

# Modélisation de la diffusion d'ondes de surface en champ lointain

*Lemta – équipe "transfert radiatif"*

Jérôme Muller, Gilles Parent, David Lacroix

# Introduction

- Essor des nanotechnologies :
  - Développement des matériaux micro et nanostructurés
  - Importance des ondes de surface
- Importance de l'étude des phénomènes thermiques en champ proche
- Développement de la microscopie optique en champ proche
  - ⇒ modèle 3D d'un microscope SNOM

# Plan

- Microscopie optique en champ proche
- Modèles numériques
- Validation des modèles
- Modélisation d'un ASNOM
- Optimisation

# Plan

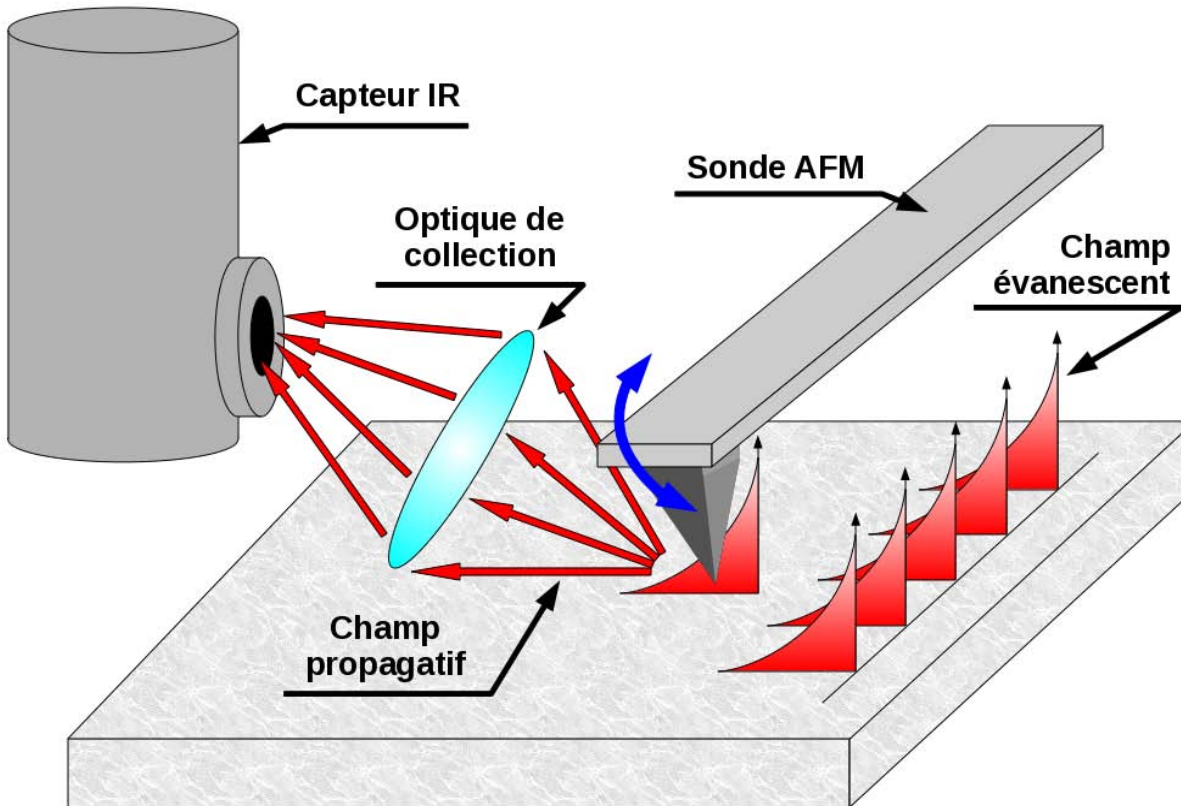
- Microscopie optique en champ proche
- Modèles numériques
- Validation des modèles
- Modélisation d'un ASNOM
- Optimisation

# ASNOM - TRSTM

- ASNOM :
  - Apertureless Scanning Near-Field Optical Microscopy
  - Fonctionne par diffusion d'ondes évanescentes en champ lointain grâce à une pointe de type AFM
  - Les ondes évanescentes sont généralement créées par une source externe
- TRSTM :
  - Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy<sup>(1)</sup>
  - Fonctionne sans aucune source externe
  - Permet de détecter le rayonnement thermique en champ proche (infrarouge)

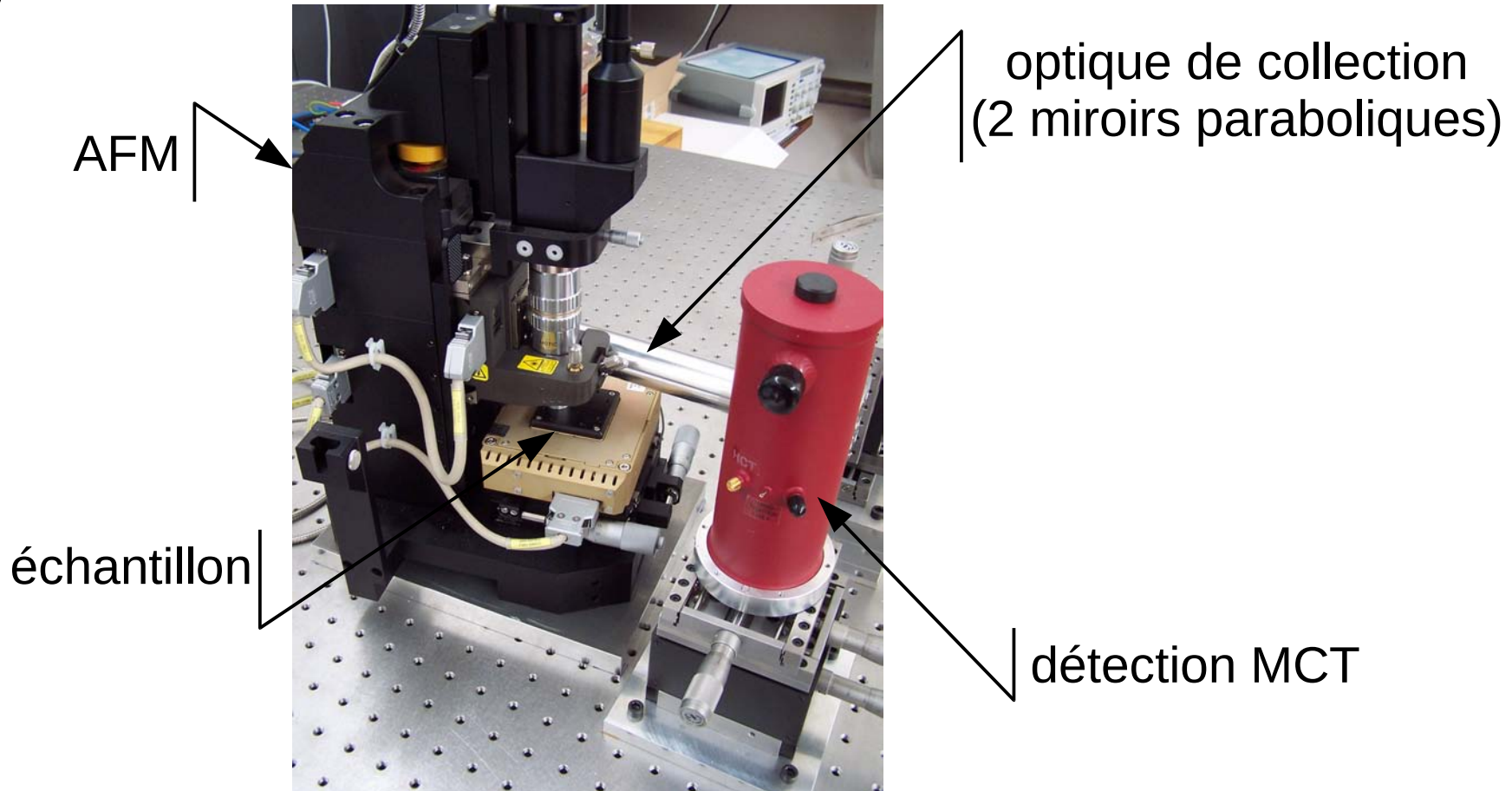
<sup>(1)</sup>Y. de Wilde, F. Formanek, R. Carminati, B. Gralak, P.A. Lemoine, K. Joulain, J.P. Mulet, Y. Chen and J.J. Greffet, *Thermal Radiation Scanning Tunnelling Microscopy*. Nature(London), Vol.444, pp740-743, 2006.

# Exemple de montage TRSTM



Montage TRSTM

# montage TRSTM

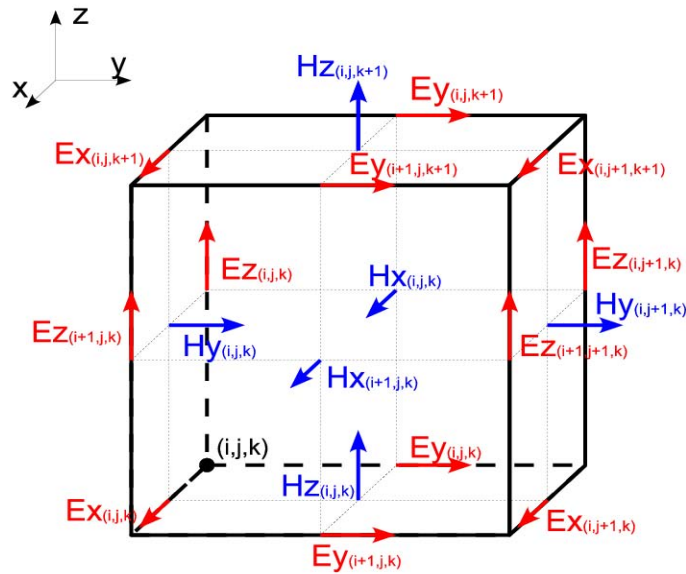


# Plan

- Microscopie optique en champ proche
- **Modèles numériques**
- Validation des modèles
- Modélisation d'un ASNOM
- Optimisation



# FDTD : Finite Difference Time Domain



Cellule de Yee

- Équations de Maxwell :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Relations additionnelles :

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$$

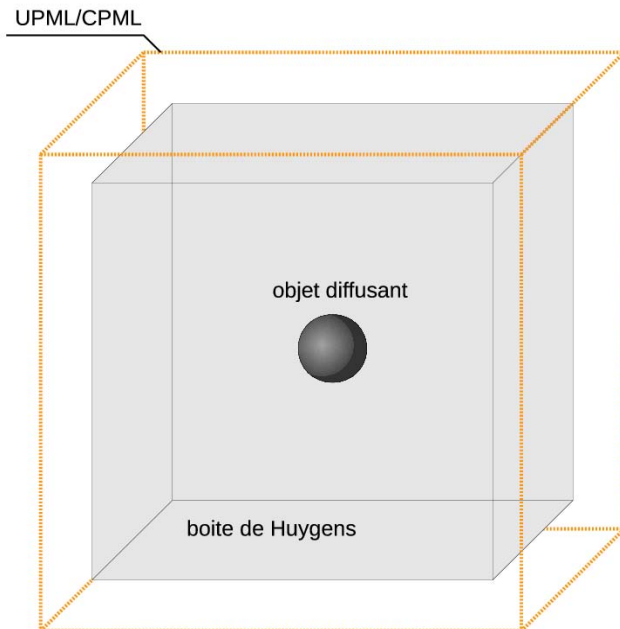
algorithme de Yee

résolution numérique des eq. de Maxwell

- dans le domaine spatial
- dans le domaine temporel

# PML

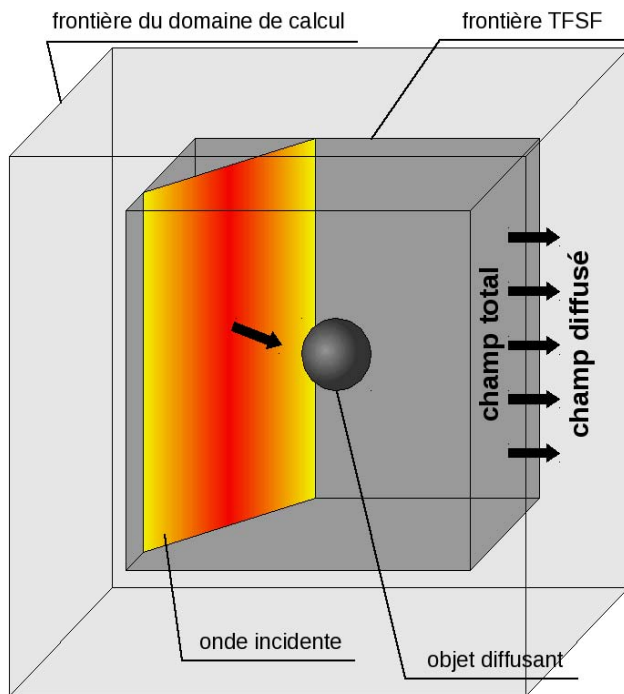
## ■ Perfectly-Matched Layer :



- Permet l'étude d'un milieu infini dans un domaine de calcul fini
- Réduit la réflexion numérique (moins de  $10^{-4}$ )
- Modèle utilisé actuellement : CPML (Convolutional Perfectly-Matched Layer)

# TFSF

- Méthode Total Field / Scattered Field :



- Décomposition des champs électrique et magnétique :

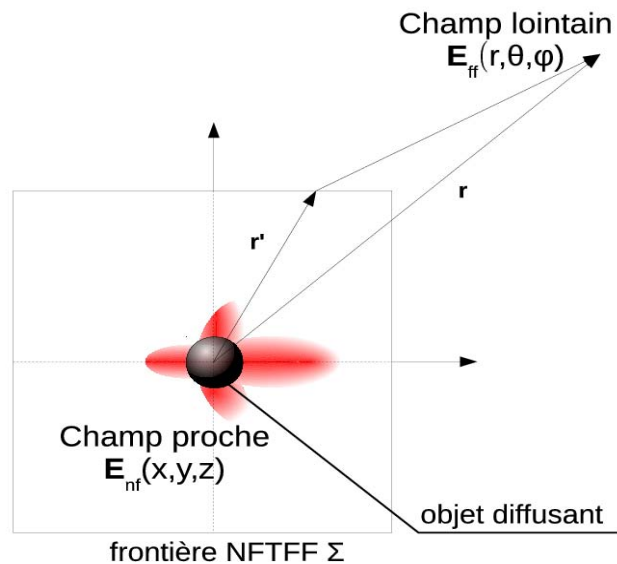
$$\mathbf{E}_{total} = \mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{scat}$$

$$\mathbf{H}_{total} = \mathbf{H}_{inc} + \mathbf{H}_{scat}$$

- Permet de créer une onde plane infinie dans un domaine de calcul fini

# FDTD → NTFFF

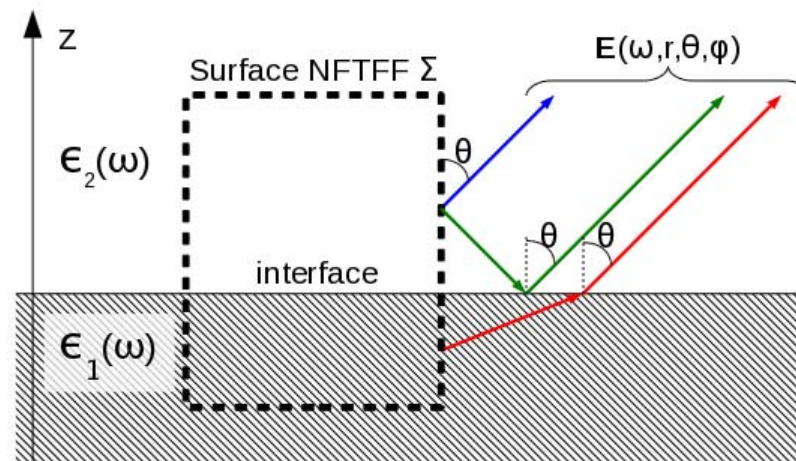
- Transformation champ proche/champ lointain :



- Basée sur le théorème des courants équivalents de surface

# NFTFF : formalisme de Capoglu-Smith

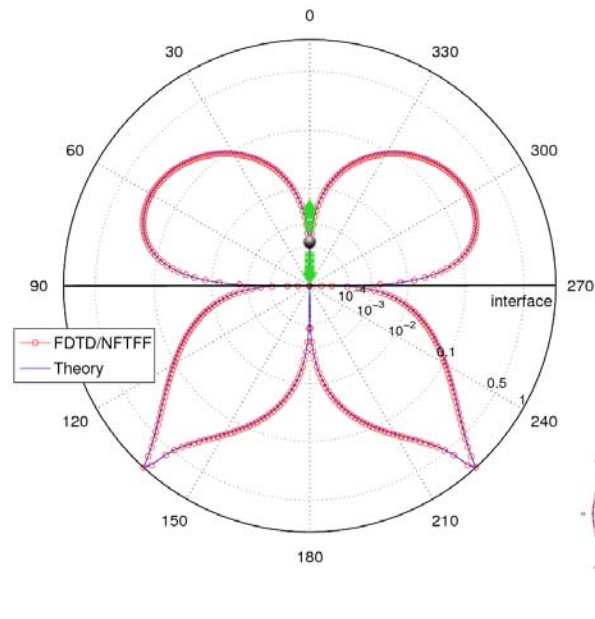
- Méthode permettant de prendre en compte la présence d'une interface à proximité de l'objet diffusant
- Détermination du champ électrique lointain  $\mathbf{E}(\omega, r, \theta, \varphi)$  à l'aide du formalisme de Capoglu et Smith



# Plan

- Microscopie optique en champ proche
- Modèles numériques
- **Validation des modèles**
- Modélisation d'un ASNOM
- Optimisation

# Dipôle au dessus d'une interface plane

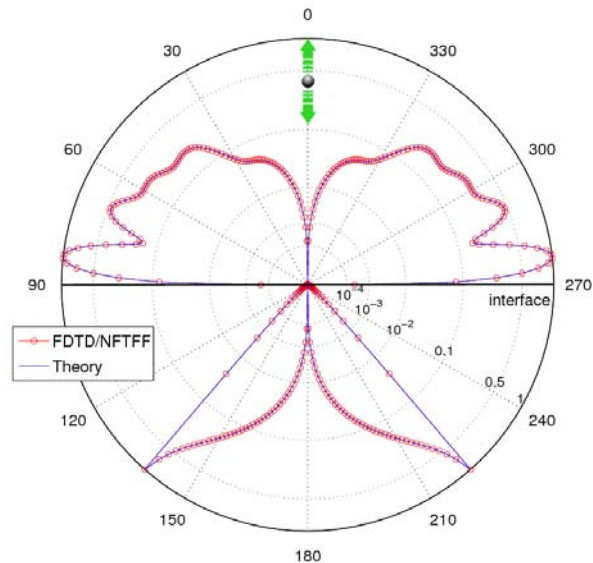


- Dipôle à  $0.1\lambda$  ( $1\mu\text{m}$ ) d'un milieu diélectrique ( $\epsilon=2,25$ ) semi-infini
- Source sinusoïdale normale à la surface
- Longueur d'onde d'étude :  $\lambda=10\mu\text{m}$

- Asymétrie due à la réflexion de l'onde à la surface de l'échantillon
- Comparaison avec la formule analytique issue du formalisme de Sommerfeld

# Dipôle au dessus d'une interface plane

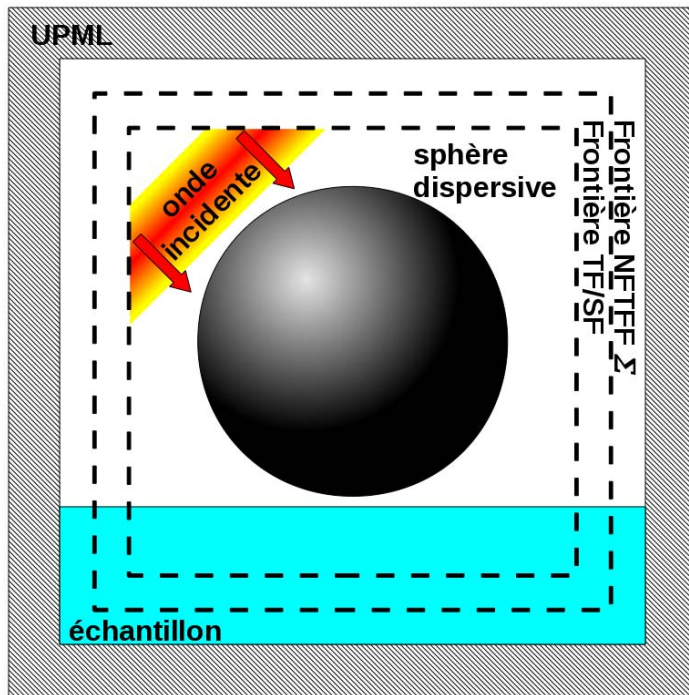
- Influence de la distance dipôle/interface  $z_{\text{dip}}$  :



- Dipôle à  $2\lambda$  ( $20\mu\text{m}$ ) de l'interface.
- Apparition de lobes d'interférences.
- Champ transmis nul dans la zone hors de l'angle critique ( $41,8^\circ$ )



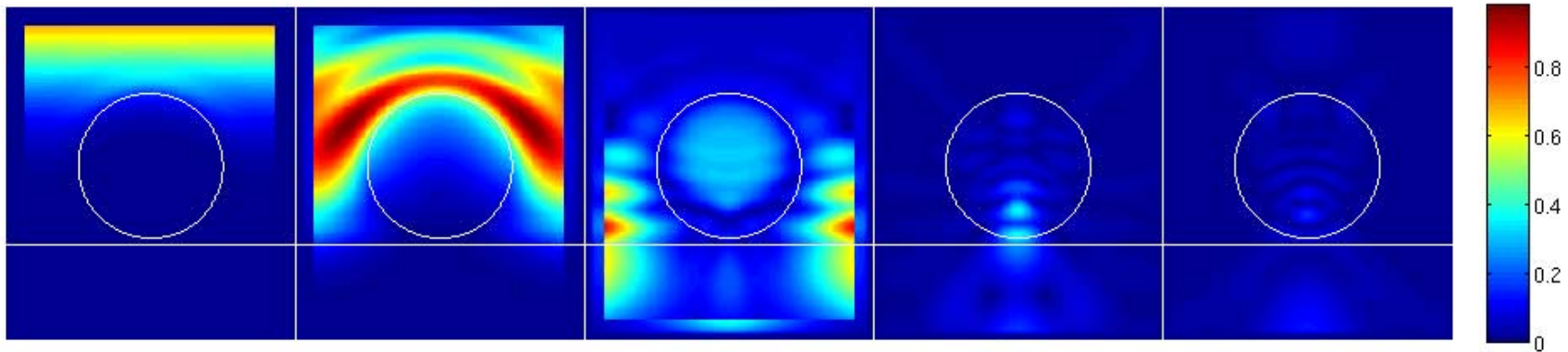
# Sphère au dessus d'une interface plane



- Domaine de calcul de  $250 \times 240^2$  cellules
- Cellules cubiques :  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \lambda_0 / 100$
- UPML : 10 cellules d'épaisseur
- Échantillon : matériau non-dispersif ( $n=1,5$ ) de 20 cellules d'épaisseur
- Sphère : matériau dispersif ( $n=2,4+0,9i$  à la longueur d'onde  $\lambda=12,9\mu\text{m}$ ), de 100 mailles de rayon ( $R=12,6\mu\text{m}$ )
- Distance sphère/interface :  $R/10$
- Champ incident : onde plane de spectre gaussien de longueur d'onde centrale  $\lambda_0=12,6\mu\text{m}$

# Sphère au dessus d'une interface plane

- Incidence normale :
  - Champ proche : évolution dans le domaine temporel

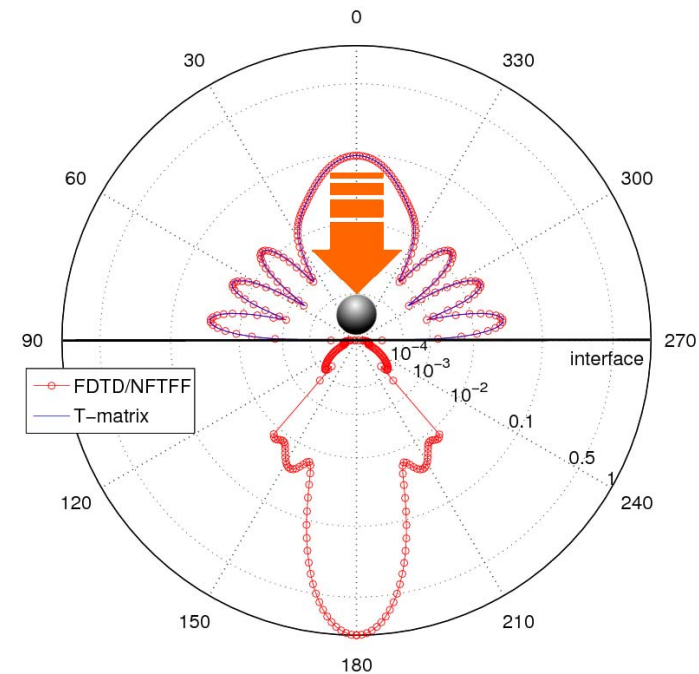
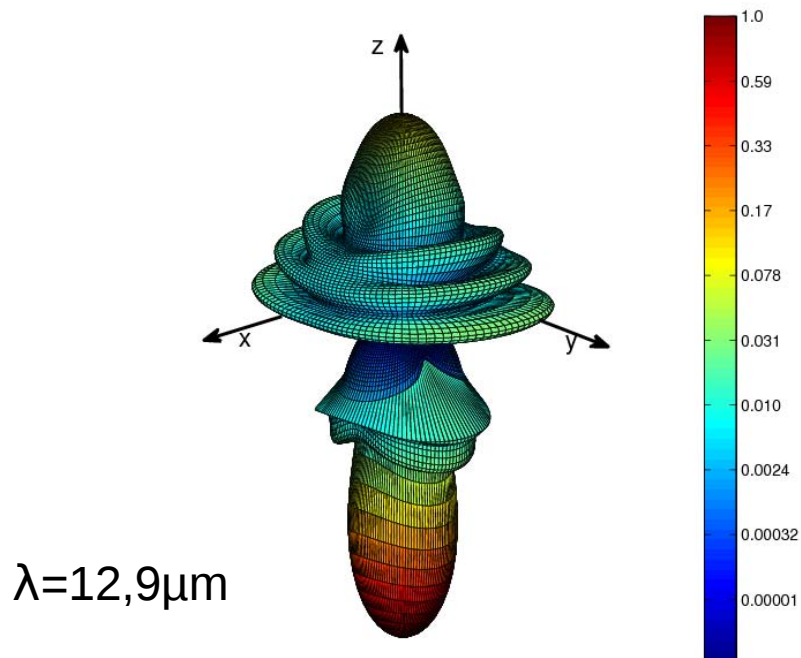


- Multiples réflexions à l'intérieur de la sphère

\* pour une meilleure visibilité de l'évolution de l'onde incidente et de sa diffusion par la sphère, les dimensions et l'échelle du domaine de calcul ont été modifiées et ne correspondent pas à celles utilisées lors de nos calculs.

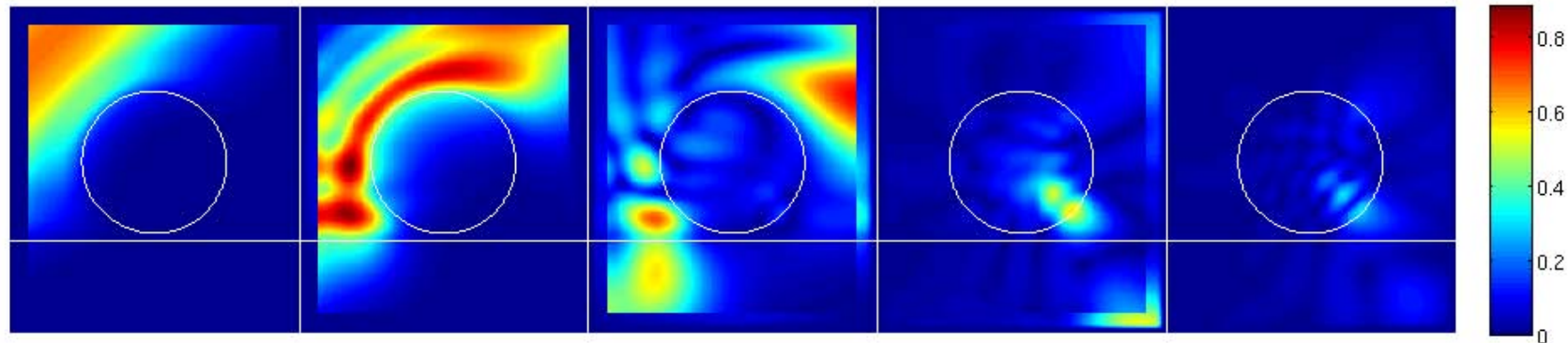
# Sphère au dessus d'une interface plane

- Incidence normale :
  - Champ lointain : comparaison avec la T-Matrix



# Sphère au dessus d'une interface plane

- Incidence à 45 degrés :
  - Champ proche : évolution dans le domaine temporel

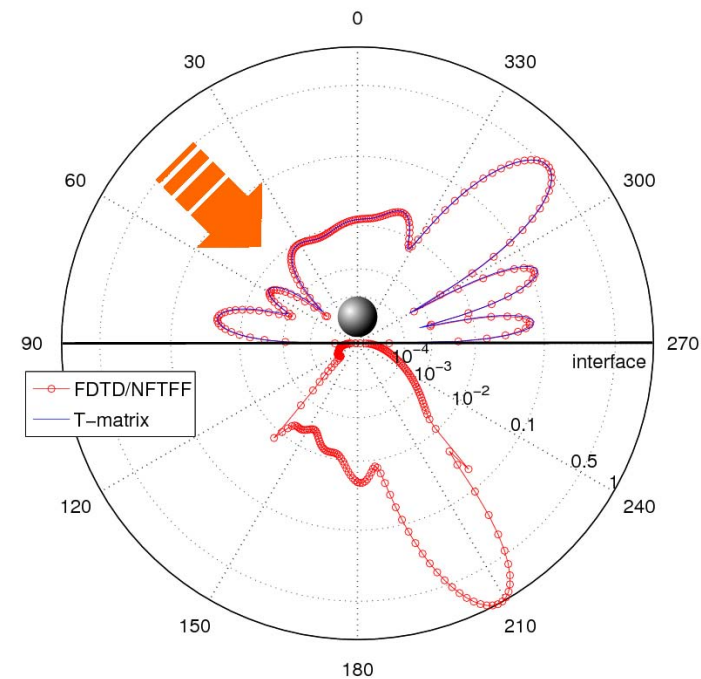
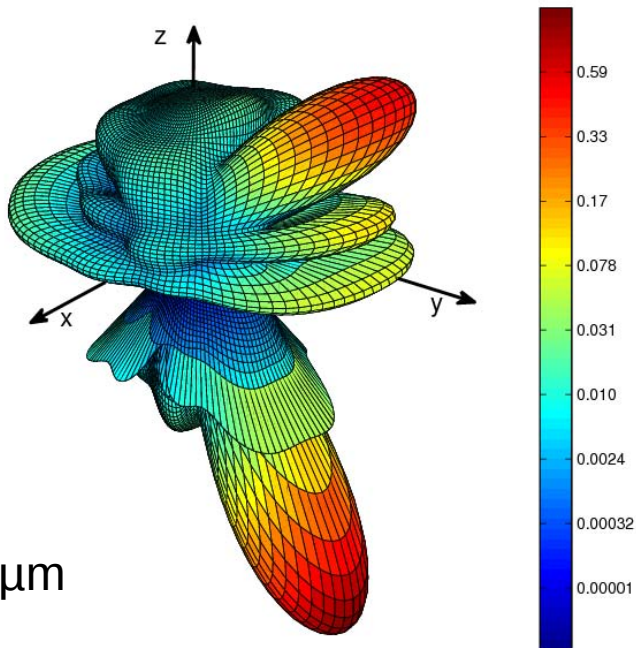


- Multiples réflexions à l'intérieur de la sphère

\* pour une meilleure visibilité de l'évolution de l'onde incidente et de sa diffusion par la sphère, les dimensions et l'échelle du domaine de calcul ont été modifiées et ne correspondent pas à celles utilisées lors de nos calculs.

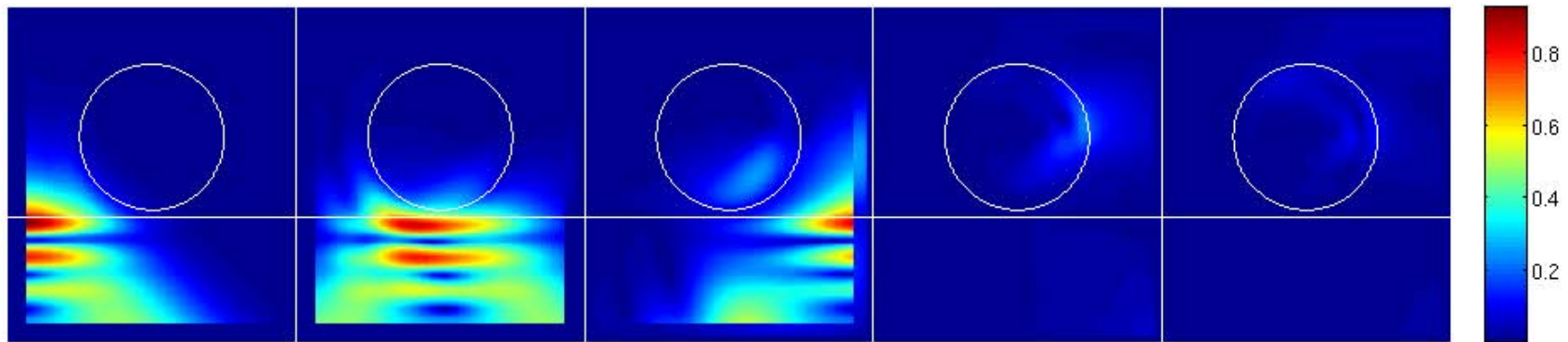
# Sphère au dessus d'une interface plane

- Incidence à 45 degrés :
  - Champ lointain : comparaison avec la T-Matrix



# Sphère au dessus d'une interface plane

- Illumination en réflexion totale (onde évanescente) :
  - Champ proche : évolution dans le domaine temporel

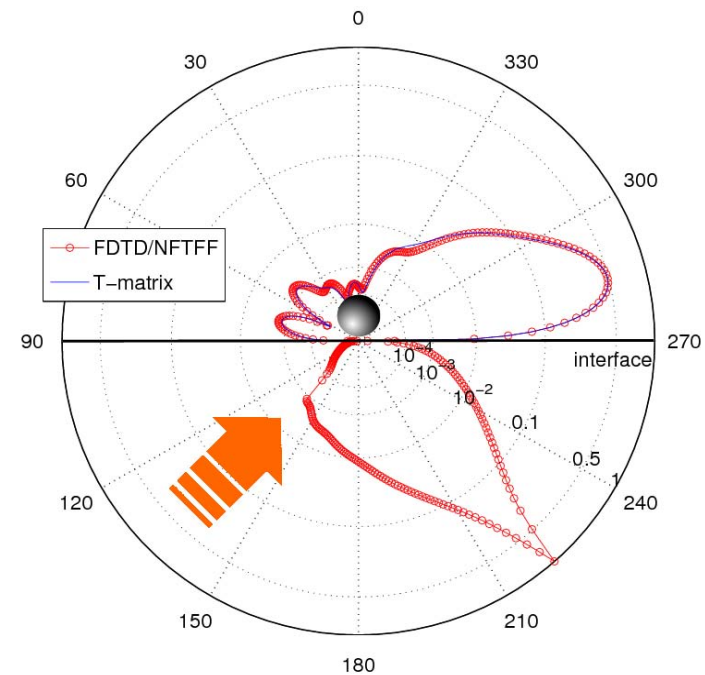
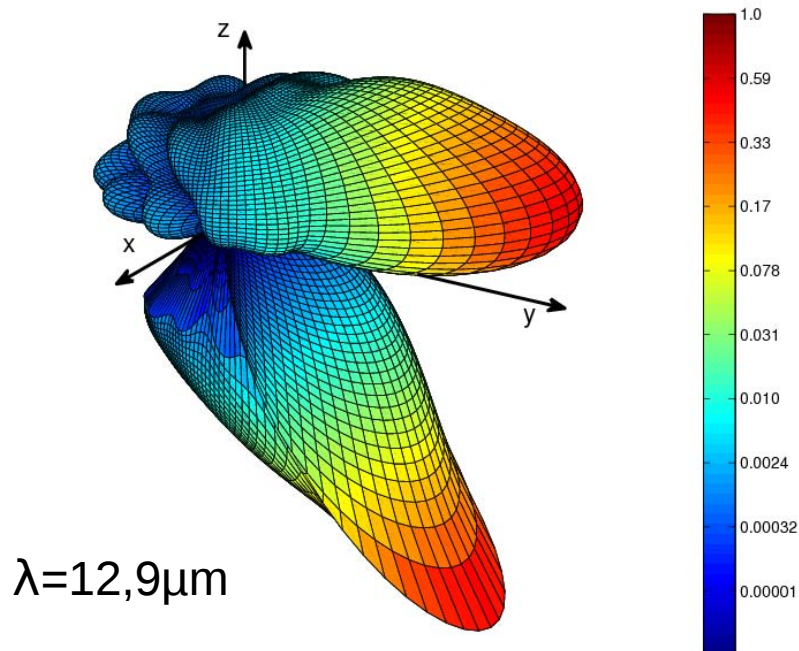


- Multiples réflexions à l'intérieur de la sphère

\* pour une meilleure visibilité de l'évolution de l'onde incidente et de sa diffusion par la sphère, les dimensions et l'échelle du domaine de calcul ont été modifiées et ne correspondent pas à celles utilisées lors de nos calculs.

# Sphère au dessus d'une interface plane

- Illumination en réflexion totale (onde évanescente) :
  - Champ lointain : comparaison avec la T-Matrix

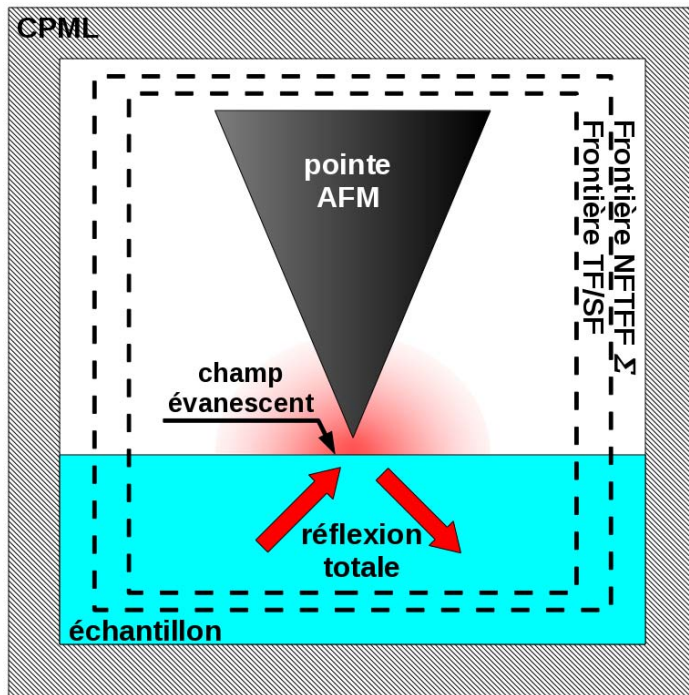


# Plan

- Microscopie optique en champ proche
- Modèles numériques
- Validation des modèles
- **Modélisation d'un ASNOM**
- Optimisation



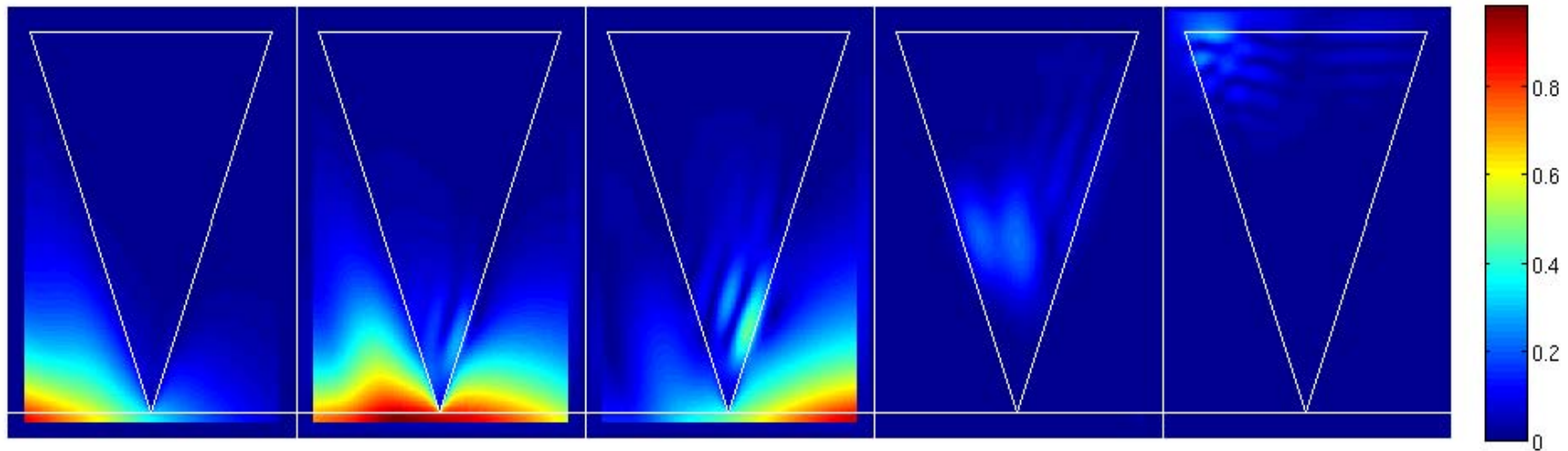
# Modélisation d'un ASNOM



- Domaine de calcul de  $340 \times 240^2$  cellules
- Cellules cubiques :  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \lambda_0 / 126$
- CPML : 10 cellules d'épaisseur
- Echantillon : matériau non-dispersif ( $n=1,5$ ) de 20 cellules d'épaisseur
- Pointe : matériau non-dispersif ( $n=3,8$ ), de forme cônica de demi-angle au sommet  $\alpha=18,5^\circ$  et de hauteur  $30\mu\text{m}$
- Distance pointe/interface : 1 cellule ( $100\text{nm}$ )
- Champ incident : onde plane de spectre gaussien de longueur d'onde centrale  $\lambda_0=12,6\mu\text{m}$ , en réflexion totale

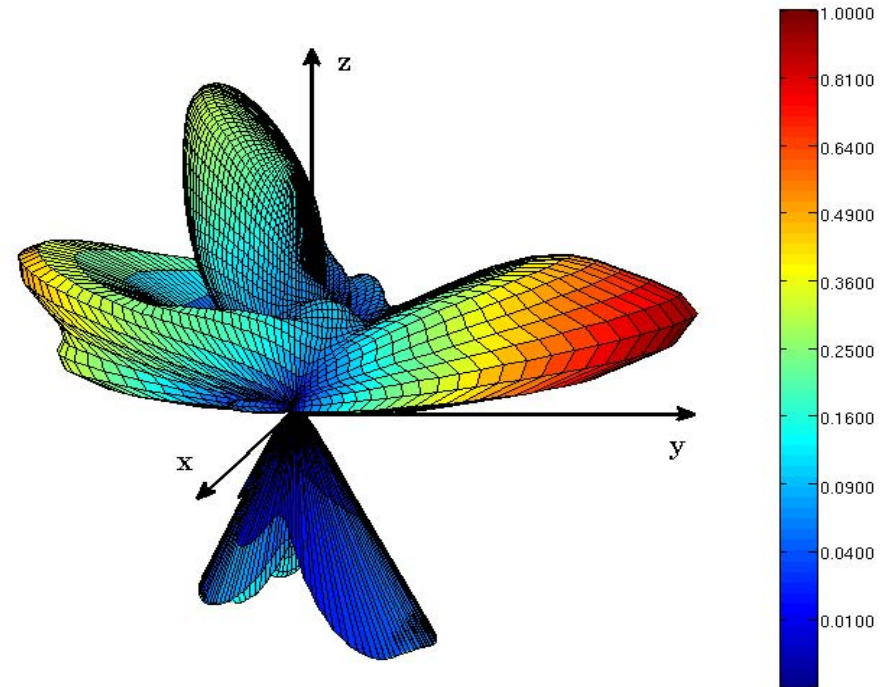
# Champ proche

- Champ proche : évolution dans le domaine temporel
  - Présence d'un champ transmis à travers la pointe (absorbé dans un cas réel)



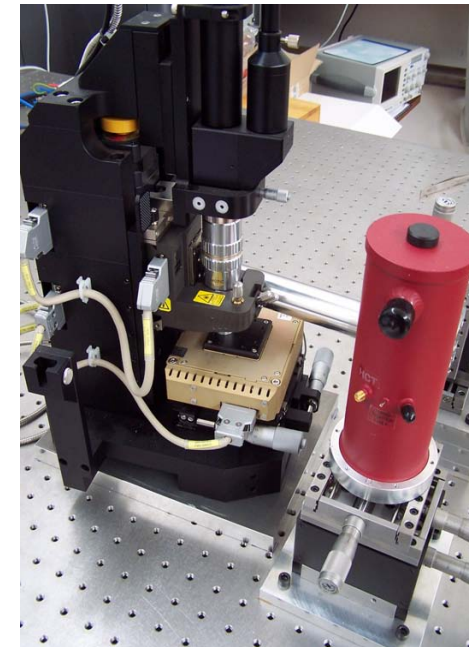
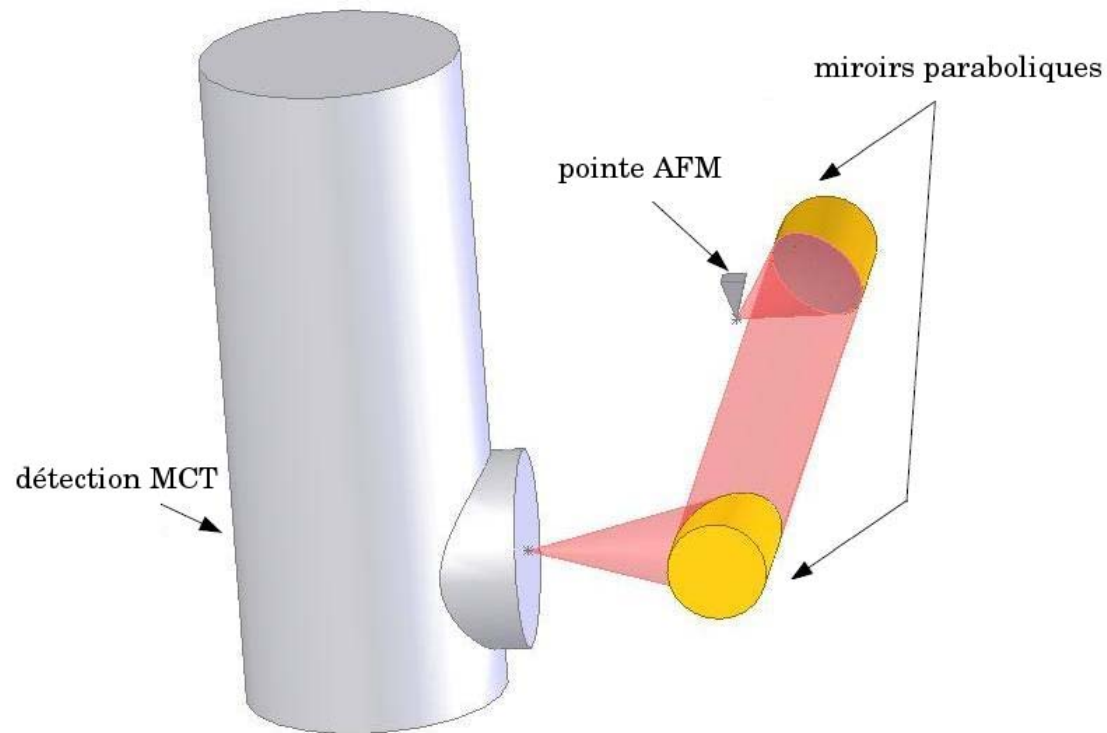
# Champ lointain

- Champ lointain :
  - Longueur d'onde d'étude :  $\lambda=13,25\mu\text{m}$
  - Champ électrique fortement diffusé vers l'avant
  - Présence d'un champ transmis à travers la pointe (absorbé dans un cas réel)
  - Champ légèrement transmis à travers l'interface



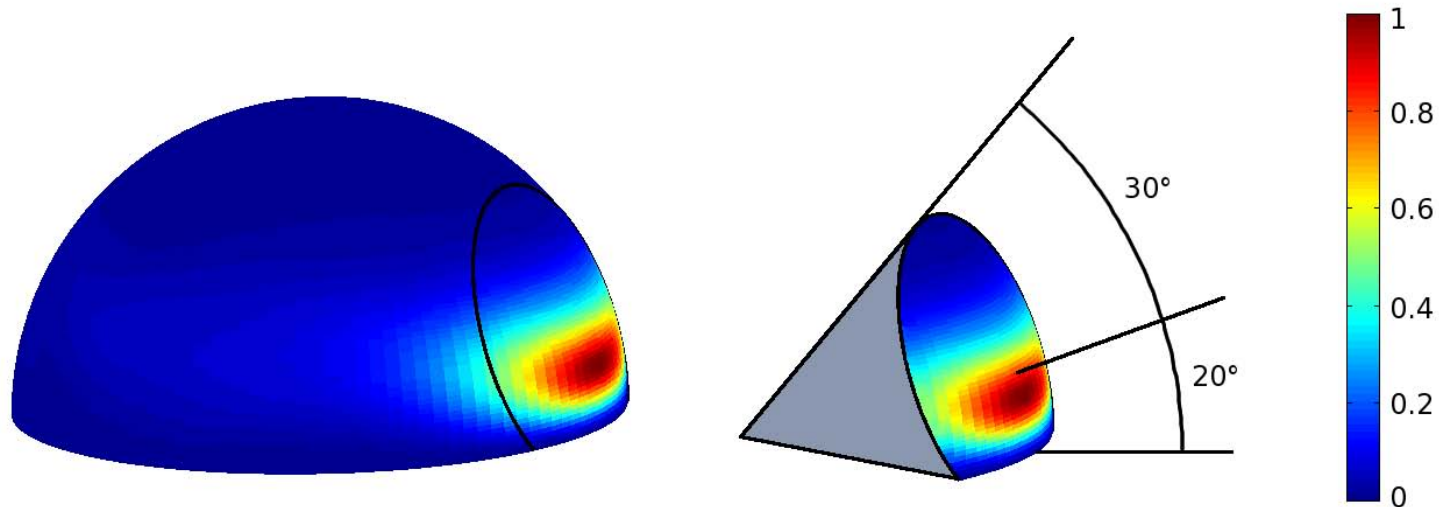
# Optique de collection

- Modélisation de l'optique de collection :



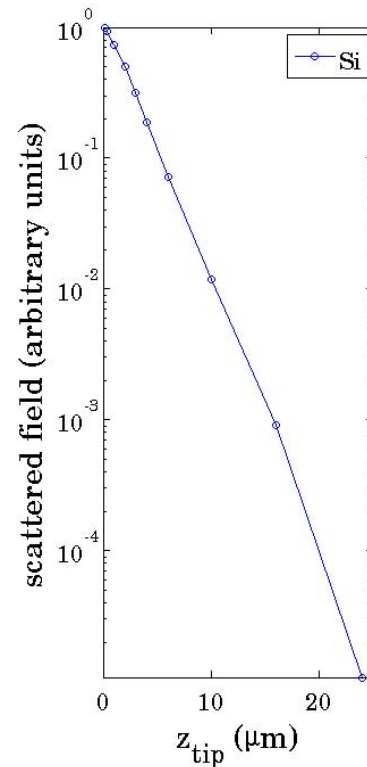
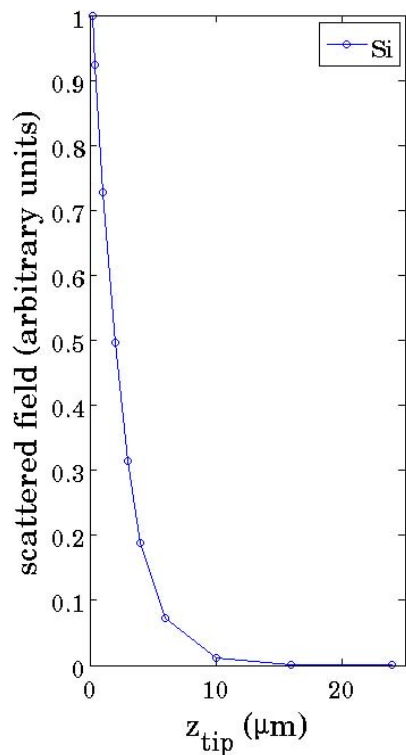
# Optique de collection

- Intégration du module au carré du champ lointain électrique :



- L'angle solide d'observation est donné par un cône de demi-angle au sommet  $\alpha=30^\circ$ , et dont l'axe de révolution fait un angle de  $20^\circ$  avec la surface.

# Influence de la distance pointe/interface



■ Dépendance entre le champ diffusé et  $z_{tip}$  :

- Représentation cartésienne
- Représentation semi-logarithmique

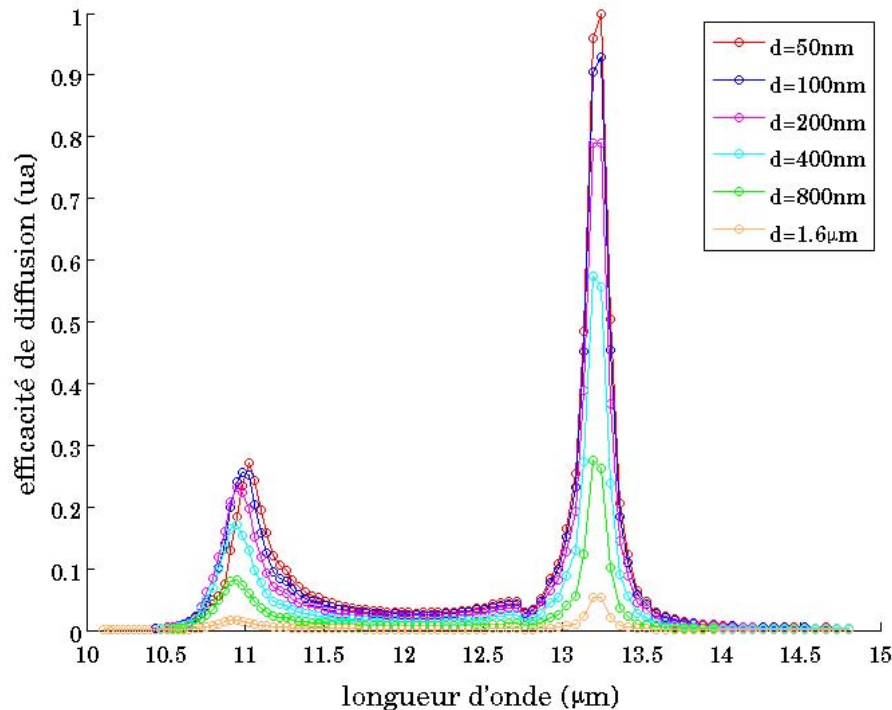
→ Présence d'une décroissance exponentielle

# Plan

- Microscopie optique en champ proche
- Modèles numériques
- Validation des modèles
- Modélisation d'un ASNOM
- **Optimisation**

# Sphère seule au dessus d'une interface

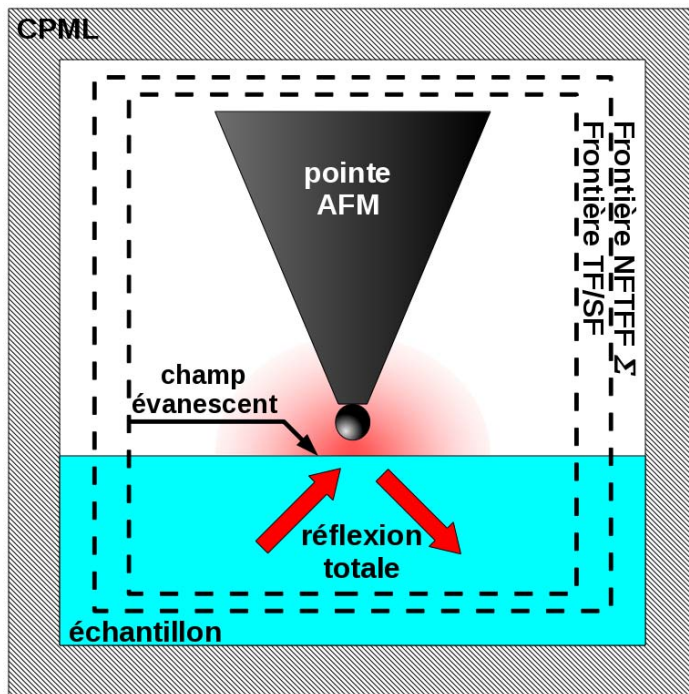
- Sphère de SiC de  $1\mu\text{m}$  (10 mailles) de rayon, placée au dessus d'une interface plane ( $n=1,5$ ) et illuminée par une onde évanescente.



- Étude de l'efficacité de diffusion au dessus de l'interface ( $2\pi sr$ )
- Étude de l'influence de la distance sphère/interface
- Pic de résonance prédominant à  $\lambda=13,25\mu\text{m}$



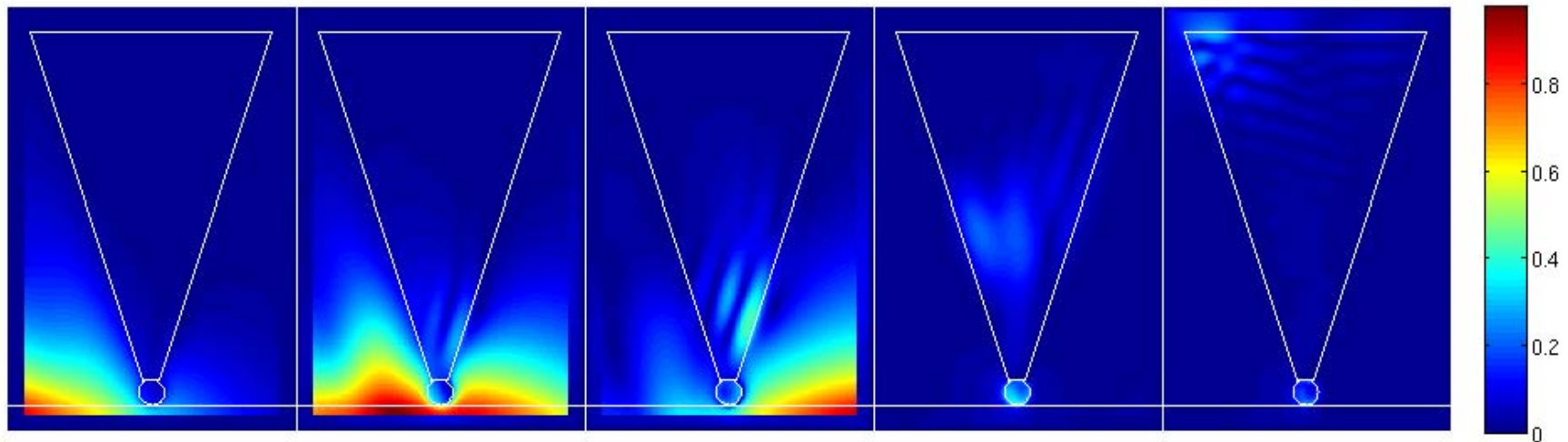
# Amélioration de la pointe



- Domaine de calcul de  $340 \times 240^2$  cellules
- Cellules cubiques :  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \lambda_0 / 126$
- CPML : 10 cellules d'épaisseur
- Echantillon : matériau non-dispersif ( $n=1,5$ ) de 20 cellules d'épaisseur
- Pointe : matériau non-dispersif ( $n=3,8$ ), de forme cônica (tronquée) de hauteur  $28\mu\text{m}$  à laquelle a été ajoutée une sphère de SiC de  $1\mu\text{m}$  de rayon.
- Distance pointe/interface : 1 cellule ( $100\text{nm}$ )
- Champ incident : onde plane de spectre gaussien de longueur d'onde centrale  $\lambda_0 = 12,6\mu\text{m}$ , en réflexion totale

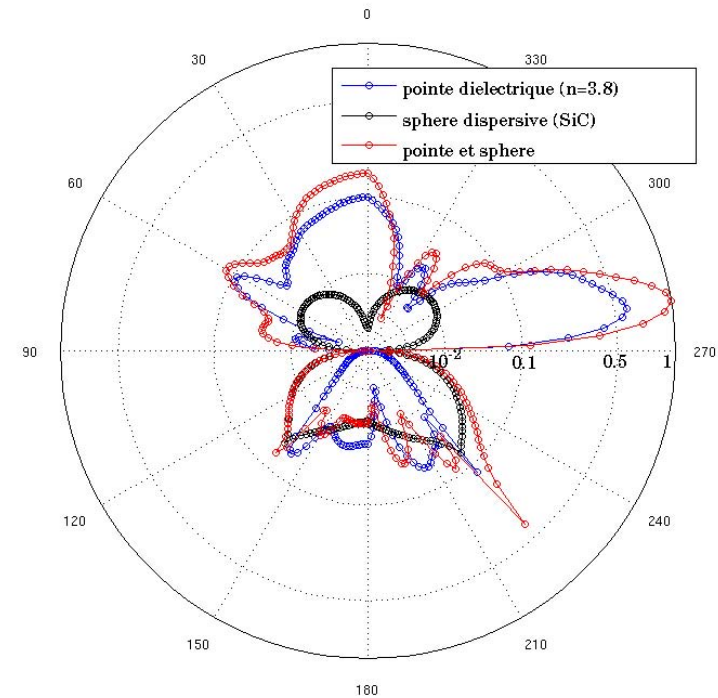
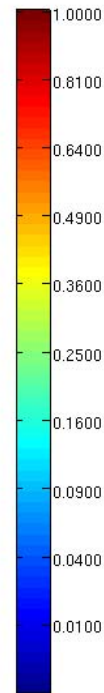
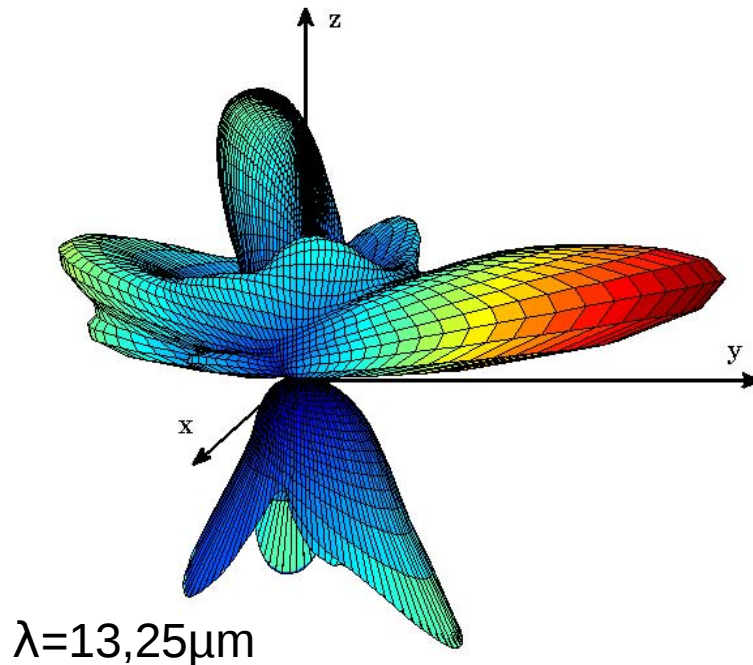
# Champ proche

- Champ proche : évolution dans le domaine temporel
  - Présence d'un champ transmis à travers la pointe (absorbé dans un cas réel)



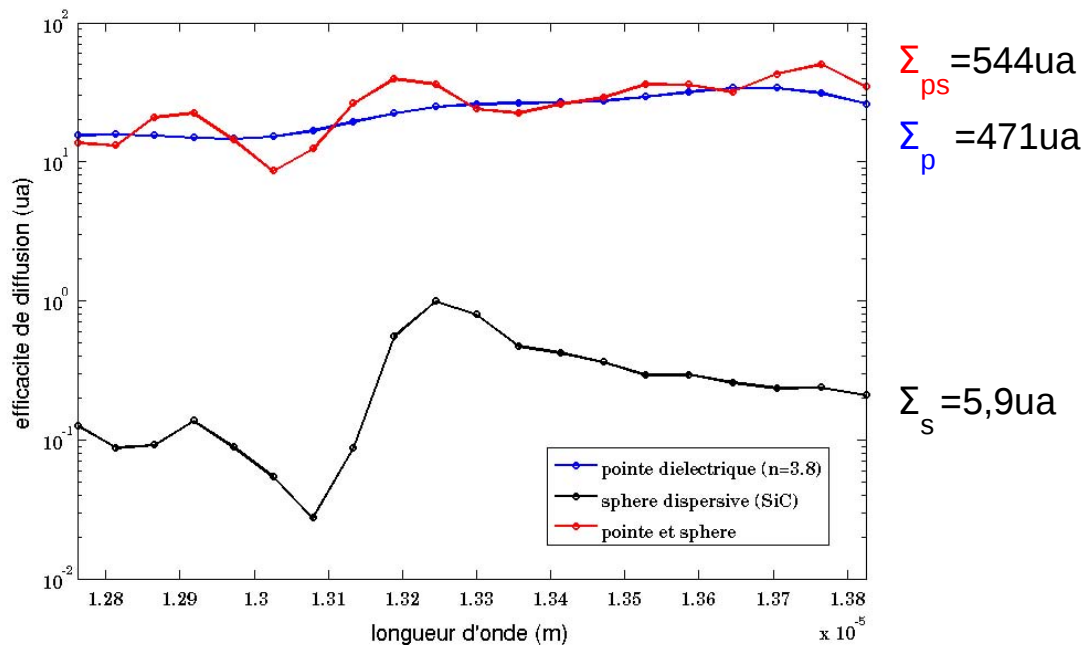
# Champ lointain

- Champ lointain :
  - Augmentation du signal dans la direction du capteur



# Comparaison des efficacités de diffusion

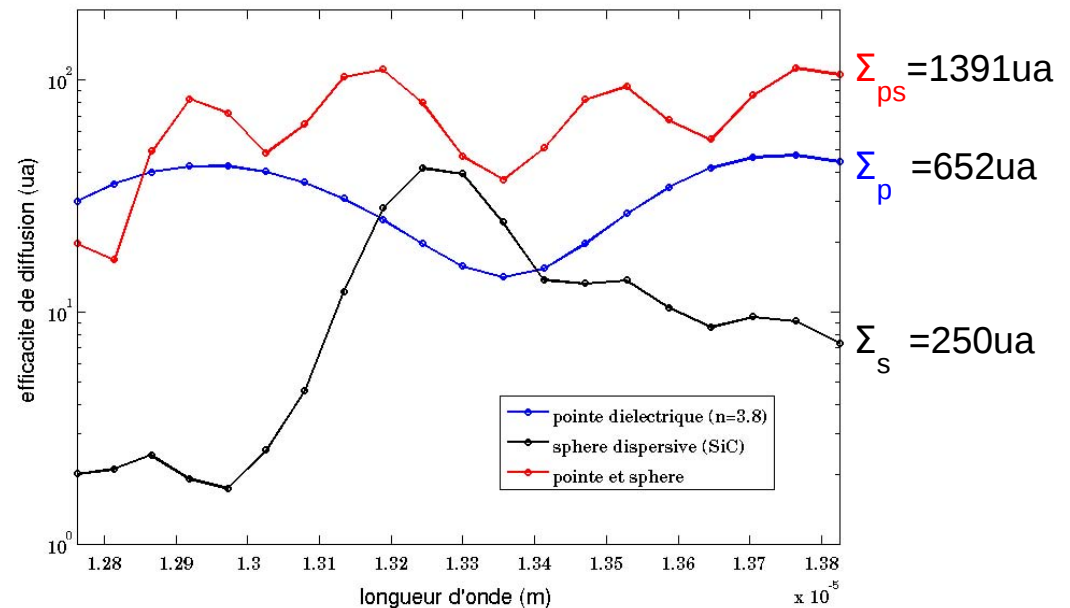
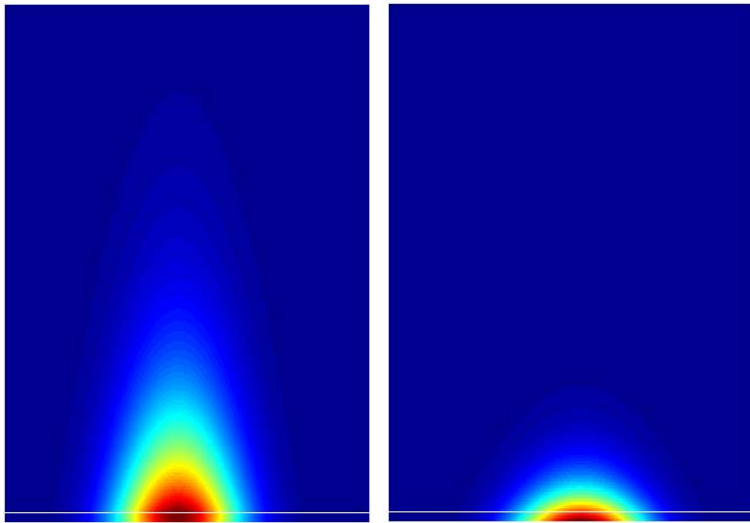
- Calcul des efficacités de diffusion dans la zone perçue par le capteur MCT : faible amélioration due au caractère faiblement évanescent de l'onde incidente



# Comparaison des efficacités de diffusion

- Influence de l'angle d'incidence : gain d'un facteur 2

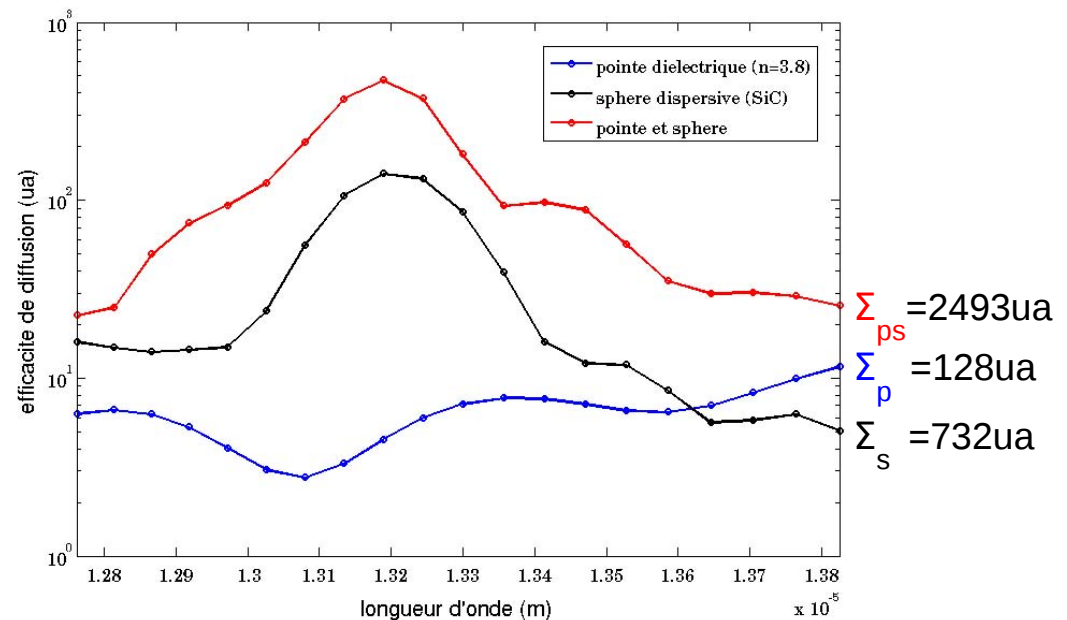
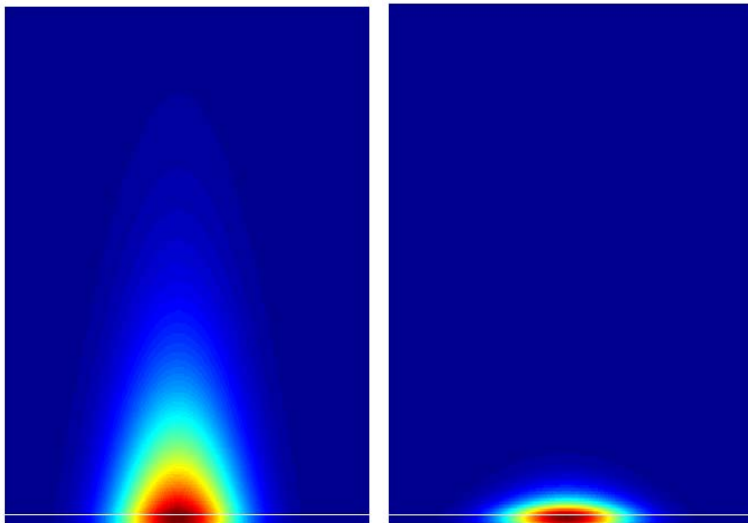
$\theta=45^\circ$   $\longrightarrow$   $\theta=85^\circ$



# Comparaison des efficacités de diffusion

- Influence de l'indice optique de l'échantillon : gain d'un facteur 20

$n=1,5$   $\longrightarrow$   $n=3,8$



# Conclusions et perspectives

- Modèle FDTD et NFFTF :
  - Fonctionne avec tous types de pointes (forme et matériaux)
  - Donne la représentation angulaire du champ lointain sur  $4\pi$ sr, à de nombreuses longueurs d'onde, à partir d'un seul et unique calcul numérique
- Perspectives :
  - Introduction de pointes absorbantes
  - Étude de surfaces structurées ou rugueuses
  - Introduction d'autres sources comme les polaritons ou les sources thermiques incohérentes