et la matière [24, 25]. Nous allons voir dans ce qui suit les prémisses de cette théorie.

Résonance de la matière

Plaçons nous dans le cas d'un réseau cristallin. Les atomes de ce réseau présentent des différences d'électronégativité. S'ils sont soumis à des ondes mécaniques (ondes élastiques qui se propagent à l'intérieur du réseau par vibration des différents plans d'atomes ou d'ions), des dipôles oscillants de pulsation ω peuvent alors apparaître et donner naissance à des ondes se propageant dans le matériau suivant un vecteur d'onde \mathbf{K} . Cette énergie de vibration peut alors être quantifiée, par analogie avec les quanta électromagnétiques (photons) ; on parle alors de phonons qui, associés aux ondes électromagnétiques, donnent naissance à ce que l'on appelle des phonon-polaritons de volume.

Le même raisonnement peut être fait dans le cas des métaux. Ici, les électrons libres peuvent être considérés comme un plasma et être assimilés, par analogie avec les cristaux ioniques, à des ions négatifs et les cœurs des atomes du métal jouent alors le rôle des ions positifs. La densité de charge négative de ce gaz peut alors subir des oscillations se propageant dans le matériau. Le quantum associé à ces vibrations est appelé plasmon, qui, une fois couplé à des ondes électromagnétiques, donne naissance à des plasmon-polaritons de volume.

Polaritons de surface

En électromagnétisme, les modes de surface sont des solutions particulières des équations de Maxwell (annexe A) au niveau d'une interface entre deux milieux, et sont issus de l'étude non radiative des relations de dispersion. Ces états sont marqués par des champs dont l'intensité est maximale au niveau de l'interface, et qui décroît exponentiellement au fur et à mesure que l'on s'en éloigne (FIG. 1.7).

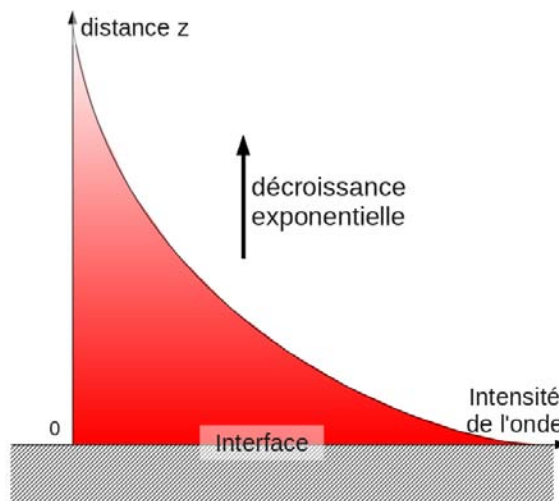


FIG. 1.7: Onde évanescente au dessus d'une interface entre deux milieux d'indices optiques différents

Les polaritons de surface font partie de ces solutions, et sont, là encore, issus du couplage entre une onde électromagnétique et une onde mécanique. On parle alors de phonon-polariton de surface dans le cas d'un réseau cristallin, et de plasmon-polariton de surface dans celui d'un métal.

Relation de dispersion d'un polariton de surface

Le moyen le plus simple de comprendre la physique d'un polariton de surface est d'étudier sa relation de dispersion. Pour cela, plaçons nous dans le cas d'une interface plane ($z = 0$) entre deux milieux de permittivités diélectriques ϵ_1 et ϵ_2 (FIG. 1.8), lesquelles sont supposées dépendre de la pulsation ω de l'onde se propageant dans le milieu. Les fonctions diélectriques relatives sont notées ϵ_1 et ϵ_2 .

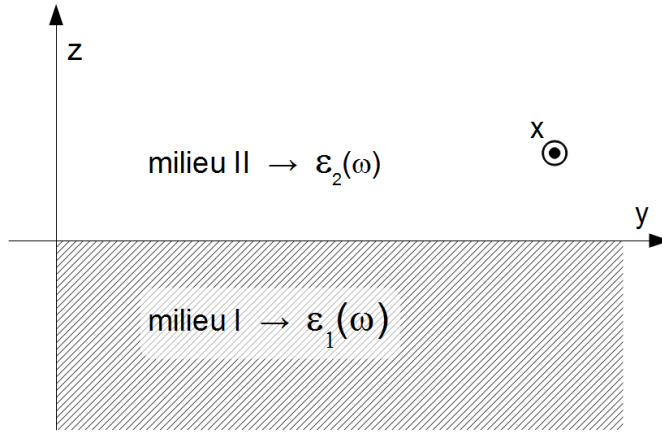


FIG. 1.8: Interface entre deux milieux d'indices optiques différents

Nous cherchons des ondes se propageant parallèlement à l'interface, et dont l'amplitude décroît exponentiellement avec z (mode de surface).

Le champ électrique au point $\mathbf{r} = (x, y, z) = (\mathbf{R}, z)$ nous est donné par :

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = (E_{x,1}, E_{y,1}, E_{z,1}) \cdot \exp(i(\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{R} - w_1 z - \omega t)) & (z < 0) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = (E_{x,2}, E_{y,2}, E_{z,2}) \cdot \exp(i(\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{R} + w_2 z - \omega t)) & (z > 0) \end{cases} \quad (1.6)$$

avec : K_{\parallel} la composante parallèle à l'interface du vecteur d'onde

w_1 et w_2 les composantes perpendiculaires à l'interface du vecteur d'onde dans les milieux 1 et 2

Pour satisfaire la condition de décroissance exponentielle, il faut que :

$$\begin{cases} w_1^2 = k_0^2 \epsilon_1 - K_{\parallel}^2 < 0 & \text{avec } \text{Im}(w_1) \geq 0 \text{ et } \text{Re}(w_1) \geq 0 \text{ si } \text{Im}(w_1) = 0 \\ w_2^2 = k_0^2 \epsilon_2 - K_{\parallel}^2 < 0 & \text{avec } \text{Im}(w_2) \geq 0 \text{ et } \text{Re}(w_2) \geq 0 \text{ si } \text{Im}(w_2) = 0 \end{cases} \quad (1.7)$$

avec $k_0 = \frac{\omega}{c}$ où c est la vitesse de la lumière dans le vide.

À partir de maintenant, nous supposons que K_{\parallel} est parallèle à l'axe des x . Deux situations distinctes, en ce qui concerne la polarisation de l'onde étudiée, sont à considérer :

- polarisation s ou TE :

Ici, seule la composante du champ électrique suivant l'axe des y est non nulle. Dans ce cas, si nous prenons en compte la continuité, en $z = 0$, de la composante tangentielle de \mathbf{E} ($E_{y,1} = E_{y,2} = E_{y,0}$), ainsi que celle du champ magnétique \mathbf{B} (ce qui implique que $\partial E_y / \partial z$ est continu), nous arrivons à :

$$w_1 + w_2 = 0 \quad (1.8)$$

Or, d'après l'équation 1.7, cette équation n'est jamais satisfaite, puisque $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$. Cela montre que nous ne pouvons pas avoir de polariton de surface en polarisation s .

- polarisation p ou TM :

Pour cette polarisation, la composante du champ électrique suivant l'axe des y est nulle. En considérant la continuité de la composante tangentielle de \mathbf{E} ($E_{x,1} = E_{x,2} = E_{x,0}$), et en posant $\text{div} \mathbf{E} = 0$ (milieu homogène et non chargé), nous arrivons à :

$$\begin{cases} E_{z,1} = -\frac{K_{\parallel}}{w_1} E_{x,0} \\ E_{z,2} = +\frac{K_{\parallel}}{w_2} E_{x,0} \end{cases} \quad (1.9)$$

En outre, comme $D_z = \epsilon E_z$ est continu au niveau d'une interface (cf. annexe A), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \epsilon_1 E_{z,1} &= \epsilon_2 E_{z,2} \\ \Rightarrow \frac{\epsilon_1}{w_1} + \frac{\epsilon_2}{w_2} &= 0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

Ainsi, en reprenant l'équation 1.7, nous arrivons à la relation reliant la pulsation ω au vecteur d'onde tangent K_{\parallel} , à savoir la relation de dispersion de l'onde de surface (cette relation est représentée figure 1.9 dans le cas d'une interface vide/SiC) :

$$K_{\parallel}^2 = k_0^2 \frac{\epsilon_1(\omega)\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)} \quad (1.11)$$

Pour illustrer cette relation, nous nous plaçons maintenant au niveau d'une interface plane entre le vide ($\epsilon_2 = 1$) et du SiC (carbure de silicium). La fonction diélectrique du SiC nous est donnée par un modèle de Lorentz à un oscillateur, dont la forme, ainsi que les différents paramètres, sont donnés dans l'annexe B. La représentation de la relation de dispersion (FIG. 1.9) nous permet alors de distinguer deux zones : d'une part, la zone des ondes propagatives, au-dessus de la ligne de lumière ($\omega = kc$, cf. annexe A) où le vecteur d'onde est réel, et, d'autre part, la zone des polaritons de surface, en dessous de cette

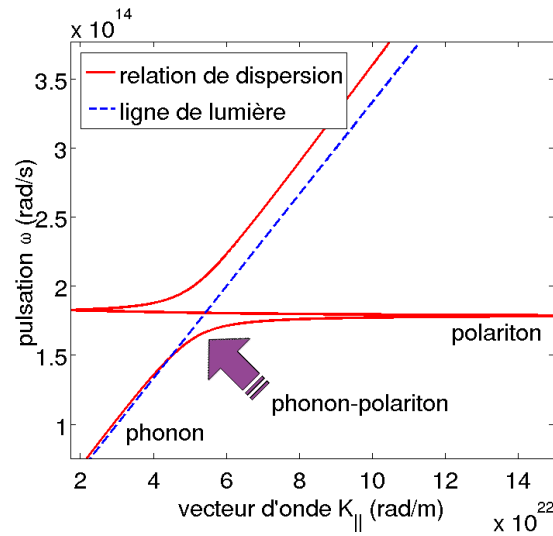


FIG. 1.9: Relation de dispersion d'un phonon-polariton de surface dans le cas du SiC

même ligne de lumière, dans laquelle le vecteur d'onde est complexe, ce qui implique la présence d'une onde non-radiative.

Cette zone de polaritons peut, elle-même, se décomposer en trois régions. Tout d'abord, pour les faibles valeurs de $K_{||}$, le polariton est une onde avec une vitesse de phase ($v_{\phi} = \omega/K_{||}$) proche de c et se comporte donc typiquement comme un photon. Par contre, lorsque $K_{||}$ tend vers l'infini, l'onde présente une vitesse de groupe ($v_g = \partial\omega/\partial K_{||}$) qui tend à s'annuler. On parle alors de phonon de surface. La région de transition entre les deux états ($K_{||}$ faible et $K_{||}$ fort) est marquée par un couplage fort entre l'onde électromagnétique qui se propage et l'oscillation des charges du réseau. C'est à ce moment précis que l'on parle de phonon-polaritons de surface.

1.2.4 Densité d'énergie électromagnétique au dessus d'une interface

Le but de cette partie est de montrer numériquement l'influence du champ évanescent sur la densité d'énergie et sa prédominance à proximité d'une interface. Nous basons nos calculs sur les résultats de la thèse de J.P. Mulet [26].

Cas général

Nous nous plaçons toujours dans le cas d'une interface plane située à $z = 0$, qui sépare le milieu 2, supposé être le vide, du substrat à étudier (milieu 1) (FIG. 1.8). Par souci de clarté, nous posons $\epsilon_1 = \epsilon$ et $\epsilon_2 = 1$. Les nombres d'onde k_1 et k_2 sont définis par :

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \epsilon k_0^2 = w^2 + K_{||}^2 \\ k_2^2 &= k_0^2 = w_0^2 + K_{||}^2 \end{aligned} \quad (1.12)$$

Avant de donner l'expression de la densité d'énergie, nous devons rappeler quelques définitions qui nous seront utiles par la suite. Tout d'abord, nous avons besoin des coefficients de Fresnel en réflexion dans le cas d'ondes polarisées s et p se propageant dans le milieu 1 (i.e. le substrat). Ils nous sont donnés par :

$$r_{12}^s = \frac{w - w_0}{w + w_0} \quad r_{12}^p = \frac{w - \epsilon w_0}{w + \epsilon w_0} \quad (1.13)$$

Il nous faut ensuite définir la densité d'énergie associée au rayonnement du corps noir à la température T et à la pulsation ω , telle que :

$$u_0^\omega(\omega, T) = \frac{\omega^2 \Theta(\omega, T)}{\pi^2 c^2} \quad (1.14)$$

où $\Theta(\omega, T) = \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}$ est l'énergie moyenne d'un oscillateur harmonique quantique [26].

Ces différentes grandeurs nous permettent de déterminer la densité d'énergie monochromatique totale u_{tot}^ω au-dessus d'une interface vide/substrat, telle que :

$$u_{\text{tot}}^\omega(z, \omega, T) = u_{\text{prop}}^\omega(z, \omega, T) + u_{\text{eva}}^\omega(z, \omega, T) \quad (1.15)$$

où u_{prop}^ω et u_{eva}^ω sont respectivement les densités d'énergie monochromatique relatives aux ondes propagatives et aux ondes évanescentes. Leurs expressions nous sont données par :

$$\begin{cases} u_{\text{prop}}(z, \omega, T) = \frac{1}{2} u_0^\omega(\omega, T) \int_0^{k_0} \left[\frac{K_{\parallel} dK_{\parallel}}{k_0 |w_0|} [(1 - |r_{12}^s|^2) + (1 - |r_{12}^p|^2)] \right] \\ u_{\text{eva}}(z, \omega, T) = u_0^\omega(\omega, T) \int_{k_0}^{\infty} \left[\frac{K_{\parallel}^3 dK_{\parallel}}{k_0^3 |w_0|} [\text{Im}(r_{12}^s) + \text{Im}(r_{12}^p)] e^{-2\text{Im}(w_0)z} \right] \end{cases} \quad (1.16)$$

La démonstration de ces expressions analytiques est accessible dans la thèse de J.P. Mulet [26].

Application au Carbure de Silicium

L'étude se porte ici sur le cas d'une interface plane entre le vide et du carbure de silicium (SiC), à une température de 300K. Rappelons la relation de dispersion au niveau d'une interface entre un matériau quelconque et le vide :

$$K_{\parallel}^2 = k_0^2 \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon(\omega) + 1} \quad (1.17)$$

K_{\parallel} présente une asymptote si, et seulement si, $\text{Im}(\epsilon(\omega)) \approx 0$ et $\text{Re}(\epsilon(\omega)) = -1$. Dans le cas du SiC, ce phénomène de résonance des ondes de surface se situe à la pulsation $\omega_{\text{rés}} = 1,78 \times 10^{14} \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$, comme le laissait supposer la figure 1.9. Cette résonance,

1.2. LES ONDES DE SURFACE

liée au pic de la densité d'états des polaritons de surface, se retrouve au niveau de la densité d'énergie électromagnétique, comme nous le montre le graphe 1.10. Cette figure, qui représente la densité d'énergie électromagnétique monochromatique totale à une distance de 10 nm au-dessus de l'interface, illustre parfaitement cette résonance par un pic d'énergie à la pulsation $\omega_{\text{rés}}$, comme affirmé plus haut. Cela montre que la densité d'énergie est quasi-monochromatique dans le cas du SiC.

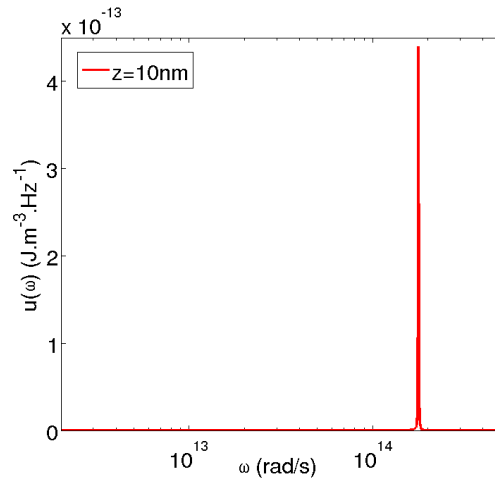


FIG. 1.10: Densité d'énergie monochromatique totale à $z=10$ nm d'une interface vide/SiC, à la température $T=300\text{K}$

À titre de comparaison, les contributions des ondes évanescentes et propagatives, à une distance de 10 nm, sont représentées sur la figure 1.11 à l'échelle log-log.

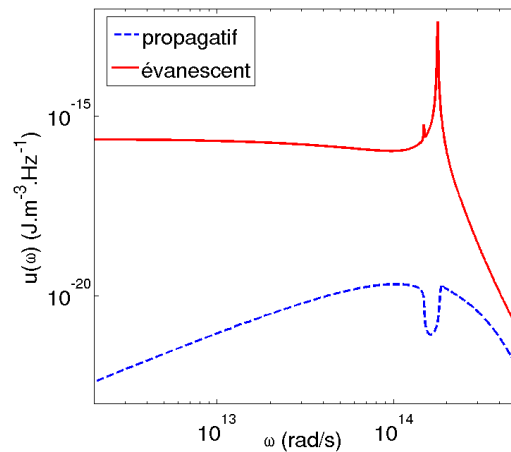


FIG. 1.11: Densité d'énergie monochromatique, 10 nm au-dessus d'une interface vide/SiC, à la température $T=300\text{K}$: contributions des ondes propagatives et évanescentes

La différence d'énergie observée est d'environ huit ordres de grandeur, ce qui présente de

grands avantages, notamment expérimentaux, dont nous parlerons ultérieurement. Nous pouvons en outre remarquer la présence d'un second pic, plus faible, sur la courbe rouge. Celui-ci est dû au champ évanescent polarisé s , le plus important étant issu de la polarisation p [26].

Il est aussi intéressant d'observer l'évolution de la densité d'énergie monochromatique totale pour différentes valeurs de z . La figure 1.12 nous montre l'évolution de u_{tot}^{ω} lorsque nous nous éloignons de la surface, le champ lointain étant marqué par l'absence totale d'influence de la part des ondes évanescentes. En outre, si l'on intègre cette densité d'énergie monochromatique sur tout le spectre, cela nous permet d'observer l'évolution de la densité d'énergie u_{tot} en fonction de la hauteur z d'observation (FIG. 1.13).

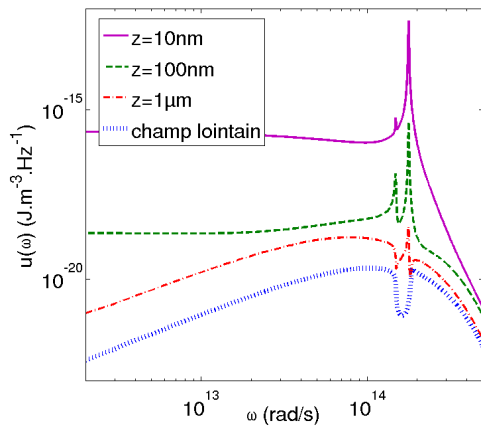


FIG. 1.12: Densité d'énergie monochromatique totale au-dessus d'une interface vide/SiC pour différentes valeurs de z à la température $T=300\text{K}$

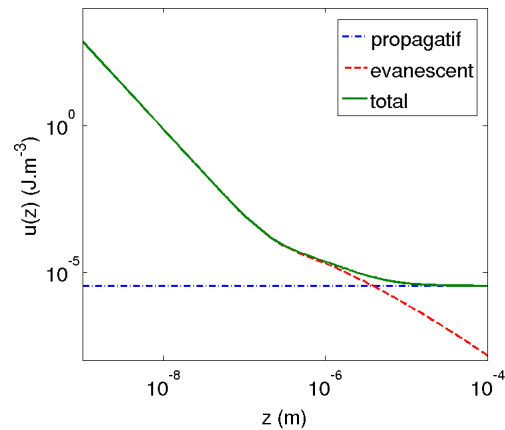


FIG. 1.13: Densité d'énergie au-dessus d'une interface vide/SiC : contributions propagative et évanescente à la température $T=300\text{K}$

Les zones de champ proche et de champ lointain sont alors parfaitement visibles. Pour les faibles distances, les ondes évanescentes sont prédominantes et la densité d'énergie décroît en z^{-3} [26]. Par contre, à grande distance ($z > 10\mu\text{m}$), seules les ondes propagatives sont perceptibles.

Application au verre SiO_2

Le second cas étudié est celui du verre SiO_2 , à une température de 300K . La fonction diélectrique de ce matériau peut être décrite dans l'infrarouge par quatre oscillateurs de Lorentz (voir annexe B). Là encore, l'évolution de la densité d'énergie monochromatique totale pour différentes distances z nous est donnée par la figure 1.14, où nous pouvons observer la présence de différents pics de résonance.

Pour finir, comme dans le cas du SiC, nous avons intégré la densité d'énergie monochromatique sur tout le spectre, ce qui nous permet d'observer l'évolution de la densité d'énergie en fonction de la hauteur z (FIG. 1.15). Une fois de plus, cette figure nous

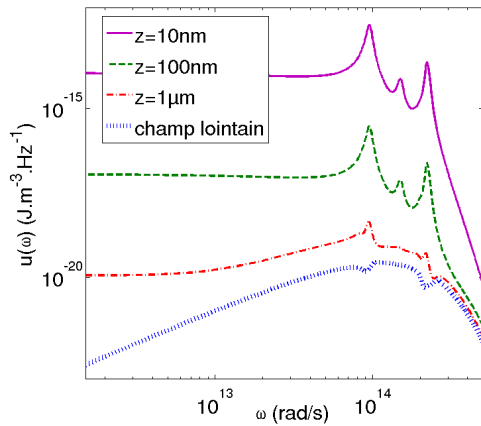


FIG. 1.14: Densité d'énergie monochromatique totale au-dessus d'une interface vide/SiO₂ pour différentes valeurs de z à la température $T=300K$

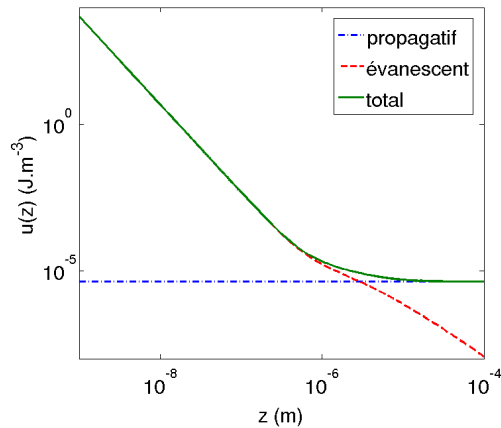


FIG. 1.15: Densité d'énergie au-dessus d'une interface vide/SiO₂ : contributions propagative et évanescente à la température $T=300K$

permet de distinguer les zones de champ proche, de champ lointain, ainsi que la zone transitoire.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons pu approcher les notions de champ proche, de champ lointain, ou encore d'ondes évanescentes, en illustrant nos propos d'applications simples telles que les antennes radioélectriques ou les dipôles oscillants. Notre étude s'est ensuite focalisée sur les particularités que présentent les interfaces optiques entre deux milieux (réflexion totale, polaritons de surface, forte variation de la densité d'énergie,...). Ces études théoriques nous permettront par la suite de prévoir le comportement des matériaux étudiés, à savoir le SiC et le verre SiO₂, et donc de créer et de tester divers échantillons pouvant présenter des caractéristiques intéressantes à nos yeux. Le chapitre suivant va présenter les différentes techniques de microscopies permettant de mettre expérimentalement en avant ces singularités optiques.

Chapitre 2

La microscopie optique en champ proche

Sommaire

2.1 La microscopie optique classique	26
2.1.1 Principes de base	26
2.1.2 Limitations	26
2.2 Les nouvelles microscopies	28
2.2.1 Les microscopes électroniques	28
2.2.2 Les microscopes à sondes locales	29
2.3 La technologie SNOM	33
2.3.1 Expérience de Synge	33
2.3.2 Les différents modes SNOM	34
2.3.3 Description d'un dispositif ASNOM complet	36
2.4 Montage et développement d'un microscope TRSTM	37
2.4.1 Dispositif et système d'asservissement de la pointe	37
2.4.2 Système optique	38
2.4.3 Traitement du signal	40
2.4.4 Manipulations et difficultés rencontrées	41

Introduction

Dans ce chapitre, après avoir introduit brièvement les principes de la microscopie optique classique, ainsi que ses limites, nous décrivons un certain nombre de technologies permettant d'améliorer la résolution des images que l'on désire obtenir lors de l'étude d'un échantillon. Ceci nous amène à parler des différentes techniques de microscopies électroniques ou de microscopies à sonde locale. Notre attention se focalise plus particulièrement sur les microscopes optiques en champ proche, et notamment le TRSTM (Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy). La dernière partie du chapitre porte sur

2.1. LA MICROSCOPIE OPTIQUE CLASSIQUE

une description détaillée d'un montage TRSTM, ainsi que sur les difficultés de mise en œuvre d'un tel dispositif.

2.1 La microscopie optique classique

2.1.1 Principes de base

La microscopie optique est l'étude de la lumière diffusée par un échantillon. Une source externe doit être utilisée, mais peut parfois se limiter à la lumière ambiante. Suivant la configuration de l'échantillon, notamment son épaisseur, l'illumination peut se faire par réflexion ou par transmission. Ces deux modes sont représentés très schématiquement sur les images 2.1 et 2.2.

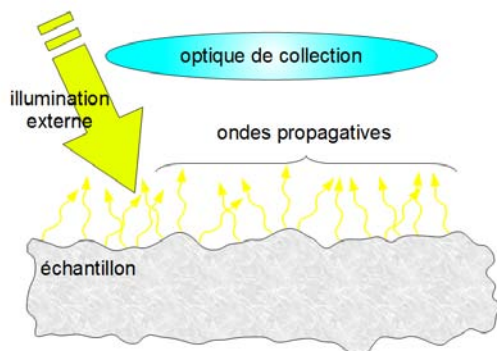


FIG. 2.1: Illustration schématique du fonctionnement d'un microscope optique classique en mode réflexion

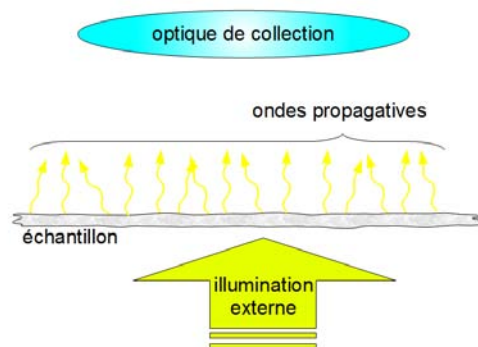


FIG. 2.2: Illustration schématique du fonctionnement d'un microscope optique classique en mode transmission

L'étude se fait généralement dans le domaine visible (pour une longueur d'onde comprise approximativement entre 400nm et 800nm) car ainsi l'image est directement détectable par l'œil humain. Cependant, le spectre d'étude peut très bien se situer, par exemple, dans l'infrarouge, et la détection se fait alors par un outil de mesure sensible à ces longueurs d'ondes (capteur infrarouge,...). En effet, les infrarouges sont souvent étudiés pour estimer l'intensité du champ électromagnétique émis par un échantillon, sous l'influence de sa température.

2.1.2 Limitations

Diffraction d'une onde

En microscopie optique, l'image d'une source ponctuelle n'est pas ponctuelle. Ce phénomène, dû à la nature ondulatoire de la lumière, repose sur le principe de Huygens-

Fresnel [27], énoncé par :

"Chaque point M d'une surface S atteinte par la lumière peut être considéré comme une source secondaire émettant une onde sphérique dont l'amplitude et la phase sont celles de l'onde incidente au point M."

Dans le cas de la diffraction d'une onde par une ouverture circulaire de diamètre d , l'intensité diffractée dans la direction θ (θ étant l'angle entre l'axe normal au plan de l'ouverture et l'axe d'observation) est donnée par [28] :

$$I(\theta) \propto \left(\frac{J_1(\eta)}{\eta} \right)^2 \quad (2.1)$$

où $\eta = \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta$, λ est la longueur d'onde et J_n est la fonction de Bessel d'ordre n . J_n nous est donnée par l'équation 2.2 :

$$J_n(\eta) = (\eta/2)^n \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{2^{2p} p! (n+p)!} \eta^{2p} \quad (2.2)$$

Cette intensité, indépendante de θ , est représentée sur la figure 2.3(a). Elle montre ce que l'on appelle une tache de diffraction (ou disque d'Airy), constituée d'un disque entouré d'anneaux concentriques.

Critère de Rayleigh

La diffraction d'une onde décrite précédemment permet de déterminer la faculté qu'a un microscope optique à dissocier deux points distincts. Sa limite de résolution théorique nous est donnée par le critère de Rayleigh [28, 29], à savoir :

$$\delta_{lim} = \frac{1.22\lambda}{2n_m \sin \theta_{ob}} \quad (2.3)$$

où λ est la longueur d'onde du faisceau utilisé, n_m l'indice de réfraction du milieu (en général l'air) et θ_{ob} le demi-angle d'ouverture de l'objectif du microscope. $(n_m \sin \theta_{ob})$ représente alors l'ouverture numérique (ON) de l'objectif. Ainsi, pour pouvoir distinguer deux points sources, il est nécessaire que la distance qui les sépare soit supérieure à δ_{lim} , sans quoi les disques d'Airy se recouvrent, comme le montre la figure 2.3.

Ainsi, la figure 2.3(b) décrit un système de deux points sources de même intensité en limite de résolution, alors que la figure 2.3(c) nous montre le cas où le critère de Rayleigh n'est plus respecté, et où les deux points observés ne sont donc plus discernables.

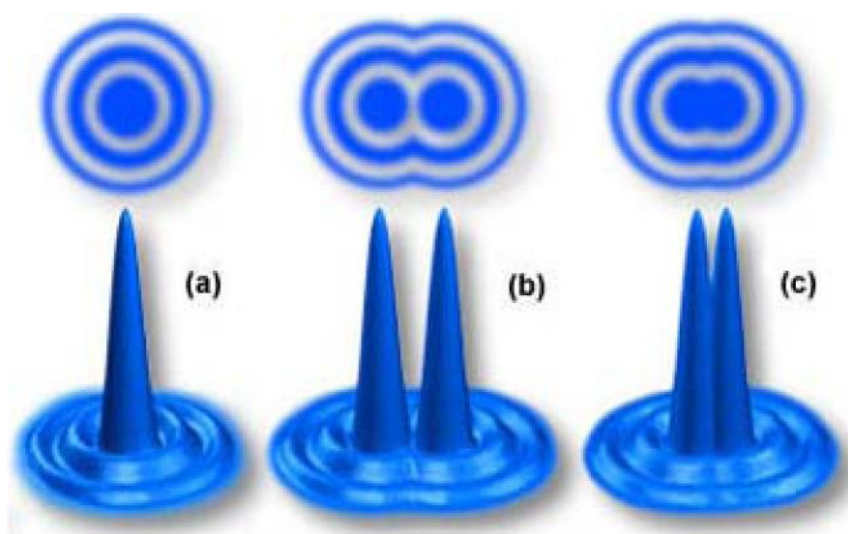


FIG. 2.3: Disques d'Airy (a) image d'un point, (b) image de deux points en limite de résolution, (c) image de deux points non résolus

2.2 Les nouvelles microscopies

Dans le but de contourner le problème de la limite de résolution en microscopie optique classique, de nombreuses technologies ont été développées. Nous ne retiendrons ici que deux grandes familles, à savoir les microscopes électroniques et les microscopes à sonde locale.

2.2.1 Les microscopes électroniques

Les microscopes électroniques utilisent des faisceaux d'électrons que l'on peut comparer, par analogie, aux photons utilisés en microscopie optique. Alors que la longueur d'onde des photons est définie par $\lambda_p = c/\nu$, avec c la vitesse de la lumière dans le vide et ν la fréquence de l'onde, la longueur d'onde des électrons est donnée par $\lambda_e = h/p$ (longueur d'onde de Broglie) où h est la constante de Planck et p la quantité de mouvement de l'électron [30]. Un faisceau d'électrons présente donc une longueur d'onde pouvant atteindre 1 pm, ce qui est bien plus faible que celle d'un faisceau de lumière visible (entre 400 et 800 nm).

En se reportant à l'équation 2.3, nous pouvons en déduire que la résolution théorique sera bien meilleure en microscopie électronique qu'en microscopie optique. Que ce soit en transmission (TEM : Transmission Electron Microscopy) ou à balayage (SEM : Scanning Electron Microscopy), la résolution de l'image obtenue est de l'ordre de l'angström, alors qu'en microscopie optique classique, elle dépasse rarement $0.1\mu\text{m}$.

À titre d'information, nous citerons aussi les microscopes "atomiques de Broglie" (Atomic de Broglie microscope) utilisant des faisceaux d'atomes d'hélium. Cependant,

nous n'entrerons pas dans les détails, le principe de fonctionnement étant fortement semblable à celui d'un microscope électronique.

2.2.2 Les microscopes à sondes locales

Cette technique d'imagerie est basée sur l'étude de la surface d'un objet à l'aide d'une sonde (pointe), pour en obtenir certaines caractéristiques. Pour cela, la sonde balaye la surface d'un échantillon, ce qui nécessite des surfaces relativement planes. Ici, la résolution est limitée, non plus par une longueur d'onde, mais par le rayon de courbure de l'extrémité de la pointe.

Nous allons décrire ici trois grandes familles de microscopes à sonde locale., à savoir les microscopes à effet tunnel (STM), les microscopes à force atomique (AFM) et les microscopes optiques en champ proche (SNOM).

Microscope à effet tunnel

Le microscope à effet tunnel (STM : Scanning Tunneling Microscopy) se base sur un phénomène quantique, l'effet tunnel, pour déterminer la morphologie et la densité d'états électroniques (quantification du nombre d'états électriques possédant une énergie donnée dans le matériau considéré) de surfaces conductrices ou semi-conductrices [31]. Pour cela, la sonde balaye l'échantillon, et le courant passant entre ces deux éléments est constamment mesuré.

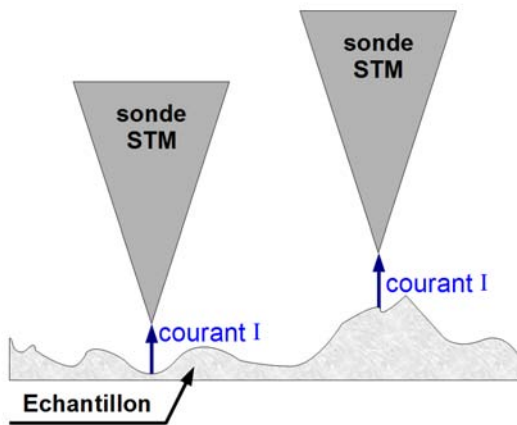


FIG. 2.4: Balayage de la surface d'un échantillon par une pointe STM - courant constant

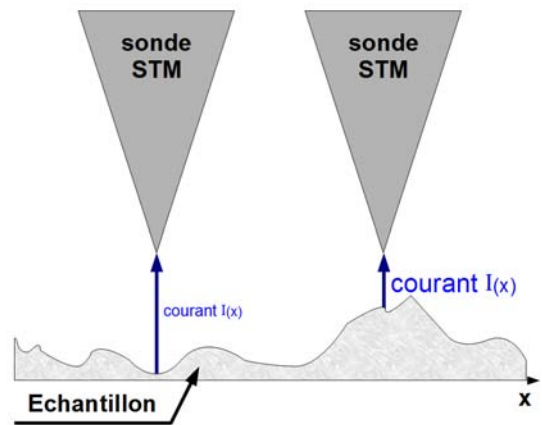


FIG. 2.5: Balayage de la surface d'un échantillon par une pointe STM - hauteur constante

Il existe pour cela deux modes de balayage. Le premier se fait à courant constant (FIG. 2.4) : si ce dernier varie lors du scan, une boucle de rétroaction va réajuster la hauteur de la pointe pour que le courant revienne à sa valeur initiale. Ce sont alors les hauteurs successives de la pointe au cours du balayage qui vont former l'image STM.

2.2. LES NOUVELLES MICROSCOPIES

Le second mode se fait à hauteur constante (FIG. 2.5), et ce sont donc les variations du courant mesuré qui vont fournir l'image.

Microscope à force atomique

Le microscope à force atomique (AFM : Atomic Force Microscopy) [32, 33] se base sur le phénomène d'attraction/répulsion entre une sonde, fixée à un levier, et l'échantillon. Comme dans le cas du STM, la pointe balaye la surface pour déterminer la topographie de l'échantillon. Il existe principalement trois modes d'utilisation :

- Tout d'abord, nous pouvons trouver ce que l'on appelle le mode contact qui s'appuie sur les forces répulsives entre la sonde et l'échantillon. L'extrémité est alors repoussée du fait du principe d'exclusion de Pauli [34]. L'asservissement de la pointe se fait par mesure de l'angle de déflexion du levier, par l'intermédiaire d'un faisceau laser se réfléchissant sur le dos de ce dernier (FIG. 2.6).

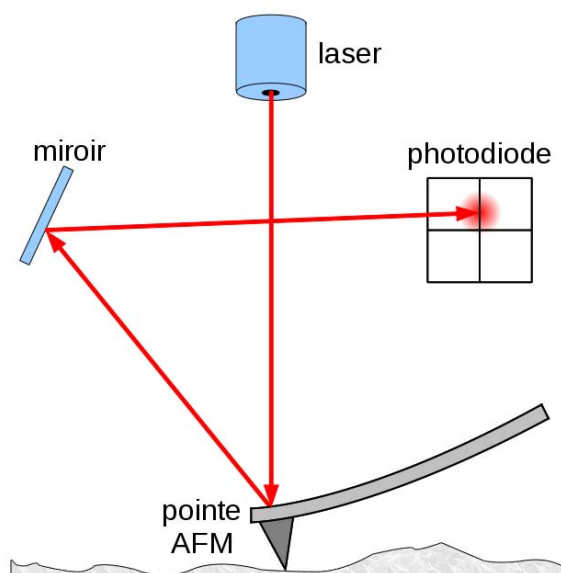


FIG. 2.6: Système d'asservissement de la sonde d'un microscope AFM par un système laser

L'image 2.6 nous montre l'exemple d'un dispositif AFM-contact par asservissement laser : le faisceau éclairant le dos du levier est réfléchi vers un miroir plan, et est redirigé vers une photodiode à quatre quadrants permettant de mesurer les déviations du faisceau au cours du déplacement de la pointe, et donc d'estimer la déflexion du levier.

Comme dans le cas du microscope STM, deux modes d'asservissement existent. La première possibilité est d'imposer une déflexion constante, et l'ensemble du dispositif soutenant la sonde doit alors réajuster sa hauteur par rapport à l'échantillon, via une boucle de rétroaction, pour que cette déflexion du levier retrouve sa valeur initiale (FIG. 2.7). La

seconde possibilité consiste à maintenir constante la hauteur de la pointe, et de mesurer l'évolution de la déflexion du levier au cours du balayage (FIG. 2.8).

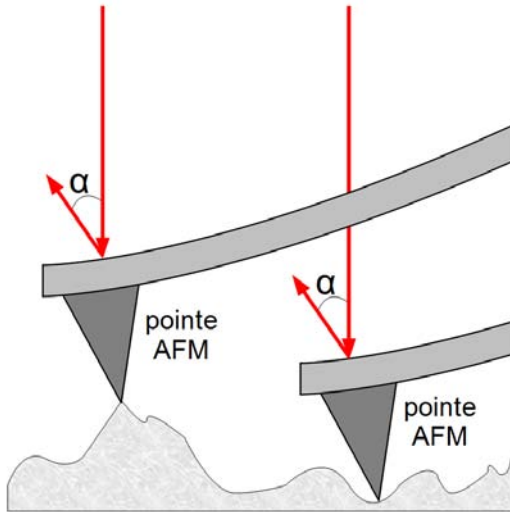


FIG. 2.7: Asservissement d'un microscope AFM en mode contact - déflexion constante

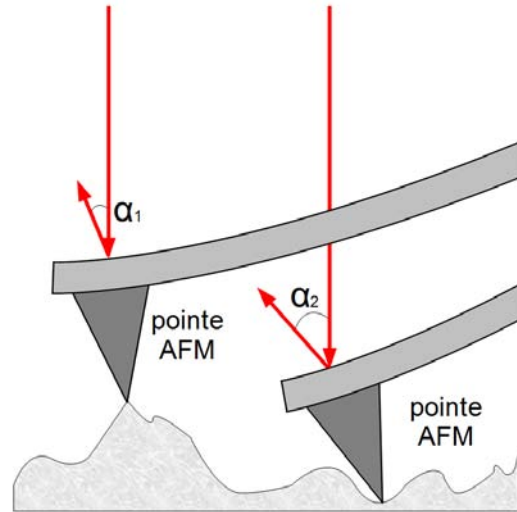


FIG. 2.8: Asservissement d'un microscope AFM en mode contact - hauteur constante

- Le second mode est le mode non-contact. Il utilise exclusivement les forces d'attraction entre la sonde et l'échantillon. Dans ce cas, le levier vibre à une fréquence imposée par l'utilisateur (FIG. 2.9).

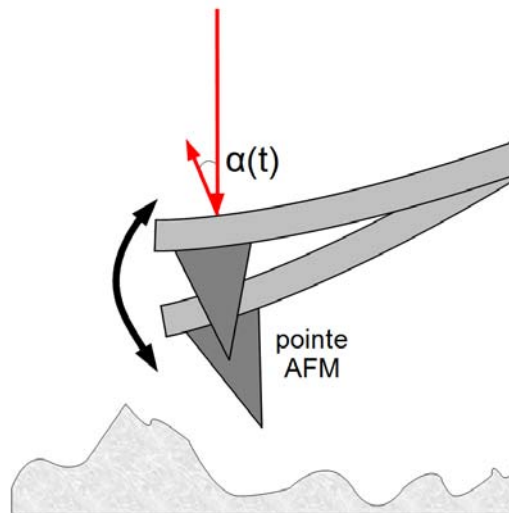


FIG. 2.9: Asservissement d'un microscope AFM en mode non-contact

La proximité de la surface va faire varier la fréquence de résonance du levier et donc

2.2. LES NOUVELLES MICROSCOPIES

l'amplitude d'oscillation de la sonde. L'asservissement, dans ce cas, peut là encore se faire par réflexion d'un faisceau laser sur le levier (voir paragraphe précédent), ce qui permet, soit d'imposer l'amplitude d'oscillation de la sonde en faisant varier la distance moyenne entre l'extrémité de la pointe et la surface de l'échantillon (on mesure alors les variations de cette distance moyenne), soit en maintenant constante cette distance moyenne pointe/interface, ce qui nous permet de mesurer les variations de l'amplitude d'oscillation.

- Finalement, le mode contact intermittent (tapping mode) fonctionne sur le même principe que le mode décrit précédemment, à la différence près que la sonde va entrer en contact avec la surface de façon périodique (FIG. 2.10). Il s'agit d'un mode résonnant non-linéaire. Une étude approfondie de cette technique est menée dans l'ouvrage de L. Aigouy et al. [31].

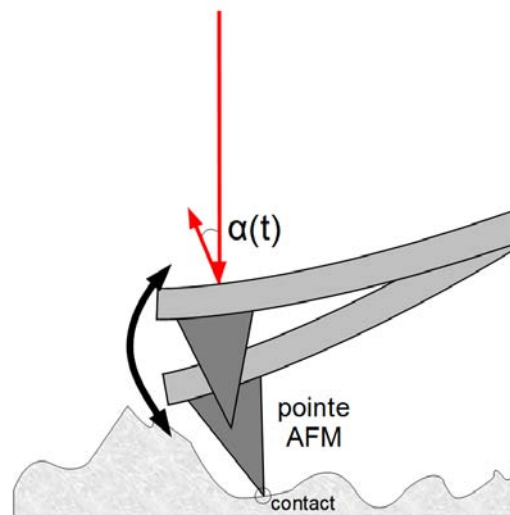


FIG. 2.10: Asservissement d'un microscope AFM en mode contact intermittent

Microscope optique en champ proche

Le microscope optique en champ proche (SNOM : Scanning Near-field Optical Microscopy) permet la caractérisation optique d'un objet de taille sub-longueur d'onde. Cette technique consiste à positionner l'extrémité d'une sonde en zone de champ proche, et de perturber les ondes évanescentes pouvant s'y trouver, et ainsi de créer des ondes propagatives mesurables en champ lointain. Cette technique est celle que nous avons employée et modélisée. Nous allons la décrire dans le sous-chapitre suivant.

2.3 La technologie SNOM

Nous parlons ici des origines de la technologie SNOM, ainsi que des différents modes de fonctionnement existants. Une attention particulière est apportée au mode de fonctionnement TRSTM qui est modélisé dans la suite de cette étude.

2.3.1 Expérience de Syngé

Dans un article publié en 1928 [35], E.H. Syngé propose d'utiliser une ouverture sub-longueur d'onde, réalisée dans un écran opaque, pour limiter la zone d'éclairage d'un échantillon.

En plaçant cet orifice à une distance e de la surface très inférieure à la longueur d'onde λ (FIG. 2.11), celle-ci se retrouve éclairée par des ondes évanescentes de confinement sub- λ dans les trois directions de l'espace. La lumière diffusée par l'échantillon résulte alors de la conversion des ondes évanescentes en ondes propagatives détectables en champ lointain par un système optique classique. Pour obtenir une image complète de l'échantillon, il suffit alors de balayer sa surface en déplaçant l'ouverture.

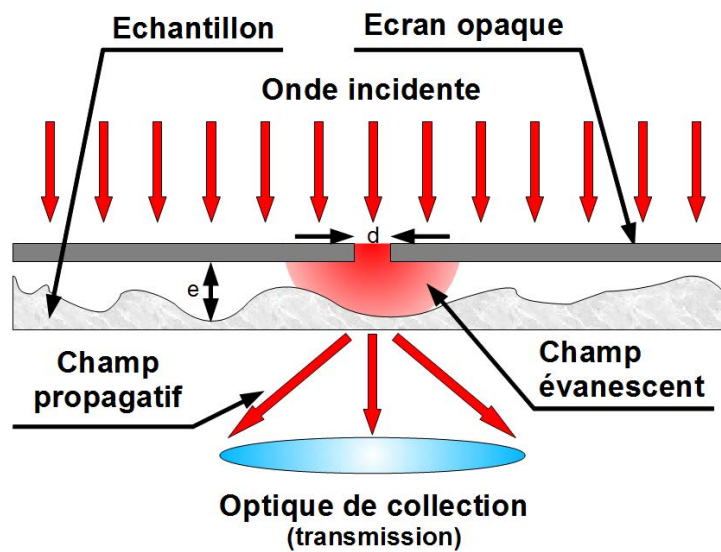


FIG. 2.11: Expérience de Syngé : illumination locale d'un échantillon

Cette méthode n'a pu être mise en pratique qu'à partir de 1984, faute de moyen technique. C'est D.W. Pohl [36] qui a proposé l'architecture du premier microscope optique en champ proche, ce dernier permettant d'atteindre une résolution optique latérale de $\lambda/20$ (la longueur d'onde d'analyse étant de 488nm). Pour cela, il a utilisé une pointe en quartz dont les flancs étaient recouverts d'aluminium, sauf à son extrémité inférieure, cette dernière constituant donc l'ouverture sub-longueur d'onde. Cette ouverture était alors positionnée en zone de champ proche par un système STM (paragraphe 2.2.2). Cette méthode,

appartenant donc à la famille des microscopes à sondes locales, est développée dans le paragraphe suivant.

2.3.2 Les différents modes SNOM

Les sondes à ouverture

Les sondes à ouvertures représentent parfaitement l'expérience de Synge, leurs extrémités jouant le rôle de nano-trou. Ces sondes sont généralement constituées d'une fibre optique effilée à son extrémité, et recouverte d'une couche de métal opaque dans la zone spectrale utile. L'ouverture optique est généralement de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres. Ce type de SNOM n'est pas au centre de notre problématique, nous nous contenterons donc de décrire brièvement les différentes configurations possibles.

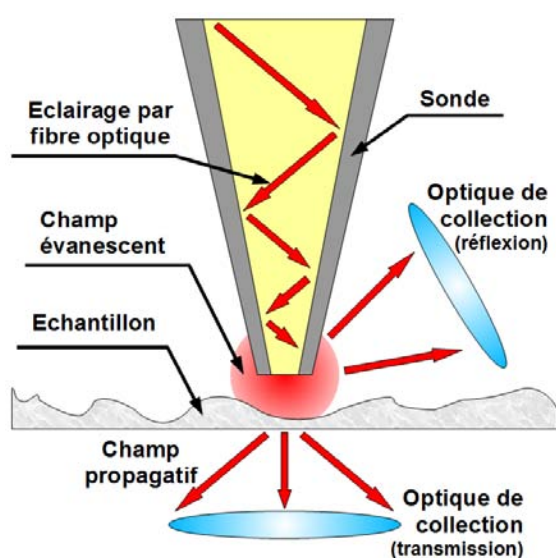


FIG. 2.12: SNOM en mode illumination

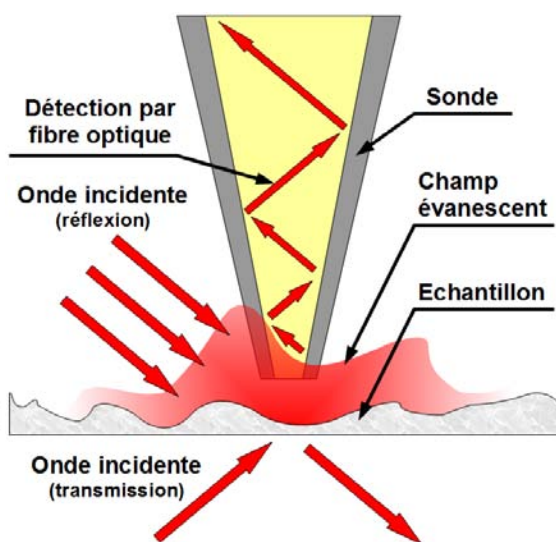


FIG. 2.13: SNOM en mode collection

En premier lieu, on trouve donc le mode illumination où la sonde sert de source lumineuse, et crée, à son extrémité, des ondes évanescentes qui éclairent localement l'échantillon, ce qui induit l'apparition d'ondes propagatives détectables en champ lointain (FIG. 2.12). Il s'agit typiquement du système utilisé par D.W. Pohl et al. [36].

À cela s'ajoute le mode collection où les ondes évanescentes sont créées en éclairant directement l'échantillon par illumination externe (par exemple à l'aide d'un laser). La sonde sert alors à détecter localement ces ondes (FIG. 2.13). Une partie des ondes de champ proche est alors collectée par l'ouverture de la sonde, pour être ensuite guidée jusqu'à l'autre extrémité de la fibre optique où elle peut être mesurée.

Les sondes diffusantes

Les sondes sans ouvertures ou diffusantes sont utilisées dans les techniques de microscopies dites ASNOM (Apertureless Scanning Near-field Optical Microscopy). Ici, l'illumination se fait obligatoirement par éclairage externe plus ou moins localisé, par transmission ou réflexion (FIG. 2.14). L'extrémité de la pointe, plongée dans le champ proche de l'objet, va alors jouer le rôle de nanodiffuseur. Les ondes propagatives, ainsi créées, peuvent alors être collectées en champ lointain par réflexion ou transmission. En pratique, ce sont généralement des sondes normalement destinées aux microscopes AFM qui sont utilisées.

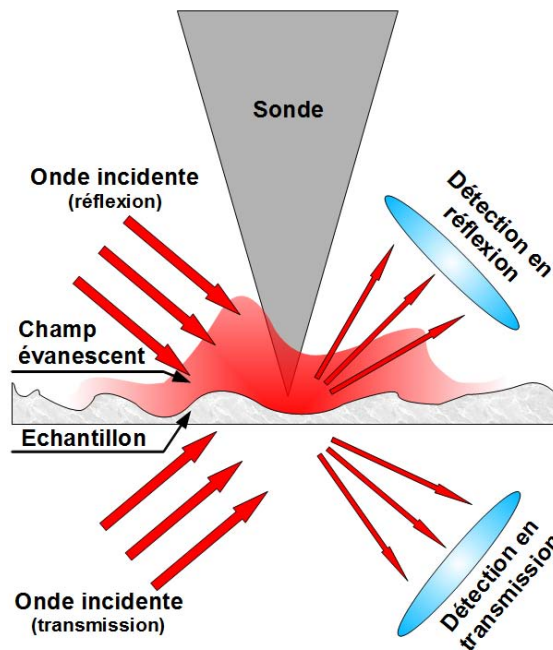


FIG. 2.14: ASNOM - différents modes d'illuminations

Le microscope TRSTM

Le TRSTM (Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy) est un microscope optique en champ proche de type ASNOM. Sa particularité est qu'aucune excitation extérieure n'est utilisée pour créer des ondes de surface. Ce sont, en fait, les fluctuations thermiques, au sein de l'échantillon, qui vont engendrer des oscillations de densité de charge (ions ou plasma) dans le matériau, créant ainsi des polaritons de volume et de surface. Les ondes évanescentes, ainsi créées, vont être perturbées et diffusées par la sonde vers un capteur (infrarouge, en ce qui nous concerne). Ce type de microscope permet donc d'évaluer la densité d'énergie électromagnétique au niveau de la surface d'échantillons. Cette technique a déjà été mise en œuvre, pour la première fois, en 2006, par l'équipe de Y. de Wilde [7].

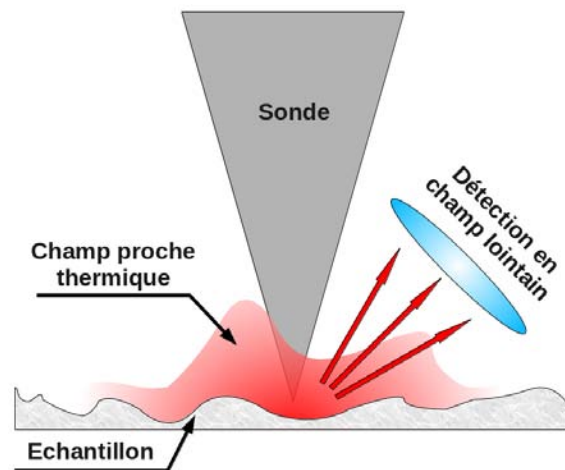


FIG. 2.15: Principe du TRSTM

2.3.3 Description d'un dispositif ASNOM complet

Un microscope ASNOM utilise généralement la technologie AFM en mode non-contact pour asservir la sonde. Ainsi, la pointe va entrer en zone de champ proche de façon périodique et va, par conséquent, diffuser en champ lointain des ondes propagatives dont l'amplitude sera modulée à la même fréquence. Une optique de collection permet de recueillir une partie de ces ondes, et de les rediriger vers un capteur sensible au spectre de longueurs d'onde désiré.

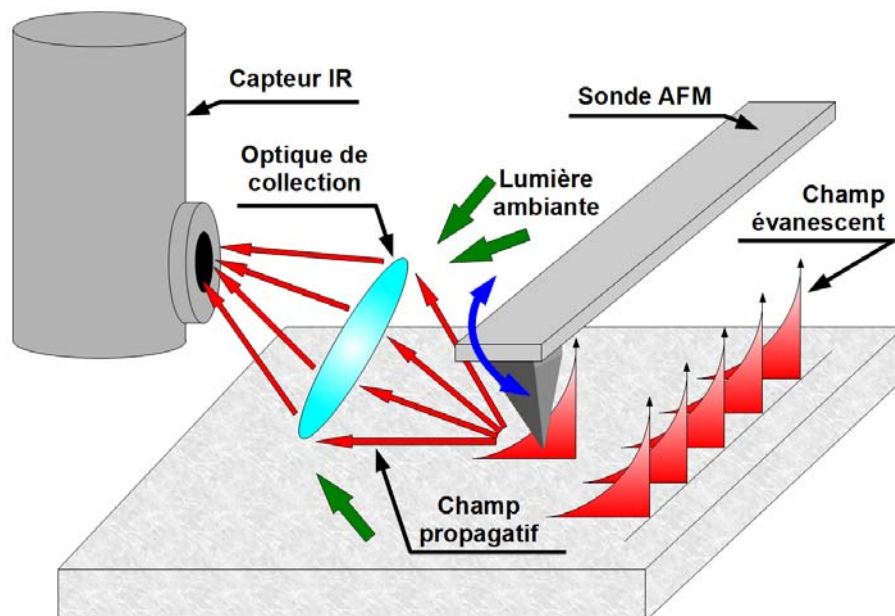


FIG. 2.16: Montage ASNOM complet

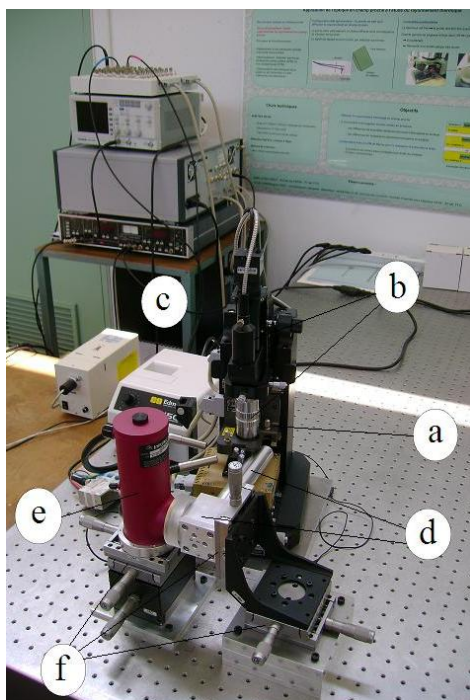
Le signal recherché peut alors être extrait du signal ambiant bruité par le biais d'un système de détection synchrone (lock-in). Une représentation schématique d'un tel dispositif est donnée par la figure 2.16.

2.4 Montage et développement d'un microscope TRSTM

Ce sous-chapitre traite des études expérimentales que nous avons menées au sein du laboratoire. Nous y donnons un bref descriptif du montage TRSTM en lui-même, ainsi que de ses particularités de fonctionnement. Nous décrivons ensuite les difficultés pouvant être observées lors de son emploi, ainsi que les moyens permettant de les résoudre.

2.4.1 Dispositif et système d'asservissement de la pointe

Les principales parties de notre montage TRSTM sont représentées sur la figure 2.17. Le positionnement de la sonde diffusante à proximité de la surface de l'échantillon se fait grâce à un AFM commercial de chez PSIA¹.



- a : la tête de l'AFM supportant la pointe.
- b : un microscope optique classique permettant le positionnement de la pointe proche de la surface.
- c : le scanner où est posé l'échantillon.
- d : le système optique transmettant le signal de la pointe vers le capteur
- e : le capteur infrarouge, relié à un lock-in.
- f : les platines micrométriques permettant le positionnement du système optique et du capteur IR.

FIG. 2.17: Ensemble du montage TRSTM

Nous avons opté pour le mode non-contact, à fréquence d'oscillation constante, dans le but de séparer ultérieurement le signal émis du signal ambiant (FIG. 2.18). Cela nécessite que la pointe soit maintenue à une distance moyenne constante de l'échantillon.

¹<http://www.parkafm.com/>

2.4. MONTAGE ET DÉVELOPPEMENT D'UN MICROSCOPE TRSTM

L'oscillation de la pointe se fait grâce à un système piézoélectrique, et son amplitude de vibration est mesurée par un laser (FIG. 2.19 - cf. sous-paragraphe 2.2.2).

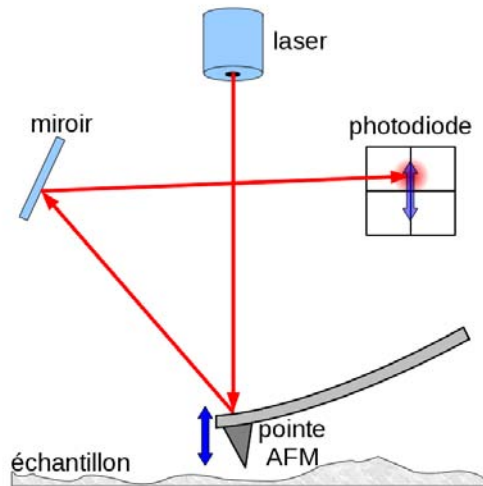


FIG. 2.18: Système de mesure de la fréquence d'oscillation de la pointe

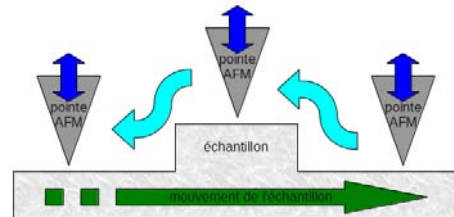


FIG. 2.19: Mode d'asservissement, tapping mod

Cependant, la pointe doit rester immobile par rapport au système de collection (comme nous le verrons par la suite), hormis son amplitude de vibration. Pour respecter cette contrainte, les échantillons étudiés doivent donc être les plus plats possible (FIG. 2.20 et FIG. 2.21). De plus, le balayage de la surface doit se faire par déplacement de l'échantillon lui-même, et ce, grâce à un scanner piézoélectrique x - y ($100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ linéarisés).



FIG. 2.20: Exemple d'échantillon plat - matériau unique

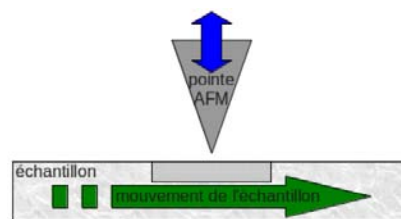


FIG. 2.21: Exemple d'échantillon plat - inclusion d'un micro-circuit

2.4.2 Système optique

Les ondes propagatives, créées par perturbation des ondes de surface par la sonde de l'AFM, diffusent dans tout l'espace. Une partie est redirigée vers un capteur à infrarouge fonctionnant à 77K (le capteur doit être refroidi par un bain d'azote liquide), grâce à un système optique composé de deux miroirs paraboliques (FIG. 2.22). Il est conçu pour que

la pointe se trouve au niveau du foyer du premier miroir, le capteur infrarouge devant se situer à l'endroit du foyer du second miroir parabolique. Du fait de la configuration de notre AFM, la position du premier miroir ne peut être que sur le coté de la pointe, comme le montre la figure (FIG. 2.23).

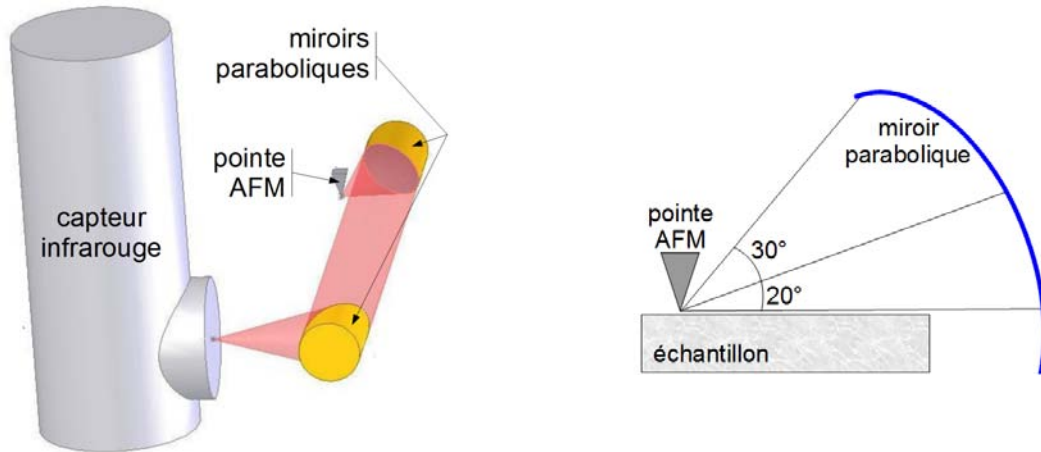


FIG. 2.22: Système optique du microscope TRSTM

FIG. 2.23: Positionnement du premier miroir parabolique

Les positionnements de la pointe et du capteur sont assez délicats. Pour focaliser le premier miroir sur la pointe, une caméra classique a été reliée au système optique au niveau du second foyer. Il suffit alors de déplacer l'ensemble (miroir 1, miroir 2 et caméra), grâce à trois platines micrométriques en x , y et z , jusqu'à obtenir une image nette de la pointe AFM au centre de l'écran (FIG. 2.24 et 2.25).

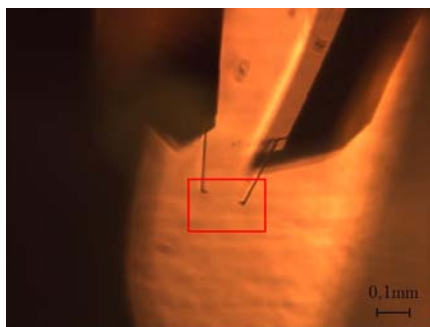


FIG. 2.24: Image de la pointe (et de son reflet sur l'échantillon) par caméra



FIG. 2.25: Agrandissement de l'image la pointe et de son reflet

Une fois ces réglages faits, le système optique ne doit plus bouger. On remplace alors la caméra par le détecteur infrarouge (FIG. 2.26). La différence majeure est que, contrairement à la caméra, le capteur infrarouge n'est pas fixé au système optique et peut donc

2.4. MONTAGE ET DÉVELOPPEMENT D'UN MICROSCOPE TRSTM

être déplacé indépendamment. La difficulté vient alors du fait que la partie sensible du détecteur mesure $0,1\text{mm} \times 0,1\text{mm}$, et son positionnement n'est donc pas immédiat. La méthode utilisée consiste à placer approximativement le capteur à l'ancienne position de la caméra (là aussi grâce à trois tables micrométriques), et de faire un scan transversal 2D suivant x et z jusqu'à obtenir un signal supérieur au bruit de mesure. Une fois que l'on commence à percevoir le signal, un scan 3D est alors nécessaire pour optimiser la mesure (FIG. 2.27).



FIG. 2.26: Capteur infrarouge

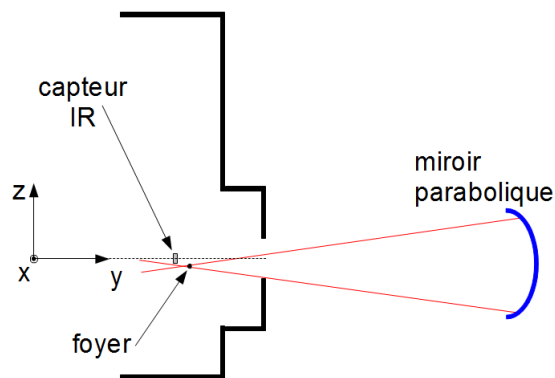


FIG. 2.27: Positionnement du capteur infrarouge

Actuellement, le scan 3D nécessaire au bon positionnement du capteur se fait manuellement, ce qui requiert environ 4 heures de manipulation par mm^3 scannés. Une automatisation par le biais de vis micrométriques motorisées est prévue.

2.4.3 Traitement du signal

Ce sujet est essentiellement traité dans l'annexe D. Nous n'en verrons ici que les grandes lignes.

Détection synchrone

Un lock-in, ou système de détection synchrone, est prévu pour repérer un signal périodique noyé dans le bruit. Il agit comme un filtre passe-bande autour d'une fréquence de référence (c'est-à-dire la même que celle du signal). En ce qui nous concerne, cette fréquence nous est donnée par transformée de Fourier du signal électrique imposé au piézo de l'AFM. Actuellement, nous disposons d'un lock-in commercial, ainsi qu'un lock-in numérique créé sous Labview (plus de détails sont donnés dans l'annexe D).

Suppression du bruit de mesure

L'outil que nous présentons brièvement dans ce paragraphe a pour but de supprimer le bruit de mesure d'un signal périodique. En supposant être en présence d'un bruit blanc, ce dernier peut s'annuler par une simple prise de moyenne (FIG. 2.28).

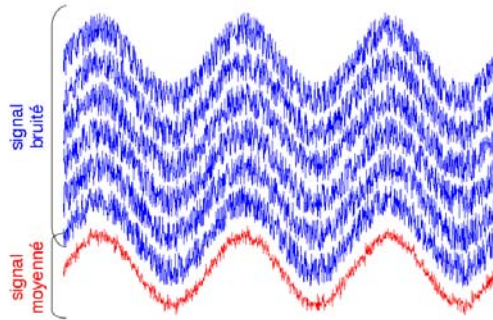


FIG. 2.28: Élimination du bruit blanc par moyenne

La difficulté vient du fait que les différents points de mesures se doivent d'être en phase. La technique que nous avons utilisée pour y parvenir, ainsi que les résultats obtenus dans le cas de signaux bruités artificiellement, sont décrits dans l'annexe D.

2.4.4 Manipulations et difficultés rencontrées

De nombreux problèmes ont pu être observés au cours des expérimentations, dont certains n'ont pas encore été résolus. Ce sont ces mêmes difficultés que nous décrivons ici, ainsi que les différentes solutions envisagées.

Influence du laser d'asservissement

Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'asservissement de la sonde par l'AFM se fait grâce à un laser, lequel est réfléchi sur le dos du levier, pour être ensuite redirigé vers une photodiode permettant, après traitement, de déterminer l'amplitude d'oscillation de la pointe.

Bien que ce laser émette dans le visible (rouge), et que le capteur que nous utilisons soit surtout sensible aux infrarouges (de 2 à 16 μm), la sensibilité de celui-ci dans le visible n'est pas nulle. Ainsi, lorsque le laser atteint l'extrémité du cantilever, laquelle se trouve dans la focale du système optique (FIG. 2.29), une partie de l'onde est diffusée vers le capteur, modulée à la même fréquence que celle de la sonde. Ce signal indésirable ne peut donc être supprimé par le lock-in, et parasite grandement les mesures.

Pour pallier ce problème, nous avons doté notre capteur d'une fenêtre en germanium opaque dans le visible. Cette action a en effet permis d'éliminer le signal parasite, sans risquer de détériorer le signal utile qui, rappelons-le, doit théoriquement se trouver dans l'infrarouge moyen (2-16 μm).

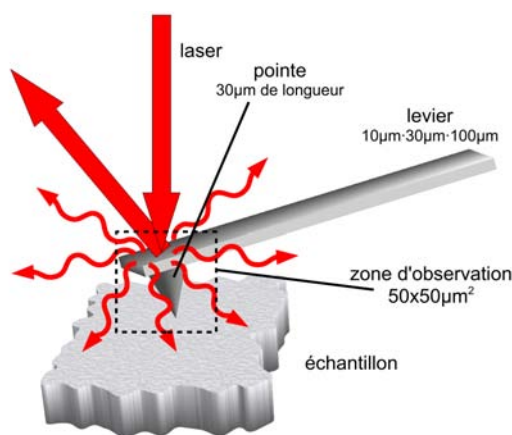


FIG. 2.29: Diffusion du laser d'asservissement par le levier de la sonde

Faiblesse du signal

Bien que notre capteur infrarouge soit parfaitement sensible au spectre de longueurs d'onde qui nous intéresse, le signal diffusé par la pointe reste tout de même très faible lorsque les échantillons étudiés sont à la température ambiante. Cela rend impossible la détection de ce signal noyé dans le bruit, du moins tant que nous ne connaissons pas parfaitement la position optimale du capteur infrarouge. L'idée est alors de chauffer l'échantillon dans le but d'augmenter le champ proche thermique, et donc le signal diffusé par la sonde. Cela permet de déterminer plus facilement, et avec plus de précision, la bonne position du capteur, ce qui ne nous empêche aucunement de redescendre, ensuite, à la température ambiante, tout en conservant les mêmes réglages de positionnement. Nous avons opté pour des résistances chauffantes plates, montant jusqu'à 150 °C, de références Minco-HK5537R13.1L12AU (FIG. 2.30).

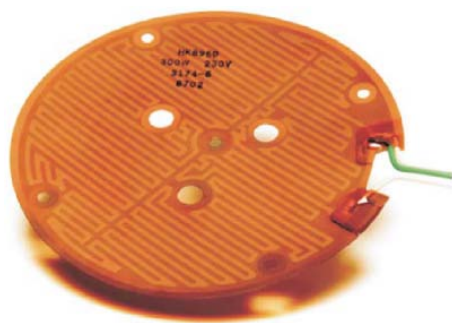


FIG. 2.30: Résistance chauffante plate - Minco-HK5537R13.1L12AU

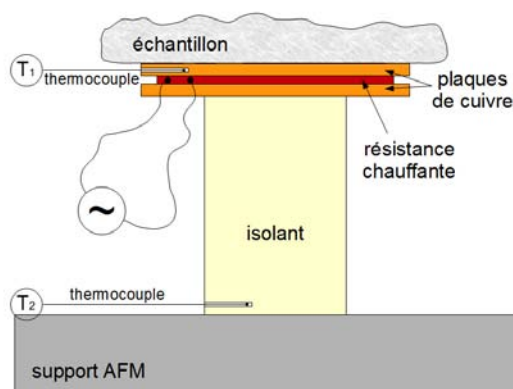


FIG. 2.31: Chauffage de l'échantillon par résistance chauffante

Dans notre dispositif, la résistance est maintenue entre deux plaques de cuivre dont l'une est en contact avec l'échantillon (FIG. 2.31). L'ensemble est alors posé sur un support isolant, dans le but de limiter les transferts thermiques par conduction vers l'AFM, ce qui aurait pour conséquence de l'endommager. Les températures, à la base de l'échantillon et de l'isolant, sont mesurées en continu grâce à deux thermocouples de type K (reliés à un instrument virtuel fait sous Labview et Matlab).

Cependant, le chauffage de l'échantillon, du fait de la configuration de notre montage (notamment la forme de la pointe), se trouve être à l'origine d'un problème supplémentaire lié au rayonnement thermique en champ lointain. Nous en parlons dans le paragraphe suivant.

Influence du champ thermique lointain

Le chauffage de l'échantillon, destiné à augmenter l'intensité des ondes évanescentes, est à l'origine d'ondes propagatives situées principalement dans l'infrarouge. Ces ondes se retrouvent donc en champ lointain, dont une partie au niveau du levier de la sonde. Le même problème que celui remarqué dans le cas de la diffusion du laser par l'extrémité du levier, s'observe alors. Le levier diffuse à nouveau des ondes dont l'amplitude est modulée à la même fréquence que celle de la sonde, mais cette fois dans un domaine spectral auquel le capteur est sensible. En effet, lorsque l'on chauffe l'échantillon, nous observons bien un signal, mais ce dernier demeure lorsque l'on éloigne la pointe de la surface de l'échantillon, ce qui prouve que le signal détecté n'est pas un signal de champ proche.

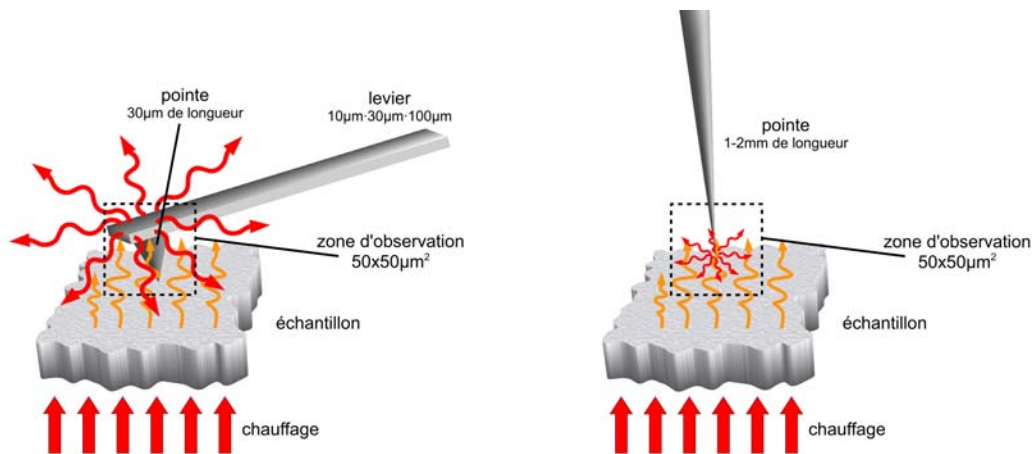


FIG. 2.32: Diffusion du champ thermique lointain par le levier de la sonde

FIG. 2.33: Avantages d'une longue sonde en tungsten

Nous travaillons actuellement sur la fabrication de sondes faites à partir de fils de tungstène. L'avantage de ces sondes est que la pointe est bien plus longue que celles que l'on peut trouver dans le commerce (2-3mm au lieu de 10-30µm). Cela permettrait d'avoir

un levier positionné relativement loin de l'extrémité de la sonde, et donc de la zone observée par le capteur, ce qui limiterait fortement l'influence du signal parasite sur la mesure. La méthode de fabrication de ces sondes est décrite dans l'annexe C. Actuellement, nous observons encore certaines difficultés pour adapter ces pointes tungstènes à notre AFM commercial, notamment à cause de la forte constante de raideur du levier de la pointe.

Conclusion

Par le biais d'une introduction aux techniques de microscopies destinées à dépasser la limite de résolution observée en microscopie optique classique, nous avons pu aborder le thème des microscopes de type SNOM, notamment ceux utilisant des sondes sans ouverture, aussi appelées sondes diffusantes. Cela nous a permis, ensuite, d'exposer le dispositif expérimental TRSTM en développement dans notre laboratoire, et d'en décrire le fonctionnement et les particularités (asservissement de la sonde, déplacement de l'échantillon, mesure du signal,...). Nous avons ensuite introduit brièvement les différents outils numériques destinés à traiter les signaux que l'on désire mesurer, l'essentiel se trouvant dans l'annexe D. Pour finir, nous avons parlé des difficultés ayant été observées au cours de nos mesures, ainsi que des différentes solutions mises en œuvre pour les résoudre.

Les difficultés liées à cette partie expérimentale de notre travail de recherche nous ont conduits à chercher les moyens susceptibles d'optimiser la collecte du signal TRSTM. L'approche que nous avons retenue passe par la modélisation du signal diffusé par des pointes AFM en vue de l'optimisation de la géométrie et des matériaux de ces dernières pour maximiser le signal recherché. Ces deux aspects vont désormais être abordés dans la seconde et la troisième partie de ce mémoire.

Deuxième partie

**Développement et validation des
modèles numériques**

Nomenclature

- Repères :

(x, y, z) : coordonnées cartésiennes

(r, θ, ϕ) : coordonnées sphériques

(ρ, ϕ) : coordonnées polaires

- Scalaires :

a : rayon de sphère

c : vitesse de la lumière dans le vide

h : fonction de Heaviside

i : unité imaginaire

k : nombre d'onde

k_0 : nombre d'onde dans le vide

$K_{||}$: norme du vecteur \mathbf{K}

n_m : indice optique du milieu m

r^s : coefficient de réflexion de Fresnel d'une onde polarisée TE

r^p : coefficient de réflexion de Fresnel d'une onde polarisée TM

S : variable PML en coordonnées étendues

\tilde{S} : transformée de Fourier inverse de $\frac{1}{S}$

t : temps

t^s : coefficient de transmission de Fresnel d'une onde polarisée TE

t^p : coefficient de transmission de Fresnel d'une onde polarisée TM

w : composante normale à l'interface du vecteur \mathbf{k}

- Vecteurs :

\mathbf{E} : champ électrique dans le domaine temporel

$\tilde{\mathbf{E}}$: champ électrique dans le domaine fréquentiel

$\check{\mathbf{E}}$: représentation angulaire du champ $\tilde{\mathbf{E}}$

\mathbf{H} : excitation magnétique le domaine temporel

$\tilde{\mathbf{H}}$: excitation magnétique dans le domaine fréquentiel

$\check{\mathbf{H}}$: représentation angulaire du champ $\tilde{\mathbf{H}}$

\mathbf{J}_E : courant équivalent électrique dans le domaine temporel

NOMENCLATURE

$\tilde{\mathbf{J}}_E$: courant équivalent électrique dans le domaine fréquentiel
\mathbf{J}_H	: courant équivalent magnétique dans le domaine temporel
$\tilde{\mathbf{J}}_H$: courant équivalent magnétique dans le domaine fréquentiel
\mathbf{J}_l	: courant de polarisation électrique du $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz
$\mathbf{k} = (\mathbf{K}, w)$: vecteur d'onde
\mathbf{k}_0	: vecteur d'onde dans le vide
$\mathbf{K} = (u, v)$: composante tangente à l'interface du vecteur d'onde \mathbf{k}
\mathbf{n}	: vecteur unitaire normal à la surface
$\hat{\mathbf{p}}$: vecteur polarisation unitaire tangent au plan d'incidence
$\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$: vecteur position du point d'observation
$\mathbf{r}' = (\mathbf{R}', z')$: vecteur position du point source
$\mathbf{R} = (x, y)$: composante tangente à l'interface de \mathbf{r}
$\mathbf{R}' = (x', y')$: composante tangente à l'interface de \mathbf{r}'
$\hat{\mathbf{s}}$: vecteur polarisation unitaire normal au plan d'incidence
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$: vecteurs unitaires

- Matrices :

$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$: tenseur de Green dans le domaine fréquentiel
$\overleftarrow{\mathbf{G}}$: représentation angulaire du tenseur de Green $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$

- Lettres grecques :

$\alpha, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$: paramètres CPML
δ	: fonction de Dirac
δ_l	: inverse du temps de relaxation du $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz
Δ	: pas spatial
Δt	: pas temporel
Δx	: pas spatial suivant x
Δy	: pas spatial suivant y
Δz	: pas spatial suivant z
ε	: permittivité diélectrique
ε_0	: permittivité diélectrique du vide
ϵ	: permittivité (fonction) diélectrique relative
ε_{pml}	: permittivité diélectrique spécifique à la PML
$\tilde{\varepsilon}_{\text{pml}}$: permittivité diélectrique complexe spécifique à la PML
ϵ_∞	: permittivité diélectrique relative pour les faibles longueurs d'onde
ϵ_{stat}	: permittivité diélectrique relative pour les faibles fréquences
η	: impédance
η_0	: impédance du vide
K, K_x, K_y, K_z	: paramètres CPML
λ	: longueur d'onde

λ_0	: longueur d'onde centrale du pulse gaussien
μ	: perméabilité magnétique
μ_0	: perméabilité magnétique du vide
μ_{pml}	: perméabilité magnétique spécifique à la PML
ν	: fréquence
ν_0	: fréquence centrale du pulse gaussien
$\tilde{\mu}_{\text{pml}}$: perméabilité magnétique complexe spécifique à la PML
ν	: fréquence
ω	: pulsation
ω_0	: pulsation centrale du pulse gaussien
$\omega_{T,l}$: pulsation optique transverse du $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz
$\omega_{L,l}$: pulsation optique longitudinale du $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz
σ_{pml}	: conductivité électrique spécifique à la PML
σ_{pml}^*	: conductivité magnétique spécifique à la PML
$\sigma, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$: paramètres CPML
θ_c	: angle d'incidence critique
θ_i	: angle d'incidence
θ_r	: angle de réflexion
$\theta_{r'}$: angle de réfraction

• Exposants :

+	: vecteur ascendant
-	: vecteur descendant
ff	: relatif au champ lointain (far-field)
inc	: relatif à l'onde incidente
n	: indice temporel
nf	: relatif au champ proche (near-field)
p	: relatif à la polarisation p
r	: relatif à la réflexion
s	: relatif à la polarisation s
t	: relatif à la transmission

• Indices :

air	: relatif à l'air
dip	: relatif au dipôle
down	: grandeur calculée en dessous de l'interface
E	: relatif au champ électrique
éch	: relatif à l'échantillon
H	: relatif au champ magnétique
i, j, k	: indices spatiaux
inc	: relatif à l'onde incidente

NOMENCLATURE

r : relatif à l'onde réfléchie
sphère : relatif à la sphère
 t : relatif à l'onde transmise
up : grandeur calculée au dessus de l'interface
vide : relatif au vide

● Opérateurs :

* : produit de convolution
 $\partial/\partial i$: dérivée partielle par rapport à la variable i
 \mathcal{F} : transformée de Fourier
 \mathcal{F}^{-1} : transformée de Fourier inverse
 Δ : laplacien vectoriel
 ∇ : opérateur nabla
 $\tilde{\nabla}_{\text{pml}}$: opérateur nabla complexe spécifique à la PML
 \times : produit vectoriel

Chapitre 3

Développement des modèles numériques

Sommaire

3.1	Calcul du champ proche	52
3.1.1	Le modèle FDTD	52
3.1.2	Stabilité du schéma FDTD	56
3.1.3	Dispersion numérique	56
3.1.4	Les conditions de bord	57
3.1.5	Les sources d'excitation	61
3.1.6	Description des milieux dispersifs et absorbants	66
3.1.7	Description des géométries complexes	68
3.2	Calcul du champ lointain	70
3.2.1	Théorème des courants équivalents de surface	71
3.2.2	Transformation champ proche/champ lointain : formalisme classique	73
3.2.3	Transformation champ proche/champ lointain via les tenseurs de Green	74

Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les outils numériques qui ont été employés pour modéliser le comportement de la pointe d'un microscope optique à sonde sans ouverture dont l'extrémité se trouve en zone de champ proche. Nous nous intéressons en particulier au cas où la sonde est éclairée par un champ d'ondes évanescentes. Ce chapitre présente l'ensemble des modèles numériques utilisés pour décrire de tels dispositifs. Les différents résultats obtenus grâce à ces modèles sont présentés dans les chapitres suivants. L'organisation de ce chapitre dédié aux modèles est la suivante :

- Nous décrivons d'abord l'ensemble des modèles permettant de déterminer le champ électromagnétique à proximité d'un objet diffusant. La FDTD (Finite-Difference Time-domain) est l'outil central autour duquel nous avons développé les autres techniques.
- La seconde partie de ce chapitre présente les outils utilisés pour calculer le champ électrique diffusé, cette fois, en champ lointain, grâce à une transformation des champs proches obtenus lors du calcul FDTD. Cette transformation champ proche/champ lointain, associée à la FDTD, nous fournit alors une méthode complète permettant d'étudier la diffusion d'une onde par des objets de forme quelconque proches d'une interface plane.

3.1 Calcul du champ proche

Comme nous l'avons vu dans l'introduction de ce chapitre, la première phase de nos calculs est destinée à déterminer le champ proche électromagnétique. Ce dernier peut, soit être émis par une source électromagnétique (par exemple un dipôle), soit être diffusé par une particule éclairée par une onde (plane ou non). Pour cela, nous avons choisi la méthode FDTD, ou Finite-difference Time-Domain, pour sa simplicité d'implémentation et sa capacité à s'adapter à un grand nombre de problèmes.

Nous présentons dans cette section, outre une description générale de la FDTD, les différentes méthodes additionnelles destinées à adapter notre modèle aux spécificités des problèmes étudiés.

3.1.1 Le modèle FDTD

Rappel sur les différences finies

La FDTD repose avant tout sur la discrétisation des dérivées partielles par la méthode des différences finies. Pour illustrer notre propos, nous nous intéressons ici à la dérivée partielle d'une fonction quelconque $u = u(x, t)$ par rapport à la variable spatiale x , à savoir :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.1)$$

La discrétisation de 3.1 par la méthode des différences finies est basée sur le développement de Taylor de $u(x, t)$ aux points $x_i - \Delta x$ et $x_i + \Delta x$, ce qui donne au temps t_n :

$$u(x_i + \Delta x, t_n) = u|_{x_i}^{t_n} + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i}^{t_n} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i}^{t_n} + O[(\Delta x)^3] \quad (3.2)$$

$$u(x_i - \Delta x, t_n) = u|_{x_i}^{t_n} - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i}^{t_n} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i}^{t_n} + O[(\Delta x)^3] \quad (3.3)$$

où $O[(\Delta x)^3]$ représente l'erreur du développement en question. La combinaison de 3.2 et 3.3 nous amène à l'équation suivante (eq. 3.4).

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_i}^{t_n} = \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + O[(\Delta x)^2] \quad (3.4)$$

où $u_i^n = u(x_i, t_n)$ avec $x_i = i\Delta x$ et $t_n = n\Delta t$. Ce schéma, qui est dit centré, est précis au second ordre. Il existe des schémas plus simples, précis au premier ordre, comme les schémas décentrés amont (“upwind”) ou aval (“forward”), bien qu’ils ne soient, à notre connaissance, jamais utilisés dans aucun modèle FDTD. Nous en donnons tout de même les expressions :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_i}^{t_n} = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} + O[(\Delta x)] \quad (\text{upwind}) \quad (3.5)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_i}^{t_n} = \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} + O[(\Delta x)] \quad (\text{forward}) \quad (3.6)$$

La même étude est à faire pour discrétiser la dérivé partielle $\frac{\partial u}{\partial t}$, ce qui nous donne :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_i}^{t_n} = \frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{2\Delta t} + O[(\Delta t)^2] \quad (3.7)$$

Ces schémas (3.4 et 3.7), relatifs à la méthode des différences finies, constituent donc le pilier central de la FDTD, comme nous le montre la section suivante.

Développement des équations de Maxwell

Le développement de la FDTD découle directement de l’application de la technique de discrétisation vue précédemment. Nous allons dorénavant traiter de la résolution des équations de Maxwell par la méthode FDTD basée sur l’algorithme de Yee. Nous rappelons ici l’expression des équations de Maxwell dans le cas d’un matériau linéaire, isotrope, sans sources et non-dispersif (des compléments d’électromagnétisme sont rappelés dans l’annexe A) :

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = +\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H} \quad (3.9)$$

avec : \mathbf{E} le champ électrique,
 \mathbf{H} l’excitation magnétique,
 ε la permittivité diélectrique,
 μ la perméabilité magnétique.

3.1. CALCUL DU CHAMP PROCHE

Chacune de ces deux équations, après développement du rotationnel, peuvent se décomposer en trois relations propres aux directions \hat{x} , \hat{y} et \hat{z} (coordonnées cartésiennes). À titre d'illustration, nous donnons ci-dessous l'expression des équations relatives à la direction \hat{x} , les autres pouvant s'obtenir naturellement par permutation circulaire.

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right] \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \quad (3.11)$$

Ces équations peuvent alors être discrétisées par la méthode des différences finies grâce à l'algorithme de Yee, lequel est présenté dans le paragraphe suivant.

Algorithme de Yee

La méthode FDTD présentée ici est basée sur l'algorithme de Yee, introduit par Kane Yee en 1966 [37]. Elle permet de déterminer, à chaque pas de temps, la valeur des différentes composantes des champs proches électrique et magnétique à leurs nœuds respectifs (FIG. 3.1).

La discrétisation des dérivées en temps et en espace des équations 3.10 et 3.11 se fait alors par la méthode des différences finies centrées précise au second ordre. Ainsi, pour une variable $u(x, y, z, t)$, on écrit, pour la dérivée en temps :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(i\Delta x, j\Delta y, \Delta z, n\Delta t) = \frac{u_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j,k}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + O[(\Delta t)^2] \quad (3.12)$$

et pour la dérivée spatiale (dans la direction des x) :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(i\Delta x, j\Delta y, \Delta z, n\Delta t) = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta x} + O[(\Delta x)^2] \quad (3.13)$$

Ces schémas numériques nous permettent de discrétiser les équations 3.10 et 3.11 qui se présentent alors sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(E_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right) &= \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[H_z \Big|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right] \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^n - H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^n \right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

et

$$\begin{aligned} \mu_0 \left(H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+1}^{n+1} - H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+1}^n \right) &= \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[E_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{3}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[E_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (3.15)$$

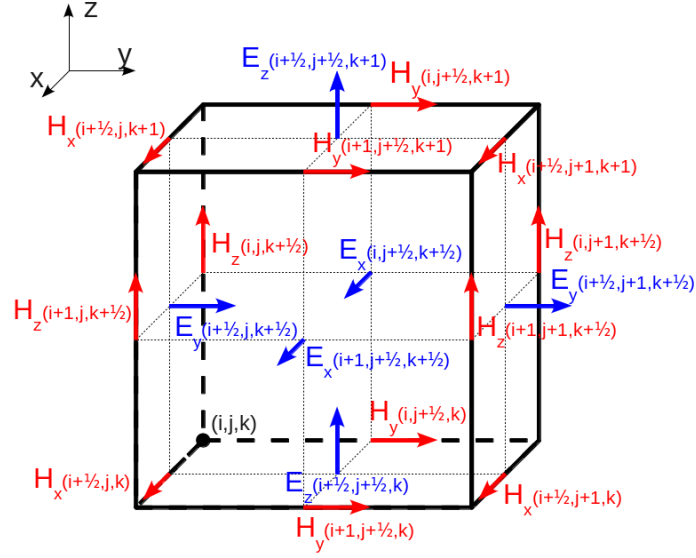


FIG. 3.1: Cellule de Yee

Les autres composantes suivant les axes \hat{y} et \hat{z} peuvent s'obtenir par simples permutations circulaires. Le décalage d'un $\frac{1}{2}$ pas spatial se comprend parfaitement lorsque l'on observe la position des différentes composantes des champs dans une cellule de Yee (FIG. 3.1). Quand au décalage temporel de $\frac{1}{2}\Delta t$, il vient du fait que, lors de l'application de l'algorithme de Yee, les calculs des champs \mathbf{E} et \mathbf{H} sont intercalés et donc décalés d'un $\frac{1}{2}$ pas de temps.

Calcul des champs dans le domaine fréquentiel

La FDTD nous permet de déterminer les champs électrique et magnétique dans le domaine temporel. Cependant, il est possible d'obtenir ces champs dans le domaine spectral par transformée de Fourier. L'utilisation de la méthode FFT (Fast Fourier Transform) nécessitant le stockage de $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ à chaque pas de temps, il est préférable d'opter pour une transformée de Fourier discrète classique de la forme :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) &= \int_0^\infty \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \exp(i 2\pi\nu t) dt \\ &\simeq \sum_n \mathbf{E}(\mathbf{r}, (n + \frac{1}{2})\Delta t) \exp(i 2\pi\nu((n + \frac{1}{2})\Delta t))\Delta t\end{aligned}\quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) &= \int_0^\infty \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \exp(i 2\pi\nu t) dt \\ &\simeq \sum_n \mathbf{H}(\mathbf{r}, n\Delta t) \exp(i 2\pi\nu(n\Delta t))\Delta t\end{aligned}\quad (3.17)$$

3.1. CALCUL DU CHAMP PROCHE

Cette transformée se fait directement au cours du calcul FDTD, à chaque pas de temps, et ne nécessite donc aucun stockage particulier. De plus, nous pouvons noter que le décalage d'un $\frac{1}{2}$ pas de temps est bien pris en compte pour le calcul de $\tilde{\mathbf{E}}$. Ce décalage temporel, qui déphase $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ de $\exp(i 2\pi\nu \frac{\Delta t}{2})$, peut être important pour la transformation champ proche/champ lointain que l'on verra ultérieurement. En effet, cette transformation nécessite à la fois $\tilde{\mathbf{E}}$ et $\tilde{\mathbf{H}}$.

3.1.2 Stabilité du schéma FDTD

Comme dans toutes les méthodes numériques basées sur les différences finies explicites, la FDTD peut devenir instable si les paramètres de discrétisation spatiaux ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$) et temporel (Δt) ne respectent pas certaines restrictions. Ces dernières sont imposées par la condition CFL (Courant-Friedrich-Levy), à savoir :

$$\Delta t \leq \frac{n_m}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (3.18)$$

c étant la vitesse de la lumière dans le vide et n_m l'indice optique du milieu. Dans le cas où $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$, nous obtenons :

$$\Delta t \leq \frac{n_m \Delta}{c \sqrt{3}} \quad (3.19)$$

D'un point de vue pratique, le pas temporel Δt doit être inférieur au temps que met l'onde pour se propager d'une cellule à l'autre. Par la suite, nous prendrons systématiquement comme pas de temps $\Delta t = \frac{\Delta}{2c}$.

Il est intéressant de préciser qu'il existe des algorithmes FDTD basés sur des schémas implicites n'étant aucunement limités par la condition CFL [38, 39, 40]. Cependant, nous n'en dirons pas plus, ces méthodes n'ayant pas été utilisées lors de nos travaux.

3.1.3 Dispersion numérique

La dispersion physique d'une onde représente le lien entre la vitesse de propagation réelle de cette onde dans le milieu et sa fréquence. La dispersion numérique, quant à elle, relie la vitesse numérique de l'onde à sa fréquence.

À titre d'exemple, nous nous plaçons dans le cas d'une onde plane infinie se propageant dans le vide. La relation de dispersion physique se présente alors sous la forme suivante :

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 = (k_x)^2 + (k_y)^2 + (k_z)^2 \quad (3.20)$$

où $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ représente le vecteur le vecteur d'onde, et où ω est la pulsation de l'onde se propageant à la vitesse c . Si l'on se rapporte à l'ouvrage de Taflove et Hagness [17], il est possible de déterminer, dans un pareil cas, la relation de dispersion numérique propre au schéma FDTD (eq. 3.21).

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{1}{c\Delta t} \sin\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) \right]^2 &= \left[\frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \right]^2 \\
 &+ \left[\frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \right]^2 \\
 &+ \left[\frac{1}{\Delta z} \sin\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \right]^2
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Nous voyons bien que l'équation 3.21 tend vers l'équation 3.20 lorsque les pas spatiaux (et temporels) tendent vers 0. En pratique, ces derniers doivent donc être inférieurs à une certaine valeur pour limiter les erreurs dues à la dispersion numérique, définie par :

$$\Delta i \leq \frac{\lambda}{10}, \quad (i = x, y, z) \tag{3.22}$$

où λ représente la longueur d'onde. En ce qui nous concerne, et par soucis d'efficacité, nous nous sommes fixés comme limite $\Delta_i \leq \frac{\lambda}{50}$. De plus, il est possible de tenir compte de l'erreur de dispersion numérique en ajustant la valeur des vecteurs d'onde à chaque longueur d'onde étudiée (le calcul se fait donc directement dans le domaine fréquentiel), par AFP-TFSF. Cette méthode est décrite dans la section 3.1.5.

3.1.4 Les conditions de bord

Un des défis majeurs de la FDTD est de décrire des milieux infinis (“unbounded regions”) dans un domaine de calcul donné. Bien que pour y parvenir, un certain nombre de techniques aient été élaborées, nous parlerons exclusivement dans ce paragraphe des conditions aux limites de type PML (Perfectly Matched Layer), et plus particulièrement de la méthode CPML (Convolutional PML).

Condition ABC-PML

Lorsque l'on désire imposer des conditions aux limites de notre domaine de calcul, l'idée la plus naturelle est de négliger les champs aux frontières en les supposant nuls. Cependant, cette hypothèse est à l'origine du phénomène de réflexion numérique qui est une source d'erreur importante. Différents modèles ont donc été développés pour résoudre ce problème, notamment la mise en œuvre de conditions aux limites dites “absorbantes” (ABC : Absorbing Boundary Conditions). Nous pouvons citer, par exemple, la condition de Mur basée sur une extension de la théorie de l'équation d'onde dite “one way” [41], ou encore la condition de Liao qui se fait par extrapolation des champs dans le temps et l'espace [42]. Cependant, ces deux techniques présentent l'inconvénient de n'être performantes que dans le cas d'ondes éclairant les frontières du domaine en incidence normale.

Une technique plus générale et bien plus performante, à savoir la PML (Perfectly Matched Layer) a été introduite par J.P. Bérenger en 1994 [43]. Elle consiste à entourer le

3.1. CALCUL DU CHAMP PROCHE

domaine de calcul FDTD (nommé boîte de Huygens) d'un matériau idéalement absorbant (FIG. 3.2).

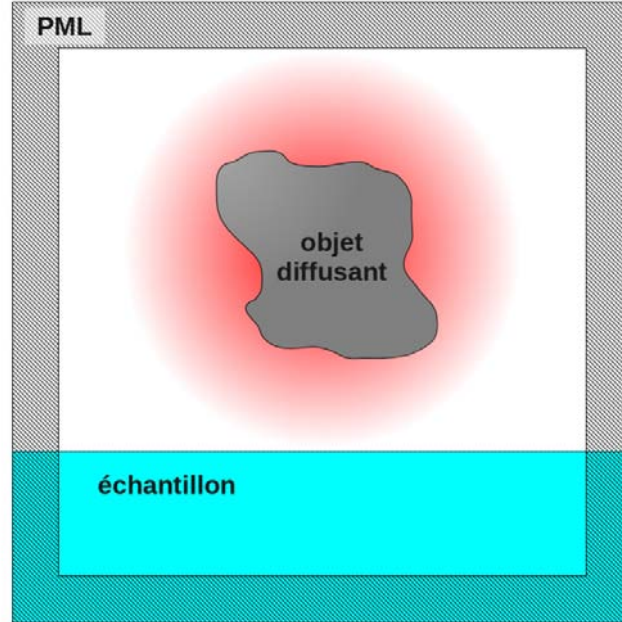


FIG. 3.2: Position de la PML dans le cas d'une particule diffusante à proximité d'une interface plane

Cette couche absorbante est caractérisée par la décroissance exponentielle de l'amplitude des ondes électromagnétiques s'y propageant, ainsi que par l'absence de réflexion à l'interface PML/boîte de Huygens. La méthode en question, dont nous rappelons brièvement le principe, consiste à introduire des termes dissipatifs fictifs dans les équations de Maxwell :

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_{\text{pml}} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma_{\text{pml}} \mathbf{E} \quad (3.23)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_{\text{pml}} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \sigma_{\text{pml}}^* \mathbf{H} \quad (3.24)$$

où σ_{pml} et σ_{pml}^* représentent respectivement les conductivités électrique et magnétique fictives. Cela donne dans le domaine fréquentiel :

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon_{\text{pml}}\mathbf{E} - \sigma_{\text{pml}}\mathbf{E} = -i\omega\tilde{\varepsilon}_{\text{pml}}\mathbf{E} \quad (3.25)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = +i\omega\mu_{\text{pml}}\mathbf{H} + \sigma_{\text{pml}}^*\mathbf{H} = +i\omega\tilde{\mu}_{\text{pml}}\mathbf{H} \quad (3.26)$$

avec $\tilde{\varepsilon}_{\text{pml}} = \varepsilon_{\text{pml}} - i\frac{\sigma_{\text{pml}}}{\omega}$ et $\tilde{\mu}_{\text{pml}} = \mu_{\text{pml}} - i\frac{\sigma_{\text{pml}}^*}{\omega}$ les permittivité et perméabilité complexes.

L'impédance de la PML est alors définie par :

$$\eta_{\text{pml}} = \sqrt{\frac{\tilde{\mu}_{\text{pml}}}{\tilde{\varepsilon}_{\text{pml}}}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{pml}}(1 - i \frac{\sigma_{\text{pml}}^*}{\omega \mu_{\text{pml}}})}{\varepsilon_{\text{pml}}(1 - i \frac{\sigma_{\text{pml}}}{\omega \varepsilon_{\text{pml}}})}} \quad (3.27)$$

Considérons maintenant une interface entre la boîte de Huygens $(\varepsilon_{\text{hu}}, \mu_{\text{hu}}, \eta_{\text{hu}})$ et la PML $(\varepsilon_{\text{pml}}, \mu_{\text{pml}}, \eta_{\text{pml}})$, et imposons les relations suivantes [17] :

$$\frac{\mu_{\text{hu}}}{\varepsilon_{\text{hu}}} = \frac{\mu_{\text{pml}}}{\varepsilon_{\text{pml}}} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_{\text{pml}}^*}{\mu_{\text{pml}}} = \frac{\sigma_{\text{pml}}}{\varepsilon_{\text{pml}}} \quad (3.28)$$

Les impédances des deux milieux sont alors liés par :

$$\eta_{\text{pml}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{pml}}(1 - i \frac{\sigma_{\text{pml}}^*}{\omega \mu_{\text{pml}}})}{\varepsilon_{\text{pml}}(1 - i \frac{\sigma_{\text{pml}}}{\omega \varepsilon_{\text{pml}}})}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{hu}}(1 - i \frac{\sigma_{\text{pml}}}{\omega \varepsilon_{\text{pml}}})}{\varepsilon_{\text{hu}}(1 - i \frac{\sigma_{\text{pml}}}{\omega \varepsilon_{\text{pml}}})}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{hu}}}{\varepsilon_{\text{hu}}}} = \eta_{\text{hu}} \quad (3.29)$$

L'absence de réflexion au niveau de l'interface est donc obtenue grâce à l'invariance de l'impédance lors du passage d'un milieu à l'autre. Cette condition constitue la base du modèle de la PML, dont différentes implémentations sont développées dans l'ouvrage de Taflové et Hagness [17]. Le sous-paragraphe suivant traite d'une implémentation évoluée de cette condition aux limites, à savoir la CPML.

CPML et formulation en coordonnées étendues

La CPML (Convolutional PML) est une des implémentations les plus performantes de la PML, dont l'avantage majeur est d'absorber les ondes évanescentes et les basses fréquences bien mieux que la PML classique. Elle est basée sur l'utilisation des variables en coordonnées étendues S_j (coordinate stretching variables [44]) définies par la méthode CFS (Complex-Frequency Shifted [45]), à savoir :

$$S_j = \kappa_j + \frac{\sigma_j}{\alpha_j + i \omega \varepsilon}, \quad (j = x, y, z) \quad (3.30)$$

Nous pouvons alors définir le nouvel opérateur $\tilde{\nabla}_{\text{pml}}$:

$$\tilde{\nabla}_{\text{pml}} = \hat{x} \frac{1}{S_x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{1}{S_y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{1}{S_z} \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.31)$$

Les équations de Maxwell deviennent alors :

$$i \omega \varepsilon \mathbf{E} = \tilde{\nabla}_{\text{pml}} \times \mathbf{H} \quad (3.32)$$

$$-i \omega \mu \mathbf{H} = \tilde{\nabla}_{\text{pml}} \times \mathbf{E} \quad (3.33)$$

3.1. CALCUL DU CHAMP PROCHE

À titre d'exemple, nous donnons ci-dessous la composante suivant x des équations 3.32 et 3.33 :

$$i\omega\varepsilon E_x = +\frac{1}{S_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{S_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (3.34)$$

$$i\omega\mu H_x = -\frac{1}{S_y} \frac{\partial E_z}{\partial y} + \frac{1}{S_z} \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (3.35)$$

Cela donne dans le domaine temporel :

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = \bar{S}_y * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \bar{S}_z * \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (3.36)$$

$$\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = -\bar{S}_y * \frac{\partial E_z}{\partial y} + \bar{S}_z * \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (3.37)$$

où “*” représente le produit de convolution et \bar{S}_j la transformée de Fourier inverse de $\frac{1}{S_j}$ telle que :

$$\bar{S}_j = \mathcal{F}^{-1} \left[\frac{1}{S_j} \right] \quad (3.38)$$

En associant 3.30 et 3.38, on obtient [17] :

$$\bar{S}_j = \frac{1}{\kappa_j} \delta(t) - \frac{\sigma_j}{\kappa_j^2 \varepsilon} \exp \left(-t \left[\frac{\alpha_j}{\varepsilon} + \frac{\sigma_j}{\kappa_j \varepsilon} \right] \right) h(t) = \frac{1}{\kappa_j} \delta(t) + \zeta_j(t) \quad (3.39)$$

avec $h(t)$ la fonction de Heaviside (fonction step), $\delta(t)$ la fonction de Dirac. $\zeta_j(t)$ est défini par :

$$\zeta_j(t) = -\frac{\sigma_j}{\kappa_j^2 \varepsilon} \exp \left(-t \left[\frac{\alpha_j}{\varepsilon} + \frac{\sigma_j}{\kappa_j \varepsilon} \right] \right) h(t) \quad (3.40)$$

Si l'on tient compte du fait que, pour une fonction quelconque $f(t)$, $\delta(t) * f(t) = f(t)$, l'équation 3.36 devient alors :

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\kappa_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\kappa_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} \\ &+ \zeta_y(t) * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \zeta_z(t) * \frac{\partial H_y}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.41)$$

La difficulté, lors de la discrétisation de l'équation 3.41 par la méthode FDTD, est de discrétiser le produit de convolution $\zeta_j(t) * \frac{\partial H_k}{\partial j}$ ($j, k = x, y, z$). La technique utilisée par

le modèle CPML repose sur une méthode de convolution récursive proposée par Luebbers et Hunsberger [46]. L'implémentation de cette méthode dans l'algorithme FDTD est développé dans l'ouvrage de Taflove et Hagness [17].

Le choix des variables σ_j , κ_j et α_j ($j = x, y, z$) conditionnent le bon fonctionnement de la CPML. Comme le montre la figure 3.3, une variation polynomiale a été choisie pour les décrire. Le rôle d'une augmentation graduelle de ces grandeurs est de limiter tout saut trop brusque de leurs valeurs du fait de la discrétisation du problème.

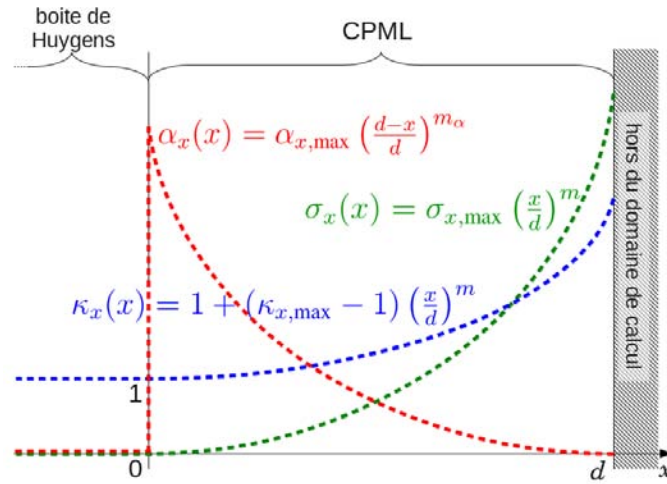


FIG. 3.3: Evolution des paramètres σ_x , κ_x et α_x au sein de la CPML suivant l'axe des x

Par la suite, nous avons imposé les conditions $\sigma_j = \sigma$, $\kappa_j = \kappa$, $\alpha_j = \alpha$ pour tout $j = x, y$ ou z . L'ensemble des paramètres nécessaires à la détermination des σ et κ optimaux ont été définis en accord avec [17], de telle sorte que $m = 3$, $\kappa_{\max} = 17$ et $\sigma_{\max} = \frac{16(m+1)}{2\eta d}$, avec $d = 10\Delta$ l'épaisseur de la PML et $\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}$ l'impédance du milieu. En revanche, les paramètres relatifs à la variable α (qui conditionne l'absorption des ondes évanescentes de la PML) ont dû être adaptés à l'ensemble de nos travaux, du fait de l'apparition récurrente, lors de nos calculs, de champs hautement évanescents. Ces paramètres ont été choisis comme suit : $\alpha_{\max} = 0.1$ et $m_\alpha = 2$. Ainsi, les grandes valeurs de α à proximité de l'interface PML/boîte de Huygens autorisent les ondes évanescentes à pénétrer dans la PML sans être aucunement réfléchi, alors que les faibles valeurs proche de la limite du domaine de calcul permettent à la PML d'absorber efficacement les ondes propagatives.

3.1.5 Les sources d'excitation

Différentes sources ont été modélisées pour traiter les problèmes nous intéressant. Dans cette section sont décrits les modèles permettant de créer des sources ponctuelles, ainsi que des ondes planes infinies.

Sources ponctuelles

Les sources ponctuelles que nous avons étudiées font parties de la famille des dipôles électriques oscillants. Pour simplifier, nous allons nous concentrer sur le cas d'un dipôle oscillant parallèlement à l'axe des \hat{z} . Pour cela, il suffit d'imposer en un point (x_0, y_0, z_0) une source électrique de la forme $E_z^{\text{source}}(x_0, y_0, z_0, t) = E_0 e^{i(-2\pi\nu_0 t)}$, oscillant donc à la fréquence ν_0 . De plus, bien que l'intensité E_0 du champ puisse être constante, nous avons opté pour une impulsion gaussienne, pour ne pas imposer à notre calcul des conditions initiales trop brutales :

$$E_z^{\text{source}}(x_0, y_0, z_0, t) = E_0 e^{-\left[\frac{t-t_0}{t_{dec}}\right]^2} e^{i(-2\pi\nu_0 t)} \quad (3.42)$$

où t_{dec} représente la largeur de l'impulsion. En ce qui nous concerne, ce type de sources n'a été étudié que dans des cas d'illuminations d'interfaces planes entre deux milieux, en vue d'une validation du code FDTD par comparaison avec la théorie. Les calculs relatifs à l'emploi d'une telle source ponctuelle sont reportés dans le chapitre 4.

Ondes planes et formulation TFSS

Nous parlons ici de la modélisation d'une onde plane infinie destinée à illuminer, directement ou non, un objet diffusant quelconque.

- Bases de la méthode TFSS

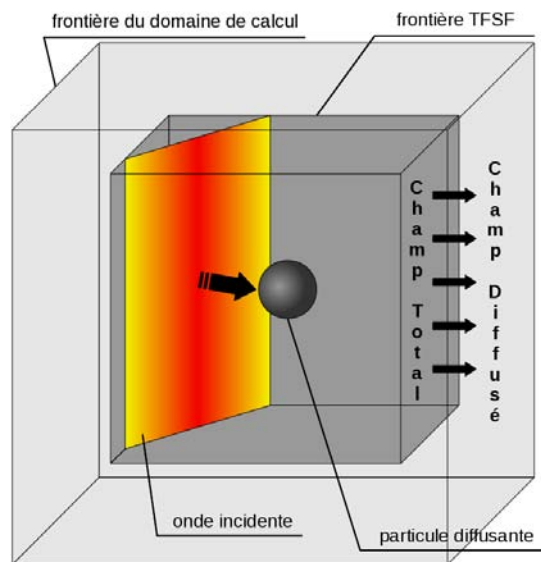


FIG. 3.4: Création d'une onde plane par la méthode TFSS : problème 3D

Comme nous l'avons brièvement évoqué au début de ce chapitre, modéliser la propagation d'une onde plane à l'aide de la FDTD n'est pas direct. La difficulté est de parvenir à décrire une onde plane infinie dans un domaine de calcul fini. Pour cela, nous

avons utilisé la technique dite de transformation Champ total/Champ diffusé (TFSF : Total Field/Scattered Field) [17]. La figure 3.4 représente schématiquement le fonctionnement de la TFSF dans le cas d'un problème tridimensionnel. Cette méthode consiste à décomposer le champ total comme étant la somme du champ diffusé et du champ incident :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{\text{tot}} &= \mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}_{\text{scat}} \\ \mathbf{H}_{\text{tot}} &= \mathbf{H}_{\text{inc}} + \mathbf{H}_{\text{scat}}\end{aligned}\quad (3.43)$$

Ainsi, la surface TFSF constitue la limite entre deux zones : la zone de champ total contenant entièrement l'objet (lequel est donc éclairé par l'onde incidente) et, à l'extérieur, la zone de champ diffusé. Pour expliquer le principe de cette transformation, nous étudions ici le cas d'un problème 1D d'une onde plane se propageant dans le sens des x . Si l'on se reporte à l'image 3.5, la limite entre les zones de champ total et de champ diffusé se situe au point $x = i_0$, de telle sorte que $E_z(i_0) = E_{z,\text{tot}}(i_0)$ et $H_y(i_0 - \frac{1}{2}) = H_{y,\text{scat}}(i_0 - \frac{1}{2})$. Nous pouvons voir, ci-dessous (équations 3.44 et 3.45), la relation additionnelle permettant d'obtenir la composante suivant x des champs électrique et magnétique au niveau de la limite TFSF. Comme nous pouvons le constater, cette formulation nécessite donc la connaissance du champ électrique incident en i_0 et du champ magnétique incident en $i_0 - \frac{1}{2}$.

$$\begin{aligned}E_{z,\text{tot}}|_{i_0}^{n+\frac{1}{2}} &= E_{z,\text{tot}}|_{i_0}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i_0}\Delta x} \left(H_{y,\text{tot}}|_{i_0+\frac{1}{2}}^n - H_{y,\text{scat}}|_{i_0-\frac{1}{2}}^n \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i_0}\Delta x} H_{y,\text{inc}}|_{i_0-\frac{1}{2}}^n\end{aligned}\quad (3.44)$$

$$\begin{aligned}H_{y,\text{scat}}|_{i_0-\frac{1}{2}}^{n+1} &= H_{y,\text{scat}}|_{i_0-\frac{1}{2}}^n + \frac{\Delta t}{\mu_0\Delta x} \left(E_{z,\text{tot}}|_{i_0}^{n+\frac{1}{2}} - E_{z,\text{scat}}|_{i_0-1}^{n+\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\mu_0\Delta x} E_{z,\text{inc}}|_{i_0}^{n+\frac{1}{2}}\end{aligned}\quad (3.45)$$

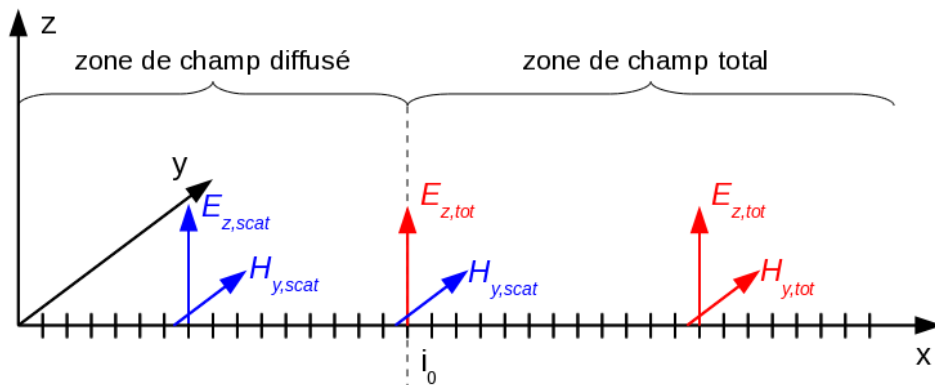


FIG. 3.5: Création d'une onde plane par la méthode TFSF : problème 1D

La difficulté est alors de connaître les valeurs des champs incidents en tout point de la surface de transformation TFSF, et ce à chaque pas de temps du calcul FDTD. Pour ce faire, nous avons opté pour la méthode AFP-TFSF (Analytical Field Propagation-TFSF) qui est décrite dans le paragraphe suivant.

- **Principes de l'AFP-TFSF**

L'AFP-TFSF consiste à calculer les valeurs des champs incidents sur toute la surface de transformation TFSF, et ce dans le domaine fréquentiel pour un spectre de longueurs d'onde prédéfini. En effet, dans le cas d'une onde plane infinie, l'expression analytique des champs électrique et magnétique est parfaitement connue pour n'importe quelle fréquence. Cependant, le calcul FDTD se passe dans le domaine temporel. C'est pourquoi ces champs incidents spectraux doivent subir une transformée de Fourier discrète inverse de la forme :

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} d\omega \quad (3.46)$$

où $F(\mathbf{r}, \omega) = F(\omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ représente le champ dans le domaine fréquentiel. Un des avantages majeurs de l'AFP-TFSF est qu'elle permet d'introduire une interface dans l'implémentation TFSF, grâce à la détermination des vecteurs d'ondes incidents, réfléchis et transmis, ainsi que des facteurs de transmission et de réflexion, lesquels dépendent de la longueur d'onde. Un autre avantage de cette technique est qu'elle permet de réduire drastiquement l'erreur de dispersion numérique lors du calcul FDTD. Cela consiste à corriger directement la valeur des vecteurs d'onde pour chaque fréquence du spectre étudié [17]. Une étude détaillée portant sur la création, par AFP-TFSF, d'une onde plane se propageant dans le vide est disponible dans l'ouvrage de A. Taflove et B. Hagness [17]. De plus, des études plus complètes traitant de l'introduction d'interfaces planes dans l'implémentation AFP-TFSF ont été réalisées par J.B. Schneider [47, 48]. On y parle notamment de la création d'ondes évanescentes, ce thème étant au centre de nos travaux.

À titre d'illustration, les figures 3.6 et 3.7 nous montrent les résultats obtenus dans le cas d'une onde incidente de spectre gaussien centré sur la longueur d'onde $\lambda_0 = 10 \mu\text{m}$ et se propageant parallèlement au plan $(y - z)$, éclairant ainsi une interface plane entre l'air (milieu 1) et un matériau diélectrique (milieu 2, $n_{\text{diél}} = 1.5$). Le domaine de calcul est de 260^3 cellules cubiques ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = \lambda_0/25$). L'interface, représentée par la ligne blanche pleine, se situe à mi-hauteur du domaine de calcul ($\frac{N_z}{2}$). L'onde est polarisée TE, de telle sorte que le champ électrique est normal au plan d'incidence. Ces figures représentent le module du champ électrique dans le plan $(\frac{N_x}{2}, y, z)$ au temps $t = 350\Delta t$ et $t = 600\Delta t$, avec $\Delta t = \frac{1}{2}\lambda_0/(25 \times c) = 0.67 \text{ fs}$. Le cadre blanc en pointillé représente la surface TFSF séparant les zones de champ total et de champ diffusé.

Deux cas distincts sont modélisés. Dans le premier cas (FIG. 3.6), l'onde plane arrive par le milieu supérieur (par la gauche) avec un angle d'incidence de 45° et nous pouvons voir qu'une partie est réfractée à travers l'interface, et qu'une autre partie est réfléchie. D'ailleurs, des phénomènes d'interférences entre l'onde incidente et l'onde réfléchie peuvent s'observer au dessus de l'interface. Une autre remarque importante est que

le champ électrique est nul à l'extérieur de la surface TFSS, c'est-à-dire dans la zone de champ diffusé, du fait de l'absence d'objet diffusant dans la zone de champ total. Le second cas (FIG. 3.7) traite de l'illumination de l'interface via le milieu inférieur. L'angle d'incidence de 45° est alors supérieur à l'angle critique $\theta_c = 42^\circ$. Nous pouvons donc observer au dessus de l'interface une onde évanescente créée par réflexion totale.

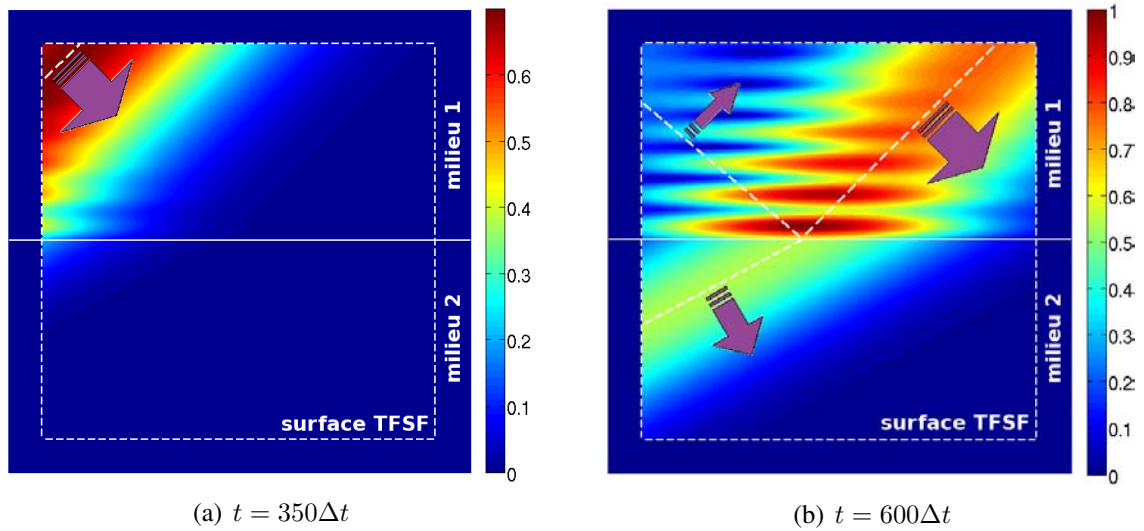


FIG. 3.6: Onde incidente au niveau d'une interface plane entre l'air (milieu supérieur) et un matériau diélectrique (milieu inférieur, $n_{\text{diél}} = 1.5$) - incidence à 45° , au dessus de l'interface

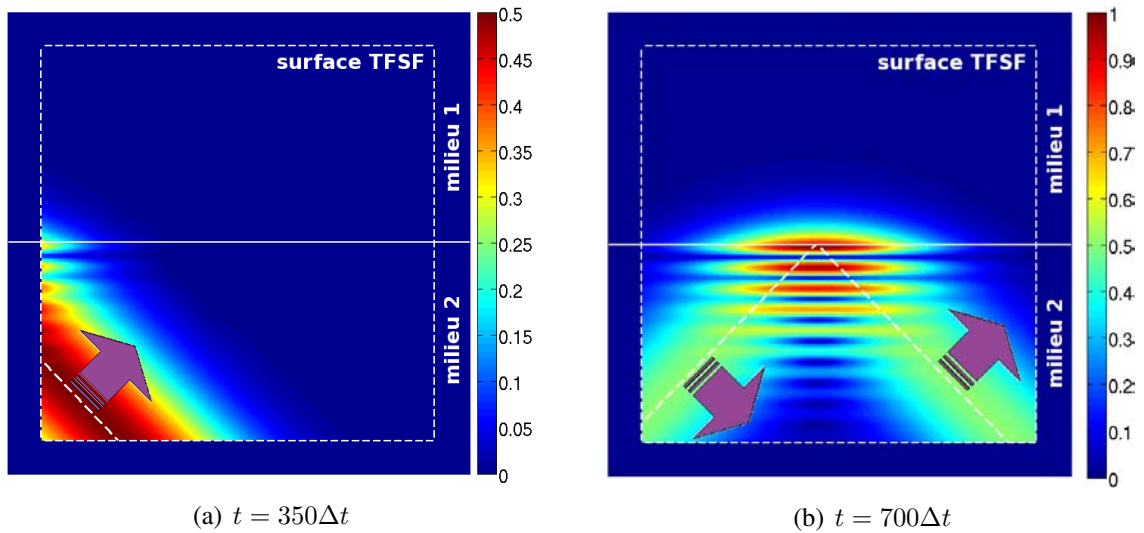


FIG. 3.7: Onde incidente au niveau d'une interface plane entre l'air (milieu supérieur) et un matériau diélectrique (milieu inférieur, $n_{\text{diél}} = 1.5$) - incidence à 45° , en réflexion totale

Remarque importante : dans les chapitres suivants, ce même type d'ondes sera utilisé pour éclairer des objets tels que des sphères ou des pointes.

3.1.6 Description des milieux dispersifs et absorbants

La méthode FDTD présentée précédemment ne permet de décrire que des matériaux simples, dont la fonction diélectrique est supposée réelle et constante. Mais il est possible d'y introduire des matériaux dispersifs décrits par des modèles de Debye, Drude ou Lorentz. Pour cela, l'idée est de résoudre la loi d'Ampère qui, dans le cas d'un milieu dispersif, s'exprime dans le domaine fréquentiel par [17] :

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\omega) = \varepsilon_0 \epsilon(\omega) i \omega \tilde{\mathbf{E}}(\omega) \quad (3.47)$$

Nous donnons ici l'exemple d'un matériau décrit par un modèle de Lorentz multipôle (pour plus d'information sur les fonctions diélectriques, se reporter à l'annexe B).

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \sum_l \frac{\Delta \epsilon_l \omega_{T,l}^2}{\omega^2 - \omega_{T,l}^2 + 2i \delta_l \omega} \quad (3.48)$$

avec : ϵ_∞ la valeur de la permittivité relative pour une fréquence infiniment grande,
 $\omega_{T,l}$ la pulsation optique transverse du pôle l ,
 $\Delta \epsilon_l = \epsilon_{stat,l} - \epsilon_\infty$ où $\epsilon_{stat,l}$ représente l'influence du pôle l sur la valeur de la fonction diélectrique en régime statique (ie quand $\omega \rightarrow 0$),
 $2\delta_l$ l'inverse du temps de relaxation relatif au pôle l .

L'équation 3.47 devient alors :

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\omega) = \varepsilon_0 \epsilon_\infty i \omega \tilde{\mathbf{E}}(\omega) - i \omega \varepsilon_0 \sum_l \frac{\Delta \epsilon_l \omega_{T,l}^2}{\omega^2 - \omega_{T,l}^2 + 2i \delta_l \omega} \tilde{\mathbf{E}}(\omega) \quad (3.49)$$

$$= \varepsilon_0 \epsilon_\infty i \omega \tilde{\mathbf{E}}(\omega) + \sum_l \tilde{\mathbf{J}}_l(\omega) \quad (3.50)$$

$\tilde{\mathbf{J}}_l$ est le courant de polarisation ($l^{\text{ème}}$ pôle), défini dans le domaine fréquentiel par :

$$\tilde{\mathbf{J}}_l(\omega) = i \omega \varepsilon_0 \frac{-\Delta \epsilon_l \omega_{T,l}^2}{\omega_{T,l}^2 - \omega^2 + 2i \delta_l \omega} \tilde{\mathbf{E}}(\omega) \quad (3.51)$$

Après passage dans le domaine temporel par transformée de Fourier inverse, l'équation 3.50 se présente alors sous la forme :

$$\nabla \times \mathbf{H}(t) = \varepsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(t) + \sum_l \mathbf{J}_l(t) \quad (3.52)$$

De même, l'équation 3.51 devient dans le domaine temporel :

$$\omega_{T,l}^2 \mathbf{J}_l(t) - 2\delta_l \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J}_l(t) + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{J}_l(t) = \varepsilon_0 \Delta \epsilon_l \omega_{T,l}^2 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(t) \quad (3.53)$$

Cette expression doit ensuite être développée selon la méthode des différences finies et être réintroduite dans l'équation 3.52, comme démontré dans l'ouvrage [17].

Cet algorithme, qui s'intitule ADE-FDTD (ou Auxiliary Differential Equation), consiste donc à ajouter au code FDTD une équation différentielle auxiliaire (du second ordre dans le cas présent) qui permet de considérer des milieux dispersifs. Pour le valider, des tests ont été faits sur un problème 1D traitant de la réflexion d'une onde sur une interface séparant le vide du matériau que l'on désire étudier (FIG. 3.8).

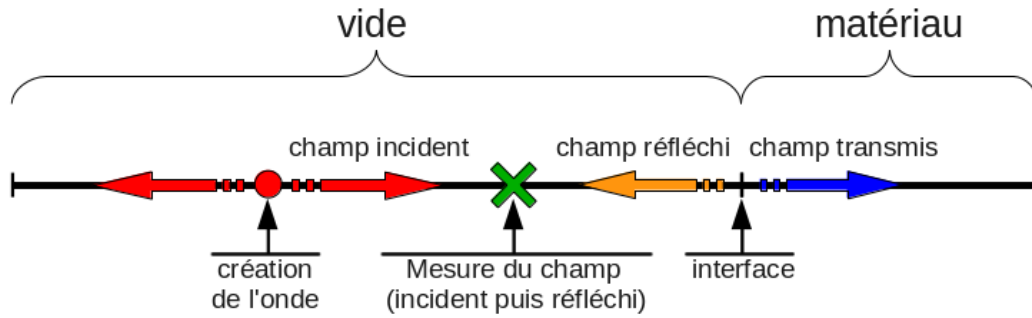


FIG. 3.8: Validation du code ADE-FDTD par étude de la réflexion d'une onde au niveau d'une interface

En faisant le rapport entre l'onde réfléchie et l'onde incidente, nous obtenons la réflectivité. L'image 3.9 nous montre le cas d'une interface entre le vide et du carbure de silicium (SiC). Ce dernier est décrit par un simple pôle de Lorentz. Plus de détails sont fournis dans l'annexe B, où d'autres matériaux sont testés. Nous pouvons voir que la réflectivité théorique et celle obtenue par ADE-FDTD concordent parfaitement.

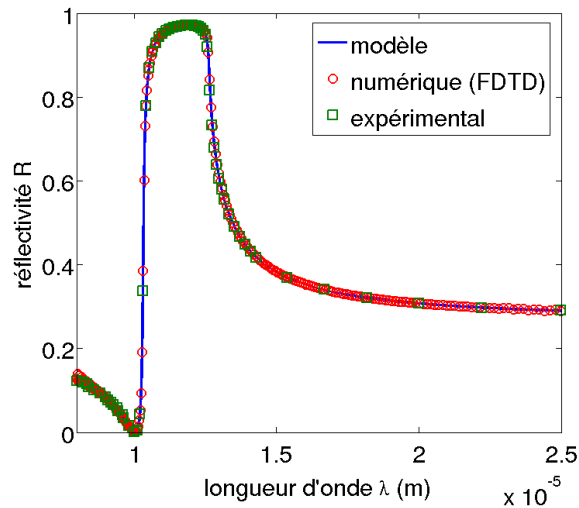


FIG. 3.9: Validation du modèle ADE-FDTD par étude de la réflectivité : cas d'une interface vide/SiC

3.1.7 Description des géométries complexes

Généralités

Lors de l'utilisation d'un maillage structuré uniforme, il arrive que certains objets ne soient pas décrits avec une résolution spatiale suffisante (FIG. 3.10 et 3.11).

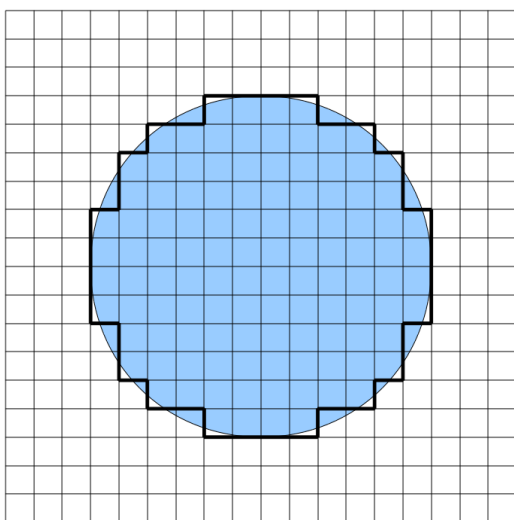


FIG. 3.10: Inconvénient d'un maillage structuré uniforme dans le cas d'une sphère

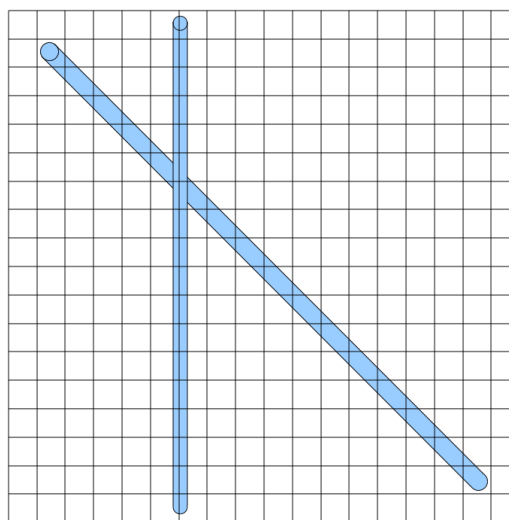


FIG. 3.11: Inconvénient d'un maillage structuré uniforme dans le cas de nano-câbles

Pour palier ce problème qui est à l'origine d'erreurs numériques, l'idée la plus simple est de diminuer la taille du pas spatial. Toutefois, cela présente deux inconvénients majeurs. D'une part, cette modification tend à augmenter les ressources nécessaires au calcul, notamment dans le cas d'un problème 3D. D'autre part, du fait de la condition CFL, le pas temporel doit lui aussi être réduit, ce qui implique un temps de calcul plus long.

Différentes techniques plus performantes pour contourner ce problème ont donc été développées. Ce sont, par exemple, les maillages non-structurés [17, 49, 50] ou les sous-maillages cartésiens [17, 51]. En ce qui nous concerne, nous avons opté pour une approche différente appelée Contour Path technique (CPT). Cette dernière est décrite dans le sous-paragraphe suivant.

Contour Path Technique

La Contour Path technique a été proposé par Yu, Dey et Mittra [52, 53, 54, 55, 56] pour décrire les surfaces courbes par un maillage structuré. Le principe est le suivant : dans chaque cellule de Yee traversée par la surface théorique d'un objet, il est nécessaire de déterminer, au niveau de chaque arête de ladite cellule, quelle proportion se trouve à l'extérieur de l'objet, et quelle proportion se trouve à l'intérieur.

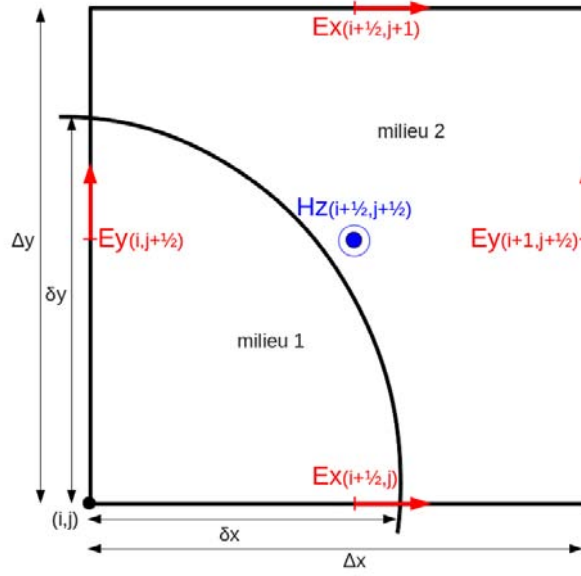


FIG. 3.12: Principe de la méthode CPT dans une cellule de Yee 2D

Par exemple, si l'on se reporte au schéma 3.12, le champ $E_x(i + \frac{1}{2}, j + 1)$ doit être considéré comme étant entièrement à l'extérieur de l'objet (i.e. entièrement dans le milieu 2) et sera donc calculé de la façon habituelle. Par contre, l'arrête portant le champ $E_x(i + \frac{1}{2}, j)$ est intersectée par la surface de l'objet. Dans ce cas, le calcul de $E_x(i + \frac{1}{2}, j)$ doit prendre en compte l'influence des deux milieux, via les ratios $\frac{\delta x}{\Delta x}$ et $\frac{(1-\delta x)}{\Delta x}$:

$$E_x(i + \frac{1}{2}, j) = \frac{\delta x}{\Delta x} E_x^1(i + \frac{1}{2}, j) + \frac{(1 - \delta x)}{\Delta x} E_x^2(i + \frac{1}{2}, j) \quad (3.54)$$

où E_x^1 et E_x^2 sont calculés comme étant entièrement dans le milieu 1 pour le premier, et entièrement dans le milieu 2 pour le second. Ainsi, E_x^1 et E_x^2 doivent être déterminés séparément au niveau de la frontière objet/milieu environnant, et doivent donc être stockés au cours du calcul FDTD. Il est toutefois possible de travailler directement avec E_x sans recourir à ces champs intermédiaires, et ce dans le cas d'objets diélectriques non-dispersifs. En effet, dans ce cas, la géométrie du problème est directement décrite par la matrice diélectrique $\bar{\epsilon}$. Les ratios, hors et à l'intérieur de l'objet, peuvent alors être intégrés à cette même matrice diélectrique. En reprenant l'exemple précédant, cette technique nous permet d'obtenir la matrice diélectrique $\bar{\epsilon}_x$ propre à la composante E_x du champ électrique :

$$\bar{\epsilon}_x(i + \frac{1}{2}, j) = \frac{\delta x}{\Delta x} \epsilon_1 + \frac{(1 - \delta x)}{\Delta x} \epsilon_2 \quad (3.55)$$

ϵ_1 et ϵ_2 étant respectivement les constantes diélectriques de l'objet et du milieu environnant. La même opération est à faire pour les composantes E_y et E_z , ce qui nécessite l'introduction des matrices diélectriques $\bar{\epsilon}_y$ et $\bar{\epsilon}_z$.

3.2. CALCUL DU CHAMP LOINTAIN

À titre d'exemple, nous pouvons voir, grâce aux figures 3.13 et 3.14, les résultats obtenus dans le cas d'une sphère de 10 mailles de rayon et d'indice optique $n_{\text{sphère}} = 1.5$, placée dans le vide. Il s'agit des trois plans de coupes $(x, y, \frac{N_z}{2})$, $(x, \frac{N_y}{2}, z)$ et $(\frac{N_x}{2}, y, z)$ passant par le centre de la sphère, et représentant la valeur des matrices diélectriques $\bar{\bar{\epsilon}}_x$, $\bar{\bar{\epsilon}}_y$ et $\bar{\bar{\epsilon}}_z$ au niveau de ces plans.

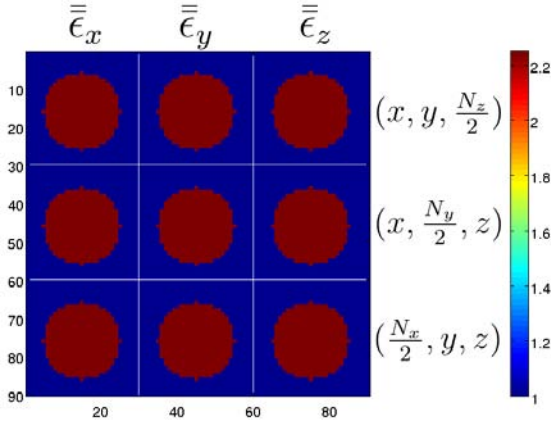


FIG. 3.13: Maillage structuré uniforme dans le cas d'une sphère - cas classique sans utilisation de la méthode CPT

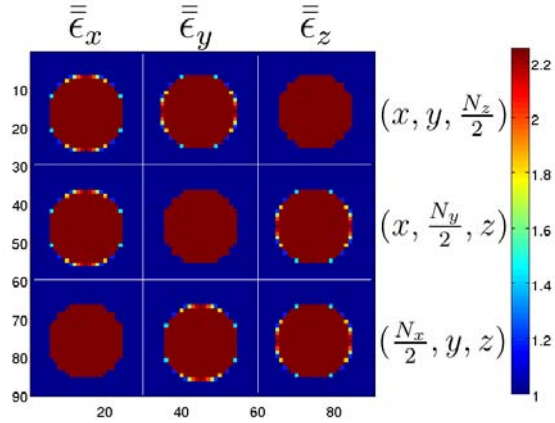


FIG. 3.14: Maillage structuré uniforme dans le cas d'une sphère - surface de l'objet affinée par la méthode CPT

Sur la figure de gauche, la méthode CPT n'a pas été utilisée, ce qui implique que $\bar{\bar{\epsilon}}_y = \bar{\bar{\epsilon}}_y = \bar{\bar{\epsilon}}_z$. Par contre, sur la figure de droite, la méthode a été mise en œuvre, ce qui nous permet d'observer les différences entre les trois matrices diélectriques.

Pour pouvoir observer l'influence de cette technique sur la qualité des résultats, des études ont été faites dans le cas de sphères en carbure de silicium et de verre SiO_2 éclairées par une onde plane. Les détails des calculs et les résultats sont donnés dans le chapitre 4.

3.2 Calcul du champ lointain

Le modèle FDTD présenté précédemment nous fournit les différentes composantes des champs électrique et magnétique en tout point du domaine de calcul, c'est à dire exclusivement en zone de champ proche. Pour obtenir la valeur des champs à grande distance de l'objet diffusant, il est nécessaire de procéder à une transformation Champ proche/Champ lointain également appelée Near Field To Far Field transformation (NFTFF).

Comme le montre la figure 3.15, nous présentons ici une méthode permettant de déterminer le champ électrique lointain dans le domaine fréquentiel, à partir des champs proches électrique et magnétique obtenus, grâce au calcul FDTD, dans le domaine temporel.

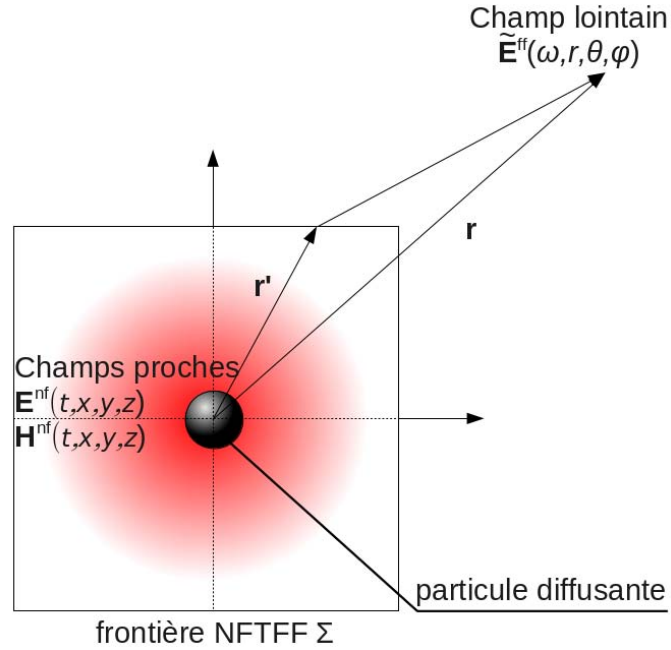


FIG. 3.15: Distinction entre zone de champ proche et zone de champ lointain

3.2.1 Théorème des courants équivalents de surface

Les méthodes de transformation NFTFF, que nous décrivons par la suite, se basent avant tout sur le théorème des courants équivalents de surface (Surface Equivalence Theorem), dont voici l'énoncé [57, 58] :

Théorème : “By the surface equivalence theorem, the fields outside an imaginary closed surface are obtained by placing over the closed surface suitable electric and magnetic current densities that satisfy the boundary condition. The current densities are selected so that the fields inside the closed surface are zero and outside are equal to the radiation produced by the actual sources. Thus, the technique can be used to obtain the fields radiated outside a closed surface by sources enclosed within it. The formulation is exact but requires integration over the closed surface. The degree of accuracy depends on the knowledge of the tangential components of the fields over the closed surface.”

Ainsi, ce théorème nous dit que les champs électrique et magnétique, en dehors de la surface fermée de transformation NFTFF (Σ sur la figure 3.16), c'est-à-dire loin de l'objet diffusant, peuvent intégralement être décrits par les courants équivalents électrique et magnétique tangents à cette surface. Les expressions de ces courants équivalents nous sont données par les équations suivantes :

$$\mathbf{J}_E = \mathbf{n} \times \mathbf{H}^{nf} \quad \mathbf{J}_H = -\mathbf{n} \times \mathbf{E}^{nf} \quad (3.56)$$

où \mathbf{n} est le vecteur unitaire normal à la surface de transformation Σ . Ainsi, une fois que ces courants surfaciques sont connus, il est inutile de connaître ce qu'il y a à l'intérieur de la

3.2. CALCUL DU CHAMP LOINTAIN

surface fermée Σ . C'est ce qui fait la puissance de la transformation champ proche/champ lointain que l'on présente dans ce chapitre. Elle est indépendante de la forme et du matériau de l'objet diffusant que l'on étudie.

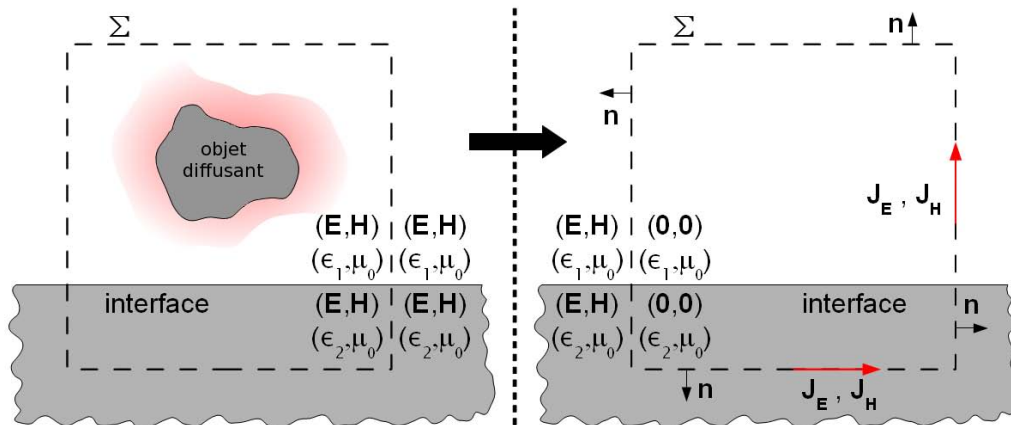


FIG. 3.16: Théorème des courants équivalents de surface

Il est important de préciser que ces courants équivalents se calculent à partir des champs proches électrique et magnétique diffusés. La surface Σ se doit donc d'être dans la zone des champs diffusés, c'est-à-dire entre la CPML et la surface de transformation TFSS, comme le montre l'image 3.17.

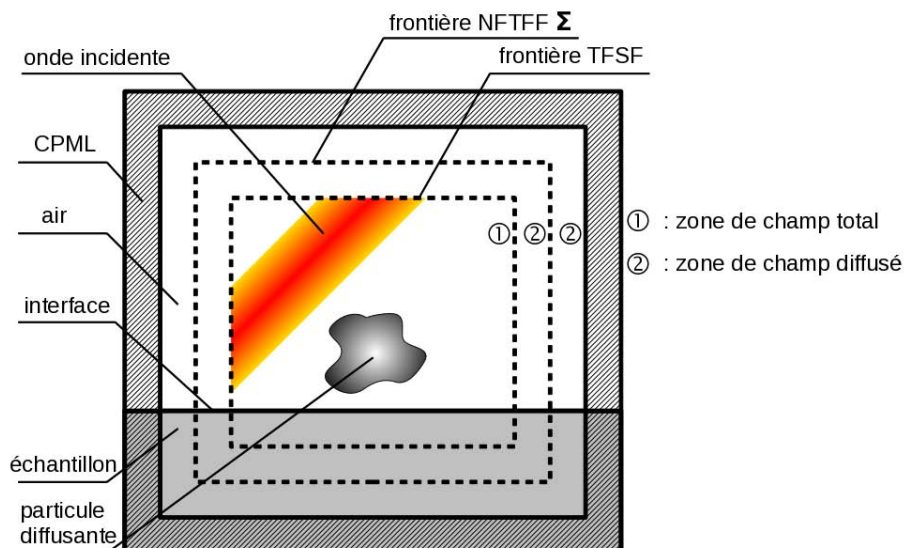


FIG. 3.17: Positions des différentes frontières FDTD et NFTFF

La seconde particularité est que nous nous intéressons exclusivement aux champs lointains définis dans le domaine fréquentiel. Il doit donc en être de même pour les courants équivalents qui sont obtenus au cours du calcul FDTD, par transformée de Fourier discrète.

3.2.2 Transformation champ proche/champ lointain : formalisme classique

La méthode présentée ici se base sur le théorème des courants équivalents de surface (voir paragraphe précédent). Elle permet de décrire des systèmes simples composés d'une source ou d'un objet diffusant de forme quelconque, dont le champ émis (ou diffusé) n'est perturbé par aucune structure extérieure. Le développement de cette technique NFTFF, actuellement très répandue, peut se retrouver dans l'ouvrage de A.Taflove [17], c'est pourquoi nous n'entrerons pas dans les détails et nous nous contenterons d'en donner le résultat final.

Les composantes des champs lointains sont données, en coordonnées sphériques (θ et ϕ étant respectivement les angles polaire et azimutal), par :

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ff}}(\omega, r, \theta, \phi) = \begin{cases} \tilde{E}_r^{\text{ff}} = 0 \\ \tilde{E}_\theta^{\text{ff}} = -\frac{i k \exp(-i kr)(L_\phi + \eta_0 N_\theta)}{4\pi r} \\ \tilde{E}_\phi^{\text{ff}} = +\frac{i k \exp(-i kr)(L_\theta - \eta_0 N_\phi)}{4\pi r} \end{cases} \quad (3.57)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}^{\text{ff}}(\omega, r, \theta, \phi) = \begin{cases} \tilde{H}_r^{\text{ff}} = 0 \\ \tilde{H}_\theta^{\text{ff}} = -\frac{i k \exp(-i kr)(N_\phi - \frac{L_\theta}{\eta_0})}{4\pi r} \\ \tilde{H}_\phi^{\text{ff}} = +\frac{i k \exp(-i kr)(N_\theta + \frac{L_\phi}{\eta_0})}{4\pi r} \end{cases} \quad (3.58)$$

avec k le nombre d'onde, $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ l'impédance du vide et $r = |\mathbf{r}|$, \mathbf{r} étant la position du point d'observation en champ lointain.

En outre, les vecteur \mathbf{L} et \mathbf{N} sont reliés aux courants $\tilde{\mathbf{J}}_E$ et $\tilde{\mathbf{J}}_H$ par les relations suivantes :

$$\mathbf{L} = \iint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{J}}_H \exp(i kr' \cos \psi) dS' \quad \text{et} \quad \mathbf{N} = \iint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{J}}_E \exp(i kr' \cos \psi) dS' \quad (3.59)$$

avec $r' = |\mathbf{r}'|$, \mathbf{r}' étant la position du point source sur la surface d'intégration Σ et ψ l'angle entre \mathbf{r} et \mathbf{r}' .

Comme nous l'avons déjà dit, cette méthode ne peut être utilisée que dans des cas simples, et ne peut donc pas prendre en compte la présence de structures extérieures, notamment celle d'une interface plane qui nous intéresse en particulier. Pour pallier ce problème, un nouveau modèle NFTFF a été développé. Avant de le présenter, nous allons d'abord établir quelques généralités sur le formalisme de Sipe utile à la compréhension de la NFTFF modifiée.

3.2.3 Transformation champ proche/champ lointain via les tenseurs de Green

Formalisme de Sipe

Un des objectifs de nos travaux porte sur l'étude du comportement optique d'une sonde au-dessus d'une interface, il est donc important de pouvoir modéliser une telle interface. Alors que cette dernière est tout simplement décrite, au cours du calcul FDTD, par les fonctions diélectriques des différents milieux, la technique NFTFF que nous présentons ici nécessite l'utilisation des tenseurs de Green qui sont décrits dans le sous-chapitre suivant. Nous n'introduisons ici que les bases relatives aux notations de Sipe [59].

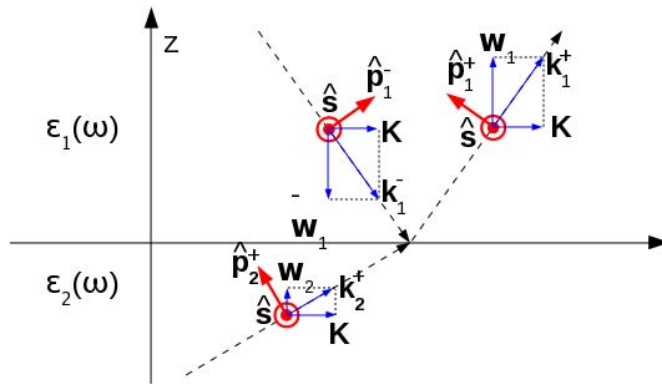


FIG. 3.18: Vecteurs de Sipe relatifs aux polarisations s et p

L'interface plane que nous modélisons est définie par deux demi-espaces homogènes, isotropes et non-magnétiques de fonctions diélectriques relatives ϵ_1 pour $z > 0$ et ϵ_2 pour $z < 0$ (FIG. 3.18). Les vecteurs d'onde dans les différents milieux sont donnés par :

$$\mathbf{k}_i^\pm = \mathbf{K}_{\parallel} \pm \mathbf{w}_i \quad (3.60)$$

avec : $|\mathbf{k}_i^\pm| = k_0 \sqrt{\epsilon_i}$, où k_0 est la norme du vecteur d'onde dans le vide,

\mathbf{K}_{\parallel} la composante tangente à l'interface du vecteur d'onde \mathbf{k}_i ($i = 1, 2$),

$w_i = \sqrt{k_0^2 \epsilon_i - \mathbf{K}_{\parallel}^2}$ la composante normale à l'interface de \mathbf{k}_i .

Si l'on définit $\hat{\mathbf{K}}$ et $\hat{\mathbf{z}}$ comme étant les vecteurs unitaires formés à partir de \mathbf{K}_{\parallel} et \mathbf{z} , les vecteurs unitaires issus des \mathbf{k}_i^\pm peuvent alors s'écrire :

$$\hat{\mathbf{k}}_i^\pm = \frac{1}{k_0 n_i} (K_{\parallel} \hat{\mathbf{K}} \pm w_i \hat{\mathbf{z}}) \quad (3.61)$$

où $n_i = \sqrt{\epsilon_i}$ est l'indice optique du milieu i . Ces nouvelles notations nous amènent à utiliser le formalisme de Sipe [59], basé sur l'introduction des vecteurs $\hat{\mathbf{s}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$ donnés par les équations suivantes.

$$\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{K}} \times \hat{\mathbf{z}} \quad (3.62)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_i^\pm = \frac{1}{k_0 n_i} (K_{\parallel} \hat{\mathbf{z}} \mp w_i \hat{\mathbf{K}}) \quad (3.63)$$

Ces différents vecteurs unitaires, représentant les polarisations s (i.e. TE) et p (i.e. TM), sont schématisés sur la figure 3.18.

On cherche maintenant à déterminer les coefficients de Fresnel en réflexion et transmission dans le cas d'ondes polarisées s et p . On se place pour cela dans le cas d'une onde plane incidente d'amplitude E_{inc} . Deux situations distinctes sont étudiées. La première traite du cas d'une onde incidente de vecteur d'onde \mathbf{k}_1^- se propageant dans le milieu 1, et dont une partie est réfléchi au niveau de l'interface (amplitude : E_r , vecteur d'onde : \mathbf{k}_1^+). En ce qui concerne la seconde situation, l'onde incidente de vecteur d'onde \mathbf{k}_2^+ se propage dans le milieu 2. Une onde va donc être transmise dans le milieu 1 (amplitude : E_t , vecteur d'onde : \mathbf{k}_1^+). Ci-dessous sont donnés les facteurs de Fresnel pour les différentes polarisations possibles de l'onde incidente (polarisations s et p) :

$$E_r^s = r_{12}^s E_{inc}^s, \quad r_{12}^s = \frac{w_1 - w_2}{w_1 + w_2} \quad (3.64)$$

$$E_r^p = r_{12}^p E_{inc}^p, \quad r_{12}^p = \frac{\epsilon_2 w_1 - \epsilon_1 w_2}{\epsilon_2 w_1 + \epsilon_1 w_2} \quad (3.65)$$

$$E_t^s = t_{12}^s E_{inc}^s, \quad t_{21}^s = \frac{2w_2}{w_1 + w_2} \quad (3.66)$$

$$E_t^p = t_{12}^p E_{inc}^p, \quad t_{21}^p = \frac{2n_1 n_2 w_2}{\epsilon_2 w_1 + \epsilon_1 w_2} \quad (3.67)$$

En ce qui concerne les champs magnétiques, il est possible de déduire des équations 3.64 à 3.67 les relations liant le champ magnétique incident H_{inc} aux champs réfléchi H_r et transmis H_t , grâce à la formule 3.68 :

$$\mathbf{H} = \frac{\mu}{\omega} (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \quad (3.68)$$

À titre d'exemple, intéressons nous aux champs magnétiques incident et réfléchi, polarisés s . Ils sont définis, dans le cas d'une onde plane, par les relations suivantes :

$$\mathbf{H}_{inc}^s = \frac{\mu}{\omega} (\mathbf{k}_1^- \times \mathbf{E}_{inc}^p) \quad (3.69)$$

$$\mathbf{H}_r^s = \frac{\mu}{\omega} (\mathbf{k}_1^+ \times \mathbf{E}_r^p) \quad (3.70)$$

Si l'on associe 3.70 à 3.65, nous obtenons :

$$\mathbf{H}_r^s = r_{12}^p \frac{\mu}{\omega} (\mathbf{k}_1^- \times \mathbf{E}_{inc}^p) \quad (3.71)$$

3.2. CALCUL DU CHAMP LOINTAIN

En reprenant l'équation 3.69, nous arrivons enfin à :

$$H_r^s = r_{12}^p H_{inc}^s \quad (3.72)$$

La même opération peut être reproduite pour H_r^p , H_t^s et H_t^p , ce qui nous donne :

$$H_r^p = r_{12}^s H_{inc}^p \quad (3.73)$$

$$H_t^s = t_{21}^p H_{inc}^s \quad (3.74)$$

$$H_t^p = t_{21}^s H_{inc}^p \quad (3.75)$$

Ces différents facteurs de Fresnel, relatifs aux polarisations s et p , sont utilisés dans ce qui suit pour la détermination de tenseurs de Green prenant en compte la présence d'une interface plane.

Modélisation d'une interface

L'interface plane que nous voulons décrire nécessite l'introduction de tenseurs de Green prenant en compte la présence de cette même interface. Pour simplifier la compréhension des prochains chapitres, nous étudions ici les tenseurs de Green permettant de déterminer le champ électrique lointain d'un seul côté de l'interface (z positifs). La méthode que l'on présente dans cette section s'appuie sur la représentation angulaire de ces tenseurs de Green \overleftrightarrow{G} dans un plan $z_0 > 0$ (FIG. 3.19), lesquels peuvent s'obtenir à partir de l'expression :

$$\overleftrightarrow{G}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \overleftrightarrow{G}(\omega, \mathbf{K}, z_0, z') \exp(i \mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')) \exp(i w(z_0 - z')) d\mathbf{K} \quad (3.76)$$

où $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z_0)$ est le vecteur position du point de mesure et où $\mathbf{r}' = (\mathbf{R}', z')$ est le vecteur position de la source. Cette représentation angulaire nous est imposée par notre méthode de transformation champ proche/champ lointain dont le principe sera développé dans le paragraphe suivant. Comme nous le montre la figure 3.19, trois situations sont possibles en fonction de la position des courants équivalents \tilde{J}_E et \tilde{J}_H par rapport à l'interface :

- La source (z_1) (i.e. \tilde{J}_E ou \tilde{J}_H) est dans le milieu 1 et émet directement vers le point de mesure (z_0). Les tenseurs de Green relatifs aux champs électrique et magnétique sont alors donnés par :

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{G}_E^0(\omega, \mathbf{K}, z_0, z_1) &= \frac{\omega}{2w_1} (\hat{s}\hat{s} + \hat{p}_1^+ \hat{p}_1^+) \exp(i w_1 |z_0 - z_1|) \\ \overleftrightarrow{G}_H^0(\omega, \mathbf{K}, z_0, z_1) &= \frac{\omega}{2w_1} (\hat{p}_1^+ \hat{s} - \hat{s} \hat{p}_1^+) \exp(i w_1 |z_0 - z_1|) \end{aligned} \quad (3.77)$$

où $(\hat{s}\hat{s})_{\alpha\beta} = s_\alpha s_\beta$.

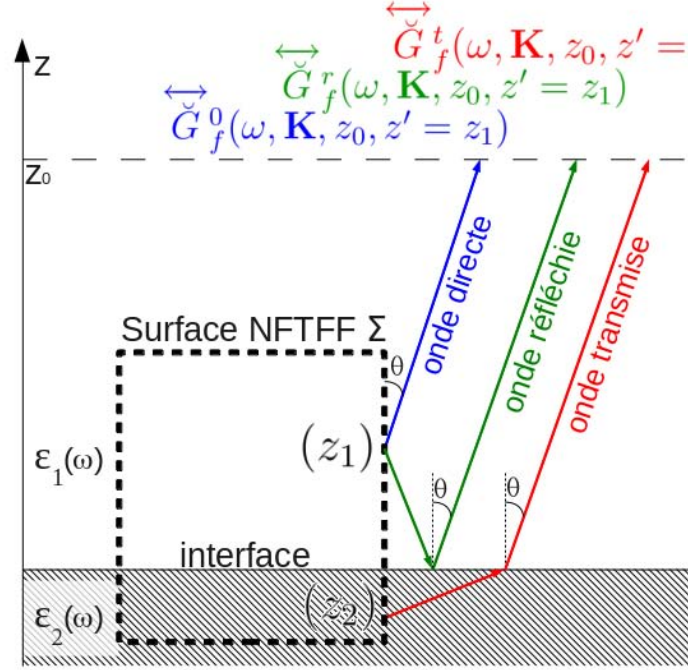


FIG. 3.19: Différents modes d'illumination d'un plan z_0 : illumination directe, onde réfléchie et onde transmise

- La source (z_1) est dans le milieu 1, et l'onde est émise vers l'interface. Une partie de cette onde est alors réfléchie au niveau de l'interface avant d'atteindre le plan z_0 :

$$\begin{aligned}\overleftrightarrow{G}_E^r(\omega, \mathbf{K}, z_0, z_1) &= \frac{\omega}{2w_1}(r_{12}^s \hat{s}\hat{s} + r_{12}^p \hat{p}_1^+ \hat{p}_1^-) \exp(i w_1 |z_0 + z_1|) \\ \overleftrightarrow{G}_H^r(\omega, \mathbf{K}, z_0, z_1) &= \frac{\omega}{2w_1}(r_{12}^s \hat{p}_1^+ \hat{s} - r_{12}^p \hat{s} \hat{p}_1^-) \exp(i w_1 |z_0 + z_1|)\end{aligned}\quad (3.78)$$

- La source (z_2) se trouve dans le milieu 2 et émet vers l'interface. Une partie de l'onde est alors transmise dans le milieu 1 avant d'atteindre le plan z_0 :

$$\begin{aligned}\overleftrightarrow{G}_E^t(\omega, \mathbf{K}, z_0, z_2) &= \frac{\omega}{2w_2}(t_{21}^s \hat{s}\hat{s} + t_{21}^p \hat{p}_1^+ \hat{p}_2^+) \exp(i(w_1 z_0 - w_2 z_2)) \\ \overleftrightarrow{G}_H^t(\omega, \mathbf{K}, z_0, z_2) &= \frac{\omega}{2w_2}(t_{21}^s \hat{p}_1^+ \hat{s} - t_{21}^p \hat{s} \hat{p}_2^+) \exp(i(w_1 z_0 - w_2 z_2))\end{aligned}\quad (3.79)$$

Ainsi, pour toutes les sources se trouvant au-dessus de l'interface, les tenseurs de Green sont définis par $\overleftrightarrow{G}_f = \overleftrightarrow{G}_f^0 + \overleftrightarrow{G}_f^r$ ($f = E$ ou H). En revanche, si la source se situe en dessous de cette même interface, nous avons $\overleftrightarrow{G}_f = \overleftrightarrow{G}_f^t$.

3.2. CALCUL DU CHAMP LOINTAIN

Il est important de préciser que toutes les expressions des tenseurs de Green présentées ci-dessus sont uniquement dédiées au calcul du champ électrique au dessus de l'interface. Certaines modifications, que nous ne développerons pas ici, doivent être prises en compte lors du calcul du champ électrique en dessous de l'interface.

Transformation NFTFF basée sur les tenseurs de Green

Nous présentons ici une nouvelle méthode de transformation Champ proche/Champ lointain, permettant de prendre en compte la présence d'une interface à proximité d'un objet diffusant. Une technique similaire a été développée par I.R. Capoglu et G.S. Smith [18]. La particularité de celle employée dans notre étude est qu'elle permet d'obtenir les champs lointains dans le domaine spectral [60, 19]. Nous ne parlerons ici que de la détermination du champ électrique lointain, le champ magnétique pouvant s'obtenir de manière similaire. Cette méthode est basée sur la représentation angulaire du champ électrique dans un plan $z = z_0$:

$$\check{E}(\omega, \mathbf{K}, z_0) = \iint \tilde{E}(\omega, \mathbf{R}, z_0) \exp(-i \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (3.80)$$

Le plan z_0 a été choisi comme étant au-dessus de l'interface, laquelle est définie par le plan $z = 0$, comme le montre la figure 3.20.

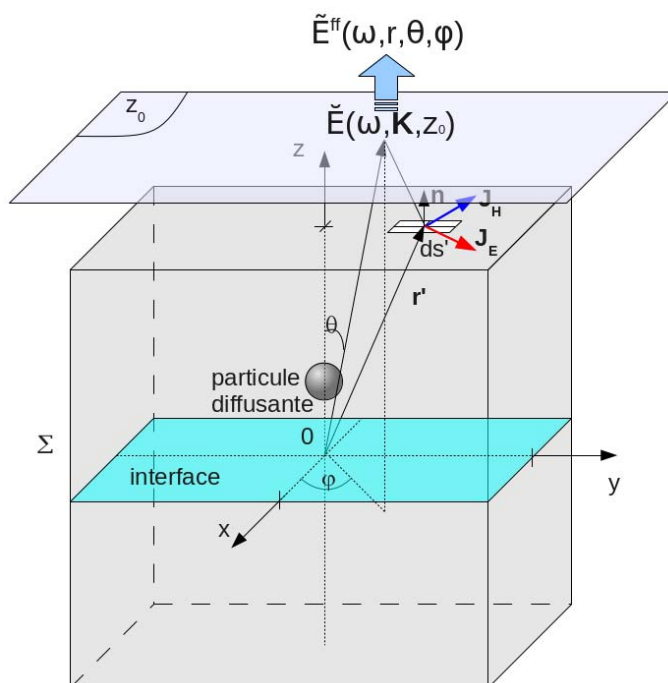


FIG. 3.20: Transformation NFTFF basée sur les tenseurs de Green : représentation angulaire du champ électrique dans le plan z_0

En se basant sur l'expression de la représentation angulaire des tenseurs de Green dans ce même plan z_0 , ces derniers ayant été décrits dans la sous-partie précédente, nous pouvons alors déterminer le champ électrique $\check{\mathbf{E}}(\omega, \mathbf{K}, z_0)$:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{E}}(\omega, \mathbf{K}, z_0) &= \int \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_E(\omega, \mathbf{K}, z_0, z') \check{\mathbf{J}}_E(\omega, \mathbf{K}, z') dz' \\ &+ \int_{\Sigma} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_H(\omega, \mathbf{K}, z_0, z') \check{\mathbf{J}}_H(\omega, \mathbf{K}, z') dz' \end{aligned} \quad (3.81)$$

$\check{\mathbf{J}}_E$ et $\check{\mathbf{J}}_H$ sont donnés par :

$$\check{\mathbf{J}}_E(\omega, \mathbf{K}, z') = \iint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{J}}_E(\omega, \mathbf{r}') \exp(i \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}') dR' \quad (3.82)$$

$$\check{\mathbf{J}}_H(\omega, \mathbf{K}, z') = \iint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{J}}_H(\omega, \mathbf{r}') \exp(i \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}') dR' \quad (3.83)$$

où Σ est la surface de transformation NFTFF, à laquelle appartiennent les courants équivalents dans le domaine spectral $\tilde{\mathbf{J}}_E$ et $\tilde{\mathbf{J}}_H$.

Une dernière transformation est alors nécessaire pour obtenir le champ électrique lointain en coordonnées sphériques, à savoir :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ff}}(\omega, r, \theta, \phi) &= \frac{i k_0 \exp(-i k_0 r)}{2\pi r} \exp(i k_0 z_0 \cos \theta) \\ &\times [F_{\theta}(\omega, \theta, \phi) \mathbf{e}_{\theta} + F_{\phi}(\omega, \theta, \phi) \mathbf{e}_{\phi}] \end{aligned} \quad (3.84)$$

où \mathbf{e}_{θ} et \mathbf{e}_{ϕ} sont les vecteurs unitaires usuels en coordonnées sphériques. Les composantes du vecteur \mathbf{F} sont données par l'équation 3.85.

$$\mathbf{F}(\omega, \theta, \phi) = \begin{cases} F_{\theta}(\omega, \theta, \phi) = [\cos \phi \mathbf{e}_x + \sin \phi \mathbf{e}_y] \cdot \check{\mathbf{E}}(\omega, \mathbf{K}, z_0) \\ F_{\phi}(\omega, \theta, \phi) = [-\sin \phi \cos \theta \mathbf{e}_x + \cos \phi \cos \theta \mathbf{e}_y] \cdot \check{\mathbf{E}}(\omega, \mathbf{K}, z_0) \end{cases} \quad (3.85)$$

Il est important de remarquer que le champ \mathbf{E}^{ff} dépend des angles θ et ϕ , non seulement à travers ses dépendances explicites mais aussi à travers le vecteur \mathbf{K} qui, ici, s'écrit :

$$\mathbf{K}(\theta, \phi) = |\mathbf{k}| \cdot [\cos \phi \sin \theta \mathbf{e}_x + \sin \phi \sin \theta \mathbf{e}_y] \quad (3.86)$$

Perspectives

Actuellement, nous nous intéressons fortement à l'étude d'interfaces rugueuses, dans le but de décrire au mieux une situation expérimentale réelle. La difficulté majeure d'une telle modélisation est la détermination des tenseurs de Green propres à ce type d'interfaces [61, 62, 63, 64, 65, 66]. Une autre application envisageable est l'étude de surfaces planes stratifiées. Là encore, les tenseurs de Green doivent être adaptés à de telles structures [67, 68].

Conclusion

Ce chapitre décrit le développement d'une méthode complète permettant de déterminer le champ diffusé, dans toutes les directions de l'espace, par une particule de forme quelconque placée à proximité d'une interface plane entre deux milieux. La première étape de la modélisation fait appel au calcul du champ proche par la méthode FDTD. Cette dernière s'accompagne d'un certain nombre de modèles, représentés sur la figure 3.21, tels que la CPML, utilisée comme condition aux limites de notre domaine de calcul, ou l'AFP-TFSF, destinée à créer une onde plane incidente éclairant l'objet étudié de manière directe ou indirecte (illumination par une onde évanescente créée par réflexion totale). La seconde étape de la modélisation consiste à déterminer le champ lointain diffusé par l'objet à partir du champ proche obtenu lors du calcul FDTD. La méthode de transformation champ proche/champ lointain développée au cours de nos travaux est mise en œuvre dans le domaine fréquentiel, et se base sur l'utilisation des tenseurs de Green. Ces derniers permettent de prendre en compte la présence d'une interface plane. L'ensemble du chapitre suivant sera destiné à la validation de cette méthode.

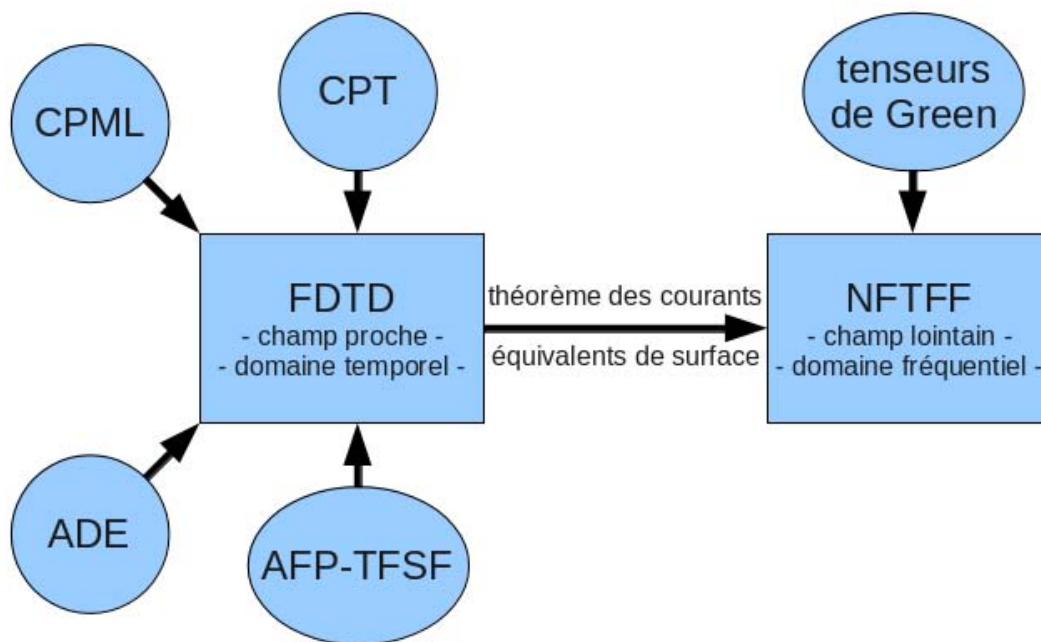


FIG. 3.21: Énumération des différents modèles numériques présentés dans ce chapitre

Chapitre 4

Validation des modèles

Sommaire

4.1	Étude d'un dipôle oscillant	82
4.1.1	Cas d'un dipôle dans le vide	82
4.1.2	Cas d'un dipôle au dessus d'une interface	83
4.2	Étude d'une sphère	86
4.2.1	Cas d'une sphère dans le vide	87
4.2.2	Cas d'une sphère au dessus d'un interface : illumination directe	89
4.2.3	Cas d'une sphère au dessus d'un interface : illumination par une onde évanescente	93
4.3	Étude d'un système résonant	95
4.3.1	Cas d'une sphère de SiC dans le vide	95
4.3.2	Cas d'une sphère de SiC au dessus d'une interface	97
4.3.3	Cas d'une sphère de SiO ₂ au dessus d'une interface	98

Introduction

Ce chapitre est essentiellement consacré à la validation des modèles numériques décrits précédemment. Ainsi, un certain nombre de cas tests sont étudiés, et les solutions obtenues par FDTD/NFTFF sont comparées à celles issues de méthodes analytiques ou semi-analytiques ayant déjà fait leurs preuves. Nous commençons par le cas simple d'un dipôle électrique oscillant, d'abord dans le vide, puis au dessus d'une interface plane. Différents paramètres sont étudiés, tels que la distance dipôle/interface, ou l'indice optique du milieu inférieur (en dessous de l'interface). Les solutions obtenues sont notamment comparées à celles fournies par le formalisme de Sommerfeld. La seconde partie de ce chapitre porte sur les sphères diélectriques éclairées par une onde plane, d'abord dans le vide, puis à proximité d'une interface. Dans le premier cas, la validation se fait grâce à la théorie de Mie. Pour ce qui est du second cas, nous nous basons sur les résultats appor-

4.1. ÉTUDE D'UN DIPÔLE OSCILLANT

tés par la méthode T-matrix pour valider les nôtres. Là encore, l'influence de différents paramètres, tels que l'angle d'incidence ou la polarisation de l'onde plane, est étudiée.

4.1 Étude d'un dipôle oscillant

4.1.1 Cas d'un dipôle dans le vide

Dans un premier temps, l'étude s'est portée sur le cas simple du rayonnement d'un dipôle dans le vide, sans la présence d'une interface. Cette situation nous permet de tester les deux méthodes de transformation NFTFF sur 4π sr. Le dipôle est modélisé par une source sinusoïdale ponctuelle située au centre du maillage, le champ étant parallèle à l'axe e_z . Sa fréquence d'oscillation est de $\nu_{\text{dip}} = \frac{c}{\lambda_{\text{dip}}}$, où $\lambda_{\text{dip}} = 10\mu\text{m}$ est la longueur d'onde du champ émis et c est sa vitesse de propagation dans le vide. Le domaine de calcul est de 100^3 mailles, et le pas spatial vaut $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \frac{\lambda_{\text{dip}}}{50}$.

La figure 4.1(a) nous montre le module de toutes les composantes du champ proche électrique, sur différents plans passant par le centre du maillage (et donc comprenant la source). Le système de couleurs utilise une échelle non linéaire pour s'adapter à la forte évolution du champ entre le centre et les bords. Sur la figure 4.1(b) est représenté le module du champ électrique lointain à la longueur d'onde d'étude $\lambda = \lambda_{\text{dip}}$.

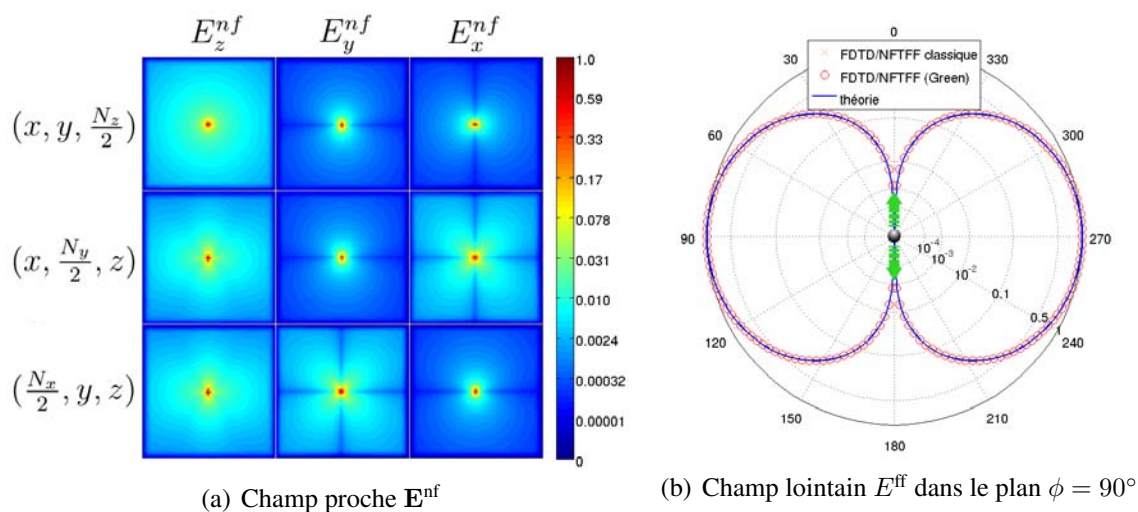


FIG. 4.1: Dipôle dans le vide. À gauche : représentation du module normalisé des composantes E_x^{nf} , E_y^{nf} et E_z^{nf} du champ électrique dans les plans $(x, y, N_z/2)$, $(x, N_y/2, z)$ et $(N_x/2, y, z)$. À droite : représentation polaire du module normalisé au carré du champ électrique lointain

Les trois courbes qui y sont représentées correspondent aux résultats donnés par la théorie, ainsi que par les deux méthodes de transformation NFTFF. Comme le champ électrique lointain ne varie pas avec l'angle azimutal ϕ , nous avons opté pour une simple représentation polaire (correspondant au plan $\phi = 0^\circ$). À nouveau, une échelle non linéaire a été

choisie dans le but de pouvoir observer les plus petites variations du champ diffusé. Nous pouvons voir que les différents résultats correspondent. Une étude plus poussée de l'écart relatif entre les solutions FDTD et analytique sera présentée dans le cas de l'illumination directe (à 45°) d'une sphère au dessus d'une interface plane (second cas de la sous-section 4.2.2).

4.1.2 Cas d'un dipôle au dessus d'une interface

Dans un second temps, le dipôle est positionné à proximité d'un milieu diélectrique semi-infini (jouant le rôle d'échantillon) d'indice optique $n_{\text{éch}} = 1.5$ ($\epsilon_{\text{éch}} = 2.25$). L'interface entre le diélectrique et le vide est parfaitement plane. Le dipôle est toujours situé au centre du maillage de coordonnées $(N_x/2, N_y/2, N_z/2)$, et est dirigé suivant \mathbf{e}_z . L'interface est positionnée à 5 pas spatiaux de dimension Δz du dipôle (où $\Delta z = \lambda_{\text{dip}}/50$ et $\lambda_{\text{dip}} = 10 \mu\text{m}$).

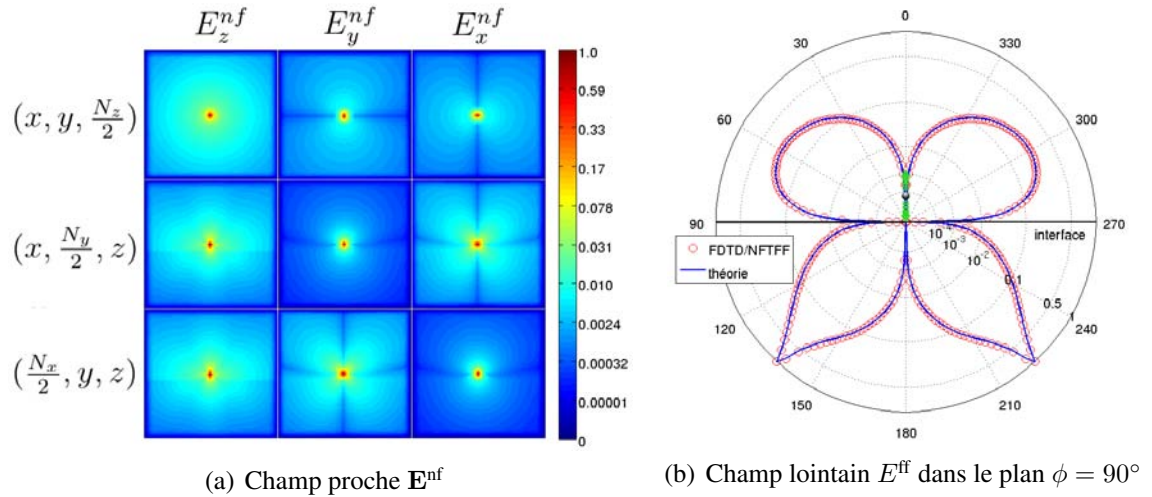


FIG. 4.2: Dipôle au dessus d'une interface plane. À gauche : représentation du module normalisé des composantes E_x^{nf} , E_y^{nf} et E_z^{nf} du champ électrique dans les plans $(x, y, N_z/2)$, $(x, N_y/2, z)$ et $(N_x/2, y, z)$. À droite : représentation polaire du module normalisé au carré du champ électrique lointain

La figure 4.2(a) présente le module des composantes E_x^{nf} , E_y^{nf} et E_z^{nf} du champ proche électrique. Nous pouvons clairement observer une dissymétrie du champ sur les plans $(N_x/2, y, z)$ et $(x, N_y/2, z)$. Celles-ci sont dues à la réflexion et à la réfraction de l'onde au niveau de l'interface. La représentation du champ lointain (FIG. 4.2(b) - cercles rouges) nous montre bien l'effet de la réflexion. En effet, d'une part les lobes de diffusion sont aplatis au voisinage de l'interface (du côté du vide), et d'autre part une partie non négligeable du champ lointain est réfractée dans le milieu diélectrique. Il est nécessaire de rappeler que dans ce cas, c'est-à-dire en présence d'une interface, la méthode NFTFF classique ne peut plus s'appliquer, et seule celle basée sur les tenseurs de Green est utilisée ici. Sur la même figure est représenté le champ lointain théorique (ligne bleue) dont

4.1. ÉTUDE D'UN DIPÔLE OSCILLANT

la forme analytique, donnée par le formalisme de Sommerfeld, peut être obtenue dans les articles de G. Videen [69] et F.H. Arnoldus [70]. Ainsi, le champ électrique lointain, au-dessus (up) et en dessous (down) de l'interface, s'exprime de la manière suivante :

$$E_{\text{up}}^{\theta}(\theta) \propto \frac{1}{k_{\text{vide}}} \left[1 + r_{\text{vide}/\text{éch}}^p \exp(2i w_{\text{vide}} d_{\text{dip}/\text{éch}}) \right] \sin(\theta) \quad (4.1)$$

$$E_{\text{down}}^{\theta}(\theta) \propto \frac{w_{\text{éch}}}{k_{\text{vide}} w_{\text{vide}}} \left[t_{\text{vide}/\text{éch}}^p \exp(i(w_{\text{éch}} - w_{\text{vide}}) d_{\text{dip}/\text{éch}}) \right] \sin(\theta) \quad (4.2)$$

où $d_{\text{dip}/\text{éch}}$ est la distance entre le dipôle et l'interface, k_i le nombre d'onde dans le milieu i ($i = \text{éch}$ ou vide), w_i la composante normale à l'interface du vecteur d'onde \mathbf{k}_i ($i = \text{éch}$ ou vide) et $r_{i/j}^p$ et $t_{i/j}^p$ les coefficients de Fresnel en réflexion et transmission, relatifs à la polarisation p , entre le milieu i et le milieu j ($i = \text{vide}$, $j = \text{air}$).

Là encore, nous pouvons voir que les deux solutions se superposent. Une étude plus poussée de l'écart relatif entre les solutions FDTD et analytique sera présentée dans le cas de l'illumination directe (à 45°) d'une sphère au dessus d'une interface plane (second cas de la sous-section 4.2.2).

Influence de la distance dipôle/interface

D'autres calculs ont été faits pour différentes distances entre le dipôle et la surface de l'échantillon, à savoir $d_{\text{dip}/\text{éch}} = 25 \times \Delta z$ et $d_{\text{dip}/\text{éch}} = 100 \times \Delta z$ avec $\Delta z = \lambda_{\text{dip}}/50$. Les résultats, qui sont présentés sur les figures 4.3(a) et 4.3(b), correspondent aux valeurs théoriques.

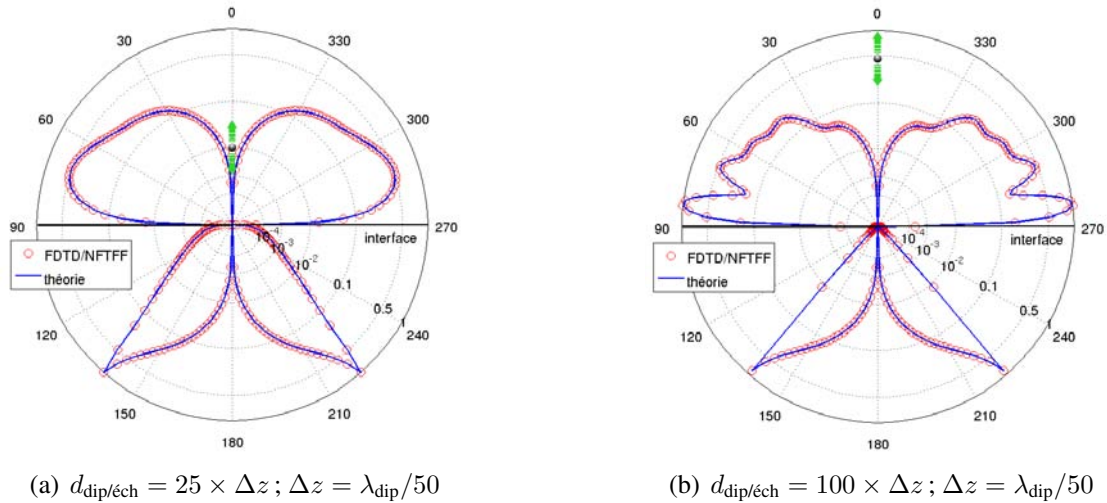


FIG. 4.3: Dipôle au dessus d'une interface plane. Comparaison du module normalisé au carré des champs E^{ff} théorique et numérique en champ lointain - étude de l'influence de la distance dipôle/interface

De plus, lorsque le dipôle se trouve à très grande distance de l'interface, nous pouvons nettement remarquer l'apparition d'interférences au niveau du champ lointain, donnant

naissance à de multiples lobes dont le nombre et l'intensité dépendent de la distance dipôle/diélectrique.

Une autre observation peut être faite, et ce en dessous de l'interface. En effet, nous pouvons voir qu'il existe un angle solide dans le milieu diélectrique où le champ lointain est absent. Toutes les ondes émises sont en fait réfractées à l'intérieur du cône dont le demi-angle au sommet représente l'angle critique (dans le cas présent : $\theta_c = 41.8^\circ$). Ainsi, seules les ondes de champ proche peuvent être transmises dans le substrat au delà de cet angle critique, mais, contrairement au cas précédent (FIG. 4.2(b)), le dipôle est trop éloigné de l'interface, et les ondes évanescentes sont donc trop faibles pour interagir avec elle. A contrario, on observe bien leur contribution sous l'interface sur les figures 4.2(b) et 4.3(a) quand le dipôle se situe au voisinage immédiat de la séparation entre les deux milieux d'indices différents.

Influence de l'indice optique du milieu inférieur

Les derniers tests sont basés sur l'étude de l'influence de l'indice optique de l'échantillon placé en dessous du dipôle. Ici, le dipôle se trouve à nouveau à 5 pas de l'interface. L'indice optique a été fixé, d'abord à $n_{\text{éch}} = 3.42$ (ce qui correspond typiquement au silicium dans l'infrarouge), puis à $n_{\text{éch}} = 10$.

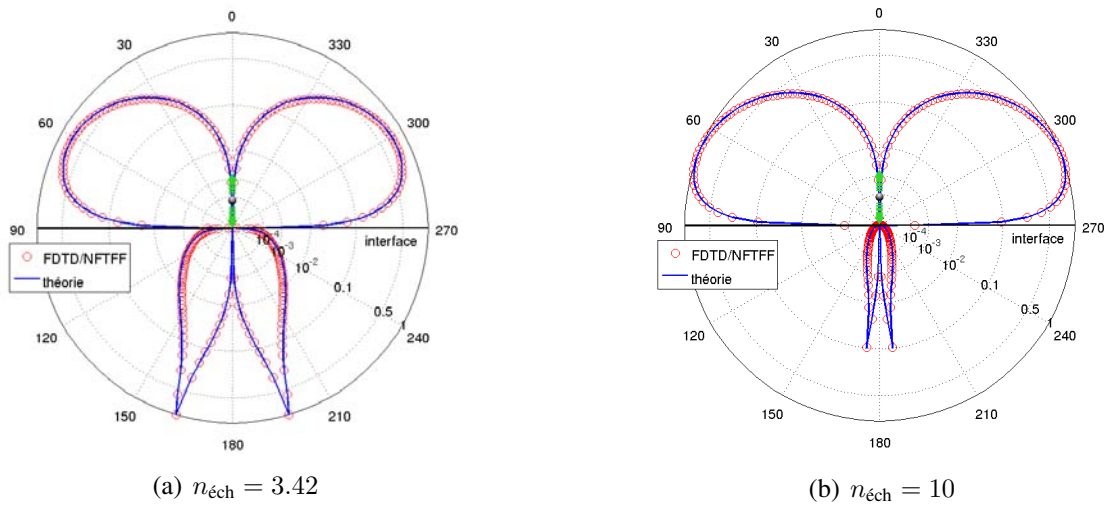


FIG. 4.4: Dipôle au dessus d'une interface plane. Comparaison du module normalisé au carré des champs E^{ff} théorique et numérique en champ lointain - étude de l'influence de l'indice optique du milieu.

Là encore, les solutions analytiques et numériques présentent un très bon accord. De plus, nous pouvons voir l'influence de l'augmentation de $n_{\text{éch}}$, d'une part sur l'intensité décroissante du champ transmis, et d'autre part sur l'évolution de l'angle critique θ_c , qui passe de 17° à 5.7° .

Ici s'achève l'étude des simples dipôles oscillants, laquelle s'est avérée concluante. Dans la section suivante, nous nous concentrons sur la modélisation bien plus complexe

de la sphère diffusante éclairée par une onde plane

4.2 Étude d'une sphère

Ici, les tests ont été faits dans le cas d'une sphère diélectrique massive, d'abord dans le vide, puis au dessus d'une interface. L'indice optique de la sphère vaut $n_{\text{sphère}} = 2.39 + i \times 0.87$ à la longueur d'onde $\lambda = 12.9 \mu\text{m}$. Le rayon de la sphère est de $12.6 \mu\text{m}$ (i.e. 100 pas spatiaux Δz), c'est à dire une longueur d'onde λ_0 , $\lambda_0 = 12.6 \mu\text{m}$ étant la longueur d'onde centrale de l'onde incidente. Le centre est à $z_{\text{sphère}} = 13.87 \mu\text{m}$ de la surface de l'échantillon (i.e. 110 pas spatiaux Δz). Le domaine de calcul est adapté à la description d'un objet sphérique à proximité d'un milieu semi-infini (FIG. 4.5). Ainsi, dans le cas d'une sphère dans le vide, il suffit d'imposer un indice optique de 1 au sein de l'échantillon. Le domaine de calcul est fait de 250^3 cellules cubiques ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = \lambda_0/100$). Enfin, la CPML a une épaisseur de 10 cellules. La figure 4.5 nous montre le positionnement des différentes frontières par rapport à la sphère et à l'interface.

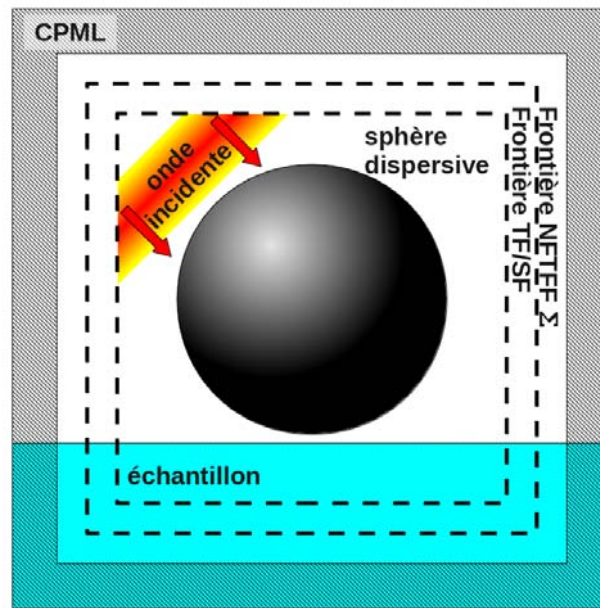


FIG. 4.5: Domaine de calcul dans le cas d'une sphère au dessus d'une interface

La sphère est éclairée par une onde plane incidente se propageant dans le vide parallèlement au plan $(y - z)$. L'angle d'incidence peut varier : $0^\circ < \theta_i < 90^\circ$. Le champ est polarisé TE (transverse électrique), c'est-à-dire polarisé suivant x (le champ électrique incident est donc normal au plan d'incidence).

$$\mathbf{E}_{\text{inc}}(x, y, z, t) = \mathbf{e}_x E_0 \int g(\omega) \exp(-i\omega t) \exp(i(k \sin \theta_i y + k \cos \theta_i z)) d\omega \quad (4.3)$$

avec : \mathbf{e}_x un vecteur unitaire suivant l'axe des x ,

$\omega = 2\pi c/\lambda$ la pulsation de l'onde,

$k = n_m\omega/c$ le nombre d'onde dans le milieu d'indice optique n_m .

La fonction $g(\omega)$ représente le spectre fréquentiel du champ qui suit une distribution gaussienne donnée par :

$$g(\omega) = \exp \left[\frac{-(\omega - \omega_0)^2}{(\Delta\omega)^2} \right] \quad (4.4)$$

où $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ est la pulsation centrale de l'onde. Dans le domaine temporel, l'onde incidente est représentée par une impulsion gaussienne. Sa durée est de 130 fs, le pas temporel valant $\Delta t = \frac{1}{2}\lambda_0/(100 \times c) = 0.21$ fs. En pratique, du fait de la petitesse de Δt , près de 25000 pas de temps sont nécessaires pour l'ensemble du calcul FDTD. La durée de la simulation tient essentiellement à la durée nécessaire pour que le champ piégé dans la sphère soit complètement atténué.

4.2.1 Cas d'une sphère dans le vide

Le premier test traite du cas d'une sphère dans le vide, éclairée par une onde plane se propageant dans le sens des z positifs. Sur la figure 4.6, nous pouvons suivre l'évolution du champ électrique au cours du temps. Il s'agit du module de la composante suivant x du champ proche électrique $|E_x^{\text{nf}}|$ dans le plan $(N_x/2, y, z)$. La sphère est symbolisée par le cercle blanc (remarque : pour réaliser ces images, le domaine de calcul a été volontairement agrandi).

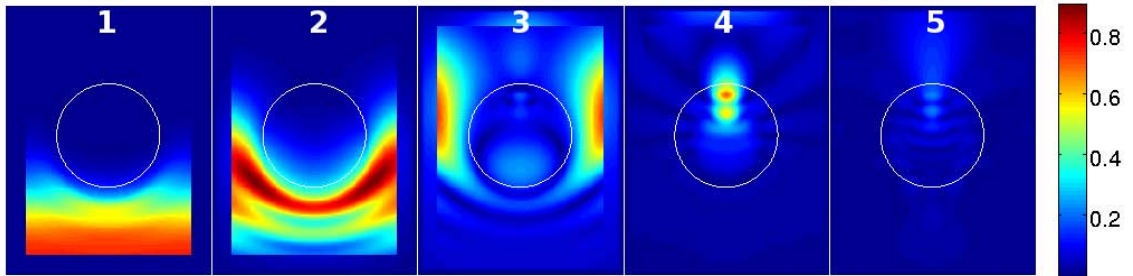


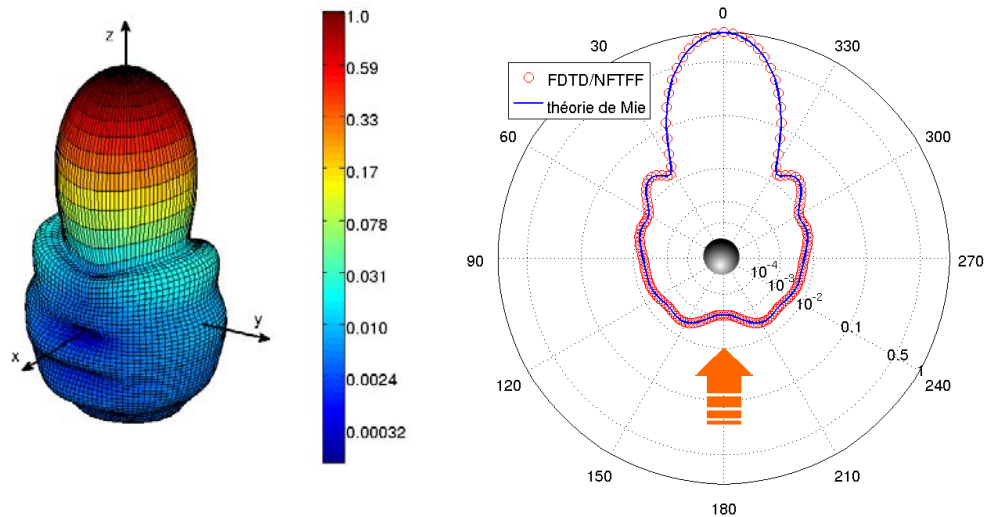
FIG. 4.6: Représentation de $|E_x^{\text{nf}}(y, z)|$ normalisé aux temps $t = 350 \times \Delta t$, $500 \times \Delta t$, $650 \times \Delta t$, $1100 \times \Delta t$ et $1400 \times \Delta t$. $\Delta t = \frac{1}{2}\lambda_0/(100 \times c) = 0.21$ fs

Cinq images ont été prises à différents moments, de 350 à 1300 pas de temps, dans le but d'observer les interactions entre la sphère et l'onde dans le domaine temporel. Sur la première image, le champ incident, qui apparaît en bas du domaine de calcul, entre juste en contact avec la sphère. Sur les images 2 et 3, l'onde plane est fortement déformée, et une partie du champ entre à l'intérieur de la sphère. Pour finir, dans les deux dernières images, l'onde plane incidente est totalement sortie du domaine de calcul, et n'interagit plus avec la sphère. Pourtant, cette dernière continue à diffuser, du fait que le champ

4.2. ÉTUDE D'UNE SPHÈRE

interne subit de multiples réflexion à la frontière sphère/milieu ambiant, ce qui laisse apparaître des phénomènes d'interférences.

Les variations du champ lointain peuvent être observées sur les deux sous-figures suivantes (FIG. 4.7). La première (FIG. 4.7(a)) représente le champ électrique lointain en coordonnées sphériques, à la longueur d'onde $\lambda = 12.9\mu\text{m}$. Les calculs ont été fait pour 180 directions suivant θ et ϕ , i.e. pour 32400 directions sur 4π sr. Comme dans le cas du dipôle, une échelle non-linéaire est utilisée pour pouvoir observer les champs diffusés les plus faibles. Nous pouvons voir que le champ est nettement diffusé vers l'avant, bien que certains lobes d'interférences, assez faibles, peuvent être observé dans toutes les directions de l'espace. Sur la seconde image (FIG. 4.7(b)), nous pouvons trouver la représentation polaire du module du champ électrique lointain dans le plan d'incidence ($\phi = 90^\circ$, i.e. le plan $(y - z)$). Comme nous l'avons déjà vu sur la figure 4.7(a), le champ est globalement diffusé vers l'avant. Sur cette figure, nos résultats (cercles rouges) sont comparés à ceux donnés par la théorie de Mie (ligne bleue). Nous pouvons voir que ces deux résultats présentent un très bon accord. Une étude plus poussée de l'écart relatif entre les solutions FDTD et T-matrix sera présentée dans le cas de l'illumination directe (à 45°) d'une sphère au dessus d'une interface plane (second cas de la sous-section 4.2.2).



(a) Champ électrique lointain sur 4π sr au dessus et en dessous de l'interface (b) Champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90^\circ$

FIG. 4.7: Variation du module normalisé au carré du champ électrique lointain diffusé par une sphère dans le vide, éclairée par une onde plane - cercles rouges : calcul FDTD/NFTFF, ligne bleue : Théorie de Mie

4.2.2 Cas d'une sphère au dessus d'un interface : illumination directe

À partir de maintenant, la sphère est placée à proximité d'une interface entre le vide (où se trouve la sphère) et l'échantillon. Ce dernier est un milieu diélectrique semi-infini de constante diélectrique $\epsilon_{\text{éch}} = 2.25$ ($n_{\text{éch}} = 1.5$) et dont l'épaisseur est de 20 mailles.

Angle d'incidence de 0°

Pour commencer, nous avons étudié le cas où la sphère est éclairée par une onde plane. Il s'agit d'une incidence normale ($\theta_i = 0^\circ$), dirigée dans le sens des z négatifs. Les résultats obtenus sont fortement semblables à ceux relatifs à la sphère dans le vide en ce qui concerne l'évolution du champ proche au cours du temps (FIG. 4.8), notamment si l'on se concentre les deux premières images. Ici, l'interface est représentée par une ligne blanche. Sur la troisième image, on observe la réflexion et la réfraction de l'onde plane au passage de l'interface. On remarque d'ailleurs un phénomène d'interférences au dessus de l'interface entre les ondes incidente et réfléchie.

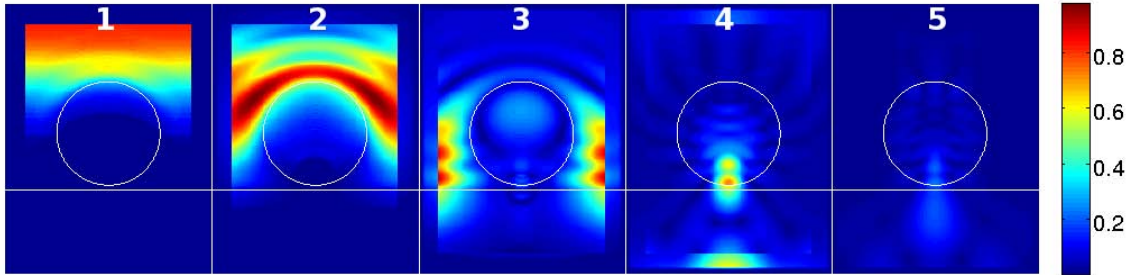
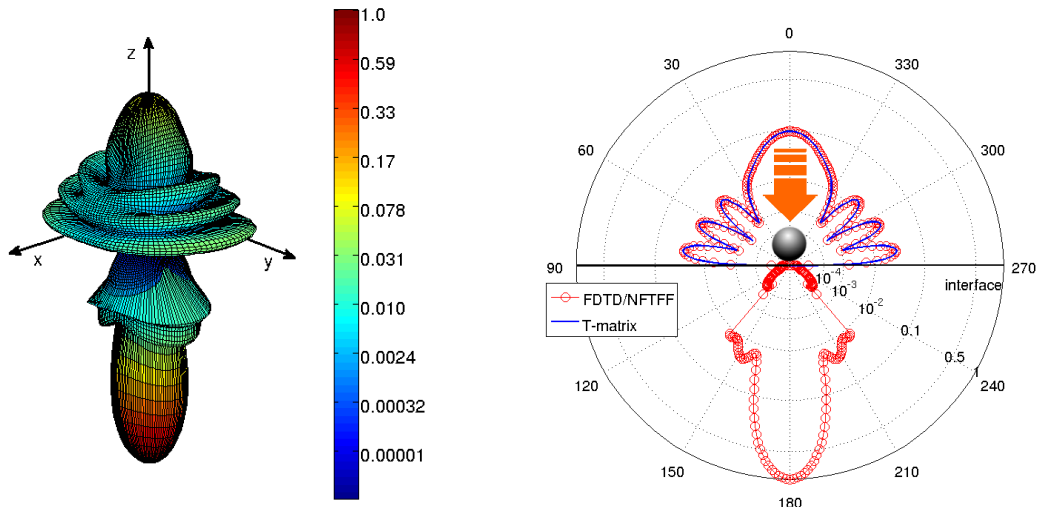


FIG. 4.8: Représentation de $|E_x^{nf}(x, z)|$ normalisé aux temps $t = 350 \times \Delta t$, $500 \times \Delta t$, $650 \times \Delta t$, $1100 \times \Delta t$ et $1400 \times \Delta t$. $\Delta t = \frac{1}{2} \lambda_0 / (100 \times c) = 0.21$ fs

L'effet de l'interface se voit plus nettement au niveau du champ électrique lointain (FIG. 4.9) à la longueur d'onde $\lambda = 12.9 \mu\text{m}$.

Là encore, le champ est majoritairement diffusé vers l'avant, c'est-à-dire à travers l'interface. Cependant, le champ rétrodiffusé est bien plus marqué que dans le cas de la sphère dans le vide, du fait de la réflexion du champ au niveau de l'interface. De plus, comme dans le cas du dipôle, nous pouvons observer au niveau du substrat un angle solide où le champ électrique lointain est presque inexistant, bien que la sphère soit très proche de l'interface. Cette fois, la comparaison a été faite entre nos résultats (cercles rouges) et ceux donnés par la T-matrix (ligne bleue). Le code T-matrix que nous avons utilisé est celui développé par l'équipe de T. Wriedt, qui est accessible dans le CD-ROM fourni avec le livre de Doicu *et al* [12]. Cette version du code nous permet d'obtenir le champ diffusé dans le milieu semi-infini contenant la sphère, c'est-à-dire au dessus de l'interface. Nous pouvons voir que les résultats des deux simulations correspondent. Une étude plus poussée de l'écart relatif entre les solutions FDTD et T-matrix est présentée dans le paragraphe suivant.

4.2. ÉTUDE D'UNE SPHÈRE



(a) Champ électrique lointain sur 4π sr au dessus et en dessous de l'interface (b) Champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90$

FIG. 4.9: Variation du module normalisé au carré du champ électrique lointain diffusé par une sphère au dessus d'une interface, éclairée par une onde plane avec un angle d'incidence $\theta_i = 0^\circ$ - cercles rouges : calcul FDTD/NFTFF, ligne bleue : T-matrix

Angle d'incidence de 45°

Ici, l'angle d'incidence a été choisi comme étant égal à 45° . À nouveau, nous commençons par l'observation de l'évolution du champ proche au cours du temps (FIG. 4.10). Les mêmes remarques que précédemment peuvent être faites pour ce nouveau cas. Sur la première image, l'onde plane incidente entre dans le domaine de calcul (en haut à gauche). Sur les images 2 et 3, la sphère interagit avec cette onde dont une partie est transmise à l'intérieur de cette même sphère. Ainsi, cette dernière continue à diffuser lorsqu'elle n'est plus éclairée par l'onde, comme le montrent les images 4 et 5.

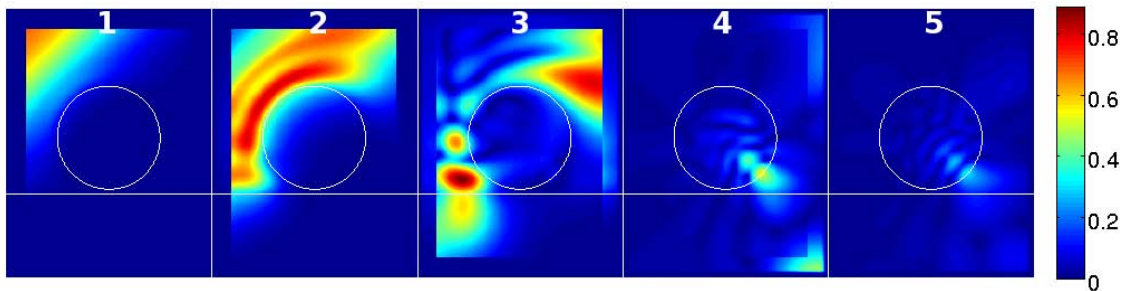
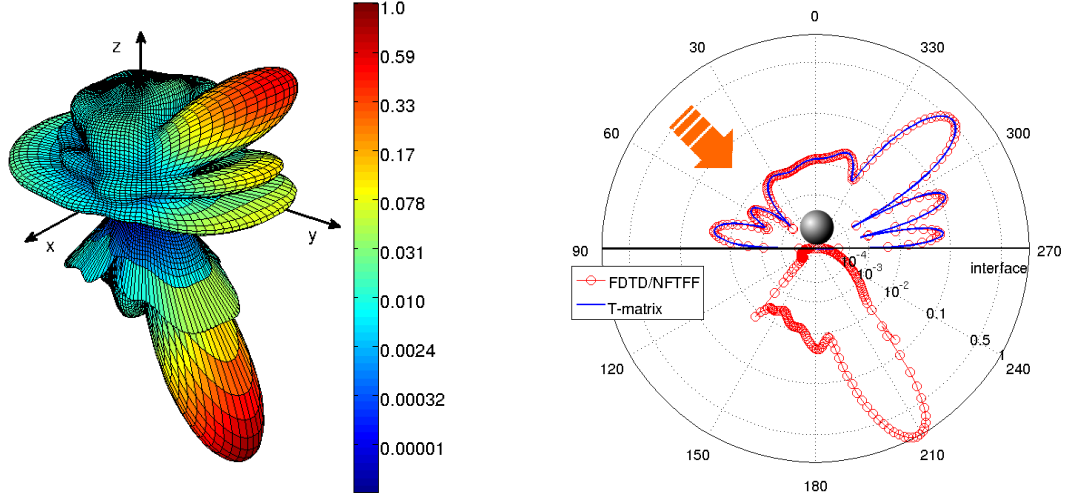


FIG. 4.10: Représentation de $|E_x^{nf}(x, z)|$ normalisé aux temps $t = 350 \times \Delta t$, $500 \times \Delta t$, $650 \times \Delta t$, $1100 \times \Delta t$ et $1400 \times \Delta t$. $\Delta t = \frac{1}{2} \lambda_0 / (100 \times c) = 0.21$ fs

Pour ce qui est du champ lointain (à la longueur d'onde $\lambda = 12.9 \mu\text{m}$), le champ est à nouveau globalement diffusé vers l'avant, cette fois autour de l'angle de réflexion

$\theta_r = 45^\circ$. De plus, la partie transmise du champ électrique est globalement réfractée autour de l'angle $\theta_{r'} = 28.1^\circ$, comme le prédit la loi de Snell-Descartes ($n_{\text{vide}} \sin \theta_i = n_{\text{éch}} \sin \theta_{r'}$ avec $n_{\text{vide}} = 1$ et $n_{\text{éch}} = 1.5$). Pour finir, nous pouvons voir, sur la figure 4.11(a), que le champ électrique diminue rapidement lorsque l'on s'éloigne du plan d'incidence.



(a) Champ électrique lointain sur 4π sr au dessus et en dessous de l'interface (b) Champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90^\circ$

FIG. 4.11: Variation du module normalisé au carré du champ électrique lointain diffusé par une sphère au dessus d'une interface, éclairée par une onde plane avec un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$ - cercles rouges : calcul FDTD/NFTFF, ligne bleue : T-matrix

Là encore, une comparaison a été faite entre nos résultats et ceux donnés par la T-matrix, ce qui nous permet d'observer un très bon accord. Cependant, pour quantifier les écarts entre ces deux solutions, nous avons calculé les écarts relatifs en fonction de la direction d'observation θ . Nous avons choisi de faire cette étude sur ce cas (éclairage direct de la sphère sous un angle de 45°) car la solution est non symétrique et qu'elle présente, comme nous venons de le voir, de nombreux lobes. Cette solution se compte donc parmi celles les plus intéressantes à étudier. L'erreur relative s'exprime alors de la manière suivante :

$$\text{erreur relative}(\theta) = \frac{\left| \tilde{\mathbf{E}}_{\text{FDTD}}^{\text{ff}}(\theta) \right| - \left| \tilde{\mathbf{E}}_{\text{Tmat}}^{\text{ff}}(\theta) \right|}{\left| \tilde{\mathbf{E}}_{\text{Tmat}}^{\text{ff}}(\theta) \right|} \quad (4.5)$$

La solution donnée par la T-matrix est donc prise comme solution de référence. L'évolution de l'erreur relative en fonction de θ peut alors s'observer sur la figure 4.12. Le champ électrique lointain y est à nouveau représenté dans le but de faciliter la mise en parallèle. De plus, en vue d'observer l'influence du maillage de la sphère sur la précision des calculs, le même calcul a été fait à des échelles différentes d'une part pour un pas spatial de $\lambda_0/30$ (le rayon de la sphère est alors de 30 mailles) et d'autre part pour un pas

4.2. ÉTUDE D'UNE SPHÈRE

spatial de $\lambda_0/10$ (le rayon de la sphère est alors de 10 mailles). On constate que l'erreur relative est grande principalement lorsque le champ est faible. L'erreur relative est particulièrement exigeante sur les faibles valeurs. Un calcul d'écart quadratique moyen sur l'ensemble de la courbe donnerait un écart très faible entre les deux solutions.

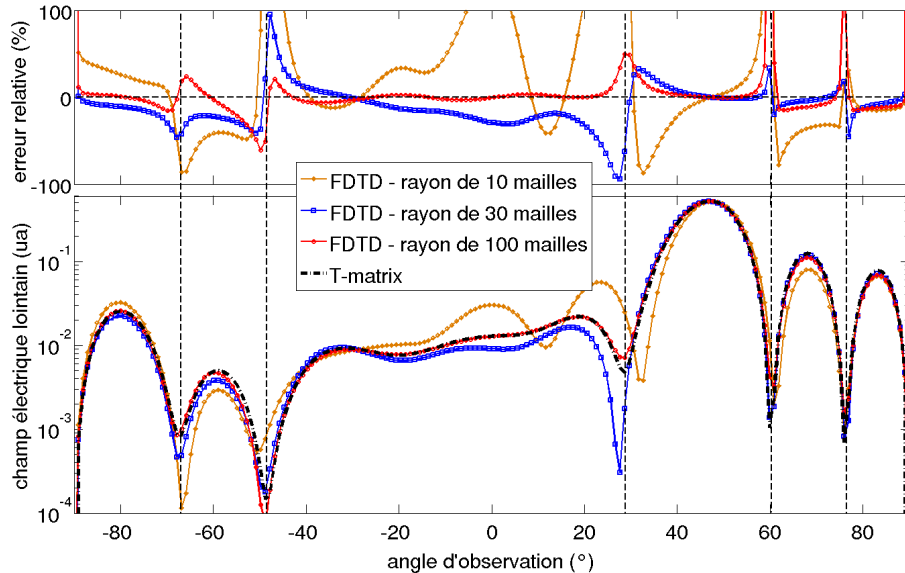


FIG. 4.12: Évolution de l'erreur relative du champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90^\circ$ en fonction de l'angle d'observation θ

Une autre représentation de cette même erreur relative, mais cette fois en fonction du champ électrique lointain, se trouve sur la figure 4.13.

Nous pouvons d'ores et déjà constater que dans le cas de la sphère hautement résolue ($\Delta_x = \lambda_0/100$), l'erreur relative est toujours inférieure à 15% lorsque le champ électrique est supérieur à 10% du champ maximal et qu'elle est bien inférieure la plupart du temps. Mais cette erreur augmente fortement pour les pas spatiaux grossiers et atteint les 55% lorsque $\Delta_x = \lambda_0/10$.

Si l'on s'intéresse plus particulièrement au cas hautement résolu, nous voyons que lorsque l'intensité du champ diminue, l'erreur tend à augmenter fortement. Ce comportement donne d'ailleurs naissance à des pics d'erreurs aux endroits où le champ présente d'importants creux. Cela s'explique, entre autres, par le fait que ces creux sont décalés par rapport à ceux prévus par la T-matrix. Il semble que ce phénomène soit dû à la discrétisation de la sphère, ce qui implique que le rayon de cette dernière ne correspond pas exactement à celui escompté. Cela tend donc à modifier la position angulaire des différents lobes d'interférence en question.

Nous concluons cette étude sur l'erreur relative en affirmant que ces importants pics d'erreurs, relatifs aux faibles champs, ne compromettent pas nos futurs calculs. En effet, comme nous le verrons dans les chapitres suivants, seuls les champs les plus importants

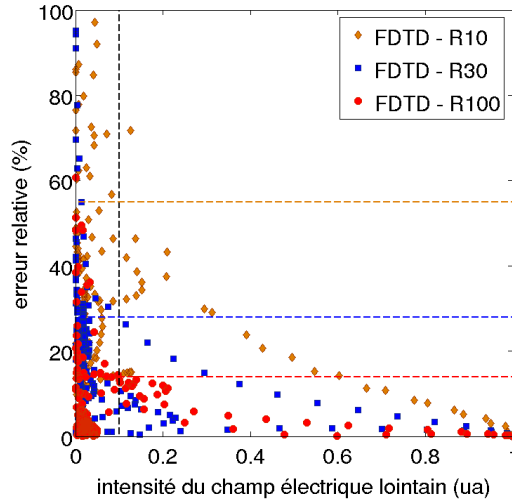


FIG. 4.13: Évolution de l'erreur relative du champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90^\circ$ en fonction de ce même champ électrique

(i.e. ceux présentant les erreurs les plus faibles) contribuent de façon très majoritaire au signal total reçu (signal intégré sur l'angle solide de collection).

4.2.3 Cas d'une sphère au dessus d'un interface : illumination par une onde évanescente

Les derniers cas traitent de l'illumination d'une sphère par une onde évanescente. Cette dernière est créée par une onde plane incidente se propageant à l'intérieur même du substrat, et éclairant l'interface en situation de réflexion totale. Pour ce faire, il suffit que l'angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$ soit plus grand que l'angle critique qui, dans le cas présent, vaut $\theta_c = 41.8^\circ$. Ainsi, une onde évanescente apparaît au dessus de l'interface. Les caractéristiques de l'onde incidente sont les mêmes que celles données par les équations 4.3 et 4.4. Tous les autres paramètres, concernant la sphère, l'échantillon (milieu inférieur) et le maillage, sont les mêmes.

Sur la figure 4.14, nous pouvons à nouveau observer le module de la composante suivant l'axe des x du champ proche électrique à cinq moments différents, de 350 à 1400 pas de temps. L'onde incidente (ici polarisée TE) en réflexion totale et l'onde évanescente au dessus de l'interface peuvent s'observer sur la première figure. L'amplitude de l'onde évanescente décroît exponentiellement dans la direction de l'axe des z . Pourtant, la sphère est suffisamment proche de l'interface pour pouvoir interagir avec l'onde, comme nous pouvons le voir sur les images 2 et 3. Les deux dernières images nous montrent la rapide extinction des ondes confinées à l'intérieur de la sphère.

4.2. ÉTUDE D'UNE SPHÈRE

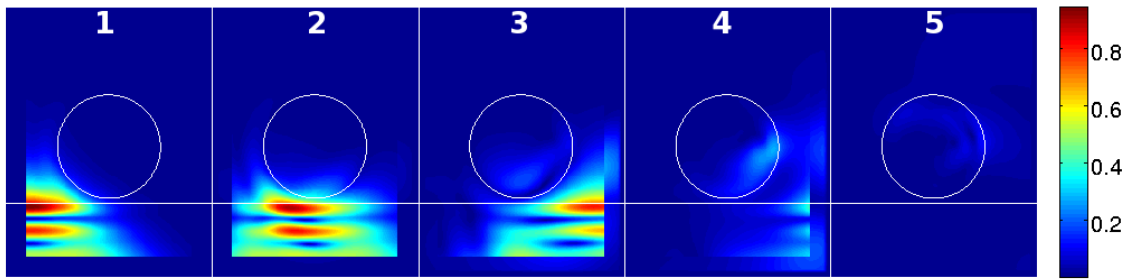
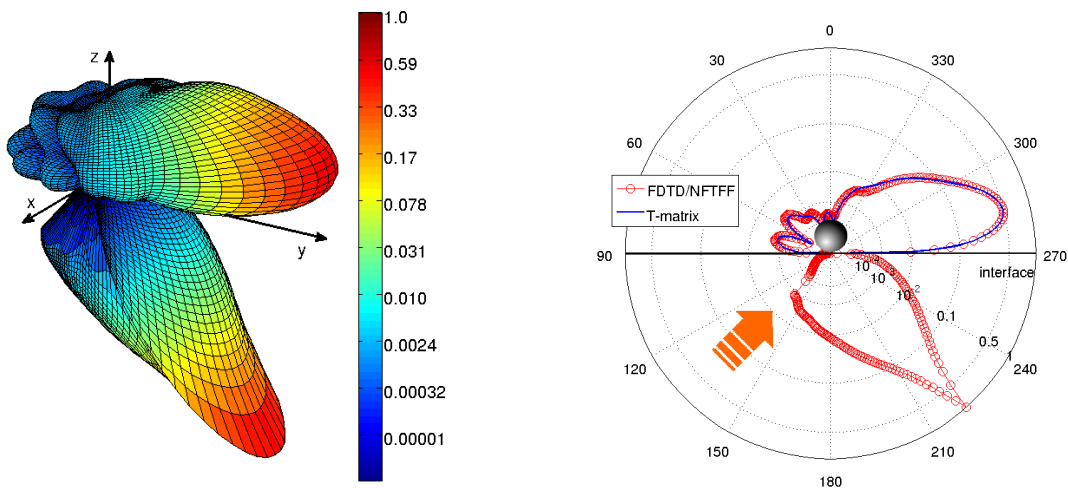


FIG. 4.14: Représentation de $|E_x^{nf}(x, z)|$ normalisé aux temps $t = 350 \times \Delta t$, $500 \times \Delta t$, $650 \times \Delta t$, $1100 \times \Delta t$ et $1400 \times \Delta t$. $\Delta t = \frac{1}{2}\lambda_0/(00 \times c) = 0.21$ fs

Illumination en polarisation TE

Ici, nous pouvons observer sur les figures 4.15(a) et 4.15(b) le champ lointain, à la longueur d'onde $\lambda = 12.9\mu\text{m}$, diffusé par une sphère éclairée par une onde évanescente polarisée TE. À nouveau, nous voyons que le champ est globalement diffusé vers l'avant, que ce soit au dessus et en dessous de l'interface.



(a) Champ électrique lointain sur 4π sr au dessus et en dessous de l'interface

(b) Champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90^\circ$

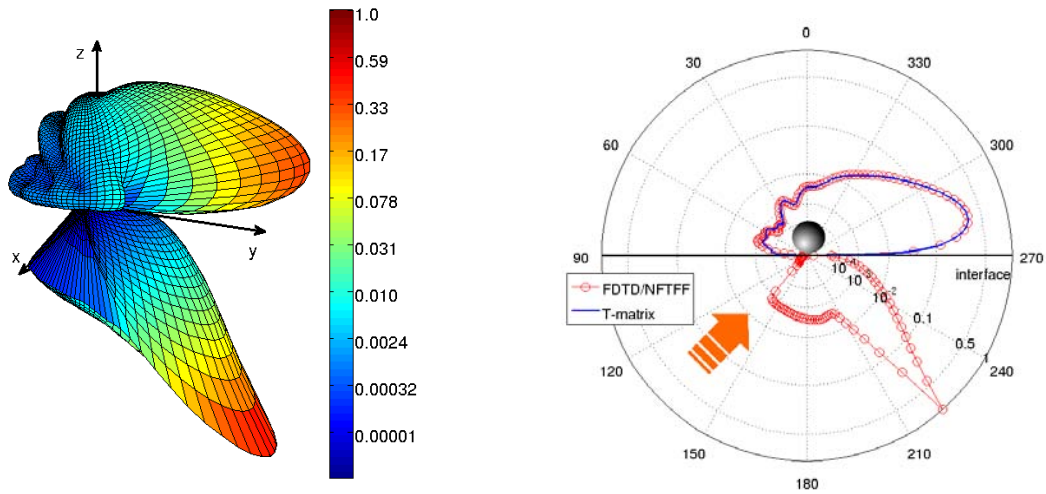
FIG. 4.15: Variation du module normalisé au carré du champ électrique lointain diffusé par une sphère au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente polarisée TE - cercles rouges : calcul FDTD/NFTFF, ligne bleue : T-matrix

En ce qui concerne la comparaison entre la FDTD et la T-matrix, sur la figure 4.15(b), nous pouvons voir que les résultats sont fortement semblables. Il existe toutefois un faible écart entre les deux solutions pour les directions proches de $\theta \simeq 330^\circ$. L'origine de cet écart est peut être imputable à un effet d'ombrage de l'onde par la sphère. Une étude plus poussée de l'écart relatif entre les solutions FDTD et T-matrix a été présentée dans le cas

de l'illumination directe (à 45°) d'une sphère au dessus d'une interface plane (second cas de la sous-section 4.2.2).

Illumination en polarisation TM

Le dernier cas test est identique au précédent, à la différence près que l'onde évanescente est polarisée TM. D'ailleurs, nous pouvons constater que les champs lointains diffusés ne dépendent que très peu de la polarisation de l'onde incidente (FIG. 4.16(a) et 4.16(b)). Là encore, les deux solutions (FDTD et T-matrix) sont très proches.



(a) Champ électrique lointain sur 4π sr au dessus et en dessous de l'interface

(b) Champ électrique lointain dans le plan $\phi = 90^\circ$

FIG. 4.16: Variation du module normalisé au carré du champ électrique lointain diffusé par une sphère au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente polarisée TM - cercles rouges : calcul FDTD/NFTFF, ligne bleue : T-matrix

4.3 Étude d'un système résonant

4.3.1 Cas d'une sphère de SiC dans le vide

Le système étudié ici est le cas simple d'une sphère dans le vide, éclairée par une onde plane. Il s'agit d'une sphère en SiC (carbure de silicium) de rayon $a = 1\mu\text{m}$. L'étude théorique d'un tel système peut se retrouver dans l'ouvrage de C.F. Bohren et D.R. Huffman [71], ainsi que dans le sous-chapitre 6.1.2. La fonction diélectrique relative peut être décrite dans l'infrarouge par un simple oscillateur de Lorentz (pour plus de précision, se reporter à l'annexe B). Les premiers calculs ont été faits pour une sphère décrite par un rayon de 20 mailles. Nous rappelons que nous travaillons ici avec un maillage structuré et uniforme, avec $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta = \frac{1}{20}a = 50\text{nm}$. La figure 4.17(a) représente

4.3. ÉTUDE D'UN SYSTÈME RÉSONANT

l'efficacité de diffusion du système pour un spectre compris entre 10 et 15 μm . La théorie de Mie (représentée par la courbe noire) est considérée comme étant exacte.

Nous pouvons observer une forte dissipation numérique du champ diffusé, notamment au niveau du premier pic de résonance. Cela est dû à la pixellisation de la surface de la sphère au niveau du code FDTD. Ce problème peut s'observer pour tout type de surfaces courbes.

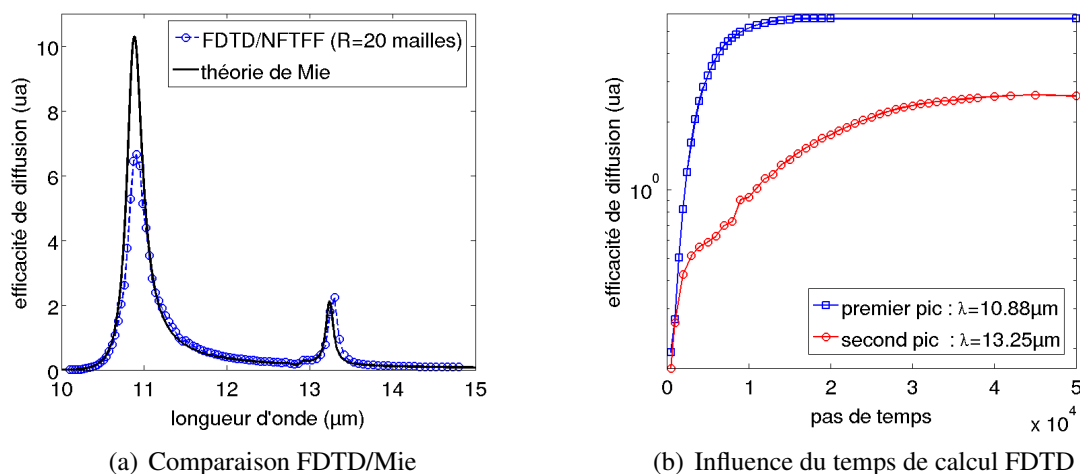


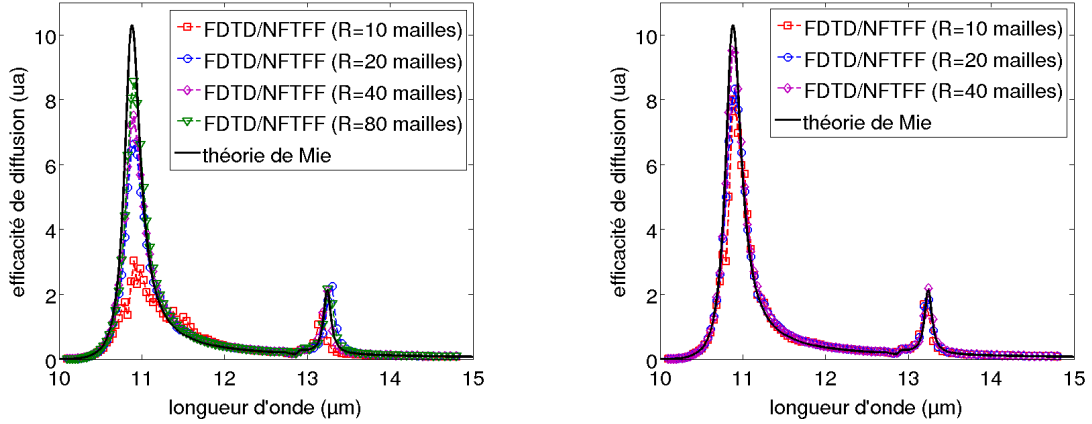
FIG. 4.17: Variation de l'efficacité de diffusion d'une sphère de SiC de 1 μm de rayon (décrit par 20 mailles) dans le vide éclairée par une onde plane - à gauche : en fonction de la longueur d'onde - à droite : en fonction du temps de calcul FDTD aux deux longueurs d'ondes correspondant aux deux pics de résonance de la sphère

La figure 4.17(b) nous montre l'évolution de l'efficacité de diffusion de cette même sphère de SiC en fonction du temps de calcul FDTD (en nombre de pas temporels). Dans cette simulation, le pas de temps est fixé à $\Delta t = \frac{\Delta}{2c} = 0.083fs$. Les calculs ont été faits aux deux fréquences relatives aux phénomènes de résonance décrits précédemment. Il est important de préciser que l'onde plane incidente n'éclaire plus la sphère à partir du 500^{ème} pas de temps. On observe clairement que l'efficacité de diffusion n'atteint sa valeur asymptotique (ce qui signifie que la sphère ne diffuse plus) que longtemps après le passage de l'onde incidente.

L'influence de la résolution de la sphère, en terme de nombre de mailles, peut s'observer sur la figure 4.18(a). Ici, nous avons étudié le même type de sphère dont le rayon de 1 μm est décrit successivement par 10 mailles ($\Delta = 100nm$), 20 mailles ($\Delta = 50nm$), 40 mailles ($\Delta = 25nm$) et 80 mailles ($\Delta = 12.5nm$). On observe une nette amélioration lorsque la résolution augmente. La seule limite est donc la taille du domaine de calcul, et, par conséquent, la puissance des calculateurs utilisés.

Les mêmes calculs ont été faits pour une sphère décrite par la méthode CPT (contour path technique - cf. le sous-chapitre 3.1.7) qui permet une correction de la fonction diélectrique au sein des cellules où la sphère et le milieu environnant coexistent. La figure

4.18(b) nous montre les résultats obtenus pour différentes résolutions. Nous voyons bien l'influence d'une telle technique sur le calcul FDTD, notamment dans le cas où la surface de la sphère est faiblement résolue. En effet, nous arrivons à obtenir des résultats similaires pour une sphère hautement résolue (80 mailles de rayon) décrite par un maillage structuré classique et pour une sphère faiblement résolue (10 mailles de rayon) dont la surface est affinée par la méthode CPT



(a) Sphère décrite par un maillage structuré classique

(b) Sphère décrite par un maillage structuré affiné par la méthode CPT

FIG. 4.18: Efficacité de diffusion d'une sphère de SiC de $1\mu m$ de rayon dans le vide éclairée par une onde plane - étude de l'influence de la résolution et de la méthode CPT et comparaison des solutions FDTD à celle donnée par la théorie de Mie

4.3.2 Cas d'une sphère de SiC au dessus d'une interface

La dernière série de cas tests traite du système résonant au voisinage d'une interface. La sphère de SiC dont le rayon est toujours de $1\mu m$, est placée à $200nm$ d'un échantillon de silicium ($n_{éch} = 3.42$ dans l'infrarouge). Deux échelles différentes sont étudiées, de telle sorte que le pas spatial est fixé, dans un premier temps à $\Delta x = 100nm$, ce qui implique que le rayon est représenté par 10 mailles, et dans un second temps à $\Delta x = 50nm$ (le rayon de la sphère est alors de 20 mailles). Dans chacun des deux cas, la surface de l'objet est décrite par la méthode CPT. La sphère est alors éclairée par une onde évanescente créée par une onde plane incidente en réflexion totale (angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$).

Ce système est étudié plus en détail dans le sous-paragraphe 6.1.2. C'est pourquoi nous nous focalisons ici sur la comparaison entre les résultats obtenus par FDTD et ceux donnés par la T-matrix. Nous pouvons voir sur les figures 4.19(a) et 4.19(b), comme dans le cas précédent, que l'efficacité de diffusion au niveau du premier pic de résonance présente une faible dissipation numérique pouvant être réduite en diminuant la taille du

4.3. ÉTUDE D'UN SYSTÈME RÉSONANT

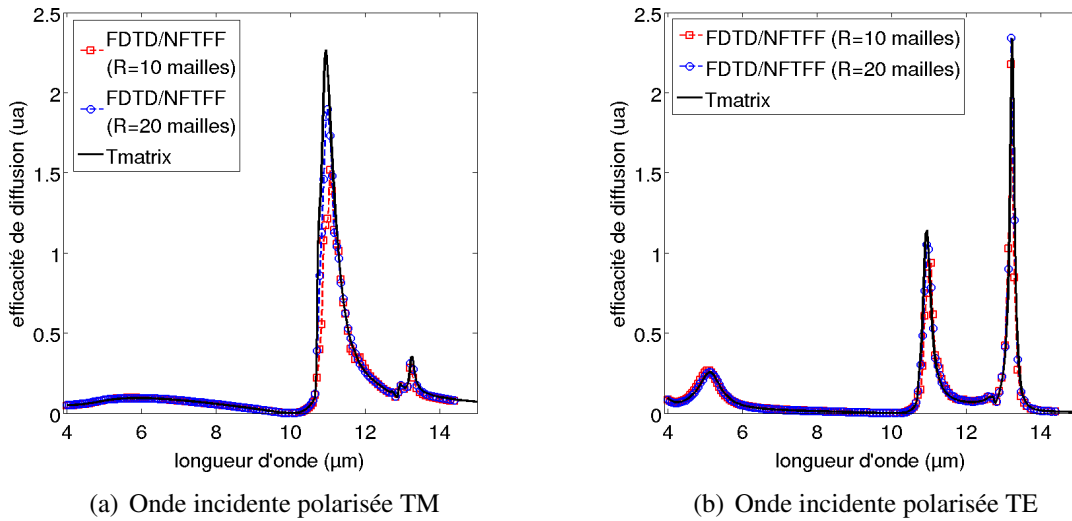


FIG. 4.19: Variation de l'efficacité de diffusion d'une sphère de SiC de $1\mu m$ de rayon au dessus d'un échantillon d'indice optique $n_{\text{éch}} = 3.42$ en fonction de la longueur d'onde - comparaison des solutions FDTD et T-matrix

pas spatial du maillage. En revanche, au niveau du second pic, les solutions FDTD et T-matrix correspondent, notamment en polarisation TE. En outre, nous pouvons constater que l'augmentation de la résolution de la sphère apporte une faible amélioration, notamment au niveau du premier pic.

4.3.3 Cas d'une sphère de SiO_2 au dessus d'une interface

Les paramètres de l'étude présentée ici sont identiques à ceux utilisés dans le paragraphe précédent. Seul le matériau de la sphère change et devient du verre SiO_2 . Les résultats obtenus sont représentés par les figures 4.20(a) et 4.20(b).

Tout comme pour le cas précédent, une étude détaillée portant sur la sphère de verre est accessible dans le sous-paragraphe 6.1.3. Si l'on compare les résultats obtenus par FDTD et ceux donnés par la T-matrix, nous pouvons voir que les deux solutions sont très proches, quelque soit la polarisation. De plus, là encore, l'apport de l'augmentation de la résolution de la sphère n'est pas flagrant.

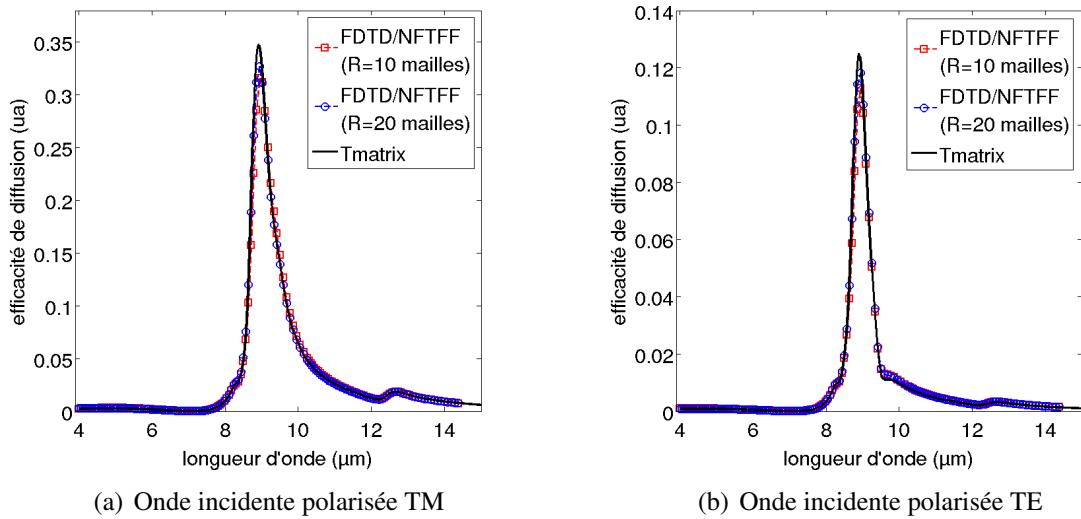


FIG. 4.20: Variation de l'efficacité de diffusion d'une sphère de SiO_2 de $1 \mu m$ de rayon au dessus d'un échantillon d'indice optique $n_{éch} = 3.42$ en fonction de la longueur d'onde - comparaison des solutions FDTD et T-matrix

Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes attachés à étudier des cas tests dont les solutions étaient déjà connues, le but étant de valider les différents modèles numériques présentés dans le chapitre précédent. Nous avons commencé par traiter le cas simple d'un dipôle, d'abord dans le vide, puis au dessus d'une interface. La comparaison entre nos résultats (donnés par FDTD/NFTFF) et ceux donnés par le formalisme de Sommerfeld montre un accord parfait. Des situations plus complexes ont ensuite été étudiées dans le cas de sphères diélectriques dans le vide, puis placées à proximité d'une interface, et éclairées par une onde plane incidente. Cela nous a permis d'observer un des moyens de créer une onde évanescente par la méthode FDTD, à savoir par réflexion totale de l'onde incidente au niveau de l'interface. Pour chacun des cas, les résultats que nous avons obtenus ont été comparés avec succès à ceux donnés par la T-matrix. Pour finir, nous nous sommes concentrés sur le calcul de l'efficacité de diffusion de sphères de SiC ou de verre SiO_2 de $1 \mu m$ de rayon dans différentes situations. Cela nous a permis d'observer l'influence de la résolution de l'objet, et de voir l'intérêt que présente la méthode CPT. La dernière partie du mémoire va désormais aborder les problèmes liés à l'optimisation de notre dispositif TRSTM à travers la modélisation et le calcul du signal collecté par différents types de sondes.

Troisième partie

Application à l'étude d'un microscope
TRSTM

Nomenclature

- Repères :

(x, y, z) : coordonnées cartésiennes

(r, θ, ϕ) : coordonnées sphériques

(ρ, ϕ) : coordonnées polaires

- Scalaires :

a : rayon de la sphère

c : vitesse de la lumière dans le vide

DSCS : Differential Scattering Cross Section

i : unité imaginaire

$I_{\text{éva}}$: intensité d'une onde évanescente

I_{opt} : estimation du signal mesuré par l'optique de collection

k : nombre d'onde

k_0 : nombre d'onde dans le vide

n_m : indice optique du milieu m

x : paramètre de taille

z_0 : hauteur caractéristique de l'onde évanescente

- Vecteurs :

\mathbf{E} : champ électrique

\mathbf{H} : excitation magnétique

- Lettres grecques :

Δ : pas spatial

Δt : pas temporel

Δx : pas spatial suivant x

Δy : pas spatial suivant y

Δz : pas spatial suivant z

ε : permittivité diélectrique

ϵ : permittivité (fonction) diélectrique relative

ϵ' : partie réelle de ϵ

NOMENCLATURE

ϵ''	: partie imaginaire de ϵ
ϵ_∞	: constante diélectrique pour les faibles longueurs d'onde
ϵ_{stat}	: constante diélectrique pour les faibles fréquences
λ	: longueur d'onde
λ_0	: longueur d'onde centrale du pulse gaussien
ω	: pulsation
ω_F	: pulsation de Fröhlich
ω_F^{est}	: pulsation de Fröhlich estimée (hypothèse des petites sphères)
ω_F^{th}	: pulsation de Fröhlich théorique (hypothèse des petites sphères)
ω_T	: pulsation optique transverse de l'oscillateur de Lorentz
θ_c	: angle d'incidence critique
θ_i	: angle d'incidence

- Exposants :

ff	: relatif au champ lointain (far-field)
nf	: relatif au champ proche (near-field)

- Indices :

air	: relatif à l'air
as	: relatif à l'angle solide
éch	: relatif à l'échantillon
inc	: relatif au champ incident
pointe	: relatif à la pointe
sphère	: relatif à la sphère
vide	: relatif au vide

Chapitre 5

Modélisation de pointes TRSTM simples

Sommaire

5.1	Étude d'une pointe en tungstène	106
5.1.1	Paramètres de calcul	106
5.1.2	Calcul des champs proche et lointain	107
5.1.3	Modélisation de l'optique de collection	108
5.2	Influence du matériau de la pointe	112
5.2.1	Description des matériaux étudiés	112
5.2.2	Allure du champ lointain	112
5.2.3	Estimation du signal collecté	114
5.3	Influence de la profondeur de pénétration de l'onde évanescente	115
5.3.1	Profondeur de pénétration d'une onde évanescente	115
5.3.2	Allure du champ lointain	116
5.3.3	Estimation du signal collecté	117
5.4	Influence de la distance pointe/interface	118
5.4.1	Principe et utilité de la simulation	118
5.4.2	Estimation du signal collecté	119
5.5	Influence de la forme de la pointe	120
5.5.1	Description des différentes formes étudiées	121
5.5.2	Allure du champ lointain	121
5.5.3	Estimation du signal collecté	122
5.6	Influence de la longueur d'onde d'étude	124
5.6.1	Cas d'une pointe de tungstène	125
5.6.2	Cas d'une pointe de SiC	126
5.6.3	Cas d'une pointe de verre SiO ₂	127

Introduction

Dans les deux chapitres précédents, nous avons présenté, d'une part les différents modèles destinés à déterminer les champs proche et lointain diffusés par une particule de forme quelconque positionnée à proximité d'un échantillon, et d'autre part des validations pour différentes associations d'objets diffusant, de matériaux et d'éclairage. Le chapitre actuel a pour objet de présenter la modélisation du comportement optique d'une pointe de microscope optique en champ proche éclairée par une onde évanescente.

Un certain nombre de paramètres sont pris en compte, tels que le matériau de la pointe, sa forme, sa distance par rapport à l'interface, ou encore la profondeur de pénétration de l'onde illuminant la pointe. Pour chaque situation, nous cherchons la position optimale de l'optique de collection destinée à recueillir une partie du champ diffusé par la pointe (cf. sous-chapitre 2.4.2). En fin de chapitre, l'influence de la longueur d'onde sur l'intensité du champ diffusé est étudiée.

5.1 Étude d'une pointe en tungstène

5.1.1 Paramètres de calcul

Le domaine de calcul, schématisé sur la figure 5.1, est fortement similaire à celui utilisé dans le cas de la sphère massive (cf. sous-chapitre 4.2).

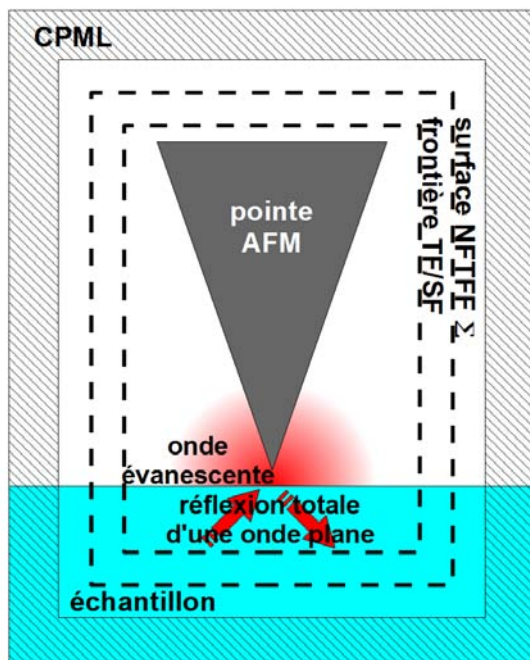


FIG. 5.1: Modélisation de la technologie ASNO par FDTD

Il est composé de 260×184^2 cellules cubiques ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta = \frac{\lambda_0}{125} = 100\text{nm}$, avec $\lambda_0 = 12.5\mu\text{m}$ la longueur d'onde centrale du champ incident). L'échantillon est en silicium (supposé non-dispersif dans l'infrarouge moyen : $n_{\text{éch}} = 3.42$), et sa surface est positionnée à 24 pas spatiaux de la limite inférieure du domaine.

La pointe est en tungstène, dont la fonction diélectrique peut être décrite par un pôle de Drude et un oscillateur de Lorentz (cf. annexe B). Il s'agit d'une pointe conique massive, de demi-angle au sommet $\theta_{\text{pointe}} = 18.4^\circ$ (le rayon du cône vaut donc un tiers de sa hauteur), et sa hauteur est de $20\mu\text{m}$ (200 pas spatiaux). Son extrémité est positionnée à 200nm (2 pas spatiaux) de l'interface et est éclairée par une onde évanescente. Cette dernière est créée par une onde plane incidente, de spectre gaussien centré sur λ_0 , en situation de réflexion totale. Pour ce faire, l'angle d'incidence est fixé à $\theta_i = 20^\circ$, ce qui est supérieur à l'angle critique qui, dans le cas d'une interface air/silicium, est égal à $\theta_c = 17^\circ$ (dans l'infrarouge moyen).

Il est important de préciser que cette configuration revient à modéliser le comportement optique d'une pointe de microscope ASNOM. Par la suite, nous montrons la méthode utilisée pour parvenir à adapter cette simulation à l'étude d'un microscope de type TRSTM (cf. section 5.1.3).

5.1.2 Calcul des champs proche et lointain

Pour cette simulation, nous avons choisi le cas d'une onde plane incidente polarisée TM ($\mathbf{E}_{\text{inc}}^{\text{nf}} = E_{\text{inc},y}^{\text{nf}}\hat{y} + E_{\text{inc},z}^{\text{nf}}\hat{z}$, $\mathbf{H}_{\text{inc}}^{\text{nf}} = H_{\text{inc},x}^{\text{nf}}\hat{x}$). La figure 5.2 nous montre l'évolution du champ proche électrique (champ total) au cours du temps. Seule la composante E_y^{nf} a été représentée, et ce, dans le plan $(x, N_y/2, z)$. La pointe de l'AFM et l'interface sont symbolisées par les lignes blanches.

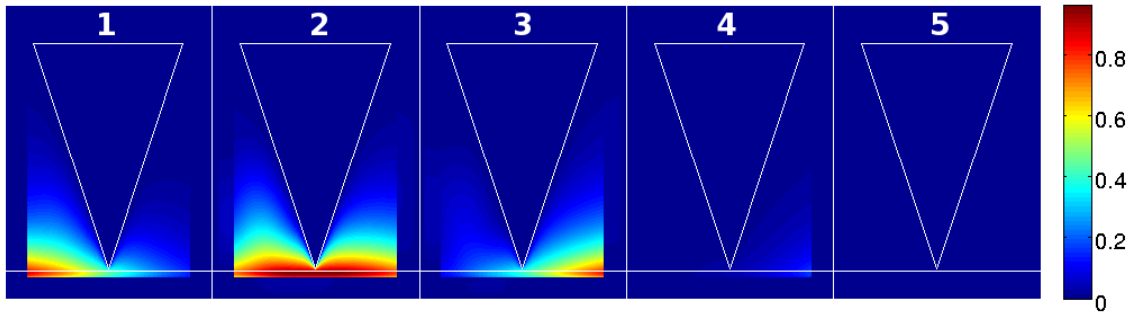


FIG. 5.2: Pointe en tungstène : représentation de $|E_y^{\text{nf}}(x, z)|$ normalisé aux temps $t = 350 \times \Delta t$, $500 \times \Delta t$, $650 \times \Delta t$, $800 \times \Delta t$ et $1100 \times \Delta t$. $\Delta t = \lambda_0 / (2 \times 125 \times c) = 0.17$ fs

On observe clairement l'influence de la pointe sur les ondes évanescentes, notamment à travers les phénomènes de diffusion vers l'arrière puis vers l'avant. Il est aussi intéressant de remarquer que le champ à l'intérieur de la pointe est totalement négligeable. Ceci est dû au fait que le tungstène est fortement réfléchissant dans l'infrarouge moyen,

5.1. ÉTUDE D'UNE POINTE EN TUNGSTÈNE

comme le montre la figure B.18 présentée dans l'annexe B. Il se comporte donc comme un matériau parfaitement conducteur (PEC : Perfectly Electric Conducting).

Ce phénomène s'observe aussi en champ lointain, comme le montrent les figures 5.3(a) et 5.3(b). Le champ lointain a été calculé à la longueur d'onde $\lambda = \lambda_0 = 12.5\mu\text{m}$.

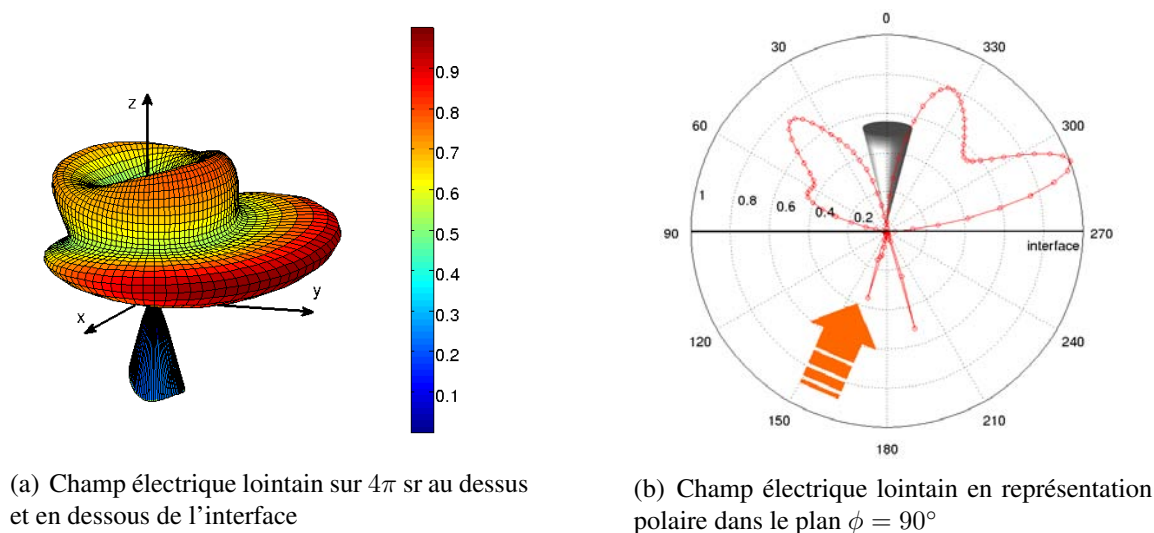


FIG. 5.3: Variation du module au carré normalisé du champ électrique lointain diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente

Comme dans le cas de l'étude des sphères, deux représentations sont visibles, l'une correspondant au module au carré du champ électrique lointain sur $4\pi\text{sr}$ (FIG. 5.3(a)), et l'autre est une représentation polaire de ce même module au carré dans le plan d'incidence (i.e. le plan (yOz) correspondant à l'angle azimutal $\phi = 90^\circ$) (FIG. 5.3(b)). Il est important de préciser qu'ici, l'échelle a été choisie comme étant linéaire. D'après ces deux figures, si l'on se concentre sur les directions d'observation proche de l'interface ($60^\circ < \theta < 90^\circ$), nous pouvons affirmer que le champ est globalement diffusé vers l'avant. En revanche, lorsque l'on se rapproche de la zone entourant la pointe, nous voyons que le champ est diffusé de façon globalement similaire dans toutes les directions entourant la pointe. De plus, comme le laissait supposer l'observation du champ proche, aucun champ n'est diffusé dans l'axe de la pointe, ceci étant dû à l'ombre créée par cette dernière.

5.1.3 Modélisation de l'optique de collection

Passage d'un microscope ASNOM à un microscope TRSTM

Les résultats présentés précédemment correspondent à l'étude d'un microscope ASNOM, et non d'un microscope TRSTM. La différence majeure est que dans le second cas, aucune source externe n'est utilisée pour créer les ondes de surface. En effet, ces dernières sont directement issues du rayonnement thermique en champ proche et elles se

déplacent donc dans toutes les directions le long de l'interface. De ce fait, il est impossible que certaines directions de diffusion puissent être privilégiées en ce qui concerne l'angle azimutal ϕ . Dans ce qui suit, nous allons modéliser une pointe de microscope TRSTM en prenant en compte l'éclairement non directionnel de la pointe par le champ évanescent. Cette première étape consiste à moyenniser le module au carré du champ diffusé sur l'ensemble des ϕ , et ce pour chaque angle d'inclinaison θ (cf. FIG. 5.4), dans le but de supprimer toute dépendance en ϕ (cette opération équivaut à éclairer la pointe grâce à de multiples ondes planes incidentes se propageant dans toutes les directions) :

$$I(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |E(\theta, \phi)|^2 d\phi = \frac{1}{2\pi} \sum_{\phi} |E(\theta, \phi)|^2 \Delta\phi \quad (5.1)$$

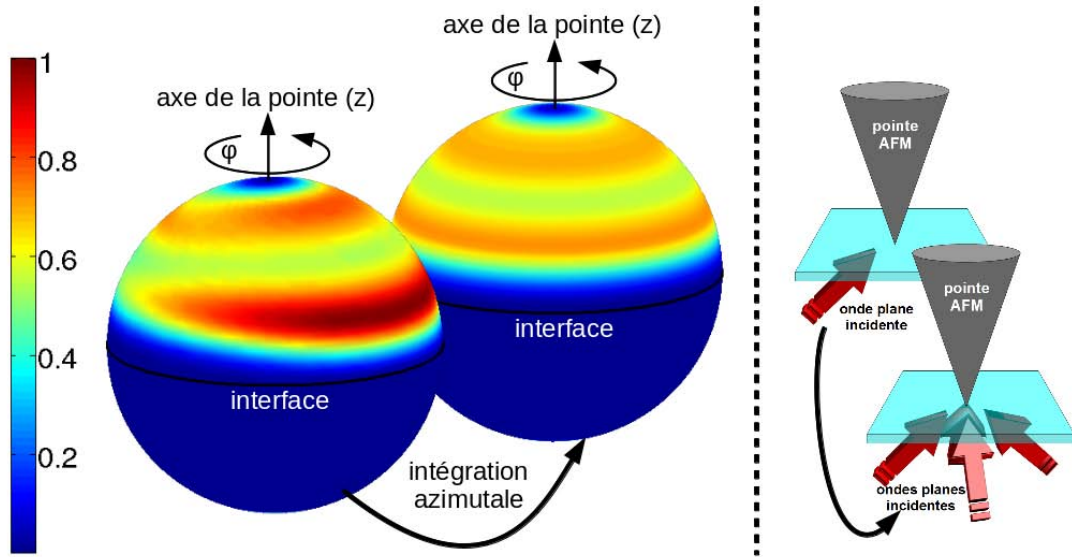


FIG. 5.4: Modélisation de l'optique de collection d'un microscope TRSTM - passage d'un microscope ASNOM à un microscope TRSTM par intégration azimutale

Modélisation de l'optique de collection

La seconde étape consiste à intégrer la grandeur moyennée $I(\theta)$ sur l'ensemble de l'angle solide Ω représentant la zone observée par l'optique de collection (FIG. 5.5).

$$I_{\text{opt}} = \int_{\Omega} I(\theta) d\Omega \quad (5.2)$$

Pour toutes les simulations présentées dans ce chapitre, cette grandeur I_{opt} est donnée sous sa forme normalisée, en unités arbitraires. En effet, tous nos calculs sont adimensionnés et normalisés. Le but de notre travail est de comparer les résultats obtenus dans différentes situations, et la valeur absolue de I_{opt} n'est pas le critère le plus important.

5.1. ÉTUDE D'UNE POINTE EN TUNGSTÈNE

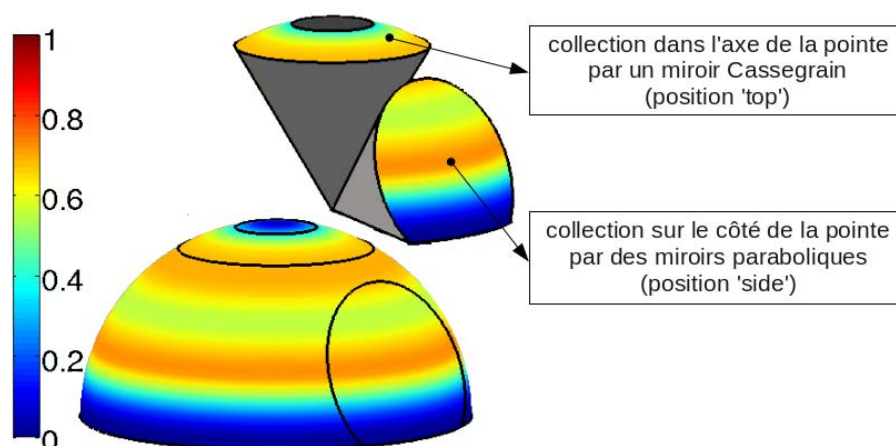


FIG. 5.5: Modélisation de l'optique de collection d'un microscope TRSTM - présentation des deux configurations envisagées

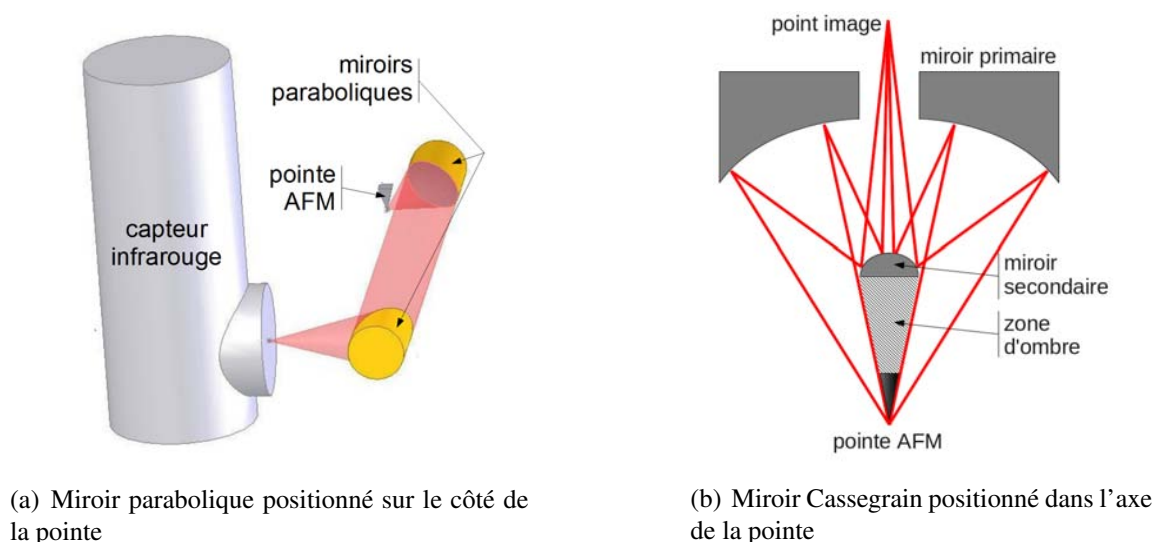


FIG. 5.6: Exemples de montages TRSTM pour différents positionnements de l'optique de collection

Dans cette section, nous nous interrogeons sur la position optimale de ce dispositif de collection. La première possibilité correspond à celle de notre propre montage TRSTM, à savoir un miroir parabolique positionné sur le côté de la pointe (position 'side' - FIG. 5.6(a) - pour plus de détail, se reporter au sous-chapitre 2.4.2). L'angle solide observé par ce premier miroir est défini par un cône de demi-angle au sommet $\alpha_{as}^1 = 30^\circ$, et dont l'angle entre l'axe des z et son axe de révolution vaut $\theta_{as}^1 = 70^\circ$. Une partie de ce cône est donc tronqué par l'échantillon. La seconde configuration envisageable consiste à collecter le signal autour de l'axe de la pointe (position 'top'). Pour rester proche de la première possibilité décrite ci-dessus, nous avons choisi pour cette seconde configuration

une optique de collection telle que l'angle solide de la zone observée soit défini par un cône de demi-angle au sommet $\alpha_{\text{as}}^2 = 30^\circ$, et que l'axe de révolution soit confondu avec l'axe des z ($\theta_{\text{as}}^2 = 0^\circ$). À titre d'exemple, nous pouvons citer un montage TRSTM similaire réalisé à Paris par l'équipe de Y. de Wilde. Il s'agit d'un miroir Cassegrain placé au dessus de la pointe (FIG. 5.6(a)) [7]. Du fait de la configuration d'un tel dispositif, une partie du signal diffusé est cachée par le miroir secondaire, à proximité de l'axe de la pointe. Cependant, cet état de fait ne constitue aucunement un inconvénient, car, comme le prouve le figure 5.3(b), le champ diffusé est quasi-inexistant dans cette zone.

Si l'on revient à la détermination de I_{opt} dans chacune des deux situations, nous obtenons les résultats représentés sur la figure 5.7. Nous pouvons voir que dans le cas d'une pointe de tungstène éclairée par une onde évanescente polarisée TM, le signal collecté est un peu plus important dans le cas d'une optique de collection placée dans l'axe de la pointe. Dans les paragraphes suivants, les mêmes simulations ont été réalisées, tout en faisant varier certains paramètres tels que le matériau ou la forme de la pointe, la polarisation de l'onde incidente, ou encore la profondeur de pénétration de l'onde de surface. Dans chacun des cas, le champ lointain a été calculé à la longueur d'onde $\lambda = 12.5\mu\text{m}$ (sauf pour la dernière sous-partie 5.6 qui traite de l'influence de la longueur d'onde sur l'intensité du champ diffusé et collecté), et les paramètres d'adimensionnement et de normalisation des résultats ont été conservés de façon à pouvoir comparer ces derniers entre eux.

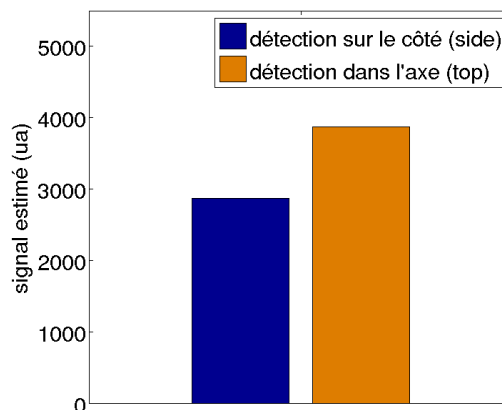


FIG. 5.7: Estimation du signal mesuré I_{opt} diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 20^\circ$)

5.2 Influence du matériau de la pointe

5.2.1 Description des matériaux étudiés

Nous avons étudié, outre le tungstène, les matériaux suivant :

- un matériau PEC (perfectly electric conducting),
- le silicium,
- le silicium dopé (silicium dopé de type N - concentration en dopant de 10^{19}cm^{-3}),
- le carbure de silicium,
- le verre SiO_2 .

Les paramètres de l'ensemble de ces matériaux sont donnés dans l'annexe B. Dans chacun des cas présentés dans les paragraphes suivants, la pointe est une pointe conique déjà présentée précédemment. Elle est éclairée par une onde évanescente créée par une onde plane incidente en situation de réflexion totale. Les deux polarisations TE et TM sont étudiées. La pointe est toujours dans un milieu assimilable au vide, le matériau constituant le substrat est pour l'ensemble des calcul du silicium (supposé non dispersif dans l'infrarouge moyen : $n_{\text{éch}} = 3.42$).

5.2.2 Allure du champ lointain

Nous ne parlons ici que de deux matériaux différents, à savoir le tungstène (proche d'un matériau PEC) et le silicium (transparent dans l'infrarouge), dans le but d'observer l'évolution du champ lointain en fonction de la direction d'observation. Pour chacun des deux cas, le module au carré du champ électrique est calculé sur $2\pi \text{sr}$ (au dessus de l'interface), à la longueur d'onde $\lambda = 12.5 \mu\text{m}$.

Pour une meilleure visibilité, la représentation sphérique utilisée jusqu'à maintenant (cf. FIG. 5.8(a)) est remplacée par une représentation polaire (θ, ϕ) (cf. FIG. 5.8(b)).

Cas d'une pointe en tungstène

Le module au carré du champ électrique lointain est représenté (en unité arbitraire) sur les figures 5.9(a) et 5.9(b). En comparant les deux polarisations, nous voyons qu'en cas d'une onde incidente polarisée TE, le champ diffusé va rester confiné à proximité de l'interface, ce qui va favoriser la collection du signal sur le côté de la pointe. En revanche, en polarisation TM, une partie importante du champ est diffusée dans la zone proche de l'axe de la pointe, ce qui avantage la mesure du signal par le dessus.

Ces deux comportements ont été observés pour l'ensemble des matériaux dispersifs que nous avons étudiés. Seuls les matériaux peu dispersif se comportent différemment, comme le démontre le paragraphe suivant traitant du cas d'une pointe en silicium.

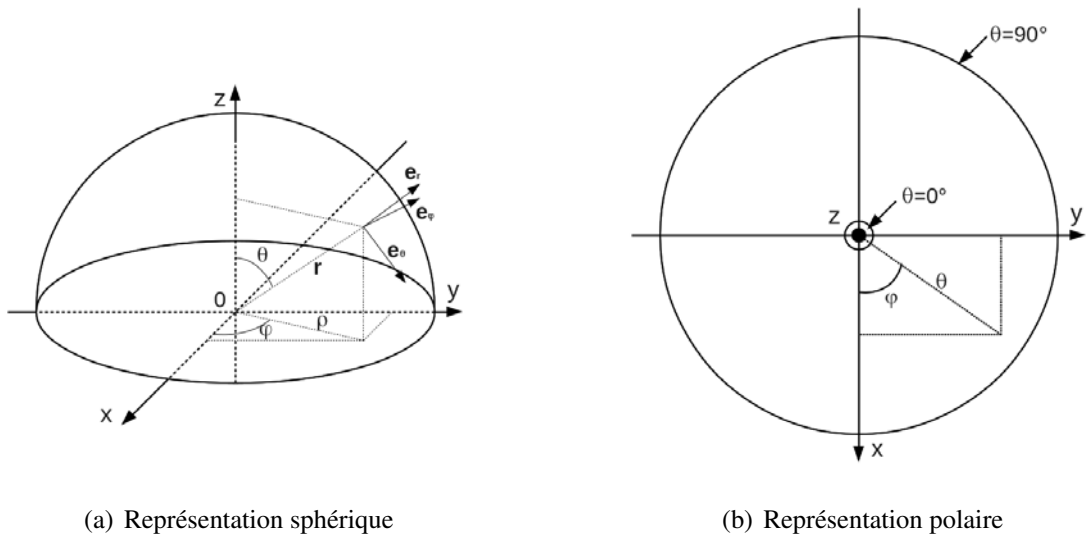


FIG. 5.8: Passage d'une représentation sphérique (r, θ, ϕ) sur $2\pi sr$ à une représentation polaire (θ, ϕ)

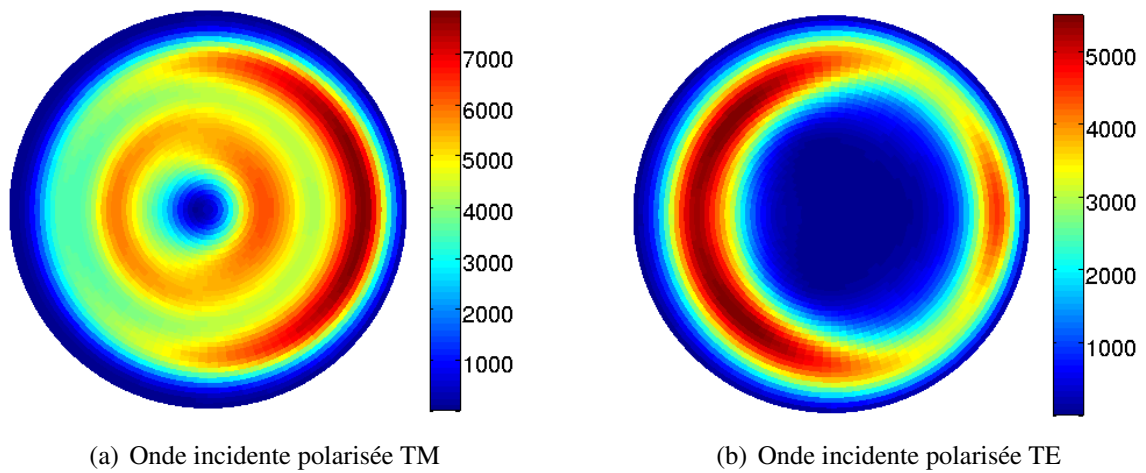


FIG. 5.9: Représentation polaire sur $2\pi sr$ du module au carré normalisé du champ électrique lointain diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente

Cas d'une pointe en silicium

Nous avons fait la même étude dans le cas d'une pointe en silicium. L'allure du champ lointain nous est donnée par les figures 5.10(a) et 5.10(b). Nous pouvons voir que le champ lointain, pour chacune des deux polarisations, présente des similitudes avec ce que nous avons observé dans le cas de la pointe en tungstène. Cependant, il est intéressant de remarquer que dans le cas présent, le champ diffusé dans l'axe de la pointe est loin d'être nul. Cela est dû au fait que le silicium est très peu absorbant dans l'infrarouge.

Nous pouvons d'ailleurs constater ce phénomène en observant l'évolution temporelle du champ proche électrique $|E_y^{nf}(x, z)|$ (FIG. 5.11 : onde incidente polarisée TM).

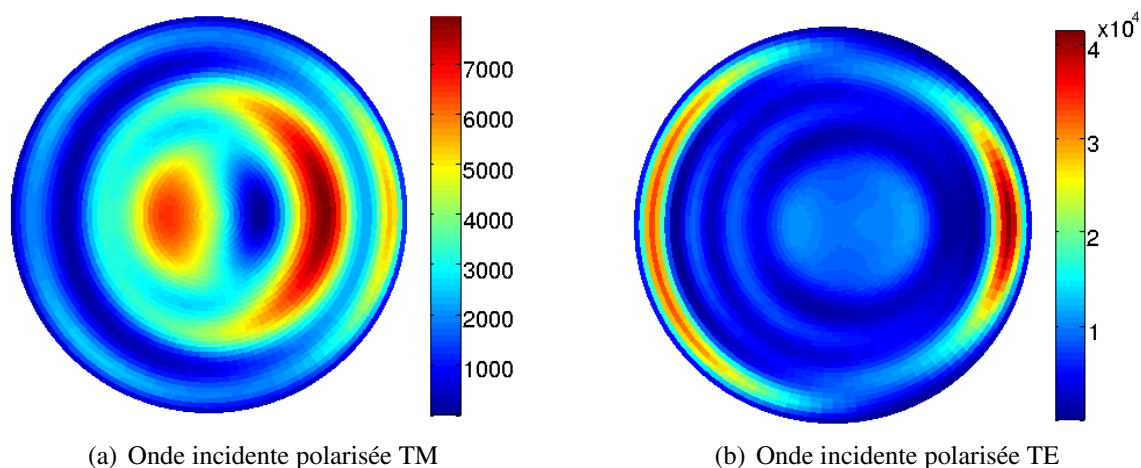


FIG. 5.10: Représentation polaire sur 2π sr du module au carré normalisé du champ électrique lointain diffusé par une pointe en silicium au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente

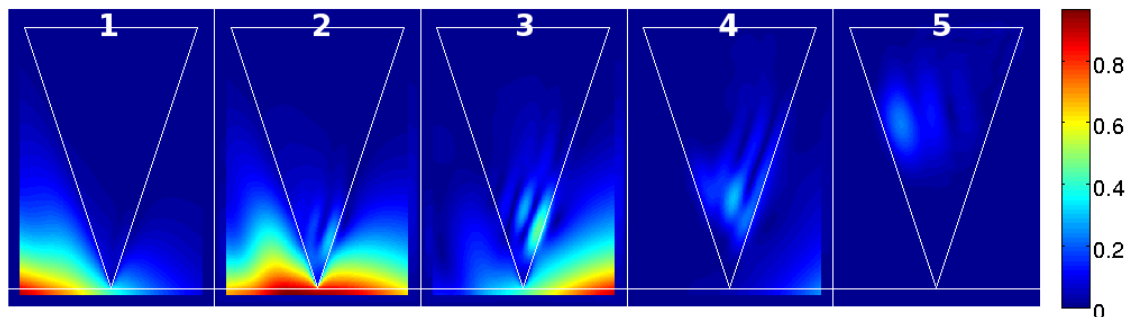


FIG. 5.11: Pointe en silicium : représentation de $|E_y^{nf}(x, z)|$ normalisé dans le plan $(N_x/2, y, z)$ aux temps $t = 350 \times \Delta t, 500 \times \Delta t, 650 \times \Delta t, 800 \times \Delta t$ et $1100 \times \Delta t$. $\Delta t = \lambda_0 / (2 \times 125 \times c) = 0.17$ fs

Nous voyons qu'une partie de l'onde évanescente entre à l'intérieur de la pointe et continue à se propager à l'intérieur de celle-ci, même lorsque l'onde incidente est sortie du domaine de calcul et n'interagit donc plus avec la pointe.

5.2.3 Estimation du signal collecté

Les valeurs du signal mesuré I_{opt} , pour chacune des simulations relatives à un matériau donné, sont représentées sur les histogrammes 5.12(a) et 5.12(b).

Comme nous avons déjà pu le constater, dans le cas d'une onde polarisée TM, aucun positionnement de l'optique de collection (au dessus ou sur le côté) ne présente de nets avantages de l'un par rapport à l'autre. En revanche, le signal collecté est bien plus important sur le coté de la pointe dans le cas d'une onde incidente polarisée TE, à l'exception de la pointe en silicium qui, du fait de son caractère peu absorbant, diffuse un signal non négligeable dans l'axe de la pointe.

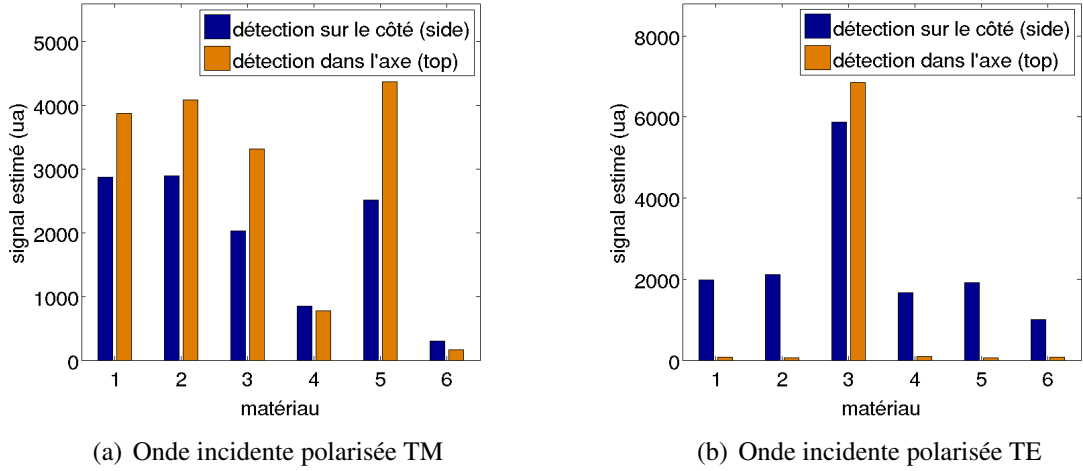


FIG. 5.12: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 20^\circ$) - étude de l'influence du matériau de la pointe : 1-tungstène, 2-pointe PEC, 3-silicium, 4-silicium dopé, 5-SiC, 6-verre SiO₂

5.3 Influence de la profondeur de pénétration de l'onde évanescente

Ici, l'étude s'est uniquement portée sur une pointe conique massive en tungstène de $20\mu\text{m}$ de hauteur, à 200nm de l'interface. Le but de cette étude est de déterminer l'influence de la profondeur de pénétration de l'onde évanescente sur l'allure du champ diffusé par la pointe. Notamment, nous voulons observer les variations de ce champ lorsque l'éclairage se fait sur toute la hauteur de la pointe, ou alors uniquement au niveau de son extrémité.

5.3.1 Profondeur de pénétration d'une onde évanescente

Dans le cas d'une onde évanescente créée par réflexion totale, la profondeur de pénétration z_0 dépend directement de l'angle d'incidence θ_i . L'expression de l'intensité du champ électrique au dessus de l'interface est alors donnée par l'expression 5.3.

$$E = E_0 e^{\left(-\frac{z}{z_0}\right)} \quad \text{avec} \quad z_0 = \frac{1}{k_{\text{éch}} \sqrt{\left(\frac{n_{\text{éch}}}{n_{\text{air}}} \sin \theta_i\right)^2 - 1}} \quad (5.3)$$

où z est la distance par rapport à l'interface et $k_{\text{éch}}$ est le nombre d'onde dans l'échantillon d'indice optique $n_{\text{éch}} = 3.42$ (cf. annexe A).

À titre d'illustration, la figure 5.13(a) nous montre l'évolution du champ électrique évanescent au dessus d'une interface plane air/silicium, à la longueur d'onde $\lambda = 12.5\mu\text{m}$, en fonction de l'angle d'incidence et de la distance z . Nous pouvons voir la très rapide

5.3. INFLUENCE DE LA PROFONDEUR DE PÉNÉTRATION DE L'ONDE ÉVANESCENTE

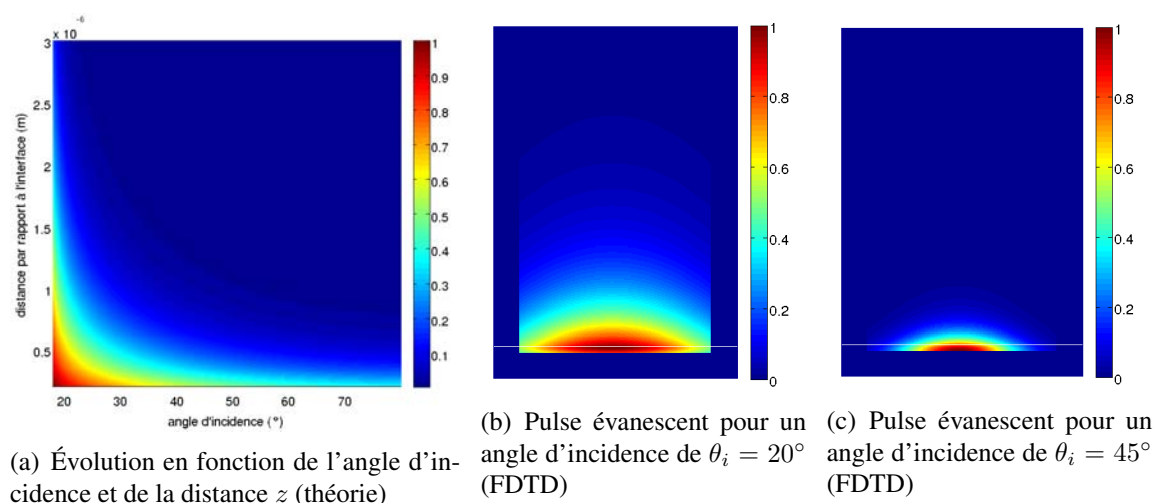


FIG. 5.13: Intensité (ua) du champ électrique évanescent créé par réflexion totale d'une onde plane, au dessus d'une interface plane air/silicium
 (a) : à la longueur d'onde $\lambda = 12.5\mu\text{m}$
 (b) et (c) : dans le domaine temporel (500^{ème} pas de temps)

décroissance du champ lorsque θ_i augmente.

Sur les figures 5.13(b) et 5.13(c), nous pouvons observer l'allure de pulses gaussiens au 500^{ème} pas de temps obtenus par AFP-TFSF pour des angles d'incidence de 20° et 45° . Les paramètres du domaine de calcul sont identiques à ceux décrits précédemment (cf. section 5.1.1). Seule la pointe est absente dans le but de faciliter la description de l'onde évanescente. L'interface est représentée par la ligne blanche. Nous voyons parfaitement le confinement de l'onde à proximité de l'interface pour les grandes valeurs de θ_i .

5.3.2 Allure du champ lointain

Les résultats représentés sur les figures 5.14(a) et 5.14(b) correspondent au module au carré du champ électrique lointain diffusée par une pointe conique en tungstène. L'onde évanescente est créée par réflexion totale, avec comme angle d'incidence $\theta_i = 60^\circ$ ($z_0 = 714\text{nm}$), ce qui correspond à une onde très évanescente.

Si l'on compare ces résultats aux figures 5.9(a) et 5.9(b), lesquelles sont obtenues pour un angle d'incidence $\theta_i = 20^\circ$ ($z_0 = 3.27\mu\text{m}$), nous remarquons que le champ diffusé tend à se concentrer autour de la pointe lorsque l'onde illuminant la pointe devient très évanescente, et ce même dans le cas d'une onde incidente polarisée TE. Ce phénomène tend donc à favoriser la collection du signal dans l'axe de la pointe, comme le démontrent les résultats présentés dans la sous-section suivante.

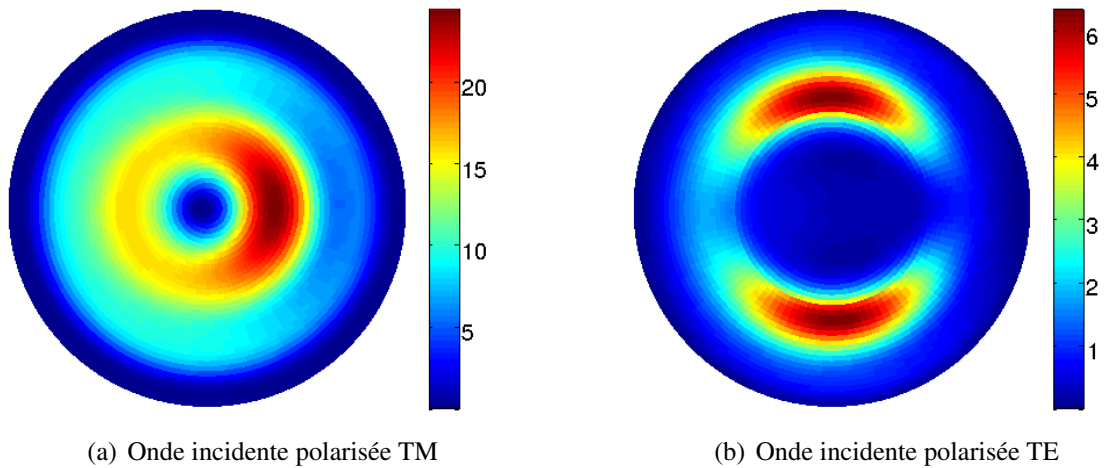


FIG. 5.14: Représentation polaire sur 2π sr du module au carré normalisé du champ électrique lointain diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde très évanescente ($\theta_i = 60^\circ$)

5.3.3 Estimation du signal collecté

Les figures 5.15(a) et 5.15(b) nous montrent l'évolution du signal collecté, sur le côté et au dessus de la pointe, pour des angles d'incidence θ_i de 20° ($z_0 = 3.27\mu\text{m}$), 30° ($z_0 = 1.43\mu\text{m}$), 45° ($z_0 = 903\text{nm}$), 60° ($z_0 = 714\text{nm}$) et 80° ($z_0 = 618\text{nm}$).

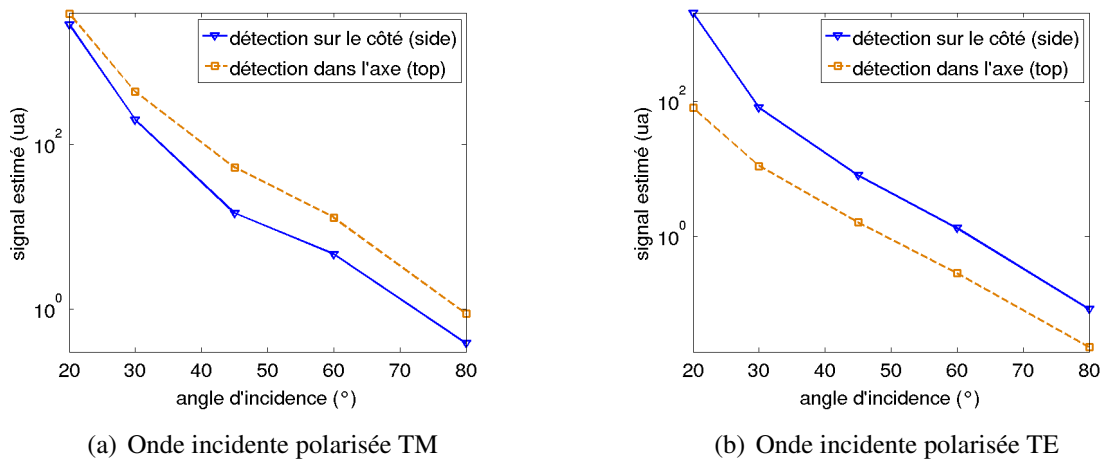


FIG. 5.15: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente - évolution en fonction de l'angle d'incidence θ_i

Premièrement, nous pouvons voir que le signal collecté diminue de façon exponentielle lorsque la profondeur de pénétration de l'onde diminue. Cette diminution de l'intensité du champ diffusé vient du fait que, plus l'onde est évanescente, plus le volume de la pointe éclairé par cette onde diminue. De plus, nous voyons que la diminution de

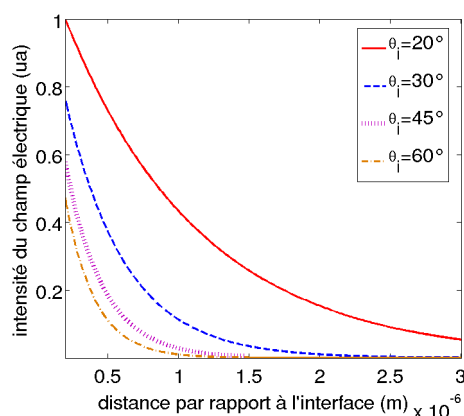
la profondeur de pénétration avantage faiblement la collection du signal dans l'axe de la pointe. En effet, dans le cas d'une onde polarisée TM, l'écart entre les signaux collectés au dessus et sur le côté de la pointe augmente. De même, lorsque l'onde incidente est polarisée TE, bien que le signal collecté sur le côté de la pointe soit encore dominant, l'écart entre les deux estimations tend à diminuer.

5.4 Influence de la distance pointe/interface

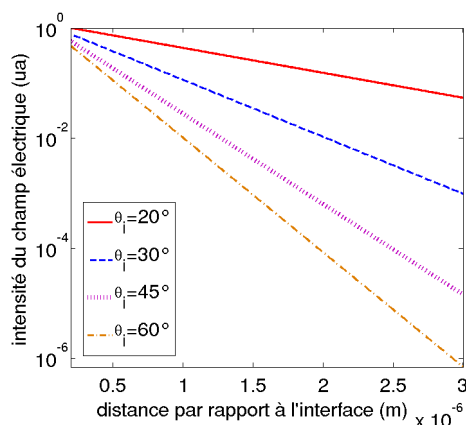
Là encore, nous nous sommes concentrés sur la modélisation d'une pointe conique massive en tungstène de $22\mu\text{m}$ de hauteur. L'angle d'incidence de l'onde plane est fixé à 45° . La distance pointe/interface, imposée jusqu'à présent à 200nm , varie ici de 200nm à $2\mu\text{m}$. Le but d'une telle étude est exposé ci-dessous.

5.4.1 Principe et utilité de la simulation

L'opération consiste à simuler l'oscillation de la pointe TRSTM au dessus de la surface de l'échantillon. Cependant, il est inutile, et surtout impossible, d'implémenter le mouvement de la pointe dans le code FDTD. En effet, l'ordre de grandeur du temps virtuel décrit par un calcul est de l'ordre de la picoseconde (~ 15000 pas de temps, avec $\Delta t = 0.083\text{fs}$). Or, la fréquence d'oscillation d'une pointe TRSTM est de l'ordre de 10kHz , ce qui équivaut à une période de 0.1ms . La simulation d'une telle période nécessite donc environ 10^{12} pas de temps, ce qui est bien sûr irréalisable, du moins pour une simulation FDTD 3D. L'idée est alors de calculer le champ proche diffusé par une pointe immobile, et ce pour différentes distances pointe/interface z . Chaque nouvelle distance z étudiée nécessite donc un calcul qui lui est propre.



(a) Évolution en fonction de la distance z



(b) Évolution en fonction de la distance z

FIG. 5.16: Intensité (ua) du champ électrique évanescent créé par réflexion totale d'une onde plane, au dessus d'une interface plane air/silicium, à la longueur d'onde $\lambda = 12.5\mu\text{m}$ dans le cas d'angles d'incidence de 20° , 30° , 45° et 60°

À titre d'illustration, les figures 5.16(a) et 5.16(b) nous montrent l'évolution du champ électrique évanescents théorique au dessus d'une interface plane air/silicium, à la longueur d'onde $\lambda = 12.5\mu\text{m}$, en fonction la distance z , et ce pour quatre angles d'incidence différents ($\theta_i = 20^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ et 60°). Nous pouvons voir la décroissance du champ lorsque z augmente, notamment grâce à la représentation semi-logarithmique de la figure 5.16(b).

5.4.2 Estimation du signal collecté

Les graphes 5.17(a) et 5.17(b) nous montrent l'évolution du champ diffusé par la pointe conique en tungstène positionnée à 200nm, 500nm, $1\mu\text{m}$ et $2\mu\text{m}$ de la surface de l'échantillon.

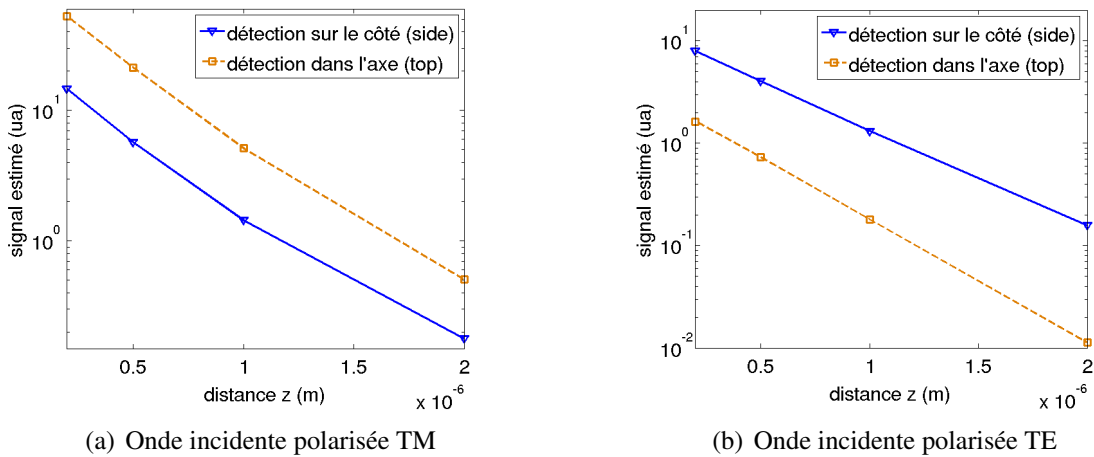


FIG. 5.17: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescence ($\theta_i = 45^\circ$) - évolution en fonction de la distance pointe interface

Dans chaque cas, nous observons une décroissance exponentielle du signal collecté, ce qui est cohérent avec la décroissance exponentielle du champ proche au dessus de l'interface. Ainsi, grâce à cette étude, nous pouvons estimer l'évolution temporelle du signal diffusé par une pointe oscillante dans le cas d'un microscope TRSTM. En effet, d'après ces résultats, il est probable que ce signal se présente sous la forme d'une succession de pics espacés d'un laps de temps correspondant à la période d'oscillation de la pointe, comme le montrent d'ailleurs les figures 5.18(a) et 5.18(b). Ces figures représentent une estimation du signal collecté et mesuré par le capteur infrarouge au cours du temps. Nous avons pris comme cas celui d'une pointe oscillant à la fréquence $\nu_{\text{pointe}} = 10\text{kHz}$, pour une distance pointe/échantillon comprise entre 200nm et $2\mu\text{m}$ (valeurs arbitraires ne correspondant pas à une situation expérimentale réaliste). Dans ce cas nous intéressent d'un point de vue expérimental, on note qu'il y a une variation d'un peu moins de deux ordres de grandeur en polarisation TE et TM. En revanche, l'intensité du signal mesuré est plus importante en polarisation TM, comme l'ont montré les précédents calculs.

5.5. INFLUENCE DE LA FORME DE LA POINTE

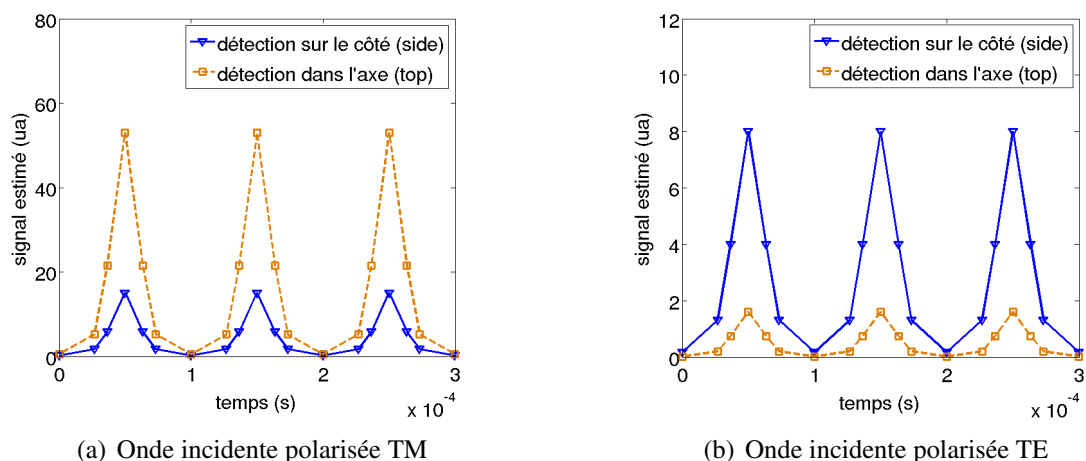


FIG. 5.18: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène oscillant au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$) - évolution au cours du temps

5.5 Influence de la forme de la pointe

Dans cette section, nous nous intéressons à la forme de la pointe dont le matériau est toujours le tungstène. La distance pointe/interface est de 200nm. L'angle d'incidence de l'onde plane est fixé, d'abord à 20° , puis à 45° . Le but principal de cette étude est d'observer l'évolution du signal diffusé en fonction de la finesse de la pointe. En effet, la résolution d'une image SNOM dépend essentiellement du volume de la pointe éclairée par les ondes de surface. Ainsi, plus la pointe est fine, plus l'image est de bonne qualité. Cependant, le fait d'affiner la pointe a aussi tendance à faire diminuer l'intensité du signal diffusé, lequel devient alors plus difficilement mesurable. Nous cherchons donc ici à déterminer le degré de décroissance du signal lorsque la finesse de la pointe augmente.

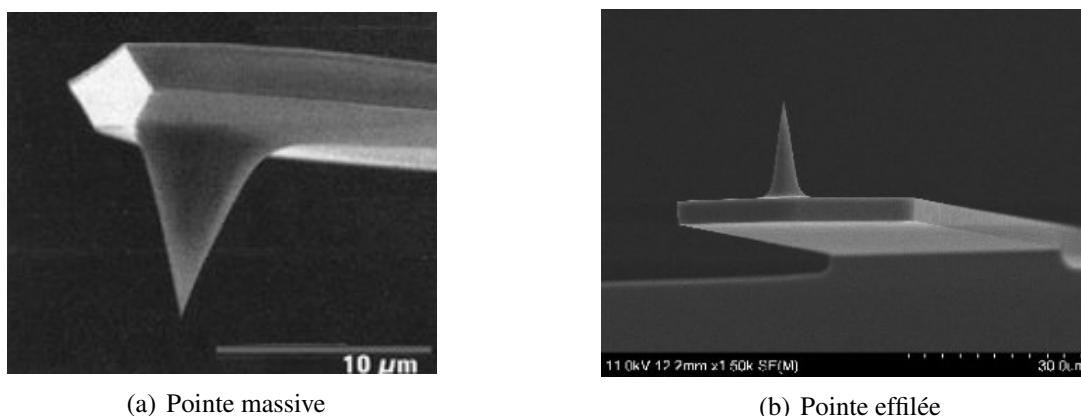


FIG. 5.19: Exemples de pointes commerciales de forme conique

5.5.1 Description des différentes formes étudiées

Trois types de pointes ont été modélisés :

- une pointe conique massive (FIG. 5.20(a)). Il s'agit du cas que nous avons traité jusqu'à présent,
- une pointe conique effilée, de hauteur $200\mu\text{m}$, et de demi-angle au sommet $\theta_{\text{pointe}} = 5.7^\circ$ (FIG. 5.20(b)),
- une pointe conique très effilée, de hauteur $200\mu\text{m}$ et de profil parabolique (FIG. 5.20(c)).

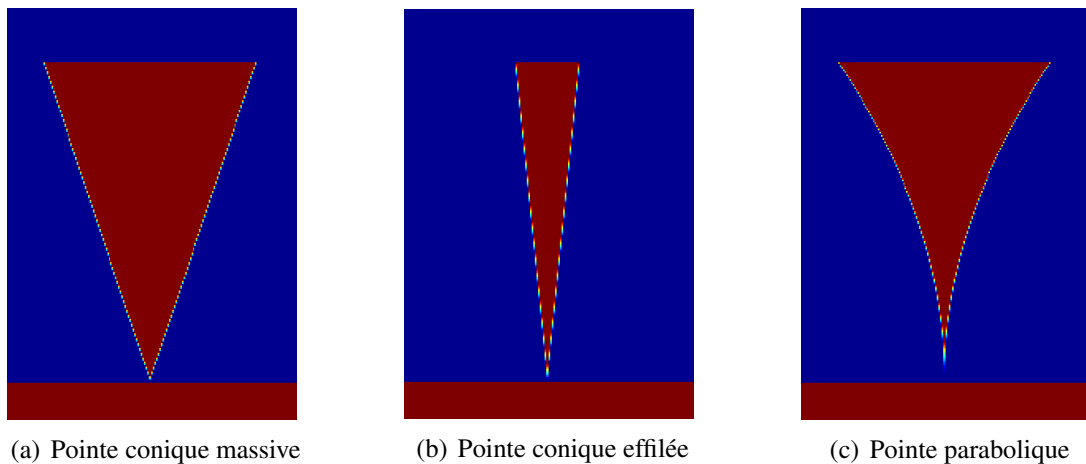


FIG. 5.20: Différentes formes de pointes étudiées - illustration de l'application de la méthode CPT à la frontière pointe/milieu ambiant

Ainsi, nous avons cherché à nous rapprocher de pointes commerciales existantes, dont deux exemples illustrent l'introduction de cette section sur les figures 5.19(a), dans le cas d'une pointe conique massive, et 5.19(b) dans celui d'une pointe conique effilée.

5.5.2 Allure du champ lointain

Le module au carré du champ électrique diffusé par une pointe en tungstène parabolique (FIG. 5.20(b)) est représenté sur les figures 5.21(a) et 5.21(b). Si l'on compare ces images aux figures 5.9(a) et 5.9(b) (obtenues, rappelons-le, dans le cas d'une pointe massive), nous voyons que dans le cas d'une onde polarisée TM, l'intensité du champ diffusé ne diminue que très peu, bien que le volume de diffusion soit fortement réduit. De plus, Le champ reste très nettement confiné autour de la pointe, ce qui favorise la détection du signal par le dessus. Par contre, pour ce qui est de l'onde incidente polarisée TE, nous observons une très forte diminution du champ, comparativement à celui diffusé par une pointe massive.

5.5. INFLUENCE DE LA FORME DE LA POINTE

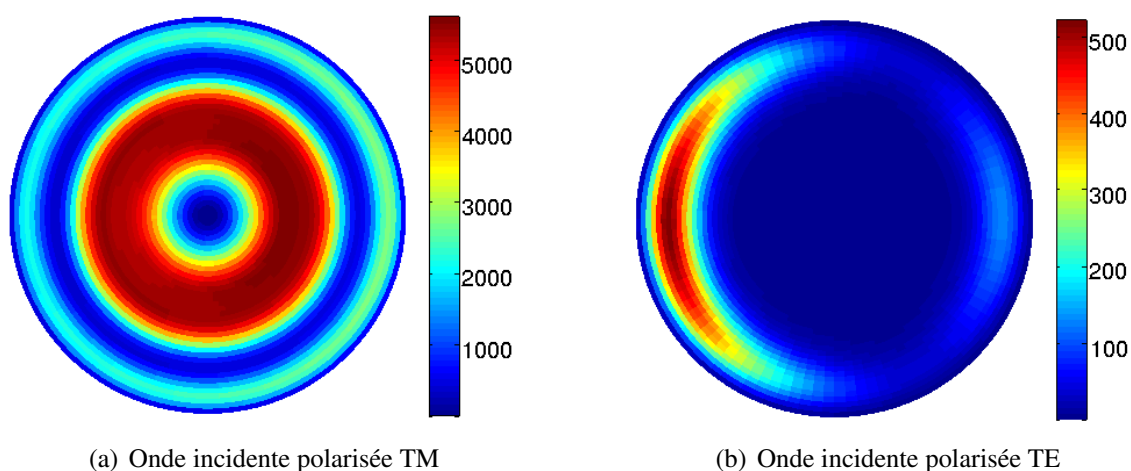


FIG. 5.21: Représentation polaire sur 2π sr du module au carré normalisé du champ électrique lointain diffusé par une pointe parabolique effilée en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 20^\circ$)

5.5.3 Estimation du signal collecté

L'évolution du signal estimé en fonction de la forme de la pointe nous est donnée par les figures 5.22 et 5.23. Deux angles d'incidence (et donc deux degrés d'évanescence) sont pris en compte, à savoir $\theta_i = 20^\circ$ et $\theta_i = 45^\circ$. Une fois encore, les deux polarisations sont étudiées.

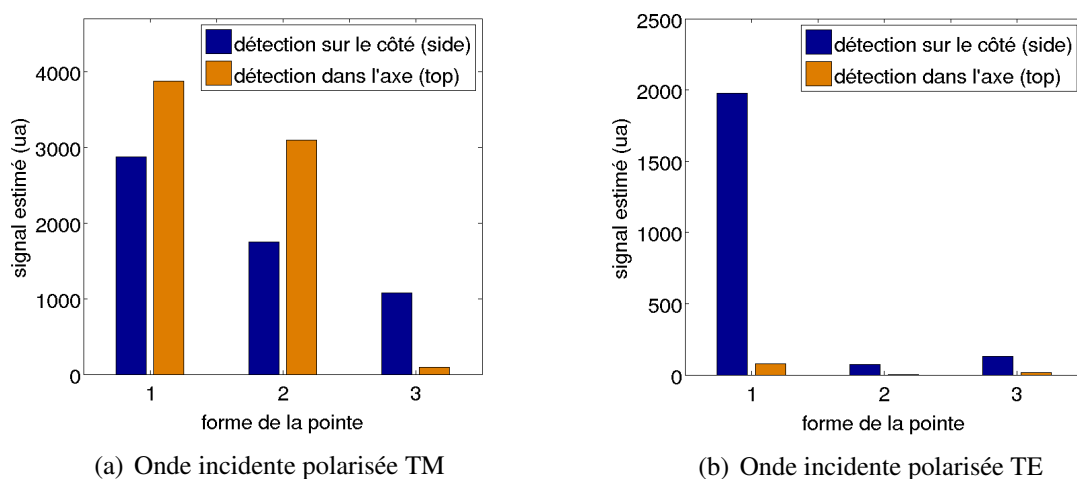


FIG. 5.22: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 20^\circ$) - étude de l'influence de la forme de la pointe : 1 : pointe conique massive, 2 : pointe conique effilée, 3 : pointe parabolique

Comme le laissait prévoir les figures 5.9(a) et 5.9(b), le signal diminue fortement pour les pointes effilées dans le cas d'une onde incidente polarisée TE, alors que pour une

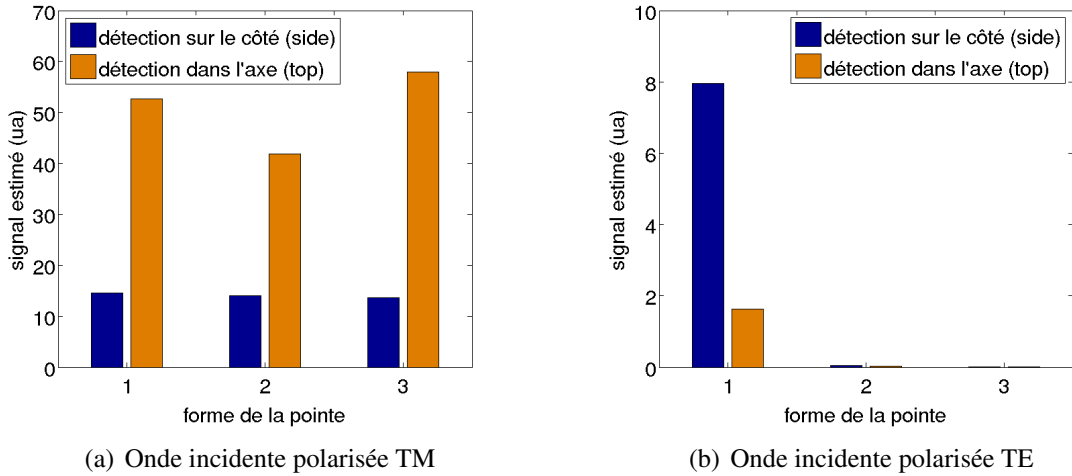


FIG. 5.23: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$) - étude de l'influence de la forme de la pointe : 1 :pointe conique massive, 2 :pointe conique effilée, 3 :pointe parabolique

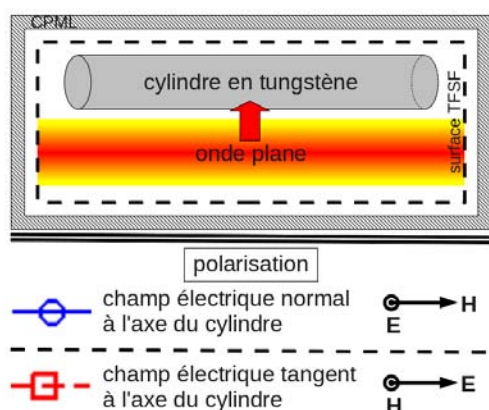
onde TM, cette diminution est beaucoup moins marquée. On observe même une faible augmentation pour le troisième type de pointe dans le cas d'une onde fortement évanescente ($\theta_i = 45^\circ$). L'explication de ce phénomène est la suivante : lorsque l'extrémité de la pointe devient très effilée, le comportement optique de cette dernière tend à se rapprocher de celui d'un fil fin (par rapport à la longueur d'onde). Ainsi, lorsque l'onde incidente est polarisée TE, le champ électrique est perpendiculaire à l'axe de ce fil dont l'efficacité de diffusion devient alors très faible dans une telle situation. En revanche, dans le cas d'une onde polarisée TM, le champ électrique éclairant la pointe possède une composante non nulle parallèle à l'axe de cette dernière. La pointe se comporte alors comme une antenne, ce qui tend à augmenter son efficacité de diffusion.

Pour illustrer nos propos, nous avons calculé par FDTD/NFTFF le champ électrique diffusé par un cylindre en tungstène de cinq longueurs d'onde de longueur (5λ avec $\lambda = 12.5\mu\text{m}$), placé dans le vide et éclairé par une onde plane (cf. figure 5.24(a)). L'influence du diamètre du cylindre y est étudiée. Ce diamètre prend alors les valeurs suivantes : $\frac{1}{20}\lambda$, $\frac{3}{20}\lambda$, $\frac{2}{5}\lambda$ et λ . La polarisation est elle aussi prise en compte. Cependant, alors qu'elle était jusqu'à maintenant définie par rapport au plan d'incidence et donc à l'interface (qui est inexistante dans ce problème), nous l'avons définie ici par rapport à l'axe du cylindre. Ainsi, deux situations d'illumination sont modélisées. L'une est marquée par un champ électrique incident parallèle à l'axe du cylindre et l'autre correspond à un champ électrique normal à ce même axe.

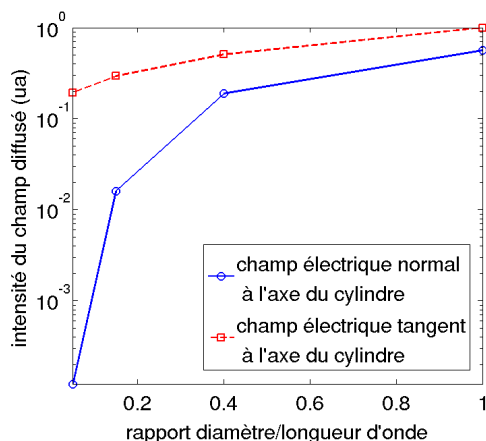
Les résultats obtenus se trouvent sur la figure 5.24(b). Ils représentent l'intégration sur $4\pi\text{sr}$ du module au carré du champ électrique lointain (en unités arbitraires) diffusé par le cylindre. Nous voyons que ces résultats corroborent avec ceux obtenus dans le cas des pointes fines (cf. figures 5.22 et 5.23). En effet, lorsque le champ électrique incident est

5.6. INFLUENCE DE LA LONGUEUR D'ONDE D'ÉTUDE

normal à l'axe du cylindre, la réduction du diamètre de ce dernier s'accompagne d'une décroissance très importante du signal diffusé. En revanche, si le champ électrique est parallèle à l'axe, nous n'observons qu'une faible diminution du signal due essentiellement à la réduction du volume diffusant.



(a) Schématisation du problème étudié - description des différentes polarisations



(b) Module au carré du champ électrique diffusé par le cylindre (ua - intégration sur 4π sr)

FIG. 5.24: Estimation du signal diffusé par un cylindre de cinq longueurs d'onde de longueur en tungstène dans le vide, éclairé par une onde plane - étude de l'influence du rayon du cylindre et de la polarisation de l'onde incidente

5.6 Influence de la longueur d'onde d'étude

Jusqu'à présent, tous les calculs de champs lointains ont été faits à une seule et unique longueur d'onde $\lambda = 12.5\mu\text{m}$, tout en faisant varier d'autres paramètres tels que la forme ou le matériau de la pointe. Dans cette section, l'influence de la longueur d'onde sur le signal est prise en compte. Trois matériaux constituant les pointes sont étudiés dont le carbure de silicium (SiC) et le verre SiO_2 qui présentent dans l'infrarouge certaines particularités pouvant s'avérer intéressantes (cf. chapitre 1). Le troisième matériau est le tungstène, l'idée étant de s'approcher le plus possible des matériaux utilisables pour notre montage TRSTM (cf. 2.4.4).

Tous les calculs sont menés dans le cas de la pointe massive conique déjà décrite dans les paragraphes précédents. Elle est positionnée à 200nm de la surface d'un échantillon en silicium ($n_{\text{éch}} = 3.42$) et est éclairée par une onde hautement évanescente obtenue par réflexion totale d'une onde plane ($\theta_i = 45^\circ$).

5.6.1 Cas d'une pointe de tungstène

La pointe est en tungstène. Le spectre de longueur d'onde étudié se situe entre $7\mu\text{m}$ et $15\mu\text{m}$. L'estimation du signal par chacun des deux dispositifs de collection (position 'side' : sur le côté de la pointe - position 'top' : dans l'axe de la pointe) est faite dans le cas d'une onde incidente polarisée TM (FIG. 5.25(a)) et TE (FIG. 5.25(b)).

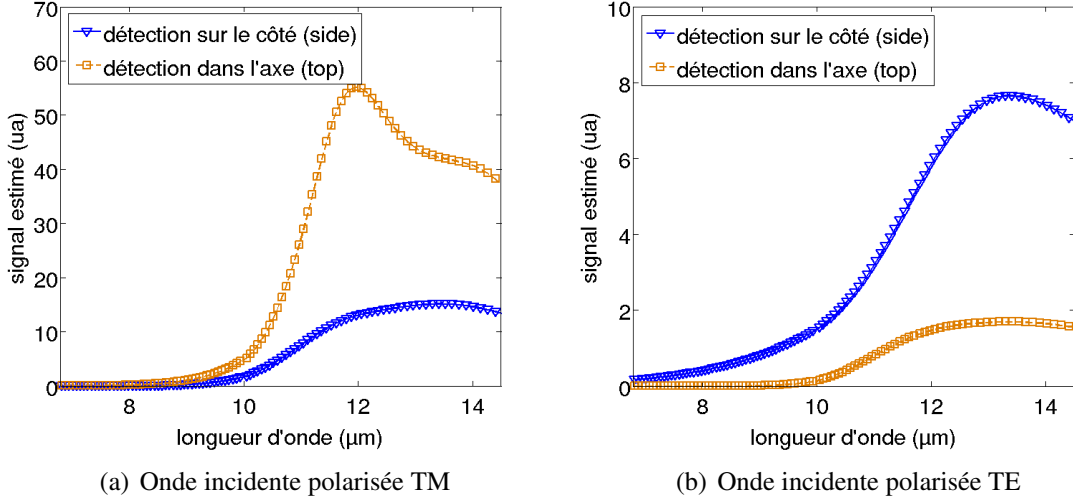


FIG. 5.25: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$), en fonction de λ

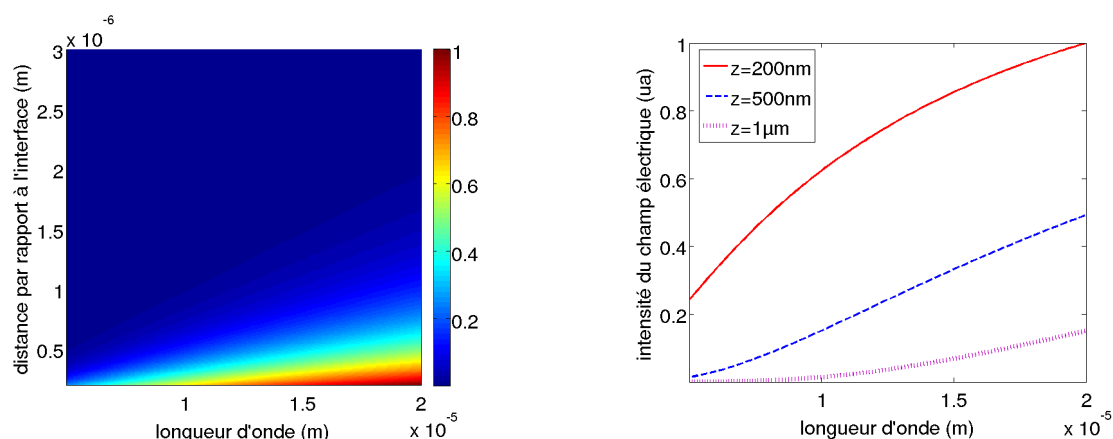
Nous voyons que, lorsque la longueur d'onde augmente, le signal diffusé augmente lui aussi. Pour comprendre ce comportement, il faut reprendre l'expression représentant la profondeur de pénétration z_0 d'une onde de surface créé par réflexion totale, à savoir :

$$E = E_0 e^{\left(-\frac{z}{z_0}\right)} \quad \text{avec} \quad z_0 = \frac{1}{k_{\text{éch}} \sqrt{\left(\frac{n_{\text{éch}}}{n_{\text{air}}} \sin \theta_i\right)^2 - 1}} \quad (5.4)$$

Ainsi, la hauteur caractéristique de l'onde évanescente z_0 évolue en $\frac{1}{k_{\text{éch}}}$, ce qui implique que z_0 est proportionnelle à λ . Par conséquent, plus la longueur d'onde est grande, plus la hauteur caractéristique de l'onde évanescente est importante, et plus le volume de la pointe éclairé par l'onde augmente. Le signal diffusé s'en retrouve donc amplifié.

À titre d'illustration, les figures 5.26(a) et 5.26(b) nous montrent l'évolution de l'intensité du champ électrique au dessus d'une interface plane air/silicium, en fonction de la longueur d'onde λ et de la distance z , et ce pour un angle d'incidence de 45° . Nous pouvons voir la nette croissance du champ lorsque λ augmente. En outre, la figure 5.26(b) nous permet de remarquer que l'évolution du champ en fonction de λ diffère fortement lorsque l'on se trouve près de l'interface et lorsqu'on s'en éloigne.

5.6. INFLUENCE DE LA LONGUEUR D'ONDE D'ÉTUDE



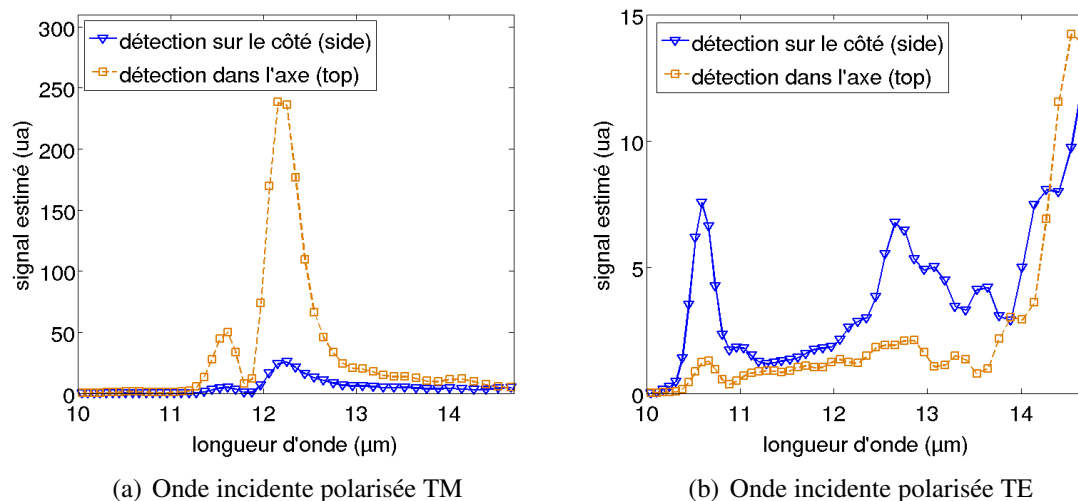
(a) Évolution en fonction de la longueur d'onde et de la distance z

(b) Évolution en fonction de la longueur d'onde pour trois distances z

FIG. 5.26: Intensité (ua) du champ électrique évanescent créé par réflexion totale ($\theta_i = 45^\circ$) d'une onde plane, au dessus d'une interface plane air/silicium

5.6.2 Cas d'une pointe de SiC

Les mêmes simulations ont été faites dans le cas d'une pointe en SiC. Les résultats sont représentés sur les figures 5.27(a) et 5.27(b).



(a) Onde incidente polarisée TM

(b) Onde incidente polarisée TE

FIG. 5.27: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en SiC au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$), en fonction de λ

Nous voyons qu'en polarisation TE, l'utilisation d'une pointe en SiC n'apporte que peu d'amélioration en ce qui concerne l'intensité du signal diffusé. Par contre, dans le cas d'une onde incidente polarisée TM, nous pouvons observer un pic de résonance à la longueur d'onde $\lambda = 12.2\mu\text{m}$. Cependant, l'amélioration qu'apporte le remplacement

d'une pointe en tungstène par une pointe en SiC ne semble pas suffisante pour justifier une telle opération.

5.6.3 Cas d'une pointe de verre SiO₂

Ici, le signal estimé a été calculé pour des longueurs d'onde comprises entre 7 μm et 12 μm. Les résultats peuvent s'observer sur les figures 5.28(a) et 5.28(b).

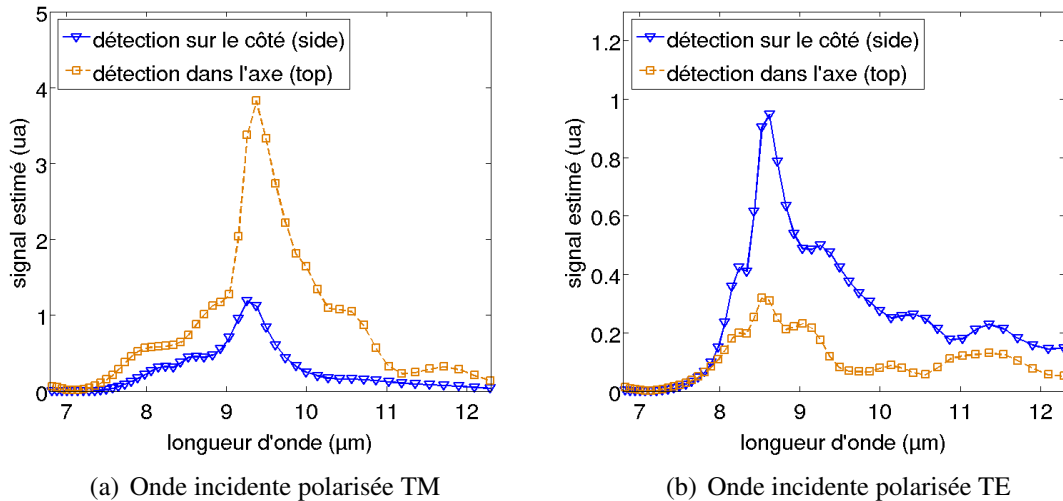


FIG. 5.28: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en verre SiO₂ au dessus d'une interface, éclairée par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$), en fonction de λ

Nous pouvons voir que le signal présente un pic de résonance à $\lambda = 9.4 \mu\text{m}$ dans le cas d'une onde incidente polarisée TM, et à $\lambda = 8.6 \mu\text{m}$ pour la polarisation TE. Une telle pointe peut donc présenter un certain avantage si le capteur destiné à mesurer le signal diffusé est sensible à ces longueurs d'onde.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu comment modéliser le comportement optique d'une pointe de microscope ASNOM, et plus précisément de microscope TRSTM. Un certain nombre de situations ont été étudiées, mettant en avant l'influence de paramètres tels que la forme ou le matériau de la pointe, sa distance par rapport à l'interface, ou encore la profondeur de pénétration et la polarisation de l'onde de surface. Dans chacun des cas, la question du positionnement optimal du système optique, destiné à collecter le signal diffusé par la pointe, a été posée. Pour finir, notre travail s'est porté sur l'étude de l'évolution du signal diffusé en fonction de la longueur d'onde, ce qui nous a permis de mettre en avant certains phénomènes de résonance que présentent des matériaux tels que le SiC ou le verre SiO₂ dans l'infrarouge moyen.

Chapitre 6

Modélisation de pointes TRSTM résonantes

Sommaire

6.1 Résonance des sphères	130
6.1.1 Modes de surfaces dans les petites particules	130
6.1.2 Étude d'une sphère de SiC	131
6.1.3 Étude d'une sphère de verre SiO ₂	135
6.2 Étude d'un système pointe/sphère	138
6.2.1 Paramètres de calcul	139
6.2.2 Cas d'une sphère de SiC	140
6.2.3 Cas d'une sphère de verre SiO ₂	142

Introduction

Nous nous sommes focalisés jusqu'à présent sur la caractérisation de pointes de microscopes TRSTM de formes simples (pointes coniques massives, pointes coniques effilées,...). Nous cherchons ici à modéliser des objets diffusants de formes plus complexes dans le but d'augmenter l'efficacité de diffusion des pointes, et donc d'améliorer les performances de la microscopie TRSTM.

La première partie de ce chapitre traite de l'étude théorique de la diffusion de petites sphères. À titre d'illustration, certains résultats donnés par la théorie de Mie et la méthode T-matrix dans le cas de sphères de carbure de silicium et de verre SiO₂, dans le vide puis au dessus d'un échantillon de silicium, sont représentés.

La seconde partie porte sur la modélisation d'un système pointe/sphère par le modèle FDTD/NFTFF développé dans le chapitre 3. Différentes simulations y sont étudiées, en faisant notamment varier le matériau de la sphère, dans le but de détecter les configurations les plus performantes en ce qui concerne l'intensité du signal diffusé par la pointe.

6.1 Résonance des sphères

6.1.1 Modes de surfaces dans les petites particules

Nous avons déjà parlé dans le chapitre 1 de la notion de modes de surface dont font partie les polaritons de surface. Ces modes y sont décrits comme étant des solutions particulières des équations de Maxwell, au niveau d'une interface entre deux milieux, dans le cas d'une étude non radiative des relations de dispersion. L'application théorique aux interfaces planes y a été développée dans le but de déterminer les fréquences pour lesquelles des phénomènes de résonance sont possibles.

Nous nous focalisons maintenant sur le cas des sphères petites par rapport à la longueur d'onde. Cependant, l'étude théorique et complexe d'un tel système ne constituant pas l'essentiel de nos travaux, nous allons seulement décrire les bases nécessaires à la compréhension des mécanismes mis en jeu. Pour plus de détails, il est conseillé de se reporter à l'ouvrage de Bohren et Huffman [71].

Nous considérons le cas d'une sphère de fonction diélectrique relative $\epsilon_{\text{sphère}}$ et de rayon a placée dans un milieu de fonction diélectrique relative ϵ_m . Le paramètre de taille $x = \frac{2\pi a}{\lambda}$, λ étant la longueur d'onde, est supposé petit ($x \ll 1$). D'après [71], la Differential Scattering Cross Section (DSCS) peut alors être définie par :

$$\text{DSCS}(\omega) = \frac{8\pi}{3} a^2 x^4 \left| \frac{\epsilon_{\text{sphère}}(\omega) - \epsilon_m(\omega)}{\epsilon_{\text{sphère}}(\omega) + 2\epsilon_m(\omega)} \right| \quad (6.1)$$

L'équation 6.1 nous montre qu'il est possible d'observer un phénomène de résonance lorsque le dénominateur s'annule, c'est-à-dire lorsque :

$$\epsilon_{\text{sphère}}(\omega) = -2\epsilon_m(\omega) \quad (6.2)$$

La pulsation pour laquelle est vérifiée cette pulsation s'appelle la pulsation de Fröhlich notée ω_F [71, 72]. Supposons maintenant que la sphère se situe dans le vide, de telle sorte que $\epsilon_m = 1$. La résonance doit alors se produire si $\epsilon_{\text{sphère}}(\omega_F) = -2$. Ainsi, si l'on décompose $\epsilon_{\text{sphère}}$ en la somme de sa partie réelle $\epsilon'_{\text{sphère}}$ et de sa partie imaginaire $\epsilon''_{\text{sphère}}$, nous arrivons à :

$$\epsilon'_{\text{sphère}}(\omega_F) = -2 \quad \text{et} \quad \epsilon''_{\text{sphère}}(\omega_F) \simeq 0 \quad (6.3)$$

Il est aussi possible d'établir une estimation de ω_F propre au matériau étudié. Par exemple, si l'on se place dans le cas d'une sphère dont la fonction diélectrique est décrite par un simple oscillateur de Lorentz (cf. annexe B), la pulsation de Fröhlich théorique ω_F^{th} est alors définie par :

$$(\omega_F^{\text{th}})^2 = \omega_T^2 \left(\frac{\epsilon_{\text{stat}} + 2}{\epsilon_{\infty} + 2} \right) \quad (6.4)$$

avec : ω_T la pulsation des phonons optiques transverse pour les grands vecteurs d'onde,
 ϵ_{stat} la valeur de la fonction diélectrique en régime statique ($\omega \rightarrow 0$),
 ϵ_{∞} la valeur de la fonction diélectrique pour les faibles longueurs d'ondes ($\omega \rightarrow \infty$)

Il est important de préciser que les relations que nous venons de voir ne sont exactes que dans le cas des sphères infiniment petites. Pour les sphères de tailles finies mais respectant encore la condition $x \ll 1$, une meilleure approximation peut être donnée par [71] :

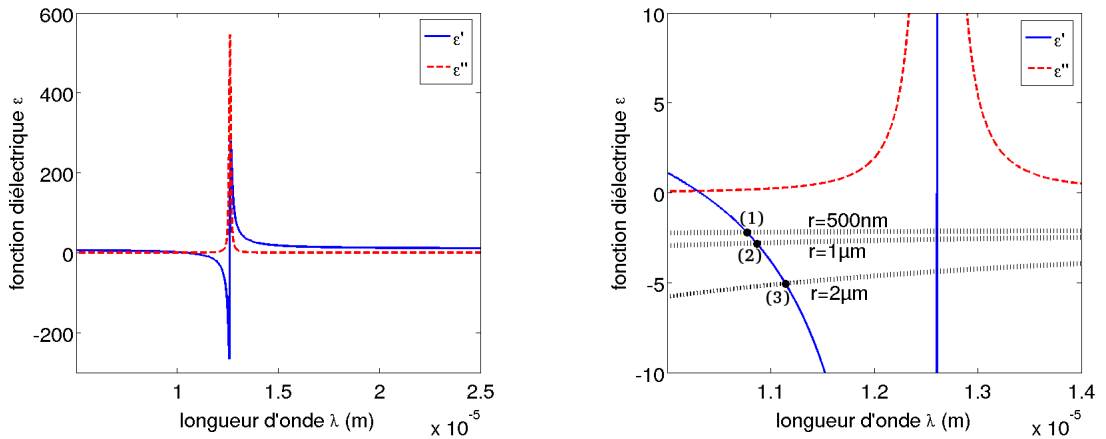
$$\epsilon_{\text{sphère}}(\omega) = - \left(2 + \frac{12}{5} x^2 \right) \epsilon_m(\omega) \quad (6.5)$$

L'intérêt de l'ensemble des relations présentées dans ce paragraphe est d'estimer la position des pics de résonance d'une sphère. Cependant, cette estimation reste peu précise, surtout lorsque le paramètre de taille est voisin ou supérieur à l'unité ($x \gtrsim 1$), comme nous le montrons dans la sous-section suivante.

6.1.2 Étude d'une sphère de SiC

Étude théorique

Pour commencer, regardons l'évolution des parties réelle et imaginaires de la fonction diélectrique relative, en fonction de la longueur d'onde, sur les figures 6.1(a) et 6.1(b).



(a) Fonction diélectrique du SiC - parties réelle et imaginaire

(b) Agrandissement de la fonction diélectrique au voisinage des longueurs d'onde de résonance

FIG. 6.1: Variation en fonction de la longueur d'onde de la fonction diélectrique du carbure de silicium - estimation des fréquences de résonance

Les lignes noires hachurées sont définies par l'équation 6.5 pour des sphères de rayon $a = 500$ nm, $a = 1 \mu\text{m}$ et $a = 2 \mu\text{m}$ placées dans le vide ($\epsilon_m = 1$). L'intersection de ces droites avec la partie réelle ϵ' nous donne une estimation de la position des pics de

6.1. RÉSONANCE DES SPHÈRES

résonance dans chacune des trois situations :

- La première intersection (à la longueur d'onde la plus faible) correspond au mode de Fröhlich. La pulsation de Fröhlich estimée ω_F^{est} va donc de $175.02 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$ (i.e. $\lambda = 10.77 \mu\text{m}$) pour $a = 500 \text{nm}$, à $169.21 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$ (i.e. $\lambda = 11.14 \mu\text{m}$) pour $a = 2 \mu\text{m}$. Il est possible de comparer ces valeurs à la pulsation de Fröhlich théorique qui, si l'on se rapporte à l'équation 6.4, vaut $\omega_F^{\text{th}} = 175.6 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$ dans le cas du SiC. Nous voyons que ω_F^{est} se rapproche de ω_F^{th} lorsque le rayon a (et donc le paramètre de taille x) diminue.

- La seconde intersection se fait à la pulsation $\omega = 149.5 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$ (i.e. $\lambda = 12.61 \mu\text{m}$) pour chacune des trois sphères. Il s'agit de la pulsation optique transverse ω_T spécifique au carbure de silicium (cf. annexe B).

Cas de la sphère dans le vide

Nous traitons ici le cas d'une sphère de SiC placée dans le vide et illuminée par une onde plane. Trois tailles différentes de sphères sont étudiées, à savoir $a = 500 \text{nm}$, $a = 1 \mu\text{m}$ et $a = 2 \mu\text{m}$. Les résultats obtenus sont donnés par la théorie de Mie. La première figure (FIG. 6.2(a)) représente la variation de la Differential Scattering Cross Section (DSCS) obtenue sur $4\pi \text{sr}$ en fonction de la longueur d'onde. Cependant, il est difficile d'interpréter ce graphe, notamment en ce qui concerne la comparaison des trois résultats de simulation, du fait de la forte dominance de la DSCS dans le cas de la sphère de $2 \mu\text{m}$ de rayon. Cette dominance étant uniquement due au volume important de cette dernière, nous avons choisi, sur la figure 6.2(b), de normaliser les différentes DSCS par le volume des sphères correspondantes. Dans ce cas, nous voyons que la DSCS normalisée relative à la sphère de $1 \mu\text{m}$ de rayon devient prédominante.

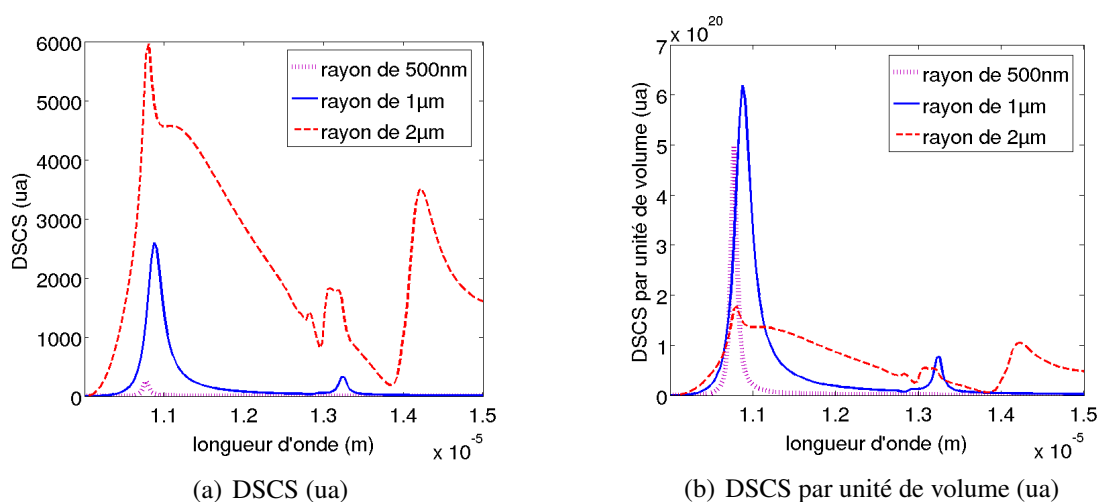


FIG. 6.2: Variation en fonction de la longueur d'onde de la "differential scattering cross section" d'une sphère de SiC dans le vide éclairée par une onde plane - calcul sur $4\pi \text{sr}$ - étude de l'influence du rayon de la sphère

Intéressons-nous à présent à la position des pics de résonance. Tout d'abord, en ce qui concerne les pics de Fröhlich, nous constatons que les pulsations de Fröhlich réelles ω_F sont très proches des pulsations estimées ω_F^{est} dans le cas des sphères de rayon 500nm ($\omega_F = 175.02 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$) et $1\mu\text{m}$ ($\omega_F = 173.73 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$). En revanche, lorsque le rayon devient trop grand, l'allure de la DSCS devient trop complexe pour que nous puissions déceler la pulsation de Fröhlich avec certitude. En effet, la condition $x \ll 1$ n'est plus vérifiée, ce qui laisse apparaître de nouveaux modes de surface non-décrits par l'hypothèse des petites sphères.

Pour ce qui est des seconds pics, nous pouvons voir que leur intensité est bien plus faible que celle des pics de Fröhlich. Cela est essentiellement dû à la forte valeur de ϵ'' à ces longueurs d'onde. De plus, en ce qui concerne leur positionnement, nous observons une forte différence entre les valeurs réelles ($\omega_F = 147.84 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$ pour $a = 500\text{nm}$, $\omega_F = 142.26 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$ pour $a = 1\mu\text{m}$) et la valeur estimée $\omega_T = 149.5 \times 10^{12} \text{rad.s}^{-1}$. Nous pouvons toutefois noter que l'écart se réduit lorsque la taille de la sphère diminue. Enfin, pour $a = 2\mu\text{m}$, nous rencontrons les mêmes difficultés que celles décrites ci-dessus, du fait de la taille importante de la sphère.

Cas de la sphère au dessus d'une interface

Nous étudions ici le cas d'une sphère de SiC positionnée dans le vide à 200nm d'un échantillon de silicium ($n_{\text{éch}}$ dans l'infrarouge moyen). Les trois rayons étudiés précédemment sont à nouveau utilisés (500nm, $1\mu\text{m}$ et $2\mu\text{m}$). La sphère est éclairée par une onde évanescente créée par réflexion totale d'une onde plane au niveau de l'interface. L'angle d'incidence est $\theta_i = 45^\circ$. Les deux polarisations TE et TM de l'onde incidente sont successivement prises en compte.

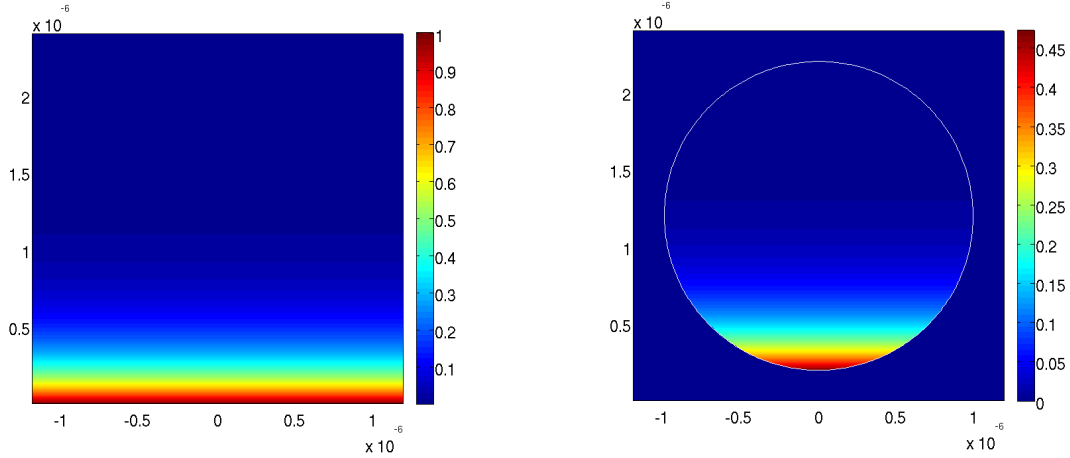
Nos travaux se basent sur le calcul de la DSCS sur $2\pi\text{sr}$ (au dessus de l'interface), grâce au code T-matrix développé par l'équipe de T. Wriedt et accessible dans le CD-ROM fourni avec le livre de Doicu *et al* [12]. Là encore, une normalisation des résultats est nécessaire car nous ne cherchons pas à déterminer quelle sphère diffuse le plus (dans ce cas, il suffirait d'en augmenter la taille), mais plutôt quelle sphère présente la DSCS la plus importante par unité de volume. Cependant, il n'est plus judicieux de normaliser directement la DSCS par le volume de la sphère. En effet, cette dernière n'est pas éclairée de façon homogène du fait de la décroissance exponentielle de l'onde évanescente au dessus de l'interface, comme le montrent les figures 6.3(a) et 6.3(b).

La normalisation que nous avons choisie tient donc compte du volume de la sphère et de son degré d'illumination, de telle sorte que :

$$\text{DSCS normalisée}(\lambda) = \frac{\text{DSCS}(\lambda)}{\int_{V_{\text{sphère}}} I_{\text{éva}}(z, \lambda) dV} \quad (6.6)$$

où $I_{\text{éva}}$ est le module au carré de l'intensité de l'onde au dessus de l'interface.

6.1. RÉSONANCE DES SPHÈRES



(a) Champ électrique évanescent (ua) au dessus de l'interface

(b) Champ électrique évanescent (ua) dans la zone occupée par la sphère de $1\mu\text{m}$ de rayon

FIG. 6.3: Intensité du champ électrique évanescent au dessus d'un échantillon de silicium ($n_{\text{éch}} = 3.42$) dans le cas d'une onde incidente en situation de réflexion totale ($\theta_i = 45^\circ$)

Dans le cas d'une onde évanescente créée par réflexion totale (cf. annexe A), $I_{\text{éva}}$ est définie par :

$$I_{\text{éva}}(z, \lambda) = \left| \exp \left[-z \left(k_{\text{éch}}(\lambda) \sqrt{\left(\frac{n_{\text{éch}}}{n_{\text{air}}} \sin \theta_i \right)^2 - 1} \right) \right] \right|^2 \quad (6.7)$$

Analysons maintenant les résultats obtenus dans le cas d'une onde incidente polarisée TM, avec sur la figure 6.4(a) la DSCS donnée directement par le calcul T-matrix, et sur la figure 6.4(b) la DSCS normalisée par la méthode présentée ci-dessus.

Nous pouvons constater que les pics de résonance se situent globalement aux mêmes fréquences que dans le cas des sphères dans le vide. De plus, il est important de remarquer que le mode de Fröhlich de la sphère de $2\mu\text{m}$ de rayon est bien plus marqué que lorsque cette dernière se trouve dans le vide. Ceci fait que la DSCS, bien que normalisée, reste maximale pour la sphère la plus massive. Cependant, cette augmentation relativement à la sphère de $1\mu\text{m}$ de rayon reste faible.

Si nous passons au cas d'une onde incidente polarisée TE. Les résultats sont présentés sur les figures 6.5(a) et 6.5(b). Là encore, les pics de résonances se trouvent aux mêmes fréquences que précédemment. Notons toutefois une brusque augmentation du second pic (qui se trouvent, rappelons-le, au niveau des basses fréquences) pour les sphères de rayon $1\mu\text{m}$ et $2\mu\text{m}$. Enfin, si l'on compare les DSCS normalisées obtenues pour chacune des trois sphères, nous voyons que celle de $1\mu\text{m}$ de rayon domine largement.

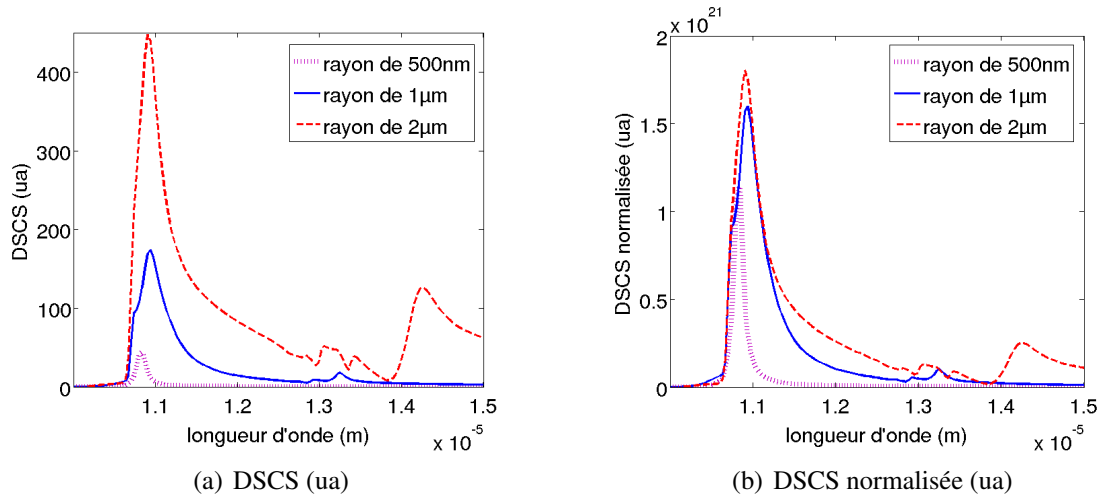


FIG. 6.4: Variation en fonction de la longueur d'onde de la "differential scattering cross section" d'une sphère de SiC éclairée par une onde évanescente (polarisation TM) au dessus d'un échantillon d'indice optique $n_{\text{éch}} = 3.42$ - calcul sur $2\pi sr$ au dessus de l'interface - étude de l'influence du rayon de la sphère

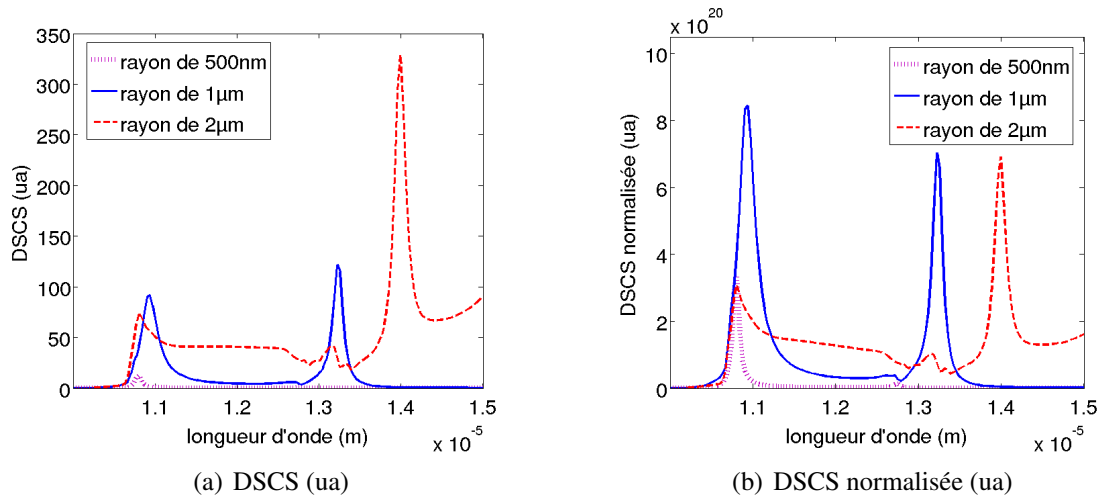


FIG. 6.5: Variation en fonction de la longueur d'onde de la "differential scattering cross section" d'une sphère de SiC éclairée par une onde évanescente (polarisation TE) au dessus d'un échantillon d'indice optique $n_{\text{éch}} = 3.42$ - calcul sur $2\pi sr$ au dessus de l'interface - étude de l'influence du rayon de la sphère

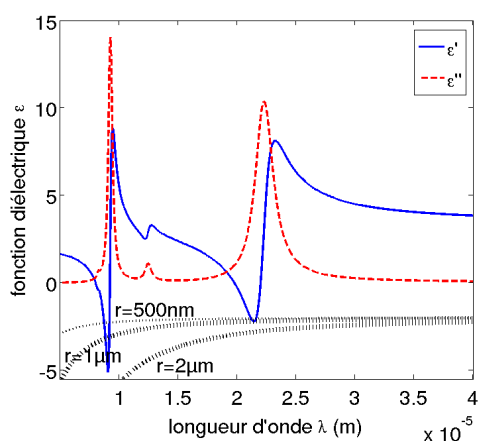
6.1.3 Étude d'une sphère de verre SiO₂

Étude théorique

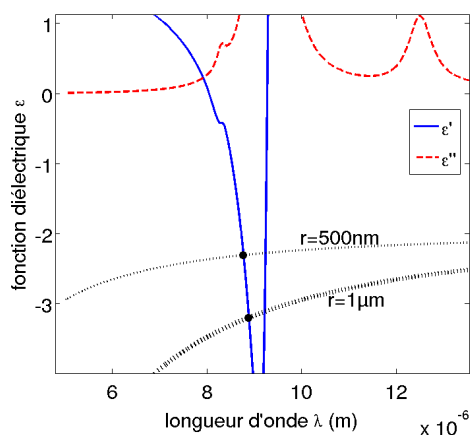
L'étude précédente est reprise dans le cas d'une sphère de verre susceptible elle aussi de présenter des pics de résonance. Regardons à nouveau l'évolution de la fonction diélectrique relative $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$ en fonction de la longueur d'onde λ sur la figure 6.6. Là encore, les lignes noires sont définies par la relation $\epsilon_{\text{sphère}}(\omega) = -\left(2 + \frac{12}{5}x^2\right)$ pour

6.1. RÉSONANCE DES SPHÈRES

des sphères de rayon 500nm, 1 μ m et 2 μ m. Ainsi, nous pouvons prévoir des phénomènes de résonance à des longueurs d'onde proche de 9 μ m et 21.5 μ m. De plus, nous remarquons que la courbe noire relative à la sphère de 2 μ m de rayon n'intersecte pas la partie réelle de la fonction diélectrique. Il est important de préciser que cela ne signifie pas que cette sphère ne présente aucune résonance dans ce spectre de longueur d'onde. En effet, l'équation donnée ci-dessus n'est valable que lorsque l'hypothèse des petites sphères est vérifiée ($x \ll 1$), ce qui n'est évidemment pas le cas ici. Par exemple, à la longueur d'onde $\lambda = 9\mu\text{m}$, le paramètre de taille de la sphère de 2 μ m de rayon vaut $x = \frac{2\pi a}{\lambda} \simeq 1.4$.



(a) Fonction diélectrique du verre SiO₂ - parties réelle et imaginaire



(b) Agrandissement de la fonction diélectrique au voisinage des longueurs d'onde de résonance

FIG. 6.6: Variation en fonction de la longueur d'onde de la fonction diélectrique du verre SiO₂ - estimation des fréquences de résonance

Cas de la sphère dans le vide

Ici, nous étudions le cas de l'illumination de sphères de verre SiO₂ de rayons 500nm, 1 μ m et 2 μ m par une onde plane. Les résultats obtenus grâce à la théorie de Mie sont représentés sur les figures 6.7(a) pour la DSCS et 6.7(b) pour la DSCS normalisée par le volume de la sphère. Comme le prévoit la théorie, nous observons des pics de résonance à la longueur d'onde $\lambda \simeq 9\mu\text{m}$. D'autres pics sont présents à $\lambda \simeq 21\mu\text{m}$, mais sont trop faibles pour être clairement observés sur ces représentations linéaires. En outre, comme dans le cas du SiC, la sphère la plus massive ($a = 2\mu\text{m}$) présente de multiples pics dus à l'apparition de nouveaux modes de surface, prouvant que l'hypothèse des petites sphères n'est plus vérifiée. Enfin, si l'on s'intéresse à la DSCS normalisée, nous constatons qu'elle est maximale dans le cas de la sphère de rayon 1 μ m.

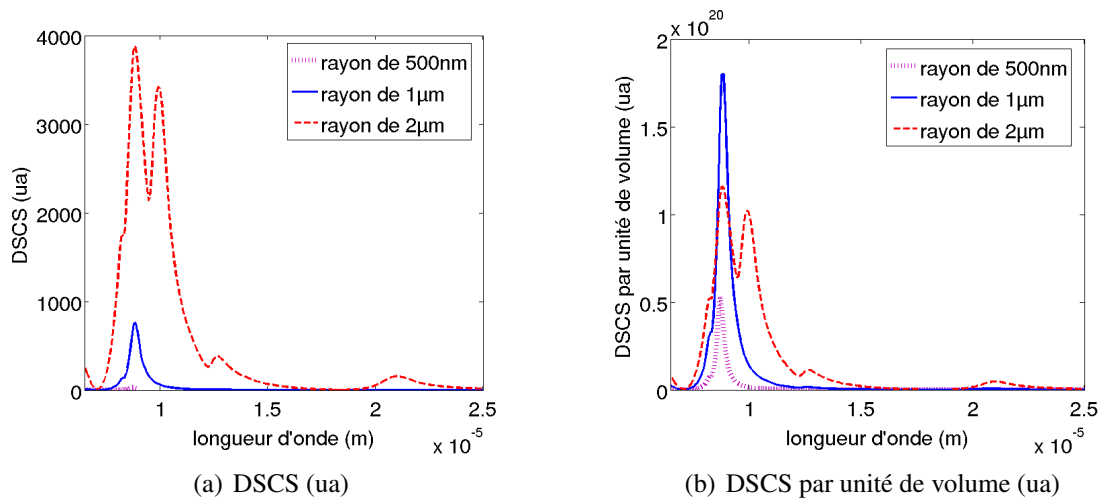


FIG. 6.7: Variation en fonction de la longueur d’onde de la “differential scattering cross section” d’une sphère de SiO₂ dans le vide éclairée par une onde plane - calcul sur $4\pi sr$ - étude de l’influence du rayon de la sphère

Cas de la sphère au dessus d’une interface

Ici, la sphère de verre SiO₂ est placée à 200nm de la surface d’un échantillon de silicium ($n_{\text{éch}} = 3.42$ dans l’infrarouge moyen) et est éclairée par une onde évanescente. Les différents paramètres sont identiques à ceux décrits dans le cas de l’étude de la sphère de SiC (cf. sous-section 6.1.2).

Nous commençons par traiter le cas de l’onde incidente polarisée TM. La DSCS, donnée par la T-matrix, et la DSCS normalisée (normalisation tenant compte du volume de la sphère et de son degré d’illumination) sont représentées respectivement sur les figures 6.8(a) et 6.8(b). Nous pouvons d’abord constater que la résonance est plus marquée à la longueur d’onde $\lambda \simeq 21\mu\text{m}$ que lorsque la sphère se trouve dans le vide (sans échantillon à proximité). Cela est dû au fait que l’onde éclairant la sphère est moins évanescente pour les grandes longueurs d’onde. De plus, si l’on observe la DSCS normalisée, nous voyons qu’elle est légèrement supérieure pour la sphère de 1µm de rayon.

Si l’on passe à présent au cas de l’onde incidente polarisée TE, nous traçons la DSCS et la DSCS normalisée sur les figures 6.9(a) et 6.9(b). En premier lieu, en ce qui concerne la sphère de rayon 2µm, nous remarquons que le mode de surface dominant a changé et ne se situe plus à $\lambda \simeq 9\mu\text{m}$ mais à $\lambda \simeq 10\mu\text{m}$. De plus, nous pouvons à nouveau constater que la DSCS normalisée domine dans le cas d’une sphère de 1µm de rayon.

À partir de cette étude systématique des résonances existant dans les petites sphères diélectriques, nous allons voir dans la section suivante de ce chapitre comment tirer avantages des comportements particuliers que présente cette classe d’objets. Dans le but d’optimiser le fonctionnement d’un microscope TRSTM, l’association pointe/sphère va être étudiée.

6.2. ÉTUDE D'UN SYSTÈME POINTE/SPHÈRE

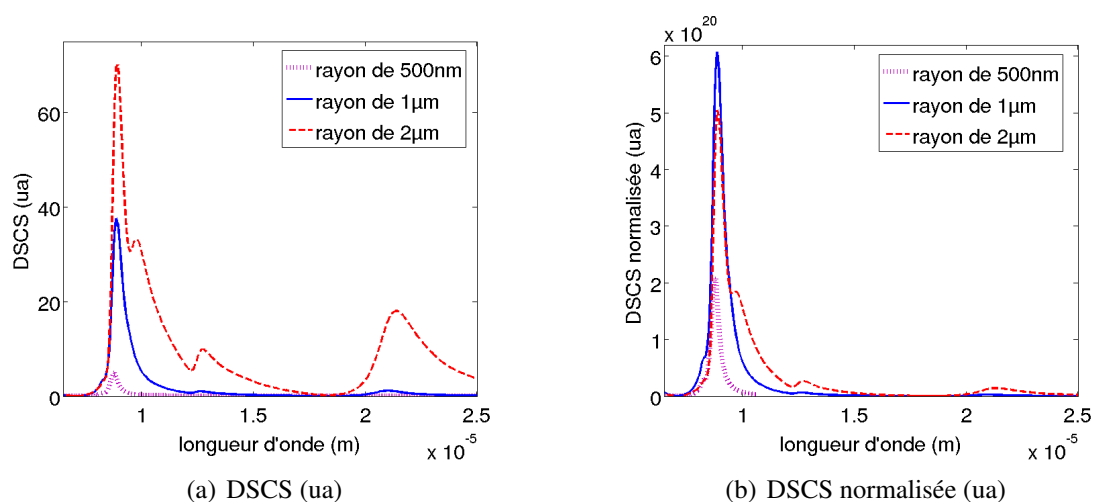


FIG. 6.8: Variation en fonction de la longueur d'onde de la "differential scattering cross section" d'une sphère de SiO_2 éclairée par une onde évanescente (polarisation TM) au dessus d'un échantillon d'indice optique $n_{\text{éch}} = 3.42$ - calcul sur $2\pi\text{sr}$ au dessus de l'interface - étude de l'influence du rayon de la sphère

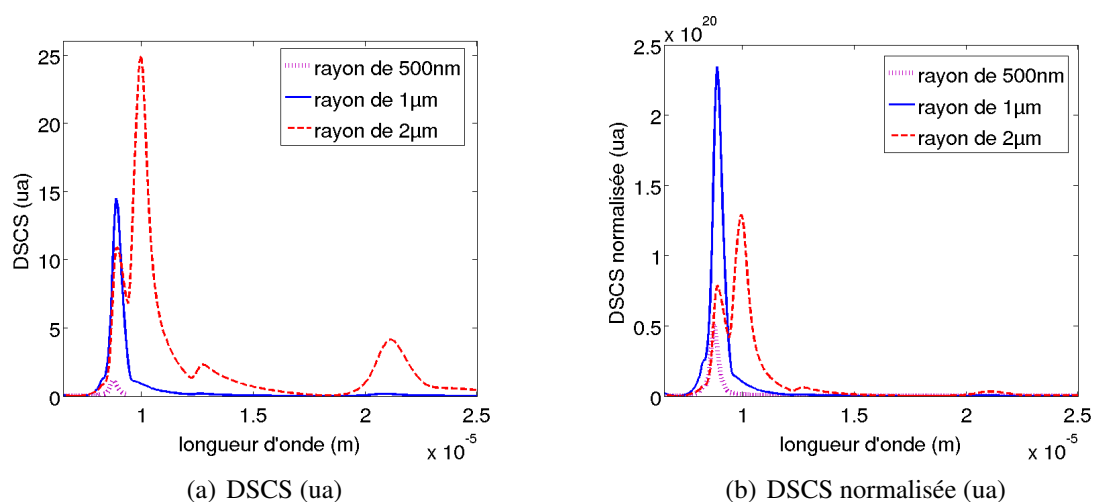


FIG. 6.9: Variation en fonction de la longueur d'onde de la "differential scattering cross section" d'une sphère de SiO_2 éclairée par une onde évanescente (polarisation TE) au dessus d'un échantillon d'indice optique $n_{\text{éch}} = 3.42$ - calcul sur $2\pi\text{sr}$ au dessus de l'interface - étude de l'influence du rayon de la sphère

6.2 Étude d'un système pointe/sphère

La section précédente nous a montré que sous certaines conditions, des sphères de petites tailles par rapport à la longueur d'onde pouvaient présenter des caractéristiques intéressantes, notamment des phénomènes de résonance à des longueurs d'onde bien précises. Nous allons voir dans cette section l'influence que peuvent avoir de tels objets s'ils sont introduits dans un montage de microscopie optique en champ proche en tant que

particule diffusante fixée à l'extrémité d'une pointe AFM. Les figures 6.10(a) et 6.10(b) nous montrent deux exemples de pointes commerciales avec en (a) le cas d'une sphère métallique (Al) de 150nm de rayon fixée à une pointe en tungstène, et en (b) le cas d'une sphère massive métallique (Au) de $2\mu\text{m}$ de rayon.

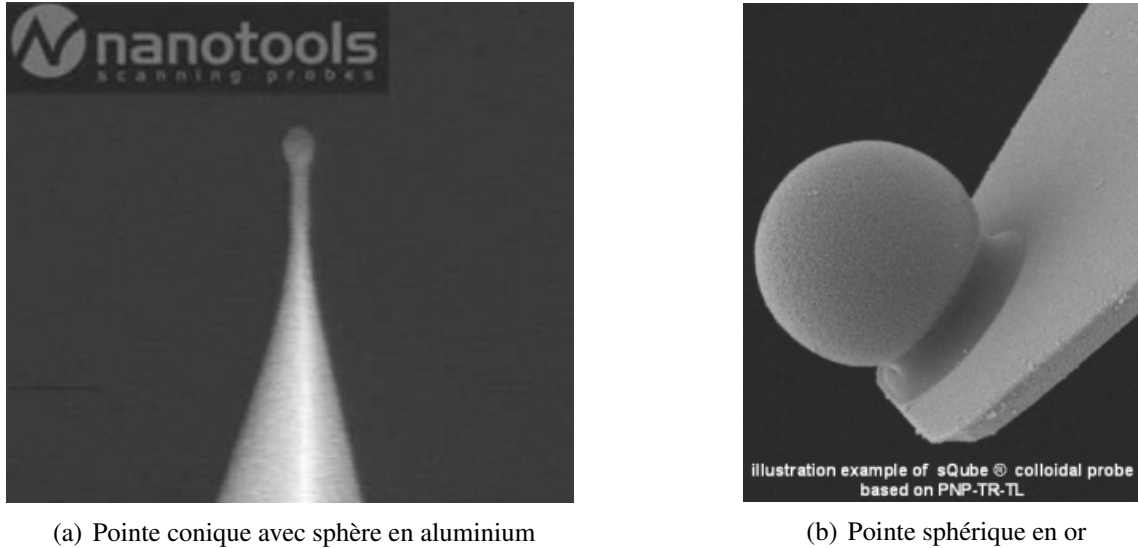


FIG. 6.10: Exemples de pointes commerciales d'extrémités sphériques

Ce type de configurations préexistantes offrent de grands avantages lorsque l'étude se fait dans le visible ou dans l'infrarouge proche, notamment avec les sphères en or qui présentent des pics de résonance utilisables pour ce spectre de longueurs d'onde [73, 74, 75]. De manière analogue, nous cherchons ici des structures résonantes dans l'infrarouge moyen, pour des longueurs d'onde comprises entre $2\mu\text{m}$ et $16\mu\text{m}$, ce qui correspond typiquement à la sensibilité du capteur infrarouge de notre montage TRSTM (cf. section 2.4). Nous avons donc choisi d'étudier des pointes dont l'extrémité est remplacée par une sphère de SiC ou de verre SiO_2 de $1\mu\text{m}$ de rayon. La taille a été choisie en accord avec les résultats donnés par la méthode T-matrix (pour plus de détail, se reporter à la première section de ce chapitre) d'après lesquels la DSCS (normalisée par rapport au volume et au degré d'illumination de l'objet - cf section 6.1.2) est maximale pour de telles sphères.

6.2.1 Paramètres de calcul

L'ensemble des paramètres sont identiques à ceux décrits dans la section 5.1.1 du chapitre précédent. La seule différence vient du fait que la pointe conique de $20\mu\text{m}$ de hauteur voit son extrémité tronquée sur une hauteur de $2\mu\text{m}$. Une sphère de $1\mu\text{m}$ de rayon (10 mailles) est alors fixée au niveau de la section (cf. FIG. 6.11).

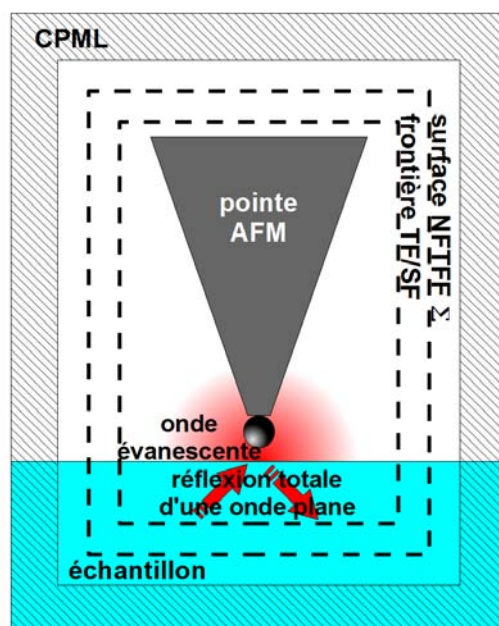


FIG. 6.11: Modélisation de la technologie ASNOM par FDTD

6.2.2 Cas d'une sphère de SiC

Sphère fixée à une pointe en tungstène

Pour commencer cette étude, nous avons choisi d'étudier le cas d'une sphère en SiC fixée à une pointe en tungstène. Les résultats, représentant l'estimation de l'intensité du signal mesuré pour chacune des deux configurations de l'optique de collection (placée soit dans l'axe (top), soit sur le côté de la pointe (side) - cf section 5.1.3), sont donnés sur les figures 6.12(a) et 6.12(b). Si nous comparons ces résultats à ceux obtenus dans le cas d'une pointe simple en tungstène (i.e. sans sphère - résultats aussi représentés sur les figures 6.12(a) et 6.12(b)), nous voyons que la présence de la sphère améliore quelque peu la diffusion dans le cas d'une onde incidente polarisée TM. Cependant, il est difficile de distinguer un pic de résonance, et il est tout à fait possible que cette faible amélioration ne soit due qu'à l'augmentation du volume diffusant (il est important de rappeler que les résultats présentés ici ne sont pas normalisés par rapport au volume de l'objet). Nous pouvons toutefois noter que l'intensité du signal augmente brusquement à la longueur d'onde $\lambda = 11\mu\text{m}$, ce qui correspond au pic de résonance principal de la sphère de SiC seule au dessus de l'interface (cf. FIG. 4.19(a)).

L'augmentation du signal est bien plus visible dans le cas d'une onde incidente polarisée TE. En effet, nous retrouvons les deux pics de résonances que nous avons déjà observé dans le cas d'une sphère seule au dessus d'un échantillon de silicium (cf. FIG. 6.5(b) de la section 6.1.2). Si l'on s'attarde sur le second pic, à la longueur d'onde $\lambda = 13.2\mu\text{m}$, nous pouvons observer un signal 170 fois supérieur à ce que l'on obtient avec la pointe simple.

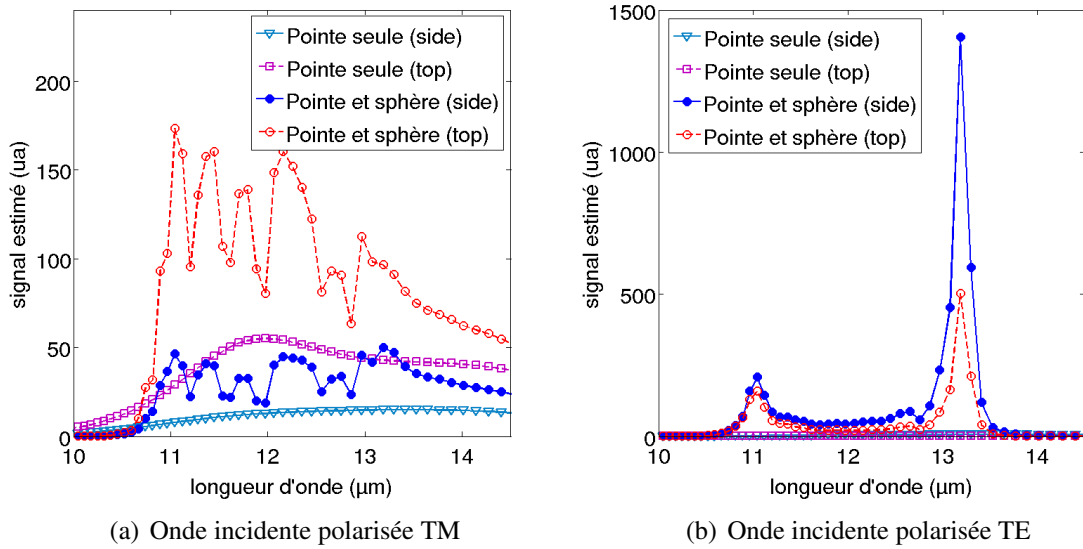


FIG. 6.12: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène dont l'extrémité est remplacée par une sphère en SiC - illumination par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$) - étude de l'influence de la longueur d'onde et comparaison aux résultats obtenus dans le cas d'une pointe seule

Sphère fixée à une pointe en SiC

La pointe en tungstène est maintenant remplacée par une pointe en SiC. Nous espérons ici l'apparition d'un phénomène de résonance entre la sphère et la pointe de même matériau.

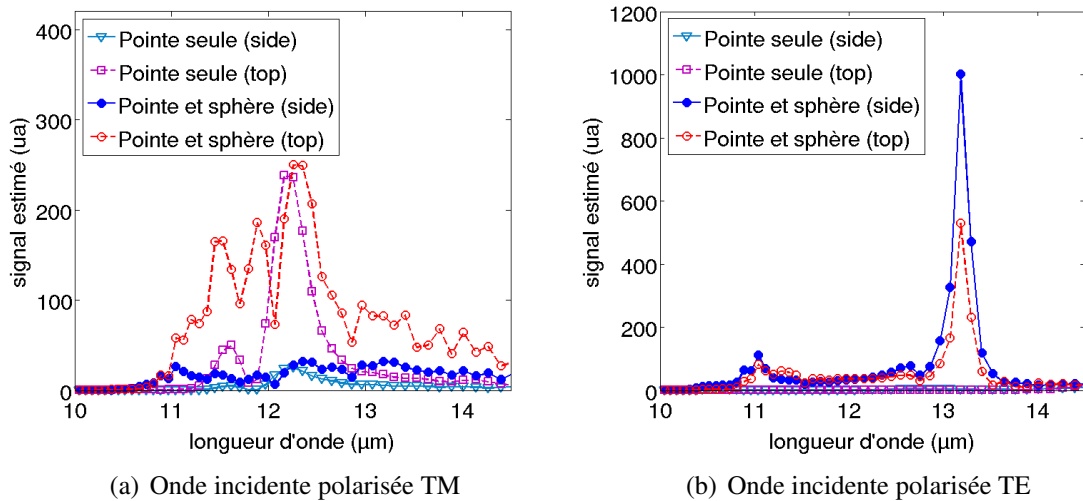


FIG. 6.13: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en SiC dont l'extrémité est remplacée par une sphère en SiC - illumination par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$) - étude de l'influence de la longueur d'onde et comparaison aux résultats obtenus dans le cas d'une pointe seule

6.2. ÉTUDE D'UN SYSTÈME POINTE/SPHÈRE

Dans le cas d'onde incidente polarisée TM (cf. FIG. 6.13(a)), nous voyons une faible augmentation, notamment au niveau du pic (à $\lambda = 12.2\mu\text{m}$) déjà observé pour la pointe en SiC seule. En revanche, si l'onde incidente est polarisée TE (cf. FIG. 6.13(b)), l'intensité du second pic ($\lambda = 13.2\mu\text{m}$) baisse fortement si l'on compare les figures 6.13(b) et 6.12(b), et cette diminution est d'autant plus importante lorsque l'optique de collection est située sur le côté de la pointe. Ainsi, nous pouvons en déduire que le phénomène de résonance que nous attendions entre la pointe et la sphère, tous deux en SiC, n'apparaît pas, et cette nouvelle configuration tend à réduire le signal diffusé par la pointe.

Ainsi, lors de l'utilisation d'une sphère en SiC, la pointe en tungstène est préférable à celle en SiC, ce qui constitue une bonne nouvelle. En effet, le tungstène est un matériau très courant dans la fabrication des pointes AFM, ce qui n'est pas le cas du carbure de silicium.

6.2.3 Cas d'une sphère de verre SiO_2

Sphère fixée à une pointe en tungstène

Nous reprenons l'étude précédente pour une structure pointe en tungstène/sphère en verre, ce type de sphères présentant lui aussi un pic de résonance dans le spectre de longueurs d'onde nous intéressant (infrarouge moyen).

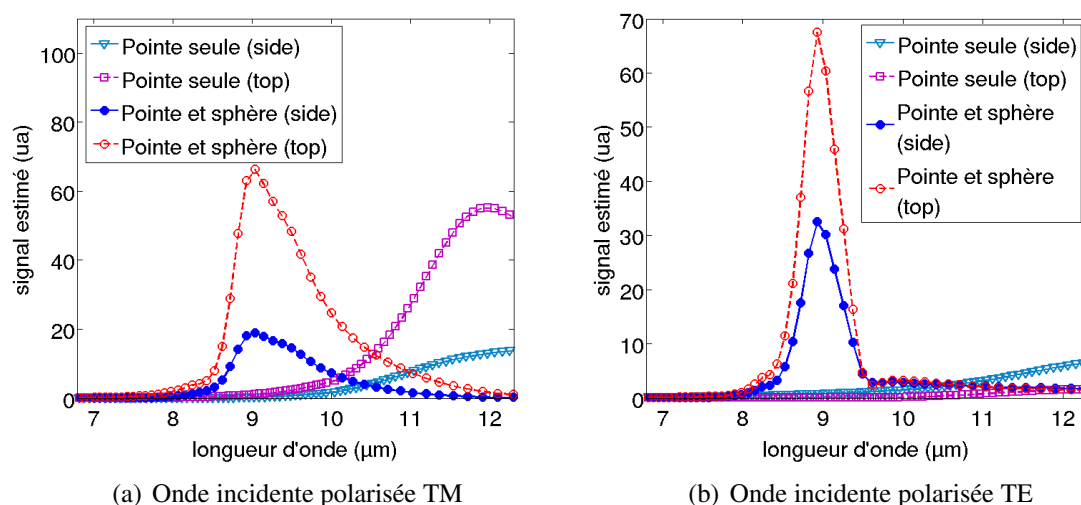


FIG. 6.14: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en tungstène dont l'extrémité est remplacée par une sphère en verre SiO_2 - illumination par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$) - étude de l'influence de la longueur d'onde et comparaison aux résultats obtenus dans le cas d'une pointe seule

Comme dans le cas de la pointe en verre seule, les calculs ont été fait pour des longueurs d'onde comprises entre $7\mu\text{m}$ et $12\mu\text{m}$, dans le but de centrer notre spectre de longueur d'onde sur le pic de résonance que nous attendons. Nous pouvons observer, sur les figures 6.14(a) et 6.14(b), la présence de ce pic à la longueur d'onde $\lambda = 9\mu\text{m}$, et ce pour

chacune des deux polarisations, comme le laissait supposer l'étude de la sphère de verre seule au dessus de la surface de l'échantillon (cf. FIG. 6.8 et FIG. 6.9 de la section 6.1.3). L'intensité de ces pics reste cependant assez faible comparativement à ce qui a été calculé dans les paragraphes précédents. Cela est sûrement dû à la faible valeur de la longueur d'onde λ , ce qui induit que la hauteur caractéristique z_0 de l'onde évanescente est faible elle aussi. Le volume de la pointe éclairé par l'onde de surface s'en trouve donc réduit. Nous pouvons aussi remarquer que le signal est maximal lorsqu'il est collecté dans l'axe de la pointe, quelque soit la polarisation de l'onde incidente. Si l'on s'interroge maintenant sur l'utilité d'une sphère en verre dans le cas d'une pointe en tungstène, nous voyons que cette structure améliore l'intensité du signal diffusé pour des longueurs d'onde inférieures à $10\mu\text{m}$, mais qu'elle ne présente plus d'intérêt lorsque λ augmente. Il est toutefois important de préciser que la sphère de verre SiO_2 présente un second pic de résonance à la longueur d'onde $\lambda = 22\mu\text{m}$, mais nous avons choisi de ne pas l'étudier car il se trouve à l'extérieur du spectre qui nous intéresse (c'est à dire le spectre auquel est sensible notre capteur infrarouge). Ainsi, du fait de la faiblesse du signal comparé à celui obtenu dans le cas d'une sphère en SiC , notamment lorsque l'optique de collection est positionné sur le côté de la pointe, nous pouvons en conclure que ce type de structure diffusante est à moins efficace dans notre montage TRSTM.

Sphère fixée à une pointe en verre SiO_2

Pour les derniers calculs, nous remplaçons la pointe en tungstène par une pointe en verre, le but étant de rechercher un phénomène de résonance entre la pointe et la sphère de même matériau. Nous obtenons les résultats présentés sur les figures 6.15(a) et 6.15(b).

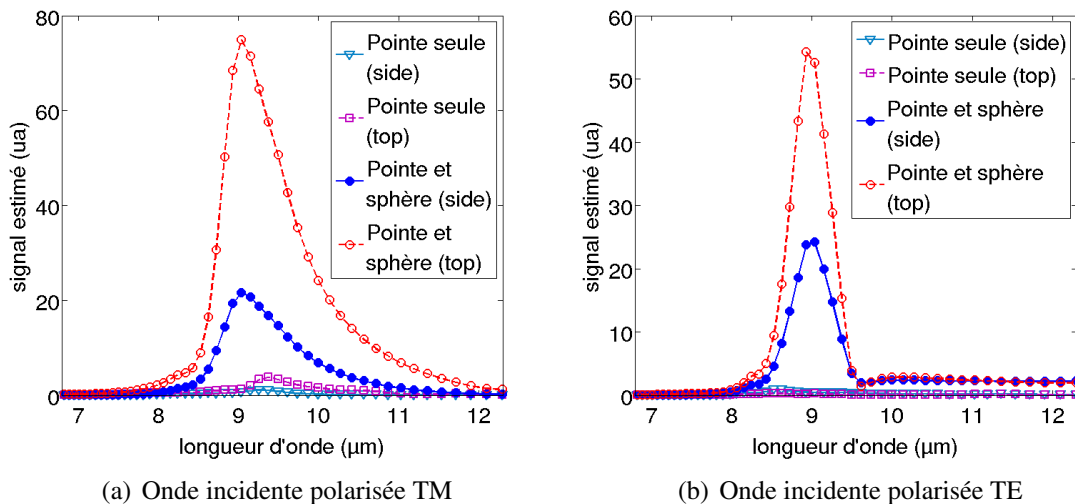


FIG. 6.15: Estimation du signal mesuré diffusé par une pointe en verre SiO_2 dont l'extrémité est remplacée par une sphère en verre SiO_2 - illumination par une onde évanescente ($\theta_i = 45^\circ$) - étude de l'influence de la longueur d'onde et comparaison aux résultats obtenus dans le cas d'une pointe seule

Nous observons que l'intensité des pics de résonance varie très peu pour cette nouvelle configuration. Ainsi, dans le cas d'une sphère en verre, le choix du matériau de la pointe (tungstène ou verre) n'est pas un critère primordial. Cependant, il est tout de même important de préciser que le fait d'ajouter une sphère de verre à l'extrémité d'une pointe de même matériau augmente grandement le signal si on le compare à celui diffusé par une simple pointe en verre.

Conclusion

Dans le chapitre 5, la modélisation du comportement optique d'une pointe de microscope TRSTM s'était focalisée sur l'étude de pointes simples de par leurs formes (coniques ou paraboliques) et leur matériau (matériau homogène dans l'ensemble de la pointe).

Dans le chapitre que nous venons de voir (i.e. le chapitre 6), nous nous sommes intéressés aux avantages (et inconvénients) qu'apporte l'utilisation de pointes dont l'extrémité est remplacée par une sphère (en SiC ou en verre SiO_2). Ce travail s'est déroulée en deux étapes, dont la première s'est concentrée sur l'étude théorique de la diffusion de sphères placées d'abord dans le vide, puis à proximité d'une interface. Pour illustrer nos propos, divers résultats, donnés par la théorie de Mie et la méthode T-matrix, ont été interprétés. Cela nous a permis de mettre en avant l'importance que présentent les modes de surface pour cette famille d'objets que sont les micro-sphères, notamment en ce qui concerne la forte augmentation de l'intensité du signal diffusé à certaines longueurs d'onde. Dans la seconde étape de ce travail, nous nous sommes attelés à modéliser le comportement optique de structures pointe/sphère, chacune des deux parties de l'objet (pointe et sphère) pouvant être constituée d'un matériau différent. Grâce à ces travaux, et compte-tenu de la configuration de notre montage TRSTM, nous avons conclu que, parmi les systèmes modélisés, celui présentant le plus d'avantages à nos yeux est la pointe en tungstène couplée à une sphère en SiC. En ce qui concerne la pointe, ce type de sonde est largement répandu dans le commerce. En revanche, il nous faut rechercher un organisme capable de fabriquer des sphères de SiC de $1\mu\text{m}$ de rayon.

Enfin, nous profitons de cette conclusion de chapitre pour débattre d'un critère très important dont nous n'avons parlé que de façon sommaire. Il s'agit de la résolution spatiale d'une image TRSTM, et plus généralement d'une image ASNOM. Celle-ci est directement reliée au volume et à la forme de l'extrémité de la pointe éclairée par les ondes évanescentes. Ainsi, l'augmentation du volume présent en zone de champ proche (et donc du volume diffusant), bien qu'elle soit favorable à l'amélioration du signal mesuré, est aussi à l'origine d'une baisse de la résolution. Cependant, cette dégradation devrait en théorie s'amoinrir au fur et à mesure que la profondeur de pénétration des ondes de surface augmente. En effet, dans un tel cas, la proportion de la pointe se trouvant en zone de champ proche s'accroît, et l'augmentation du volume par l'ajout d'une sphère de taille raisonnable par rapport à la longueur d'onde devrait avoir de moins en moins d'influence sur

la résolution de l'image. De plus, l'augmentation de l'intensité du signal par l'utilisation d'une sphère facilite l'extraction de ce signal du bruit ambiant, et permet d'obtenir des images TRSTM et ASNOM moins bruitées, ce qui présente un avantage supplémentaire de ce type de sonde.

Conclusion et perspectives

Au cours de cette thèse, nous avons pu approcher du domaine très riche et très vaste que constituent les nanotechnologies via l'étude des ondes de surface, et notamment des ondes issues du champ proche thermique. En effet, le contexte scientifique relatif à ce domaine de recherche est marqué depuis peu par d'importantes découvertes telles que l'observation de phénomènes de cohérences spatiales ou fréquentielles du rayonnement thermique évanescents, ou de la forte augmentation de la densité d'énergie électromagnétique au voisinage immédiat d'une interface optique [1, 2, 3, 4, 5, 6]. C'est dans ce contexte qu'a été introduit, en 2006 par l'équipe de Y. de Wilde [7], un microscope AS-NOM de nouvelle génération, à savoir le microscope TRSTM (Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy), destiné à mesurer directement le champ proche thermique par le biais d'une sonde diffusante. Cette technologie innovante permet d'établir des cartographies thermiques de résolution proche de la dizaine de nanomètres, bien au delà des performances des capteurs infrarouges classiques.

Dans la première partie de ce manuscrit, nous nous sommes d'abord attachés (dans le chapitre 1) à la description de concepts constituant le fil directeur de l'ensemble de nos travaux, tels que le champ proche optique ou les ondes électromagnétiques évanescentes. La mise en lumière de ces notions fondamentales nous a permis de réaliser l'étude théorique portant sur l'estimation de la densité d'énergie électromagnétique à proximité d'une interface entre deux milieux. Le but d'une telle information était de déterminer les échantillons pouvant présenter des caractéristiques intéressantes dans l'infrarouge moyen. En cela, le carbure de silicium (SiC) et le verre SiO₂ se sont révélés être des matériaux prometteurs.

Ensuite, dans le chapitre 2, nous avons décrit le développement de notre propre montage TRSTM. Lors de ces travaux expérimentaux, différents outils numériques ont pu être développés (sous Labview et matlab) afin de pouvoir détecter (par détection synchrone) et extraire (par la méthode des moyennes) les signaux utiles émis par la sonde. Bien que le bon fonctionnement de ces outils ait été confirmé par des tests faits sur différents types de signaux bruités réels ou virtuels, l'application à la détection d'ondes diffusées par la pointe n'a pas encore pu être réalisée. Cela est dû à certaines difficultés non encore résolues, notamment celle due à la réflexion du champ infrarouge lointain (émis par l'échantillon, notamment lorsque celui-ci est chauffé) sur le levier. Nous travaillons actuellement à la mise au point d'une méthode de fabrication de sonde en fil de tungstène (cf. annexe C). Du fait de la hauteur importante de ce type de pointe, cela devrait permettre de sortir le levier du champ de vision du capteur infrarouge, et donc de minimiser son influence sur la mesure. Finalement, des travaux ont commencé dans le cadre du développement d'une méthode de cartographie thermique par microscopie SThM (Scanning Thermal Microscopy). Cette méthode consiste à remplacer la sonde AFM par une nano-thermistance (ou thermocouple). Le but de cette nouvelle approche est de pouvoir comparer ces résultats avec ceux obtenus par TRSTM, en vue d'une confrontation des deux techniques, ainsi que d'une validation de la méthode TRSTM.

En parallèle à ces travaux expérimentaux, une grande partie de notre travail s'est portée sur l'étude numérique du comportement optique d'une sonde sans ouverture. L'intérêt est lié au fait que le champ diffusé par une sonde TRSTM dépend directement de la forme et du matériau de cette dernière. Ainsi, il est extrêmement complexe, voir impossible, d'interpréter une image TRSTM sans prendre en compte l'influence des deux paramètres sus-cités. La modélisation numérique que nous avons développée lors de nos travaux constitue donc une solution efficace à ce problème.

Ainsi, la seconde partie a présenté le développement des différents modèles numériques nécessaires au bon déroulement des nos simulations. La méthode utilisée consiste, dans un premier temps, à déterminer, dans le domaine temporel, les champs proches électrique et magnétique diffusés par l'objet que l'on désire étudier, lequel se trouve à proximité d'une interface entre deux milieux. Pour cela, le modèle FDTD 3D implémenté au laboratoire a été enrichi de modèles additionnels tels que la CPML (Convolutional Perfectly Matched Layer - condition aux limites absorbante permettant de décrire des milieux infinis), AFP-TFSF (Analytical Field Propagation Total Field/Scattered Field - condition aux limites permettant d'introduire une onde plane infinie dans un domaine de calcul composé de deux milieux semi-infinis distincts séparés par une interface), l'ADE (Auxiliary Differential Equation - modèle utilisé pour introduire des milieux dispersifs) et la CPT (Contour Path technique - méthode destinée à optimiser la description des surfaces courbes). La seconde étape consiste à calculer le champ électrique lointain diffusé par la particule, dans le domaine fréquentiel, à partir des champs proches électrique et magnétique obtenus via la FDTD. La transformation champ proche/champ lointain (NFTFF - Near Field To Far Field transformation) utilisée dans nos travaux se base sur l'utilisation des tenseurs de Green, lesquels permettent de prendre en compte la présence d'une interface optique à proximité de la particule.

Ces différents modèles ont subi de nombreux tests de validation dans le chapitre 4, tels que le cas du dipôle dont les résultats se sont révélés être en accord avec le formalisme de Sommerfeld. Ensuite, des cas plus complexes ont été étudiés, tels que celui de la sphère éclairée par une onde évanescente obtenue par réflexion totale d'une onde plane. Les résultats ont alors été comparés avec succès à ceux donnés par la méthode T-matrix.

Enfin, la troisième partie est focalisée sur l'application de ces méthodes à la modélisation de pointes TRSTM éclairées par une onde évanescente. Un grand nombre de paramètres ont été étudiés, tels que le matériau ou la géométrie de la pointe, sa distance par rapport à l'échantillon, ou encore la profondeur de pénétration ou la polarisation de l'onde. Dans le but d'optimiser le fonctionnement de la microscopie TRSTM, nous nous sommes interrogés, lors de chaque simulation, sur la position optimale de l'optique de collection destinée à recueillir le signal diffusé par la pointe. Il s'est avéré que dans la majorité des cas, la diffusion d'une onde évanescente polarisée TE aurait tendance à se faire dans des directions proches de la surface de l'échantillon, ce qui donnerait crédit à notre propre montage TRSTM dont l'optique de collection est située sur le côté de la pointe. Des résultats inverses ont été observés lors d'une illumination de la sonde par une onde évanescente polarisée TM, auquel cas le signal s'est avéré être diffusé essentiellement

dans des directions proches de l'axe de la pointe, ce qui pourrait nous amener à conseiller de positionner l'optique de collection autour de cet axe. Cependant, cette dernière interprétation est à prendre avec précaution, car notre modélisation ne nous permet pas encore de prendre en compte la présence d'un levier soutenant la pointe, lequel pourrait perturber le signal diffusé vers le haut dans des proportions qui nous sont encore inconnues.

Nos travaux se sont ensuite dirigés vers l'étude des petites sphères dans le but de déterminer sous quelles conditions l'utilisation de sondes de types pointe/sphère peut optimiser le signal mesuré par un montage TRSTM. À la suite de ces simulations, il s'est avéré que l'association d'une pointe de tungstène et d'une sphère de SiC présente des caractéristiques très intéressantes. En effet, la modélisation d'une telle pointe nous a révélé l'existence d'un phénomène de résonance dans le spectre de longueur d'onde qui nous intéresse (de 2 à $16\mu\text{m}$) dans le cas d'une onde polarisée TE. De plus, l'influence du pic d'intensité du signal diffusé s'est avérée bien plus importante sur le côté de la pointe qu'aux alentours de son axe, ce qui justifie, une fois de plus, nos propres choix en ce qui concerne le positionnement de l'optique de collection.

Actuellement, différentes améliorations concernant nos travaux numériques sont en cours, notamment en ce qui concerne la modélisation de l'échantillon. En effet, nous désirons implémenter des échantillons en matériau dispersif dans le but de pouvoir créer numériquement des plasmon-polaritons ou des phonon-polaritons de surface, et ainsi voir l'action de ces derniers sur la diffusion par un objet (et en particulier une pointe). La difficulté majeure que nous observons actuellement est l'adaptation du modèle AFP-TFSF à ce type de matériau.

La seconde possibilité d'illumination que nous envisageons d'étudier n'en est actuellement qu'à ses prémises. Elle touche à la création d'un champ proche thermique cohérent ou non. L'utilité d'une telle opération apparaît clairement car cela nous permettrait de décrire directement un microscope TRSTM sans être obligé de passer par l'étape de la modélisation d'un microscope ASNOM.

Si l'on en revient à l'échantillon, sa surface devrait elle aussi subir diverses modifications. D'abord, nous envisageons d'étudier des surfaces dites rugueuses dans le but de se rapprocher de situations plus réalistes que celle d'une interface parfaitement plane. Ensuite, nous désirons implémenter des surfaces nanostructurées telles que des microcircuits, afin d'observer, par exemple, l'influence de l'effet Joule à ces petites échelles.

D'autres voies possibles concernent la description de l'objet diffusant lui même. En effet, comme nous l'avons vu dans ce manuscrit, notre modèle FDTD/NFTFF permet de modéliser des objets de matériau et de forme quelconques, dès lors qu'ils se trouvent intégralement à l'intérieur de la surface de transformation champ proche/champ lointain. Ainsi, nous désirons d'abord poursuivre nos travaux portant sur l'étude de pointes de forme complexe (couplage pointe/sphère) ou de matériau inhomogène (pointe diélectrique recouverte d'une couche métallique). Le but est alors de déterminer les critères nécessaires à l'optimisation du fonctionnement d'un microscope optique en champ proche.

Enfin, d'autres applications externes au thème central de ce manuscrit peuvent mettre à profit la puissance de notre modèle numérique. À titre d'exemple, si l'on s'intéresse aux

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

grandes longueurs d'onde, nous pouvons citer la modélisation de la détection d'objets enfouis dans le sol par un système de radar (domaine cher à la géologie et à l'archéologie).

Annexes

Annexe A

Bases de l'électromagnétisme

Sommaire

A.1	Équations de Maxwell et équation d'onde	158
A.1.1	Les équations de Maxwell	158
A.1.2	Établissement de l'équation d'onde	159
A.2	Application à l'onde plane	160
A.2.1	Propagation d'une onde plane dans un milieu infini	160
A.2.2	Interaction avec une interface plane	161

Nomenclature

- Repères :

(x, y, z) : coordonnées cartésiennes

- Scalaires :

c : vitesse de la lumière dans le vide

i : unité imaginaire

k : nombre d'onde

k_0 : nombre d'onde dans le vide

$K_{||}$: norme du vecteur \mathbf{K}

n_m : indice optique du milieu m

w : composante normale à l'interface du vecteur d'onde \mathbf{k}

- Vecteurs :

\mathbf{B} : champ magnétique

\mathbf{D} : déplacement électrique

NOMENCLATURE

\mathbf{E}	: champ électrique
\mathbf{H}	: excitation magnétique
\mathbf{J}	: densité de courant électrique
$\mathbf{k} = (\mathbf{K}, w)$: vecteur d'onde
\mathbf{k}_0	: vecteur d'onde dans le vide
\mathbf{k}'	: partie réelle du vecteur d'onde \mathbf{k}
\mathbf{k}''	: partie imaginaire du vecteur d'onde \mathbf{k}
$\mathbf{K} = (u, v)$: composante tangente à l'interface du vecteur d'onde \mathbf{k}
\mathbf{M}	: polarisation magnétique
\mathbf{P}	: polarisation électrique
\mathbf{r}	: vecteur position
\mathbf{R}	: composante tangente à l'interface de \mathbf{r}
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$: vecteurs unitaires

• Lettres grecques :

ε	: permittivité diélectrique
ε_0	: permittivité diélectrique du vide
ϵ	: permittivité (fonction) diélectrique relative
λ	: longueur d'onde
μ	: perméabilité magnétique
μ_0	: perméabilité magnétique du vide
ν	: fréquence
ω	: pulsation
ρ	: densité de charge électrique
σ	: conductivité électrique
θ_c	: angle d'incidence critique
θ_i	: angle d'incidence
θ_t	: angle de réfraction

• Indices :

i	: relatif au champ incident
op	: relatif à l'onde plane
r	: relatif au champ réfléchi
t	: relatif au champ transmis

• Opérateurs :

∂	: dérivée partielle
Δ	: laplacien vectoriel
∇	: opérateur nabla
\times	: produit vectoriel
\cdot	: produit scalaire

Introduction

Dans cette annexe, nous rappelons les bases de l'électromagnétisme en nous appuyant essentiellement sur le développement des équations de Maxwell. Cette étude nous permet d'approcher de notions fondamentales telles que la propagation des ondes planes ou la réflexion totale.

A.1 Équations de Maxwell et équation d'onde

A.1.1 Les équations de Maxwell

Les équations de Maxwell sont au nombre de quatre, et représentent le fondement même de l'électromagnétisme. Leur forme générale, en unités du système international (USI), nous est donnée ci-dessous [76] :

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = +\nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{J} \quad (\text{loi d'Ampère}) \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (\text{loi de Faraday}) \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (\text{loi de Gauss pour le champ électrique}) \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{loi de Gauss pour le champ magnétique}) \quad (\text{A.4})$$

avec : \mathbf{D} le déplacement électrique,
 \mathbf{B} le champ magnétique,
 \mathbf{E} le champ électrique,
 \mathbf{H} l'excitation magnétique,
 ρ la densité de charge électrique,
 $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} + \mathbf{J}_{source}$ la densité de courant électrique (A/m^2),
 σ la conductivité électrique (S/m)

À cela s'ajoute les deux équations de consistances propres aux matériaux linéaires et isotropes :

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (\text{A.6})$$

Ici, deux grandeurs sont introduites :

- la permittivité diélectrique ε . Elle peut être reliée à la constante (ou fonction) diélectrique relative ϵ par la relation $\varepsilon = \varepsilon_0 \epsilon$, où $\varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} Fm^{-1}$ est la permittivité diélectrique du vide.
- la perméabilité magnétique μ . La perméabilité magnétique du vide est donnée par $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} Hm^{-1}$.

Il est aussi utile d'introduire les notions de polarisation électrique \mathbf{P} (moment dipolaire électrique par unité de volume) et de polarisation magnétique \mathbf{M} (moment dipolaire magnétique par unité de volume) par les équations suivantes :

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mu_0 \mathbf{M} \quad (\text{A.8})$$

Une autre notion très importante en électromagnétisme est celle de la continuité. Ainsi, lors du passage d'un milieu à l'autre, et en l'absence de charge et de courant, voici les différentes grandeurs qui conservent leur continuité :

- la composante tangente à l'interface de \mathbf{E} est continue,
- la composante tangente à l'interface de \mathbf{H} est continue,
- la composante normale à l'interface de \mathbf{D} est continue,
- la composante normale à l'interface de \mathbf{B} est continue.

A.1.2 Établissement de l'équation d'onde

Nous supposons que le milieu est sans charge, et non magnétique. Cela implique $\rho = 0$, $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ et $\mu = \mu_0$. Établissons, dans ce cas de figure, l'équation d'onde du champ électrique. Si nous combinons les équations A.1, A.2, A.5 et A.6, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} \\ &= -\frac{\partial}{\partial t} (\mu_0 \nabla \times \mathbf{H}) \\ &= -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \\ &= -\mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Sachant que $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E}$ et $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, nous obtenons alors l'équation d'onde :

$$\Delta \mathbf{E} = \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (\text{A.10})$$

Le même raisonnement est à suivre pour le champ magnétique, ce qui donne :

$$\Delta \mathbf{H} = \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (\text{A.11})$$

Ces relations seront utilisées dans le cas de l'étude de l'onde plane, dans la section suivante.

A.2 Application à l'onde plane

A.2.1 Propagation d'une onde plane dans un milieu infini

Les ondes planes électromagnétiques sont des solutions particulières des équations de Maxwell, souvent utilisées pour leur simplicité. Dans ce cas bien particulier, les champs électrique et magnétique se présentent alors sous la forme suivante :

$$\mathbf{E}_{\text{op}} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad \text{et} \quad \mathbf{H}_{\text{op}} = \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (\text{A.12})$$

où \mathbf{E}_0 et \mathbf{H}_0 sont des vecteurs constants. ω et \mathbf{k} représentent alors respectivement la pulsation de l'onde et son vecteur d'onde. Ce dernier peut d'ailleurs se présenter sous sa forme complexe, à savoir :

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}'' \quad (\text{A.13})$$

L'introduction de A.13 dans A.12 nous donne alors :

$$\mathbf{E}_{\text{op}} = \mathbf{E}_0 e^{-\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad \mathbf{H}_{\text{op}} = \mathbf{H}_0 e^{-\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (\text{A.14})$$

$\mathbf{E}_0 e^{-\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}}$ et $\mathbf{H}_0 e^{-\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}}$ représentent l'amplitude des champs électrique et magnétique, et $\phi = \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r} - \omega t$ représente leur phase. Attardons-nous maintenant sur l'étude de l'influence du vecteur d'onde \mathbf{k} sur le comportement de l'onde plane. Si nous nous reportons à l'ouvrage de C.F. Bohren et D.R. Huffman [71], nous pouvons dire, en étudiant les solutions de l'équation $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = \text{cste}$ (où \mathbf{K} est un vecteur réel quelconque), que la composante \mathbf{k}' est normale à ce que l'on appelle les surfaces de phase constante, alors que \mathbf{k}'' est normale aux surfaces d'amplitude constante.

Introduisons maintenant A.12 dans les équations de Maxwell. Nous obtenons alors les relations suivantes :

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega\mu\mathbf{H} \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega\varepsilon\mathbf{E} \quad (\text{A.18})$$

De A.15 et A.16, nous déduisons aisément que \mathbf{E} et \mathbf{H} sont perpendiculaires à \mathbf{k} . De plus, d'après A.17 (ou A.18), nous pouvons voir que \mathbf{E} et \mathbf{H} sont perpendiculaires entre eux. Par ailleurs, il est possible de redéfinir l'équation d'onde, spécifique à notre cas particulier, en se basant sur A.17 et A.18 :

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega\mu\mathbf{H} \Rightarrow \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = \omega\mu\mathbf{k} \times \mathbf{H} \quad (\text{A.19})$$

$$\Rightarrow \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = -\omega^2\varepsilon\mu\mathbf{E} \quad (\text{A.20})$$

Utilisons maintenant l'identité vectorielle $\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) - \mathbf{E}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k})$ avec $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$. Nous arrivons alors à l'équation d'onde, aussi appelée relation de dispersion :

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} &= \omega^2 \epsilon \mu \\ &= \frac{\omega^2}{c^2} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

où c est la vitesse de l'onde dans le milieu ambiant.

A.2.2 Interaction avec une interface plane

Ondes évanescentes et ondes propagatives au niveau d'une interface

On se place ici au niveau d'une interface entre deux milieux (FIG. A.1), de fonctions diélectriques relatives ϵ_1 et ϵ_2 distinctes.

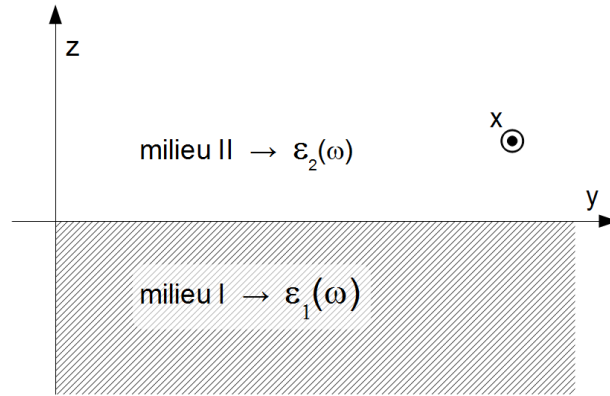


FIG. A.1: Interface entre deux milieux d'indices optiques différents

Nous nous concentrons principalement sur le milieu 2, lequel est considéré comme étant le vide, ce qui implique $\epsilon_2 = 1$. Le vecteur d'onde peut alors se décomposer sous la forme suivante :

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (u, v, w) = (\mathbf{K}, w) \quad (\text{A.22})$$

où : $\mathbf{K} = (k_x, k_y) = (u, v)$ est la composante tangente à l'interface du vecteur d'onde,
 $w = k_z$ est la composante normale à l'interface du vecteur d'onde.

En reprenant l'équation A.21, la relation de dispersion devient :

$$\Rightarrow K_{\parallel}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} - w^2 \quad (\text{A.23})$$

L'onde plane s'écrit alors :

A.2. APPLICATION À L'ONDE PLANE

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, z, t) = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})} e^{i w z} e^{-i \omega t} \quad (\text{A.24})$$

où $\mathbf{R} = (x, y)$ est la composante du vecteur position parallèle à l'interface. Deux cas peuvent être distingués :

- pour des w réels, nous avons $0 < K_{\parallel}^2 < k^2$. Nous sommes alors en présence d'ondes propagatives.
- pour des w imaginaires ($w = i|w|$), nous avons $K_{\parallel}^2 > k^2$. Il s'agit alors d'ondes évanescentes, se propageant parallèlement à l'interface, et dont l'expression du champ électrique est :

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, z, t) = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})} e^{-|w|z} e^{-i \omega t} \quad (\text{A.25})$$

Cette expression nous permet d'expliquer la décroissance exponentielle de l'intensité d'une onde évanescente (évolution en $e^{-|w|z}$ lorsque l'on s'éloigne de l'interface). Cette distinction entre ondes propagatives et ondes évanescentes peut être représentée sur le graphe reliant la pulsation à K_{\parallel} (FIG. A.2). Ici, la ligne de lumière (d'équation $k = \frac{c|\mathcal{E}|}{c}$) sépare la zone régie par les ondes propagatives (au dessus de la ligne de lumière - $K_{\parallel}^2 < \frac{c|\mathcal{E}|}{c}$) de celle régie par les ondes évanescentes (en dessous de la ligne de lumière - $K_{\parallel}^2 > \frac{c|\mathcal{E}|}{c}$).

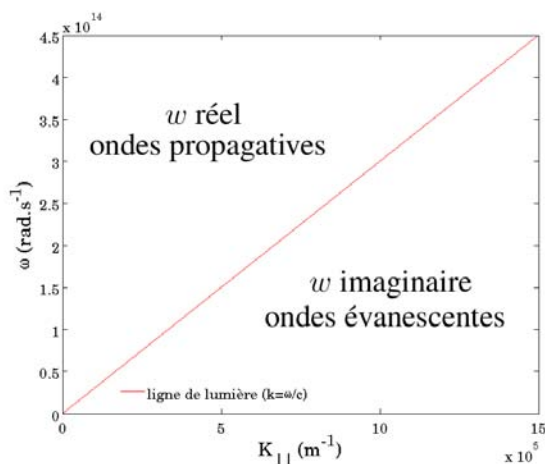


FIG. A.2: Ligne de lumière

Réflexion totale

Une des applications de l'étude de l'onde plane, et de son interaction avec une interface, est la création d'ondes évanescentes par réflexion totale. Nous avons déjà décrit les principes de ce phénomène dans le chapitre 1 portant sur la champ proche optique, sans pour autant rentrer dans les détails. Nous allons ici nous baser sur une interprétation électromagnétique dans le but d'en expliquer l'origine. Observons pour cela une interface

entre deux milieux d'indices optiques différents (A.3), tels que $n_t < n_i$, n_i étant l'indice optique du milieu incident, et n_t celui du milieu où l'onde est transmise.

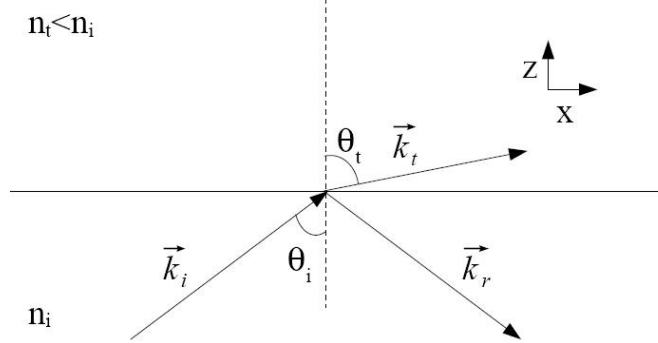


FIG. A.3: Ondes incidente, réfléchie et transmise au niveau d'une interface

On suppose maintenant que l'onde incidente est de type onde plane, ce qui nous permet d'obtenir l'expression des champs électriques, respectivement pour les ondes incidentes, réfléchies et transmises :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{0i} e^{i(\omega t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})} \\ \mathbf{E}_r = \mathbf{E}_{0r} e^{i(\omega t - \mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r} - \phi_r)} \\ \mathbf{E}_t = \mathbf{E}_{0t} e^{i(\omega t - \mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r} - \phi_t)} \end{cases} \quad (\text{A.26})$$

où le vecteur d'onde \mathbf{k}_t peut être décrit par ses deux composantes $k_{tx} = k_t \sin \theta_t$ et $k_{tz} = k_t \cos \theta_t$. Rappelons la loi de Snell-Descartes, laquelle nous dit :

$$n_t \sin \theta_t = n_i \sin \theta_i \quad (\text{A.27})$$

Ainsi, si l'on se place dans le cas où $\theta_i > \theta_c$, θ_c étant l'angle critique défini par $\theta_c = \arcsin(\frac{n_t}{n_i})$, l'équation A.27 devient alors :

$$\sin \theta_t > \frac{n_i}{n_t} \sin \theta_i \quad (\text{A.28})$$

$$\Rightarrow \sin \theta_t > 1 \quad (\text{A.29})$$

$$\Rightarrow \cos^2 \theta_t < 0, \text{ car } \cos^2 \theta_t = 1 - \sin^2 \theta_t \quad (\text{A.30})$$

$\cos \theta_t$ est donc complexe, et se présente sous la forme : $\cos \theta_t = \pm i \sqrt{\frac{n_i^2}{n_t^2} \sin^2 \theta_i - 1}$. Cela nous permet de définir à nouveau les différentes composantes du vecteur d'onde de l'onde transmise, à savoir :

$$k_{tx} = k_t \frac{n_i}{n_t} \sin \theta_i \quad (\text{A.31})$$

$$k_{tz} = \pm i k_t \sqrt{\frac{n_i^2}{n_t^2} \sin^2 \theta_i - 1} \quad (\text{A.32})$$

D'après l'équation A.26, si l'on se considère dans le cas des z croissants, seule la solution $k_{tz} = -i k_t \sqrt{\frac{n_i^2}{n_t^2} \sin^2 \theta_i - 1}$ peut exister. Ainsi, nous obtenons :

$$\mathbf{E}_t = \mathbf{E}_{0t} \cdot e^{i(\omega t - k_t \frac{n_i}{n_t} \sin \theta_i x - \phi_t)} e^{-k_t \sqrt{\frac{n_i^2}{n_t^2} \sin^2 \theta_i - 1} z} \quad (\text{A.33})$$

On observe donc la décroissance exponentielle du champ électrique lorsqu'on s'éloigne de l'interface, ce qui est propre aux ondes évanescentes.

Conclusion

L'étude des équations de Maxwell nous a permis d'établir les bases relatives à la notion d'onde planes. Cela nous a amené à mettre en équation le principe de réflexion totale. Cette notion, très importante, revient régulièrement au cours de nos travaux de simulations numériques.

Annexe B

Fonctions diélectriques : base de données

Sommaire

B.1 Les modèles	166
B.1.1 Quelques rappels sur la fonction diélectrique	166
B.1.2 Le modèle de Drude	167
B.1.3 Le modèle de Lorentz	167
B.1.4 Les modèles composites	168
B.2 Les différents cas étudiés	168
B.2.1 Le carbure de silicium (SiC)	168
B.2.2 Le verre (SiO ₂)	169
B.2.3 Le silicium (Si)	170
B.2.4 Le silicium dopé (n-Si)	171
B.2.5 Le tungstène (W)	172

Nomenclature

- Scalaires :

- i : unité imaginaire
- n : partie réelle de l'indice optique
- k : partie complexe de l'indice optique
- R : réflectivité

- Lettres grecques :

- ϵ : permittivité (fonction) diélectrique relative

B.1. LES MODÈLES

- ϵ' : partie réelle de ϵ
- ϵ'' : partie imaginaire de ϵ
- ϵ_∞ : constante diélectrique pour les faibles longueurs d'onde
- ϵ_{stat} : constante diélectrique pour les faibles fréquences
- Γ_d : inverse du temps de relaxation plasma
- Γ_l : inverse du temps de relaxation relatif au $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz
- ω : pulsation
- ω_d : pulsation plasma
- $\omega_{L,l}$: pulsation optique longitudinale du $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz
- $\omega_{T,l}$: pulsation optique transverse du $l^{\text{ème}}$ pôle de Lorentz

- Opérateurs :

- Im : partie imaginaire
- Re : partie réelle

Introduction

Les modèles des fonctions diélectriques dépendent fortement du matériau étudié. Ainsi, la première section de cette annexe se concentre sur le développement des modèles de Drude et de Lorentz. Nous étudions ensuite deux types de matériaux, à savoir, d'une part, les diélectriques pouvant présenter certaines propriétés intéressantes dans l'infrarouge (SiC, SiO₂,...), et d'autre part, certains métaux rentrant régulièrement dans la composition des pointes AFM (tungstène). Pour chaque cas, l'implémentation du modèle dans le code FDTD (modèle ADE-FDTD) est validé par l'étude de la réflexion d'une onde plane au niveau d'une interface air/matériau (pour plus de précision sur la méthode ADE, se reporter au chapitre 3).

B.1 Les modèles

B.1.1 Quelques rappels sur la fonction diélectrique

L'ensemble des données expérimentales sur lesquelles nous nous appuyons sont tirées des ouvrages "Handbook of Optical Constants of Solid", tomes I,II et III, de E.D. Palik [77, 78, 79]. Ces derniers nous fournissent l'indice de réfraction n et le coefficient d'extinction k de différents matériaux en fonction de la longueur d'onde (et donc de la pulsation), ce qui nous permet d'obtenir la fonction diélectrique relative (complexe) :

$$\epsilon(\omega) = (n(\omega) - i k(\omega))^2 \quad (\text{B.1})$$

Les parties réelle ϵ' et imaginaire ϵ'' de ces fonctions diélectriques sont alors données par :

$$\begin{cases} \text{Re}(\epsilon) = \epsilon' = n^2 - k^2 \\ \text{Im}(\epsilon) = \epsilon'' = 2nk \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

À titre d'illustration, nous donnons ci-dessous les expressions permettant d'obtenir n et k à partir de ϵ' et ϵ'' :

$$\begin{cases} n = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} + \epsilon'}{2}} \\ k = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon'}{2}} \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Finalement, nous donnons l'expression de la réflectivité en incidence normale :

$$R = \left(\frac{\sqrt{\epsilon} - 1}{\sqrt{\epsilon} + 1} \right)^2 \quad (\text{B.4})$$

B.1.2 Le modèle de Drude

Le modèle de Drude à un pôle s'utilise généralement pour décrire la fonction diélectrique des métaux. Il est défini par l'équation suivante :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_d^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma_d} \quad (\text{B.5})$$

avec : ω_d la pulsation du pôle (souvent appelée pulsation plasma),

ϵ_∞ la valeur de ϵ pour les faibles longueurs d'ondes ($\omega \rightarrow \infty$),

Γ_d l'inverse du temps de relaxation, décrivant donc l'amortissement de l'onde dans le milieu.

B.1.3 Le modèle de Lorentz

Le modèle de Lorentz à un pôle s'utilise généralement pour décrire la fonction diélectrique des matériaux diélectriques. Il est défini par l'équation suivante :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\Delta\epsilon_l \omega_{T,l}^2}{\omega^2 - \omega_{T,l}^2 + i\omega\Gamma_l} \quad (\text{B.6})$$

avec : $\omega_{T,l}$ la pulsation des phonons optiques transverse pour les grands vecteurs d'onde,

ϵ_∞ la valeur de ϵ pour les faibles longueurs d'ondes ($\omega \rightarrow \infty$),

$\Delta\epsilon_l = \epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_\infty$ où ϵ_{stat} représente la valeur de la fonction diélectrique en régime statique ($\omega \rightarrow 0$),

Γ_l l'inverse du temps de relaxation, décrivant donc l'amortissement de l'onde dans le milieu.

ϵ_{stat} peut être décrit par la relation de Lyddane-Sachs-Teller $\frac{\epsilon_{\text{stat}}}{\epsilon_\infty} = \left(\frac{\omega_{L,l}}{\omega_{T,l}} \right)^2$, où $\omega_{L,l}$ représente la pulsation des phonons optiques longitudinaux pour les faibles vecteurs d'onde.

B.1.4 Les modèles composites

Parmi les matériaux que nous avons étudiés, un certain nombre nécessite des modèles de Lorentz multipôles, ou encore des modèles Drude-Lorentz. L'équation donnée ci-dessous représente le cas d'un matériau à 1 pôle de Drude et p pôles de Lorentz :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_d^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma_d} - \sum_{l=1}^p \frac{\Delta\epsilon_l \omega_{T,l}^2}{\omega^2 - \omega_{T,l}^2 + i\omega\Gamma_l} \quad (\text{B.7})$$

B.2 Les différents cas étudiés

Pour chacun des matériaux suivants (sauf pour le verre SiO_2), l'estimation des paramètres des modèles de Lorentz et/ou de Drude est faite par ajustement des données expérimentales fournies par les ouvrages [77, 78, 79], grâce au logiciel libre Focus¹.

B.2.1 Le carbure de silicium (SiC)

Le SiC peut être décrit par le modèle de Lorentz à un seul pôle. Les paramètres sont donnés par le tableau suivant :

	ϵ_∞	$\Delta\epsilon_l$	$\omega_{T,l}(10^{12}\text{rad}\cdot\text{s}^{-1})$	$\Gamma_l(10^{10}\text{rad}\cdot\text{s}^{-1})$
Lorentz	6.69	3.3	149.50	90.36

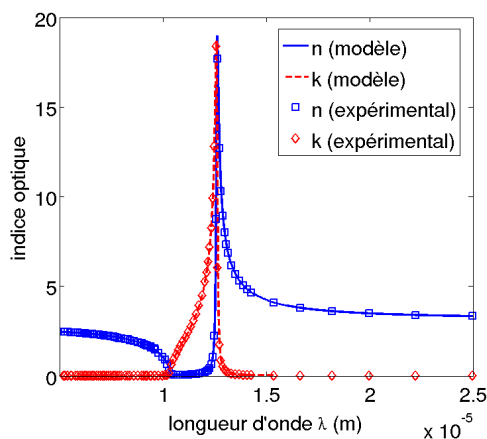


FIG. B.1: Indice optique du SiC : représentation des parties réelle (n) et imaginaire (k)

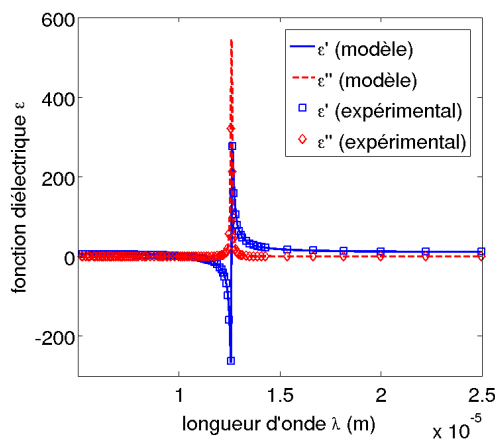


FIG. B.2: Fonction diélectrique du SiC : représentation des parties réelle et imaginaire

Les figures B.1 et B.2 montrent respectivement la variation de l'indice optique (parties réelle n et imaginaire k) et de la fonction diélectrique ϵ en fonction de la longueur d'onde

¹<http://www.cemhti.cnrs-orleans.fr/pot/software/focus.html>

λ . À titre d'illustration, la figure B.3 nous montre l'allure de la relation de dispersion dans le cas d'un interface air/SiC, et sa position par rapport à la ligne de lumière. La dernière figure B.4 représente la réflectivité au niveau de l'interface, ce qui nous permet de comparer la solution numérique (ADE) à la réflectivité théorique : les deux courbes présentent un accord parfait.

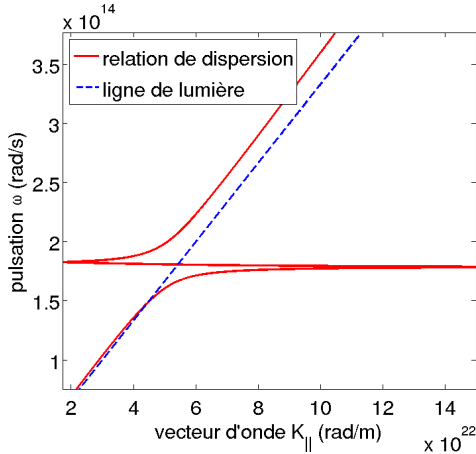


FIG. B.3: Relation de dispersion d'une interface air/SiC

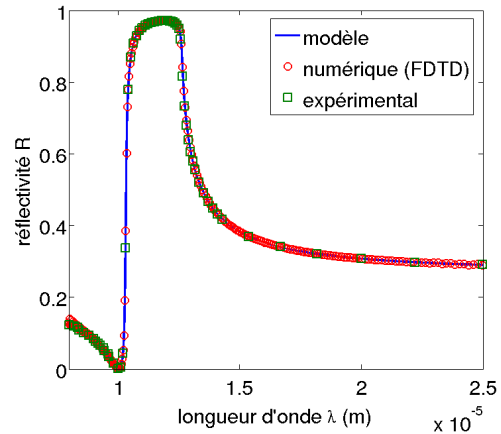


FIG. B.4: Réflectivité au niveau d'une interface air/SiC ; comparaison théorie/ADE-FDTD

B.2.2 Le verre (SiO₂)

Le verre SiO₂ est le seul matériau de cette étude à ne pas se baser sur les données expérimentales fournies dans l'ouvrage de E.D. Palik [77, 78, 79]. Ici, nous nous sommes appuyés sur les travaux de thèse de A. Milandri [80]. Selon cette étude sus-citée, le verre SiO₂ peut être décrit par un modèle de Lorentz à 4 pôles dont voici les paramètres :

	ϵ_{∞}	$\Delta\epsilon_l$	$\omega_{T,l}(10^{12}rad \cdot s^{-1})$	$\Gamma_l(10^{12}rad \cdot s^{-1})$
Lorentz 1	1.95	0.0083	227.1	6.313
Lorentz 2	-	0.58	202.68	8.391
Lorentz 3	-	0.0483	150.8	7.359
Lorentz 4	-	0.84	84.53	6.864

Les figures B.5 et B.6 montrent respectivement la variation de l'indice optique (parties réelle n et imaginaire k) et de la fonction diélectrique ϵ en fonction de la longueur d'onde λ . À titre d'illustration, la figure B.7 nous montre l'allure de la relation de dispersion dans le cas d'un interface air/SiO₂, et sa position par rapport à la ligne de lumière. La dernière figure B.8 représente la réflectivité au niveau de l'interface, ce qui nous permet de comparer la solution numérique (ADE) à la réflectivité théorique : les deux courbes présentent un accord parfait.

B.2. LES DIFFÉRENTS CAS ÉTUDIÉS

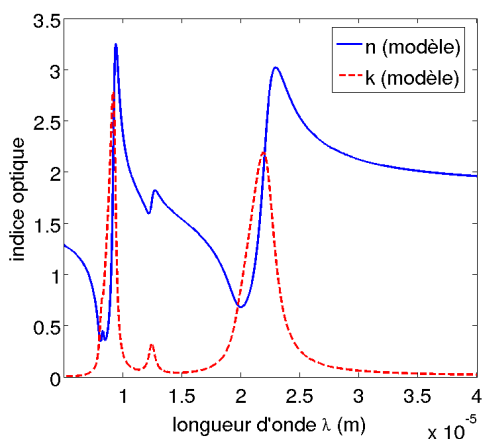


FIG. B.5: Indice optique du SiO_2 : représentation des parties réelle n et imaginaire k

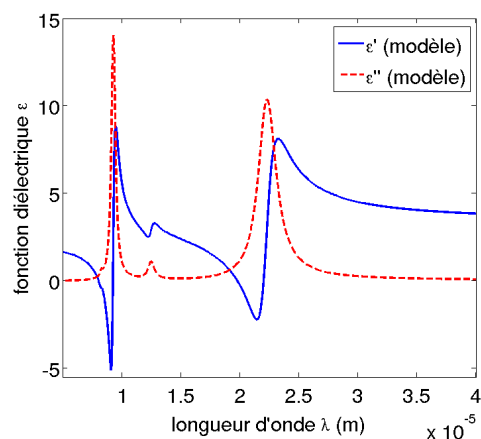


FIG. B.6: Fonction diélectrique du SiO_2 : représentation des parties réelle et imaginaire

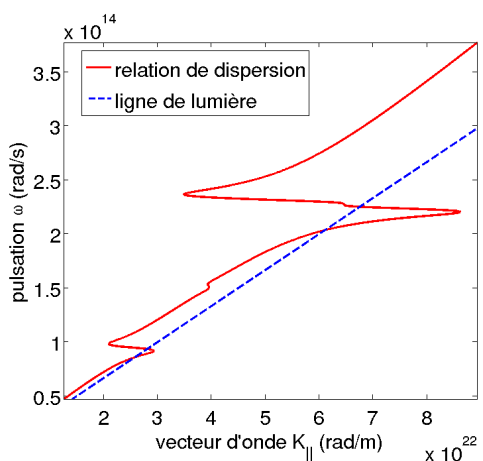


FIG. B.7: Relation de dispersion d'une interface air/ SiO_2

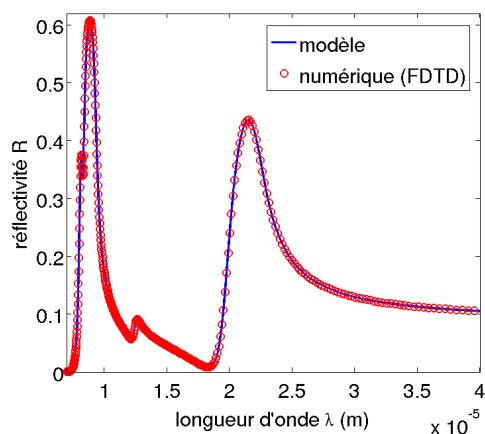


FIG. B.8: Réflectivité au niveau d'une interface air/ SiO_2 ; comparaison théorie/ADE-FDTD

B.2.3 Le silicium (Si)

Le silicium peut être décrit par le modèle de Lorentz à un seul pôle. Les paramètres sont donnés par le tableau suivant :

	ϵ_∞	$\Delta\epsilon_l$	$\omega_{T,l}(10^{13}\text{rad}\cdot\text{s}^{-1})$	$\Gamma_l(10^{10}\text{rad}\cdot\text{s}^{-1})$
Lorentz	10.58	1.11	196.10	8.67

Les variations de l'indice optique (parties réelle n et imaginaire k) et de la fonction diélectrique ϵ en fonction de la longueur d'onde λ ne sont pas représentées ici. En effet, dans ce spectre de longueurs d'onde, ces deux grandeurs peuvent être considérées comme fonctions ($n \approx 3.42$, $k \approx 0$). À titre d'illustration, la figure B.9 nous montre l'allure de la

relation de dispersion dans le cas d'un interface air/Si, et sa position par rapport à la ligne de lumière. La dernière figure B.10 représente la réflectivité au niveau de l'interface, ce qui nous permet de comparer la solution numérique (ADE) à la réflectivité théorique : les deux courbes présentent un léger décalage qui reste tout de même acceptable.

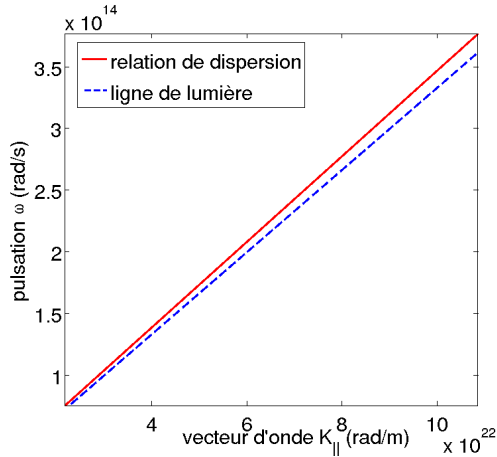


FIG. B.9: Relation de dispersion d'une interface air/Si

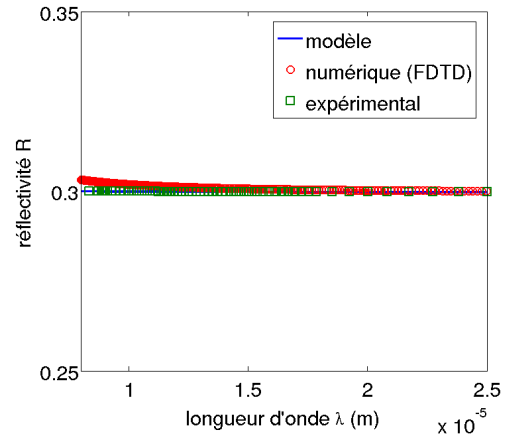


FIG. B.10: Réflectivité au niveau d'une interface air/Si ; comparaison théorie/ADE-FDTD

B.2.4 Le silicium dopé (n-Si)

Nous avons choisi d'étudier le silicium dopé de type N. La concentration en dopants est ici de 10^{19}cm^{-3} . Le silicium dopé peut être décrit dans l'infrarouge qui nous intéresse par un simple pôle de Drude, dont les paramètres sont :

	ϵ_{∞}	$\omega_d(10^{14} \text{rad} \cdot \text{s}^{-1})$	$\Gamma_d(10^{13} \text{rad} \cdot \text{s}^{-1})$
Drude	11.74	3.61	5.46

Les figures B.11 et B.12 montrent respectivement la variation de l'indice optique (parties réelle n et imaginaire k) et de la fonction diélectrique ϵ en fonction de la longueur d'onde λ . À titre d'illustration, la figure B.13 nous montre l'allure de la relation de dispersion dans le cas d'un interface air/Si dopé, et sa position par rapport à la ligne de lumière. La dernière figure B.14 représente la réflectivité au niveau de l'interface, ce qui nous permet de comparer la solution numérique (ADE) à la réflectivité théorique : les deux courbes présentent un accord parfait.

B.2. LES DIFFÉRENTS CAS ÉTUDIÉS

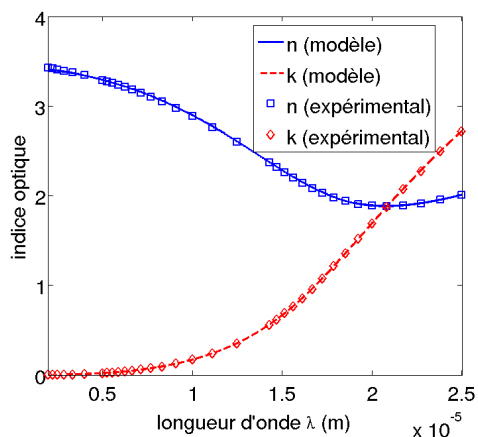


FIG. B.11: Indice optique de n-Si : représentation des parties réelle n et imaginaire k

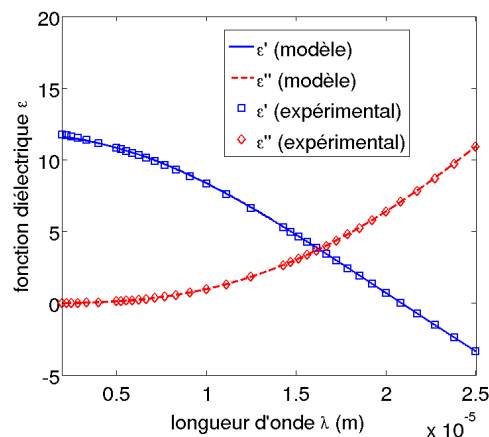


FIG. B.12: Fonction diélectrique de n-Si : représentation des parties réelle et imaginaire

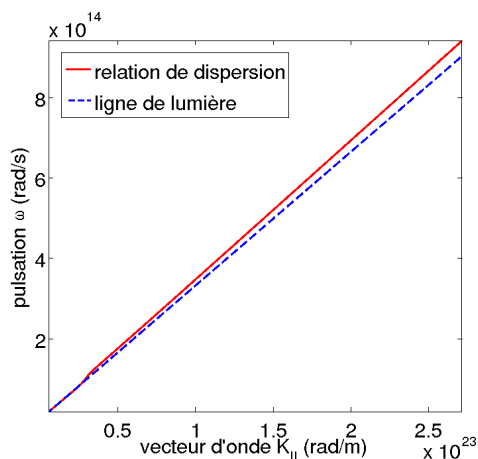


FIG. B.13: Relation de dispersion d'une interface air/n-Si

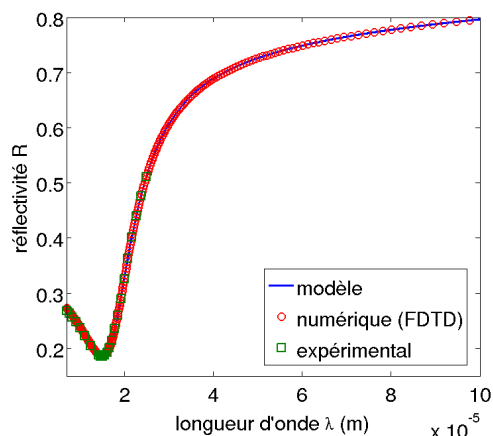


FIG. B.14: Réflectivité au niveau d'une interface air/n-Si ; comparaison théorie/ADE-FDTD

B.2.5 Le tungstène (W)

Dans l'infrarouge proche, le tungstène peut être décrit par un modèle composé d'un pôle de Drude et d'un pôle de Lorentz. Les paramètres du pôle de Drude sont :

	ϵ_{∞}	$\omega_d(10^{14}rad \cdot s^{-1})$	$\Gamma_d(10^{13}rad \cdot s^{-1})$
Drude	63.5	93.5	8.11

et ceux du pôle de Lorentz sont :

	ϵ_{∞}	$\Delta\epsilon_l$	$\omega_{T,l}(10^{14}rad \cdot s^{-1})$	$\Gamma_l(10^{14}rad \cdot s^{-1})$
Lorentz 1	-	6.99	6.43	2.43

Les figures B.15 et B.16 montrent respectivement la variation de l'indice optique (parties réelle n et imaginaire k) et de la fonction diélectrique ϵ en fonction de la longueur d'onde λ .

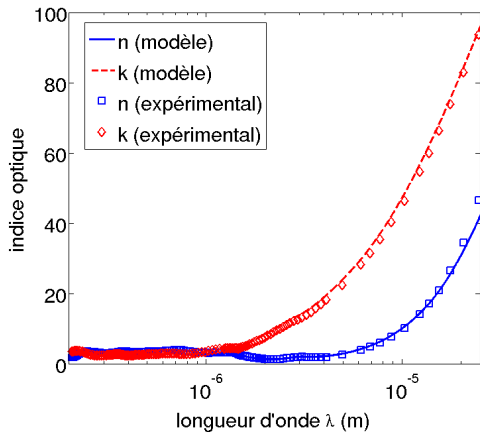


FIG. B.15: Indice optique du tungstène : représentation des parties réelle n et imaginaire k

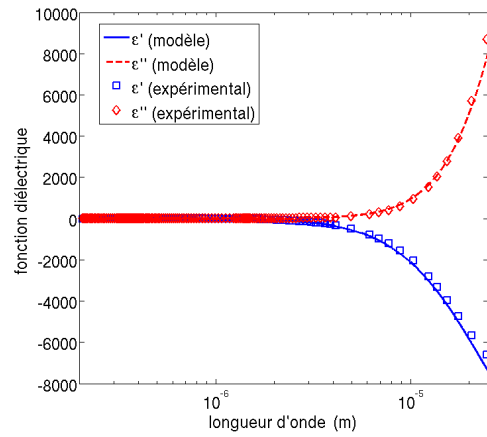


FIG. B.16: Fonction diélectrique du tungstène : représentation des parties réelle et imaginaire

À titre d'illustration, la figure B.17 nous montre l'allure de la relation de dispersion dans le cas d'une interface air/tungstène, et sa position par rapport à la ligne de lumière. La dernière figure B.18 représente la réflectivité au niveau de l'interface, uniquement dans l'infrarouge proche, ce qui nous permet de comparer la solution numérique (ADE) à la réflectivité théorique : les deux courbes présentent un léger décalage qui reste tout de même acceptable.

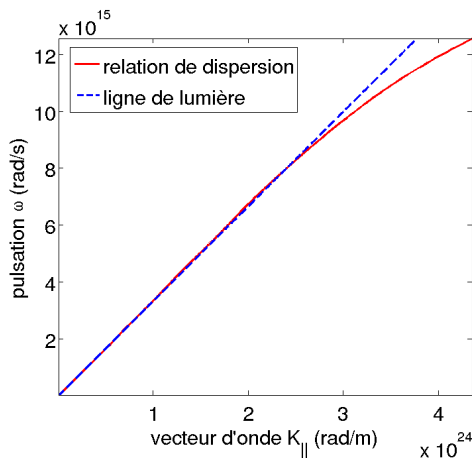


FIG. B.17: Relation de dispersion d'une interface air/tungstène

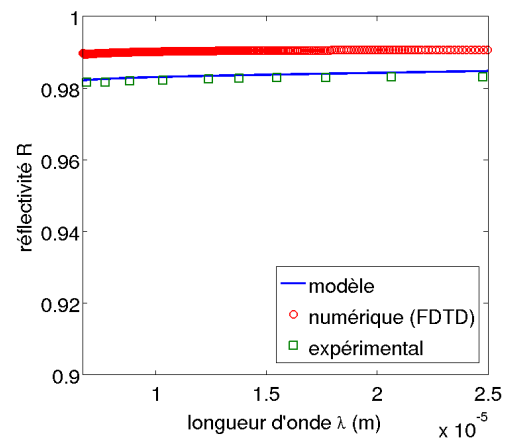


FIG. B.18: Réflectivité au niveau d'une interface air/tungstène (infrarouge) ; comparaison théorie/ADE-FDTD

B.2. LES DIFFÉRENTS CAS ÉTUDIÉS

Il est tout de fois possible de décrire le tungstène dans l'infrarouge et le visible, à l'aide d'un pôle de Drude et de cinq pôles de Lorentz. Les paramètres du pôle de Drude sont :

	ϵ_∞	$\omega_d(10^{14}rad \cdot s^{-1})$	$\Gamma_d(10^{13}rad \cdot s^{-1})$
Drude	4.0	91.5	8.11

et ceux des deux pôles de Lorentz sont :

	ϵ_∞	$\Delta\epsilon_l$	$\omega_{T,l}(10^{14}rad \cdot s^{-1})$	$\Gamma_l(10^{14}rad \cdot s^{-1})$
Lorentz 1	-	7.02	6.41	2.22
Lorentz 2	-	9.2	14.6	6.9
Lorentz 3	-	12.5	30.5	20.5
Lorentz 4	-	4.2	52.5	20.1
Lorentz 5	-	6.1	81.01	27.03

La figure B.19 représente la réflectivité au niveau de l'interface, dans le visible et l'infrarouge proche, ce qui nous permet de comparer la solution numérique (ADE) à la réflectivité théorique : les deux courbes présentent un très bon accord.

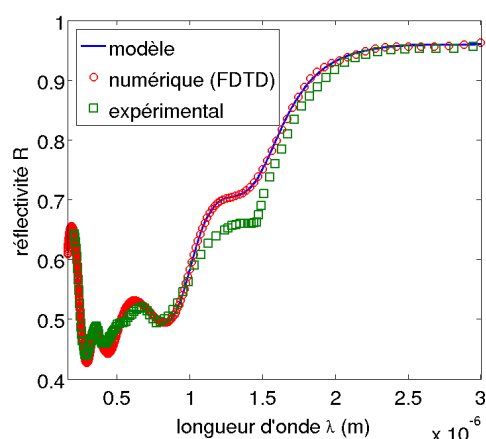


FIG. B.19: Réflectivité au niveau d'une interface air/tungstène (visible) ; comparaison théorie/ADE-FDTD

Conclusion

Nous avons développé dans cette annexe les moyens nécessaires à la modélisation de la fonction diélectrique relative de divers matériaux. Les modèles que nous avons utilisés sont l'oscillateur de Lorentz et le modèle de Drude. Ils nous ont permis de fitter les données expérimentales accessibles via les ouvrages de E.D. Palik [77, 78, 79] dans le but d'implémenter dans notre code FDTD les matériaux en question.

Annexe C

Fabrication d'une sonde en tungstène

Sommaire

C.1 Description générale	175
C.2 Fabrication du méplat	176
C.2.1 Préparation du support	176
C.2.2 Polissage du levier	177
C.2.3 Résultats	178
C.3 Fabrication de la pointe	178
C.3.1 Principes de la réaction	178
C.3.2 Montage	179
C.3.3 Manipulations et résultats	181

Introduction

Ici est décrite la technique utilisée pour la fabrication de sondes en tungstène destinées à l'AFM à partir de fil de tungstène. Pour cela, nous nous sommes basés sur les travaux de G.Wurtz [81] et H.Wioland [82].

C.1 Description générale

La sonde est fabriquée à partir de fil de tungstène (fournisseur : Goodfellow), pur à 99.9%, rectiligne (30cm de longueur) et à section circulaire (0.125mm de diamètre).

Sa forme générale, après modification, est la suivante :

La sonde est composée de deux parties :

- partie A : la pointe elle-même, de 2 à 3mm.
- partie B : le levier, d'environ 10mm, quitte à le raccourcir ultérieurement.

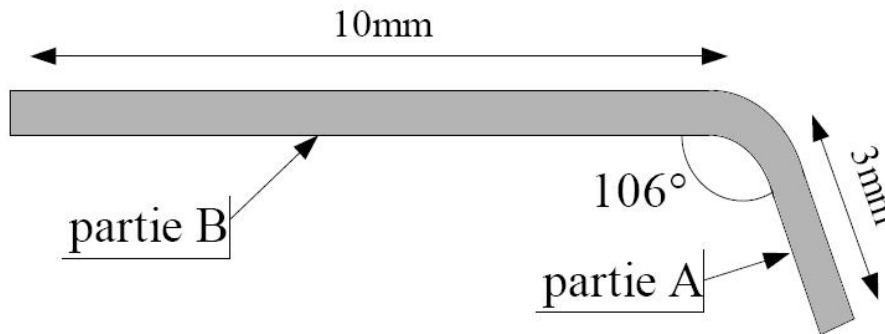


FIG. C.1: Cotes d'une sonde AFM en tungstène

Les parties A et B forment un angle de 106° , imposé par l'inclinaison du porte-pointe de la tête de l'AFM, de manière à ce que la pointe (partie A) soit perpendiculaire à la surface de l'échantillon.

Ce fil doit ensuite subir diverses modifications :

- pour que le laser puisse se réfléchir sur le levier (partie B), ce dernier doit posséder un méplat, qu'il est possible de faire par polissage.
- la pointe doit être affinée en son extrémité ; la technique utilisée ici est l'attaque électro-chimique.

Les différentes opérations, permettant de passer du fil de tungstène brut à la sonde AFM, sont décrites dans les prochains paragraphes.

C.2 Fabrication du méplat

Il s'agit d'une technique de polissage, dont les étapes sont décrites dans les paragraphes suivants.

C.2.1 Préparation du support

Les fils sont coupés à une longueur de 12 à 13 mm, et sont collés sur un support en métal, dont les quatre faces latérales présentent un angle de 106° (voir image C.2). Le fait de créer l'angle avant le polissage nous permet d'être sûr que le méplat sera bien positionné par rapport à l'axe de la pointe.

La colle utilisée est de la cyanoacrylate. Une nouvelle couche est ensuite appliquée, dans le but de noyer littéralement les fils (voir image C.3) et, ainsi, d'empêcher tout décollement.



FIG. C.2: Support pour polissage

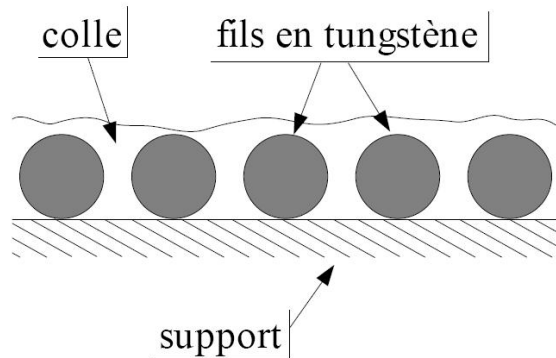


FIG. C.3: Collage des fils de tungstène

C.2.2 Polissage du levier

Le plus gros du polissage a été fait au papier de verre de grain 1200, jusqu'à obtenir un méplat de bonne dimension (FIG. C.4); cela peut s'observer à l'aide d'un simple microscope optique.

Il faut remarquer que, comme le collage des fils se fait à la main, tous les méplats ne sont pas identiques. Il faut donc s'assurer que le plus grand nombre soit utilisable, quitte à en sacrifier quelques uns.

Dès que la dimension moyenne des méplats convient (environ 2/3 du diamètre du fil), un grain plus fin est utilisé, à savoir du grain 4000. Le support est tenu à la main, pour pouvoir régulièrement adapter la pression, et la polisseuse est réglée pour avoir une vitesse de rotation minimale.

Cette opération dure environ 5 minutes.

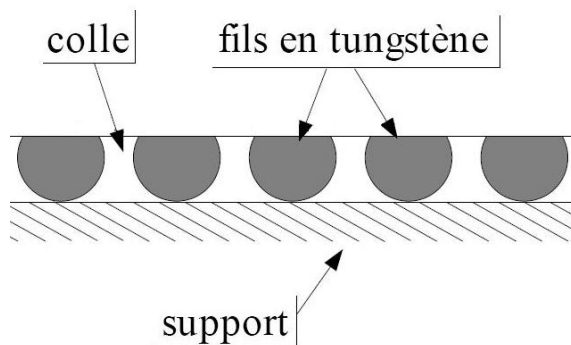


FIG. C.4: Fils de tungstène après polissage

Les finitions se font ensuite par pâte diamantée. Là aussi, le support est maintenu manuellement, et la polisseuse tourne à son régime le plus bas.

Une pâte de $3\mu\text{m}$ est utilisée pour commencer, et ce, pendant environ 30 minutes, l'opération étant suivie régulièrement au microscope.

Une fois que le méplat ne présente plus d'aspérité au microscope, la pâte actuelle est alors remplacée par une de $1\mu m$, pendant 5 minutes.

C.2.3 Résultats

Un premier aperçu au microscope optique est plus que convaincant (FIG. C.6), comparé aux premiers essais qui ont été faits (image C.5). On observe quand même quelques zones accidentées, sûrement dues au papier de verre de plus gros grain ; mais le fait est qu'il suffit d'une seule zone bien lisse, proche de l'extrémité du levier, pour que le laser puisse s'y réfléchir de manière spéculaire.

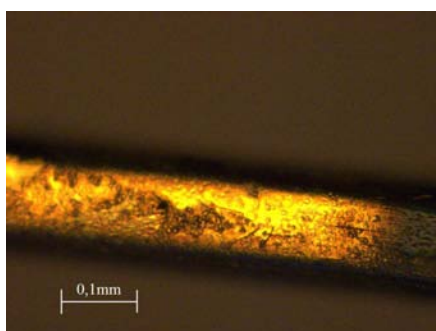


FIG. C.5: Fil poli - premiers essais

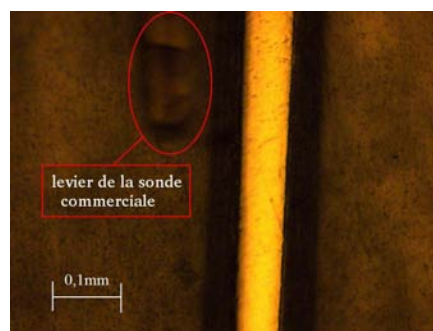


FIG. C.6: Fil poli - derniers essais

À titre de comparaison, nous pouvons apercevoir, sur l'image C.6, à gauche du fil de tungstène, une pointe AFM commerciale de dimension similaire au méplat réalisé.

Un scan a ensuite été fait par AFM en mode contact. Les résultats sont donnés ci-dessous (FIG. C.7).

Nous pouvons voir que le méplat présente un bon état de surface, marqué toutefois par un rayon de courbure non négligeable de 2.3mm ; cela ne pose pas de problème, en ce qui concerne la réflexion du laser, puisque la quantité lumineuse reçue par la photodiode (partie 2.4.1), après réflexion du laser sur le méplat du levier, équivaut aux deux tiers de ce que l'on reçoit avec un cantilever commercial, ce qui est suffisant pour l'utilisation de notre AFM.

Remarque : il faut préciser que cela n'est que notre second essai de polissage. Des améliorations peuvent donc être apportées.

C.3 Fabrication de la pointe

C.3.1 Principes de la réaction

Il s'agit d'une réaction d'électrolyse entre le fil de tungstène et une électrode de platine, lesquelles sont plongées dans un bain de soude à 1mol.L^{-1} (FIG. C.10).

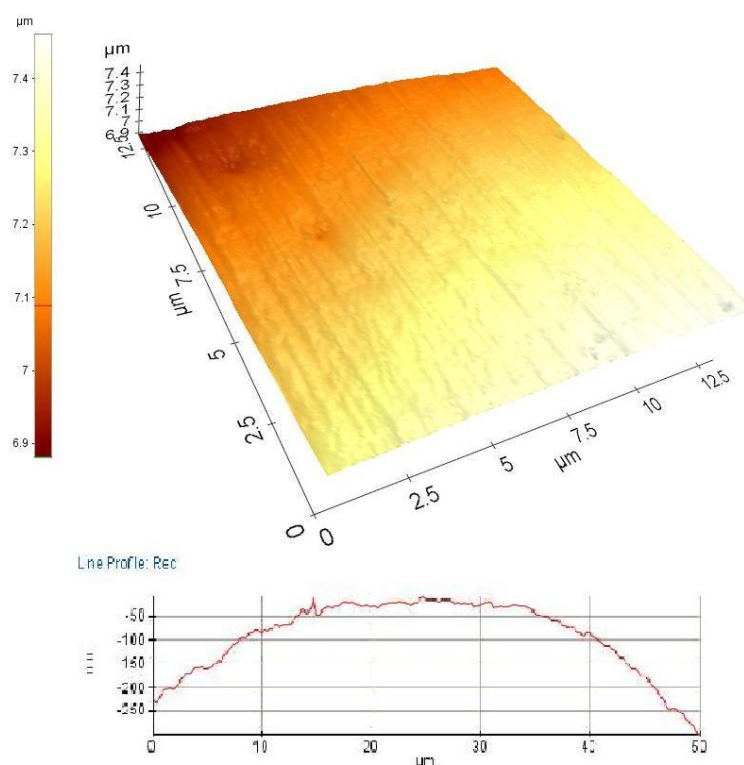
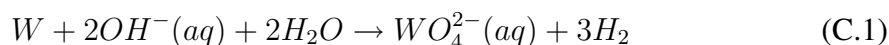


FIG. C.7: Scan d'un fil de tungstène par AFM contact, image 3D et coupe transversale

Les demi-réactions aux électrodes s'écrivent :

- à l'anode : $W + 8OH^-(aq) \rightarrow WO_4^{2-}(aq) + 4H_2O + 6e^-$
- à la cathode : $6H_2O + 6e^- \rightarrow 6OH^-(aq) + 3H_2$

La réaction bilan est donc de la forme :



C.3.2 Montage

Les fils de tungstène, après avoir été décollés et nettoyés à l'acétone, doivent être fixés pour pouvoir subir l'attaque chimique.

Deux possibilités s'offrent à nous (Photo C.8) : soit la pointe est collée sur une plaquette métallique (support classique des pointes AFM prémontées fournies par Park AFM), soit elle est simplement bloquée par un porte-pointe à pince pouvant être directement installé sur l'AFM (système fourni par Park AFM - anciennement PSIA).

Dans le premier cas, il faut s'assurer que le contact électrique se fasse entre la plaquette et la sonde. Pour cela, il est possible de coller la pointe avec de la laque d'argent, et de renforcer le tout par de la cyanoacrylate.

C.3. FABRICATION DE LA POINTE

En ce qui nous concerne, nous avons opté pour la seconde solution, un peu moins fiable, mais beaucoup plus simple.

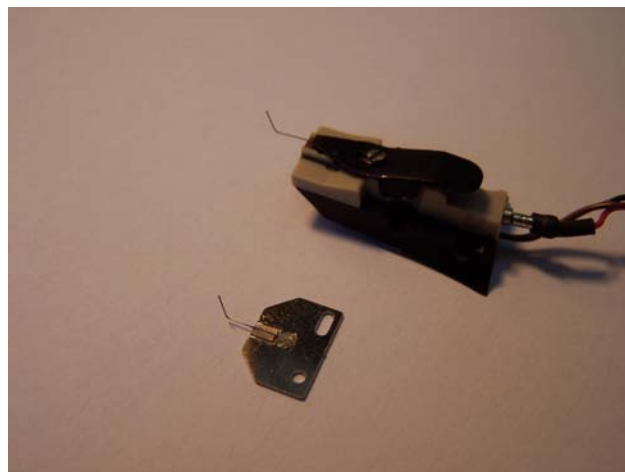


FIG. C.8: Systèmes de porte-pointes

Le tout est fixé sur un dispositif permettant de positionner la pointe précisément au niveau du bain de soude (Photo C.9).

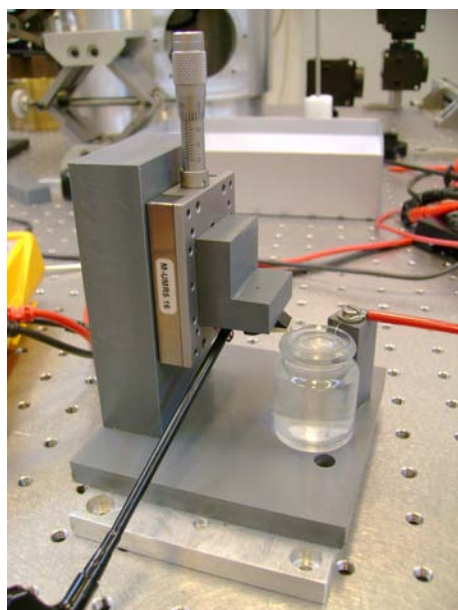


FIG. C.9: Montage de l'électrolyse

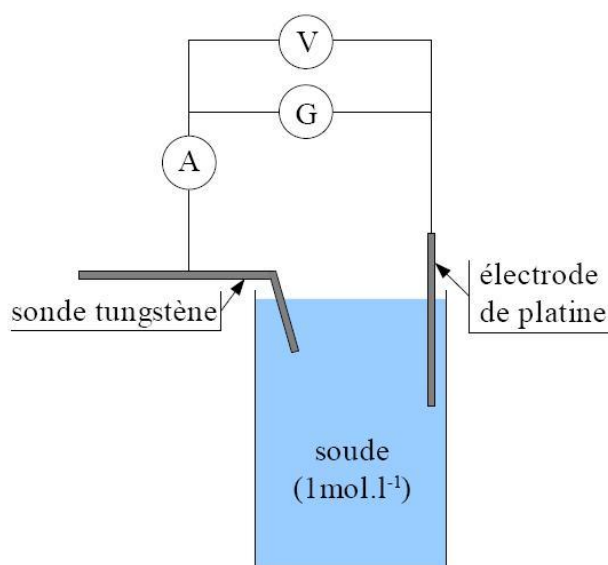


FIG. C.10: Principe du montage

La pointe de tungstène et l'électrode de platine sont reliées entre elles par un GBF. À cela s'ajoute un oscilloscope, permettant de mesurer la tension délivrée par le générateur, et un ampèremètre servant à suivre l'évolution de l'intensité du courant pendant la réaction (FIG. C.10).

Remarque : lorsque la pointe de tungstène pénètre dans la soude, un ménisque se forme par capillarité (FIG. C.11). Il faut donc faire attention à ne pas immerger trop profondément la sonde.

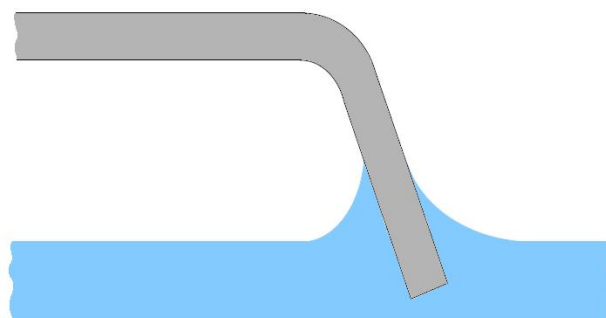


FIG. C.11: Formation du ménisque

C.3.3 Manipulations et résultats

Le GBF est réglé pour délivrer une tension alternative de 1V RMS, à une fréquence de 100Hz. Ces valeurs ont été validées par les essais de G.Wurtz [81]. L'évolution du courant d'électrolyse au cours du temps est donnée par le graphe C.12.

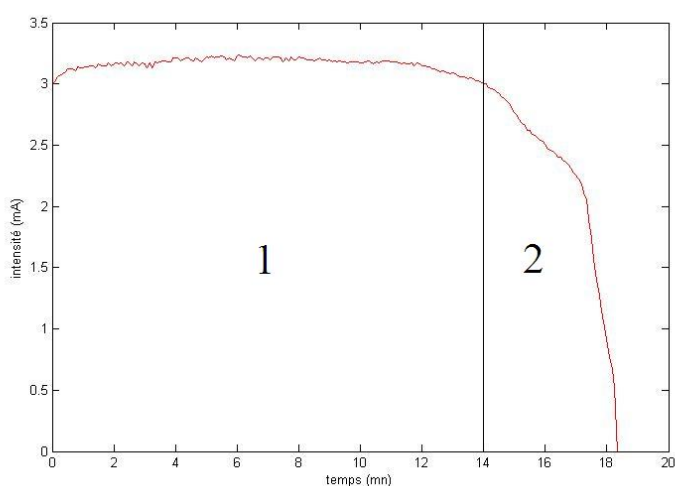


FIG. C.12: Evolution du courant au cours du temps

Deux étapes peuvent être distinguées :

- La première étape est marquée par une légère décroissance de l'intensité. Le ménisque, formé à l'interface air-soude-sonde (FIG. C.11), donne alors sa forme co-

C.3. FABRICATION DE LA POINTE

nique à la pointe. Il faut remarquer qu'à ce moment, l'apparition de bulles de dihydrogène, le long de la tige de tungstène, est significatif de la qualité finale de l'état de surface de la pointe.

- lors de la seconde étape, le courant chute brutalement jusqu'à atteindre une valeur nulle ; tout le tungstène, initialement immergé, a alors réagi, ce qui fait que la sonde n'est plus en contact avec la soude.

D'après la thèse de G.Wurtz, de bons résultats peuvent être obtenus en stoppant la réaction quand $I = \frac{2}{3}I_{max}$, I_{max} étant le courant maximal observé pendant la réaction.

Ci-dessous se trouve une image par microscopie optique classique de l'extrémité de la pointe après attaque chimique (figure C.13).



FIG. C.13: Pointe AFM en tungstène après attaque chimique, microscopie optique

Pour un agrandissement plus important, il est nécessaire d'utiliser un microscope électronique à balayage (figure C.14). Sur la seconde image, observons un rayon de courbure d'environ 100nm, ce qui est satisfaisant pour nos premiers essais.

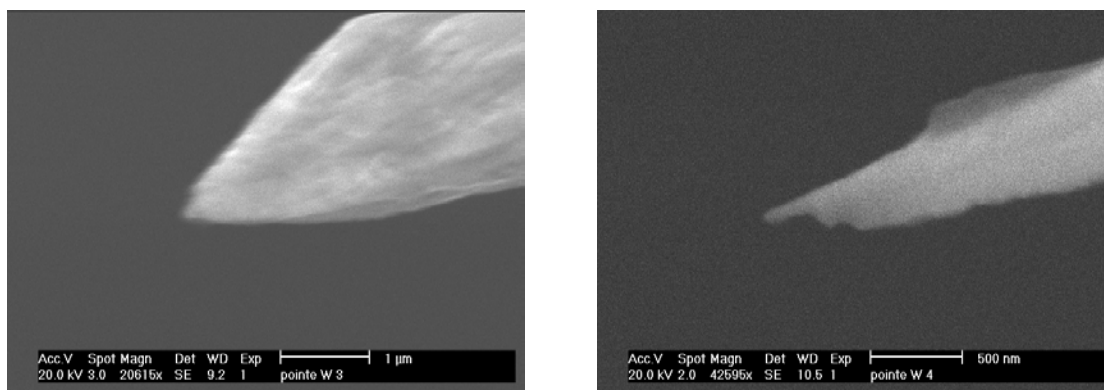


FIG. C.14: Pointe AFM en tungstène après attaque chimique, MEB

Conclusion

Cette annexe nous a permis d'établir les différentes étapes nécessaires à la fabrication de sondes AFM en tungstène. Du fait du mode de fonctionnement de notre propre microscope, caractérisé par un asservissement par laser de la sonde, un méplat se doit d'être fait par polissage au dos du levier de cette dernière. La seconde étape consiste à affiner l'extrémité de la pointe en contact avec l'échantillon, et ce par attaque chimique. Les résultats que nous avons obtenus sont prometteurs, mais nous observons actuellement de grandes difficultés à adapter ces sondes à notre microscope AFM. Ce problème est essentiellement dû à la forte constante de raideur du levier en tungstène.

Annexe D

Traitement du signal

Sommaire

D.1 Généralités	186
D.1.1 Généralités sur l'échantillonnage	186
D.1.2 Fréquence d'échantillonnage - fréquence d'acquisition	187
D.2 Système de détection synchrone	187
D.2.1 Principe d'un lock-in	187
D.2.2 Signal de référence	188
D.2.3 Tests	189
D.3 Suppression du bruit de mesure	190
D.3.1 Principes	190
D.3.2 Rééchantillonnage	190
D.3.3 Tests	191

Nomenclature

- Scalaires :

A : intensité du signal
 f : fréquence du signal
 F_s : fréquence d'échantillonnage
 $R_{s/b}$: rapport signal sur bruit
 T : période

- Lettres grecques :

ω : pulsation du signal
 θ : phase du signal

Introduction

La dernière partie du chapitre 2 traitait des travaux numériques s'étant déroulés au sein de notre laboratoire. Dans le but de d'extraire le signal utile du bruit de mesure, différents outils numériques ont été élaborés à partir des logiciels Labview et Matlab. Ces outils seront décrits en détail, après quelques rappels sur les principes d'acquisition et de traitement du signal.

D.1 Généralités

D.1.1 Généralités sur l'échantillonnage

L'échantillonnage consiste à numériser périodiquement la valeur d'un signal, ce qui implique une double discrétisation :

- une discrétisation de la valeur mesurée : après numérisation, une valeur correspond toujours à un nombre fini de bits ; d'autre part, la plage de mesure d'un dispositif d'échantillonnage est finie, et par conséquent, le nombre de valeurs mesurables est lui aussi fini.

- une discrétisation temporelle : le signal n'est connu que toutes les T secondes, T étant la période d'échantillonnage. Dans le cas d'un signal périodique, il est nécessaire de s'assurer du respect du théorème de Nyquist-Shannon [83], lequel nous dit que l'échantillonnage d'un signal de fréquence f doit se faire avec une fréquence d'échantillonnage F_s supérieure à $2f$. Les images D.1 et D.2 nous montrent respectivement les cas où $F_s = 4f$ et $F_s = \frac{3}{4}f$.

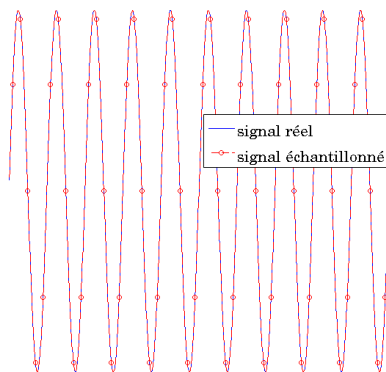


FIG. D.1: Respect du théorème de Nyquist-Shannon, $F_s = 4f$

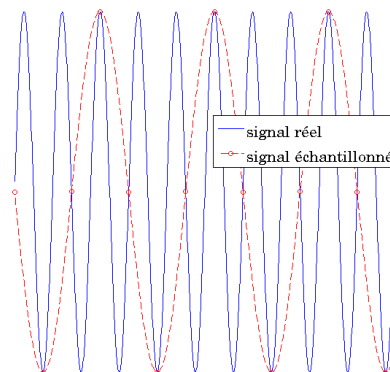


FIG. D.2: Non-respect du théorème de Nyquist-Shannon, $F_s = \frac{3}{4}f$

La carte d'acquisition dont nous disposons est une NI PCI-6251 dont voici les caractéristiques :

- précision : 16bit/ech.
- mémoire embarquée : 4095ech.
- fréquence d'échantillonnage : 800kech/s sur 2 voies, 1.25Mech/s sur 1 voie.
- synchronicité : un très faible déphasage est visible lors de l'acquisition sur 2 voies.
- continuité : aucune discontinuité n'a pu être détectée, même lorsque la mémoire embarquée est remise à jour.

D.1.2 Fréquence d'échantillonnage - fréquence d'acquisition

Les outils, que nous décrirons par la suite, nécessitent une connaissance parfaite, d'une part de la fréquence du signal utile, et d'autre part de la fréquence d'acquisition.

Dans le premier cas, la fréquence du signal s'obtient par analyse (par transformée de Fourier) du signal de référence, c'est-à-dire du courant électrique imposé au piezo de l'AFM. Ce courant étant relativement exempt de tous bruits parasites, la fréquence est donc déterminée aisément avec une très grande précision.

Dans le second cas, il existe une petite subtilité qui, si elle est négligée, peut engendrer de multiples erreurs. En effet, si la plupart des cartes d'acquisition actuelles permettent de choisir la fréquence d'échantillonnage, il faut savoir que la période d'acquisition (inverse de la fréquence) se doit d'être un multiple du pas de temps minimum de l'horloge interne de la carte, ce qui restreint les possibilités en terme de fréquence d'échantillonnage. Ainsi, si la fréquence qui est demandée ne correspond pas à celles autorisées, la carte d'acquisition nous imposera la fréquence supérieure la plus proche. Ce problème a été pris en compte par la suite.

D.2 Système de détection synchrone

D.2.1 Principe d'un lock-in

Un lock-in est prévu pour repérer un signal périodique (courant AC) noyé dans le bruit. Il agit comme un filtre passe-bande autour d'une fréquence de référence (i.e. la même que celle du signal, supposée connue). Son fonctionnement est expliqué par la figure [D.3](#). Par souci de simplicité, le cas traité est celui d'un signal sinusoïdal.

Le signal réel est donc multiplié par un signal de référence (signal virtuel sinusoïdal dans notre cas) de même pulsation ω , puis est filtré en sortie par un filtre passe-bas, ce qui nous permet d'obtenir l'amplitude A du signal et sa phase θ (ou plutôt son déphasage avec le signal de référence). Différents filtres sont proposés par Labview, auxquels nous avons rajouté un système de moyenne permettant d'atténuer le bruit des grandeurs X et Y .

À titre d'illustration, on voit sur les figures [D.4](#) et [D.5](#) l'évolution au cours du temps de ces grandeurs, dans le cas d'un signal non bruité, puis bruité, après filtrage par un filtre

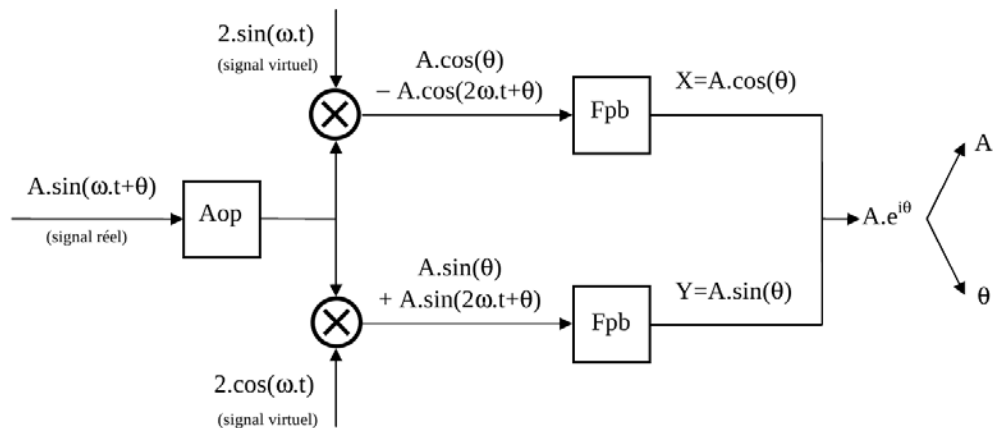


FIG. D.3: Principe de la détection synchrone

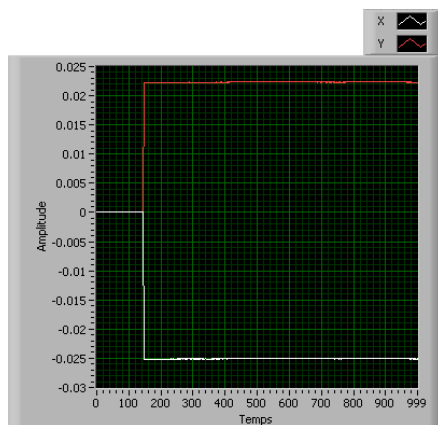


FIG. D.4: Évolution des grandeurs X et Y pour un signal non bruité

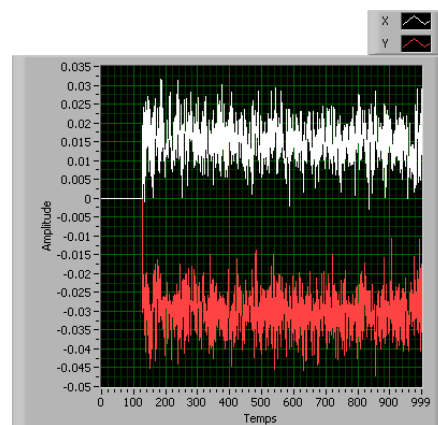


FIG. D.5: Évolution des grandeurs X et Y pour un signal bruité

passé-bas.

Les parasites que l'on observe sur la seconde figure peuvent, comme nous l'avons dit, être supprimés par la méthode des moyennes.

D.2.2 Signal de référence

Deux solutions sont possibles en ce qui concerne l'utilisation du signal de référence :

- Soit ce dernier est utilisé directement au cours de la mesure. L'avantage est qu'il est inutile de connaître la fréquence. Cependant, cela nécessite une acquisition sur deux voies, ce qui réduit fortement la fréquence d'acquisition maximale. De plus, il faut absolument que ces deux voies soient isolées. Sans cela, le "ghost" (ou signal fantôme) du signal de référence peut se retrouver sur la voie du signal de mesure, ce qui fausse gran-

dement les résultats, les deux signaux ayant la même fréquence.

- Soit on extrait la fréquence du signal de référence par transformée de Fourier, et on recrée numériquement un signal sinusoïdal à la même fréquence. Ainsi, seule l'acquisition du signal de mesure est nécessaire. L'inconvénient est que la fréquence de référence doit être connue avec une très grande précision, pour que le déphasage entre le signal de mesure et celui de référence soit constant.

D.2.3 Tests

Dans le cadre de notre travail portant sur l'étude du comportement d'une sonde éclairée par des ondes évanescentes à la surface d'un matériau, il est intéressant d'observer comment réagit le lock-in lorsque le signal utile augmente (simulant par exemple le passage d'une pointe au-dessus d'un matériau A, puis d'un matériau B). La figure D.6 nous montre l'évolution du signal de sortie (après filtrage) lorsque celui d'entrée passe de 0.3mV à 0.6mV, le bruit de mesure étant constant. Le rapport signal/bruit passe alors de $\frac{1}{1000}$ à $\frac{1}{500}$.

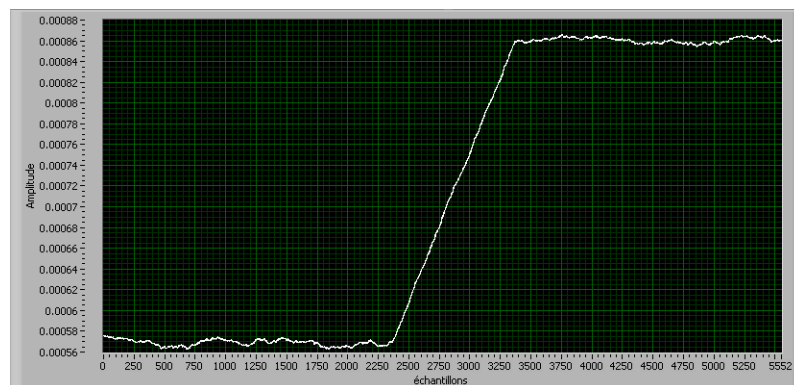


FIG. D.6: Détection de l'augmentation du signal utile par détection synchrone

Bien que l'augmentation du signal utile soit instantanée, la réaction du lock-in demande un certain laps de temps, cela étant dû au système de moyenne qui doit se faire, dans le cas de signaux fortement bruités, sur de grands échantillons. Dans le cas présenté ici, le temps nécessaire à la stabilisation du lock-in est de une seconde. Cela correspond au temps nécessaire à l'acquisition d'un "paquet de données" (ou buffer) auquel est appliquée la méthode des moyennes. De plus, les valeurs obtenues après stabilisation ne correspondent pas exactement à celles attendues (0.57mV et 0.88mV, au lieu de 0.3mV et 0.6mV). Pour résoudre ce problème, il est possible d'accroître la taille du buffer sur lequel se fait la moyenne pour optimiser le filtrage, mais cela a pour conséquence d'accroître le temps de réponse du lock-in. En ce qui nous concerne, nous privilégions la rapidité du lock-in, et non pas sa précision.

D.3 Suppression du bruit de mesure

D.3.1 Principes

L'outil présenté ici a pour but d'atténuer le bruit de mesure d'un signal périodique. En supposant être en présence d'un bruit blanc, ce dernier peut s'annuler par un simple système de moyenne. En effet, si l'on considère que s_i et b_i sont respectivement le signal utile et le bruit au temps t_i , alors le signal débruité S_i s'obtient par :

$$S_i = \frac{1}{i} \sum_i (s_i + b_i) = \frac{1}{i} \sum_i s_i + \frac{1}{i} \sum_i b_i \rightarrow s_i \quad (\text{D.1})$$

Nous travaillons ici avec un système de buffers. Ces derniers permettent de stocker le signal mesuré sous forme de tableaux de taille fixe et paramétrable. Ainsi, lorsqu'un buffer est plein, un nouveau s'ouvre et commence à se remplir, au fur et à mesure que les données arrivent. Dans le cas d'un signal périodique, il faut donc que ces buffers, sur lesquels se fait la moyenne, soient en phase (FIG. D.7). Cependant, cela nécessite que la fréquence d'acquisition soit un multiple de la fréquence du signal. Sans cela, on observe des décalages (déphasages) entre les différents buffers successifs (FIG. D.8), ce qui risque de faire disparaître le signal utile de sortie.

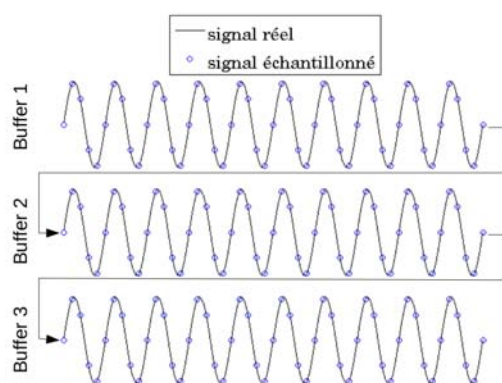


FIG. D.7: Échantillonnage avec buffers en phase

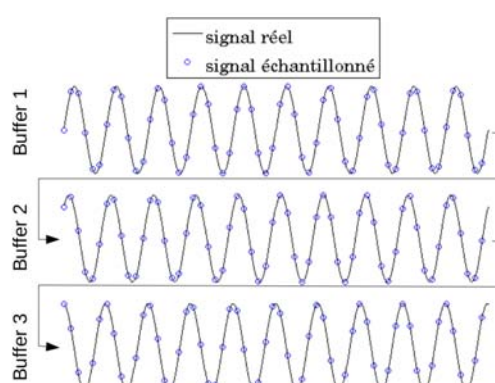


FIG. D.8: Échantillonnage avec buffers déphasés

D.3.2 Rééchantillonnage

Il est rarement possible que les buffers soient en phase. En effet, la fréquence du signal est, dans de nombreux cas, difficilement réglable avec une précision satisfaisante, alors que le choix de la fréquence d'acquisition est fortement limitée par la fréquence maximale de l'horloge interne de la carte d'acquisition. Pour pallier ce problème, nous avons choisi de déterminer de nouveaux points, en phase d'un buffer à l'autre, par interpolation, à partir des points de mesure déphasés, comme le montre la figure D.9.

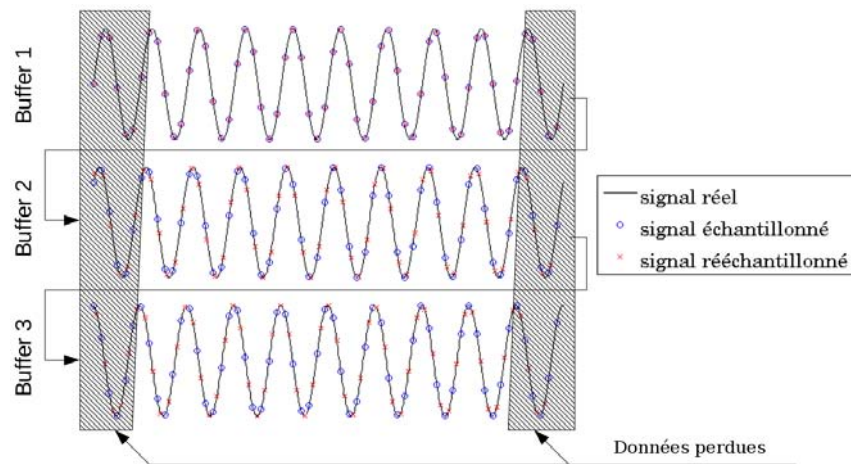


FIG. D.9: Rééchantillonnage du signal

Pour que tous les buffers soient compatibles, il est nécessaire de sacrifier un certain nombre de points, mais ces pertes deviennent négligeables lorsque le nombre de périodes stockées dans chaque buffer augmente.

Les figures D.10 et D.11 nous montrent le cas de l'acquisition d'un signal purement sinusoïdal (sans bruit), avant et après rééchantillonnage. Chaque ligne représente deux périodes (100000 périodes sont représentées selon l'axe vertical).

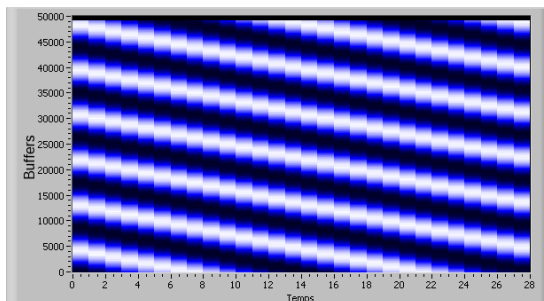


FIG. D.10: Évolution des buffers avant rééchantillonnage

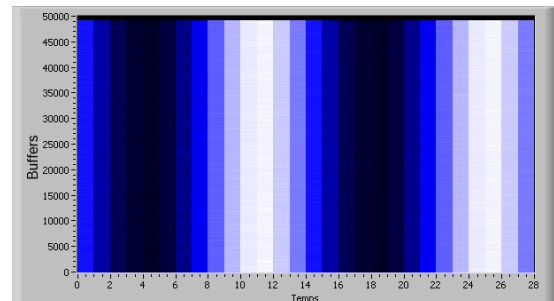


FIG. D.11: Évolution des buffers après rééchantillonnage

D.3.3 Tests

Les tests que l'on décrit ici ont été faits sur un signal sinusoïdal d'amplitude 32mV et de fréquence 70Hz, auquel a été ajouté du bruit blanc (d'amplitude réglable). Les figures D.12 et D.13 nous donnent l'allure du signal après traitement (rééchantillonnage et moyenne) pour des rapports signal/bruit de $\frac{1}{10}$ et $\frac{1}{1000}$.

Dans le premier cas, le résultat s'obtient en moins d'une seconde, et est tout à fait correct compte tenu du nombre de points dont on dispose (seulement 14 points par pé-

D.3. SUPPRESSION DU BRUIT DE MESURE

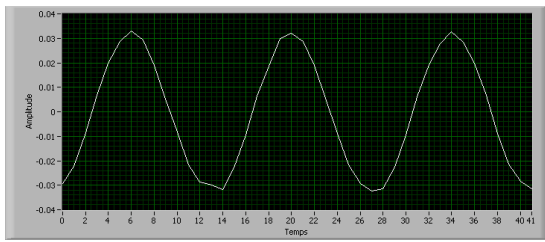


FIG. D.12: Filtrage d'un signal sinusoïdal bruité ($R_{s/b} = \frac{1}{10}$) - temps de calcul : 1 sec.

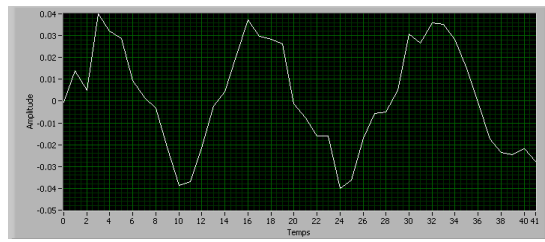


FIG. D.13: Filtrage d'un signal sinusoïdal bruité ($R_{s/b} = \frac{1}{1000}$) - temps de calcul : 100 sec.

riodes, à cause de la haute fréquence du signal). Par contre, dans le cas fortement bruité, le résultat exposé ici est obtenu au bout de 100 secondes. Les mêmes tests ont été réalisés dans le cas d'un signal de la forme $e^{(\sin \omega t - 1)}$ avec une fréquence 35Hz, dans le but de simuler le signal diffusé par une pointe AFM vibrant au dessus d'une interface. Dans ce cas, le rapport signal sur bruit a été imposé à $R_{s/b} = \frac{1}{1000}$. Les résultats obtenus au bout de 100 secondes sont représentés par la figure D.14. Nous pouvons voir que les pics du signal ressortent parfaitement du bruit.

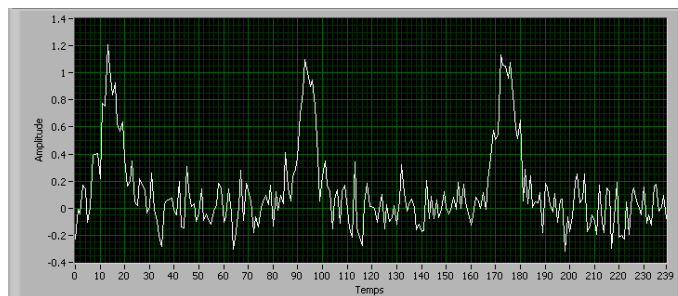


FIG. D.14: Filtrage d'un signal bruité de la forme $e^{(\sin \omega t - 1)}$ ($R_{s/b} = \frac{1}{1000}$) - temps de calcul : 100 sec.

Conclusion

Nous avons vu dans cette dernière annexe les différents outils numériques nécessaires au traitement d'un signal périodique noyé dans le bruit de mesure (détection par lock-in et extraction par la méthode des moyennes). Les résultats obtenus pour différents cas tests ont été concluant.

Bibliographie

- [1] Pendry, J.B. Radiative exchange of heat between nanostructures. *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 11, No. 35, pp 6621–6633, 1999.
- [2] Carminati, R. and Greffet, J.J. Near-field effects in spatial coherence of thermal sources. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 82, No. 8, pp 1660–1633, 1999.
- [3] Shchegrov, A.V., Joulain, K., Carminati, R. and Greffet, J.J. Near-field spectral effects due to electromagnetic surface excitations. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 85, No. 7, pp 1548–1551, 2000.
- [4] Greffet, J.J., Carminati, R., Joulain, K., Mulet, J.P., Mainguy, S. and Chen, Y. Radiative exchange of heat between nanostructures. *Nature (London)*, Vol. 416, No. 6876, pp 61–64, 2002.
- [5] Joulain, K., Carminati, R., Mulet, J.P. and Greffet, J.J. Definition and measurement of the local density of electromagnetic states close to an interface. *Phys. Rev. B*, Vol. 68, No. 24, pp 2454051–24540510, 2003.
- [6] Marquier, F., Joulain, K., Mulet, J.P., Carminati, R., Greffet, J.J. and Chen, Y. Coherent spontaneous emission of light by thermal sources. *Phys. Rev. B*, Vol. 69, No. 15, pp 155412–1–11, 2004.
- [7] Wilde, Y. De, Formanek, F., Carminati, R., Gralak, B., Lemoine, P.A., Joulain, K., Mulet, J.P., Chen, Y. and Greffet, J.J. Thermal radiation scanning tunnelling microscopy. *Nature (London)*, Vol. 444, No. 7120, pp 740–743, 2006.
- [8] Hafner, C. The generalized multiple multipole technique for computational electromagnetics. 1990.
- [9] Doicu, A., Eremin, Y. A. and Wriedt, T. Scattering of evanescent waves by a particle on or near a plane surface. Vol. 134, No. 1, pp 1–10, 2001.
- [10] Wriedt, T. and Doicu, A. Light scattering from a particle on or near a surface. Vol. 152, No. 1, pp 376–384, 1998.
- [11] Doicu, A., Eremin, Y. A. and Wriedt, T. Convergence of the t-matrix method for light scattering from a particle on or near a surface. Vol. 159, No. 1, pp 266–277, 1999.
- [12] Moreno, F. and González, F. *Light Scattering from Microstructures*. Springer, 2000.
- [13] Hoekstra, Alfons G. and Sloot, Peter M. A. New computational techniques to simulate light scattering from arbitrary particles. *Particle and Particle Systems Characterization*, Vol. 11, pp 189–193, 1994.

- [14] Purcell, E. M. and Pennypacker, C. R. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains. 1973.
- [15] Nebeker, B.M., de la Peña, J.L. and Hirleman, E.D. Comparisons of the discrete-dipole approximation and modified double interaction model methods to predict light scattering from small features on surfaces. *J. Quant. Spect. and Rad. Trans.*, Vol. 70, No. 1, pp 749–759, 2001.
- [16] Loke, Vincent L.Y., Mengüç, M. Pinar and Nieminen, Timo A. Discrete-dipole approximation with surface interaction : Computational toolbox for matlab. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 112, No. 11, pp 1711 – 1725, 2011.
- [17] Taflove, A. and Hagness, S. *Computational Electrodynamics, 3ème éd.* Artech House, 2005.
- [18] Capoglu, I.R. and Smith, G.S. A direct time-domain FDTD near-field-to-far-field transform in the presence of an infinite grounded dielectric slab. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, Vol. 52, No. 12, pp 3805–3814, 2006.
- [19] Muller, J., Parent, G., Jeandel, G. and Lacroix, D. Finite-difference time-domain and near-field-to-far-field transformation in the spectral domain : application to scattering objects with complex shapes in the vicinity of a semi-infinite dielectric medium. *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 28, pp 868–878, 2011.
- [20] Günther, P., Fischer, U.Ch. and Dransfeld, K. Scanning near-field acoustic microscopy. *App. Phys. B Photophysics and Laser Chemistry*, Vol. 48, No. 1, pp 89–92, 1989.
- [21] Yu, Z. and Boseck, S. Scanning acoustic microscopy and its applications to material characterization. Vol. 67, No. 4, pp 863–891, 1995.
- [22] Oh, S., Kim, J. and Yun, J. Antenna measurement on cylindrical surface in fresnel region using direct far-field measurement system. *ETRI Journal*, Vol. 29, No. 2, pp 135–141, 2007.
- [23] D., Courjon and C., Bainier. *Le champ proche optique : théorie et applications.* Springer, 2001.
- [24] Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. *Solid state physics.* Saunders College, 1976.
- [25] Kittel, C. *Physique de l'état solide - 7ème éd.* Dunod, 1998.
- [26] Mulet, J.P. *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 Paris XI, UFR Scientifique d'Orsay, Mars 2003.
- [27] Michel, B., Jean-Pierre, F. and Jacques, R. *Optique et physique ondulatoire : optique géométrique et optique physique, phénomènes de propagation - 3ème éd.* Dunod, 1986.
- [28] Pérez, J.P. and Anterrieu, E. *Optique : fondements et applications - 7ème éd.* Dunod, 2004.

-
- [29] Benson, H., Amrouni, D., Séguin, M., Villeneuve, B. and Marcheterre, B. *Physique . 3 , Ondes, optique et physique moderne*. De Boeck, 2005.
- [30] de Broglie, L. *Recherches sur la Théorie des Quanta*. PhD thesis, Université de Paris, Novembre 1924.
- [31] Aigouy, L., Wilde, Y.de and Frétygny, C. *Les nouvelles microscopies : à la découverte du nanomonde*. Paris : Belin, 2006.
- [32] Binnig, G. and Quate, C.F. Atomic force microscope. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 56, No. 9, pp 930–934, 1985.
- [33] Giessibl, F.J. Advances in atomic force microscopy. *Rev. of Modern Phy.*, Vol. 75, No. 1, pp 949–983, 2003.
- [34] Tipler, P.A. and Llewellyn, R.A. *Modern Physics, 4^{ème} éd.* W H Freeman & Co, 2003.
- [35] Synge, E.H. A suggested method for extending the microscopic resolution into the ultramicroscopic region. *Phil. Mag.*, Vol. 6, pp 356, 1928.
- [36] D.W. Pohl, W. Denk and Lanz, M. Optical stethoscopy : image recording with resolution $\lambda/20$. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 44, pp 651–653, 1984.
- [37] Yee, K. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, Vol. 14, pp 302–307, 1966.
- [38] L., Tan E. Fundamental schemes for efficient unconditionally stable implicit finite-difference time-domain methods. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, Vol. 56, No. 1, pp 170–177, 2008.
- [39] T., Namiki. 3D ADI-FDTD method-unconditionally stable time-domain algorithm for solving full vector maxwell's equations. *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, Vol. 48, No. 10, pp 1743–1748, 2000.
- [40] Shao-Bin, Liu and San-Qiu, Liu. One-step alternating direction implicit FDTD algorithm. *Chinese Physics*, Vol. 13, No. 11, pp 1892, 2004.
- [41] Mur, G. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations. *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, Vol. 23, pp 377–382, 1981.
- [42] Liao, Z.P., Wong, H.L., Yang, B.P. and Yuan, Y.F. A transmitting boundary for transient wave analyses. *Scientia Sinica (Series A)*, Vol. 27, pp 1063–1076, 1984.
- [43] Berenger, J. . Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, Vol. 127, No. 2, pp 363–379, 1996. Cited By (since 1996) : 402.
- [44] Chew, W.C. and Weedon, W.H. A 3D perfectly matched medium from modified maxwell's equations with stretched coordinates. *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, Vol. 7, pp 599–604, 1994.
-

- [45] Kuzuoglu M, Mittra R. Frequency dependence of the constitutive parameters of causal perfectly matched anisotropic absorbers. *IEEE Microw Guided W*, Vol. 6, No. 12, pp 447–449, 1996.
- [46] Luebbers, R. J. and Hunsberger, F. FDTD for nth-order dispersive media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 40, pp 1297–1301, 1992.
- [47] Abdijalilov, K. and Schneider, J.B. Analytic field propagation TFSF boundary for FDTD problems involving planar interfaces : Lossy material and evanescent fields. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, Vol. 5, pp 454–458, 2006.
- [48] Schneider, J.B. and Abdijalilov, K. Analytic field propagation TFSF boundary for FDTD problems involving planar interfaces : PECs, TE, and TM. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, Vol. 54, No. 54, pp 2531–2542, 2006.
- [49] Venkatarayalu, Neelakantam V., Gan, Yeow-Beng, Lee, Robert and Li, Le-Wei. Application of hybrid FETD-FDTD method in the modeling and analysis of antennas. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 56, pp 3068–3072, 2008.
- [50] Venkatarayalu, N. V. and Li, L.-W. Simulation of electromagnetic radiation and scattering using hybrid higher order FETD-FDTD method. *Applied Electromagnetics Conference*, pages 1–4, 2007.
- [51] Diamanti, Nectaria and Giannopoulos, Antonios. Implementation of ADI-FDTD subgrids in ground penetrating radar FDTD models. *Journal of Applied Geophysics*, Vol. 67, No. 4, pp 309 – 317, 2009.
- [52] Dey, S. and Mittra, R. A locally conformal finite difference time domain (FDTD) algorithm for modeling three dimensional perfectly conducting objects. *Microwave and Guided wave Letters*, Vol. 7, No. 9, pp 273–275, 1997.
- [53] Dey, S. and Mittra, R. A locally conformal finite difference time domain (FDTD) algorithm for modeling 3D objects with curved surfaces. *1997*, Vol. 4, pp 2172–2175, IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium.
- [54] Dey, S. and Mittra, R. A locally conformal finite difference time domain technique for modeling arbitrary shaped objects. *IEEE, Antennas and Propagation Society International Symposium*, Vol. 1, pp 584–587, 1998.
- [55] Yu, W. and Mittra, R. A conformal FDTD algorithm for modeling perfectly conducting objects with curve-shaped surfaces and edges. *Microwave and Optical Technology Letters*, Vol. 27, No. 2, pp 136–138, 2000.
- [56] Yu, W. and Mittra, R. A conformal finite difference time domain technique for modeling curved dielectric surfaces. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, Vol. 11, No. 1, pp 25–27, 2001.
- [57] Schelkunoff, S.A. Some equivalence theorems of electromagnetics and their application to radiation problems. *Bell System Tech. J.*, Vol. 15, pp 92–112, 1936.
- [58] Balanis, C.A. *Advanced Engineering Electromagnetics*. Wiley, 1989.
- [59] Sipe, J.E. New green-function formalism for surface optics. *J. Opt. Soc. Am. B*, Vol. 4, No. 4, pp 481–489, 1987.

-
- [60] Muller, J., Parent, G., Fumeron, S., Jeandel, G. and Lacroix, D. Near-field and far-field modeling of scattered surface waves. application to the apertureless scanning near-field optical microscopy. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 112, No. 7, pp 1162–1169, 2011.
- [61] Desanto, J. A. Green's function for electromagnetic scattering from a random rough surface. *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 15, pp 283–288, 1974.
- [62] Ogura, Hisanao and Takahashi, Nobuyuki. Green function and radiation over a random rough surface. *Journal of The Optical Society of America A-optics Image Science and Vision*, Vol. 2, 1985.
- [63] Mudaliar, S. Mean dyadic green's function of a randomly rough surface. *Canadian journal of physics*, Vol. 72, No. 1-2, pp 20–29, 1994.
- [64] Greffet, J.-J. Scattering of electromagnetic waves by rough dielectric surfaces. *Physical Review B*, Vol. 37, pp 6436–6441, 1988.
- [65] Baylard, Christophe, Greffet, Jean-Jacques and Maradudin, Alexei A. Coherent reflection factor of a random rough surface : applications. *Journal of The Optical Society of America A-optics Image Science and Vision*, Vol. 10, 1993.
- [66] Biehs, S.-A. and Greffet, J.-J. Near-field heat transfer between a nanoparticle and a rough surface. *Physical Review B*, Vol. 81, 2010.
- [67] Cheng, David. On the formulation of the dyadic green's function in a layered medium. *Electromagnetics*, Vol. 6, pp 171–182, 1986.
- [68] Polimeridis, Athanasios G., Yioultis, Traianos V. and Tsiboukis, Theodoros D. A robust method for the computation of green's functions in stratified media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 55, pp 1963–1969, 2007.
- [69] Videen, G. Light scattering from a sphere behind a surface. *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 10, No. 1, pp 110–117, 1993.
- [70] Arnoldus, F.H. and Foley, J.T. Transmission of dipole radiation through interfaces and the phenomenon of anti-critical angles. *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 21, No. 6, pp 1109–1117, 2004.
- [71] Bohren, C. F. and Huffman, D. R. *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley-Interscience, 1983.
- [72] H., Fröhlich. *Theory of dielectrics : dielectric constant and dielectric loss*. Clarendon Press, 1958.
- [73] Okamoto, Takayuki and Yamaguchi, Ichirou. Optical absorption study of the surface plasmon resonance in gold nanoparticles immobilized onto a gold substrate by self-assembly technique. *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 107, pp 10321–10324, 2003.
- [74] Schatz, George and Shuford, Kevin. Optical properties of gold nanospheres. *Spring Nanoscape*, Vol. 2, No. 1, pp 27–33, 2005.
- [75] Harris, Nadine, Ford, Michael J, Mulvaney, Paul and Cortie, Michael B. Tunable infrared absorption by metal nanoparticles : The case for gold rods and shells.
-

- [76] Jackson, J.D. *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1975.
- [77] Palik, E.D. *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, 1985.
- [78] Palik, E.D. *Handbook of optical constants of solids II*. Academic Press, 1991.
- [79] Palik, E.D. *Handbook of optical constants of solids III*. Academic Press, 2009.
- [80] Milandri, A. *Détermination des paramètres radiatifs d'un isolant fibreux : théorie de Mie, oscillateurs de Lorentz et méthode inverse*. PhD thesis, Université Henri Poincaré, Nancy-I, Décembre 2000.
- [81] Wurtz, G. *Développement d'un microscope optique en champ proche utilisant une sonde métallique : adaptation à l'étude de composants de l'optoélectronique et à la mise en évidence de l'effet de pointe optique*. PhD thesis, Université de Troyes, Janvier 2000.
- [82] Wioland, H. *Conception, réalisation et caractérisation d'un microscope optique en champ proche en utilisant une sonde sans ouverture. Application à l'étude d'échantillons*. PhD thesis, Université de Troyes, Janvier 2000.
- [83] Shannon, C.E. Communication in the presence of noise. *Proc. Institute of Radio Engineers*, Vol. 37, No. 1, pp 10–21, 1949.

Titre : Réalisation et modélisation d'un microscope à sonde locale appliqué à l'étude du rayonnement thermique en champ proche.

Mots clés : Champ proche thermique, microscopie optique en champ proche, FDTD, transformation champ proche/champ lointain.

Résumé : De récentes études ont montré que les ondes électromagnétiques, proche d'une structure diffusante telle qu'une pointe de microscope à force atomique (AFM), peuvent être diffusées et détectées en champ lointain. Ainsi, la détection d'ondes de surface par microscopie optique en champ proche (SNOM) est une technique prometteuse dans le cadre des mesures thermiques aux petites échelles. Une telle technologie prend alors le nom de microscope TRSTM (Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy).

Le travail de thèse présenté dans ce manuscrit se scinde en deux étapes. La première a trait à nos travaux expérimentaux basés sur le montage d'un dispositif TRSTM. Nous en décrivons les différentes composantes, ainsi que les difficultés rencontrées liées à son fonctionnement. En outre, divers outils numériques, destinés à détecter et extraire tout signal périodique utile, sont développés. La seconde étape se concentre sur nos travaux numériques. Nous y proposons un modèle de diffusion d'ondes électromagnétiques basé sur la FDTD (Finite-Difference Time-Domain) et la transformation champ proche/champ lointain. Ce modèle a été validé par l'étude de dipôles, puis de sphères dispersives à proximité d'un substrat diélectrique. Alors, un certain nombre de simulations de diffusion d'ondes évanescentes par une pointe, de diverses formes et de divers matériaux, proche d'une interface, est présenté.

Title : Realization and modeling of a scanning probe microscope applied to the study of thermal near-field radiation.

Key-words : Thermal near-field, SNOM, FDTD, near-field to far-field transformation.

Abstract : Recent studies have shown that electromagnetic waves (in particular the thermal radiation), in the vicinity of a scattering object such as an atomic force microscope (AFM), can be scattered from near to far-field and thus detected. The detection of surface waves through scanning near-field optical microscopy (SNOM) is a promising technique for thermal measurement at small scales. Such technology is known as TRSTM.

The thesis work presented in this manuscript is divided into two parts. The first one relates to our experimental work based on the development of a TRSTM device. Its various components are detailed, and the difficulties observed during its utilization are described. Furthermore, several digital tools, used to detect and extract any useful signal, are presented. The second part of our work focuses on the development of a numerical model based on the finite-difference time-domain (FDTD) and the near-field to far-field (NFTFF) transformation for the scattering of electromagnetic waves. This model has been validated by studying different cases of dipoles and dispersive spheres close to a dielectric substrate. Then, several simulations of scattering of evanescent waves by a tip, with various shapes and materials, near an interface, are presented.