

Design inverse de sources thermiques cohérentes.

Jérémie DREVILLON, Philippe BEN-ABDALLAH* et Bertrand GARNIER

Laboratoire de Thermocinétique, CNRS UMR 6607

Ecole Polytechnique de l'université de Nantes 44 306 Nantes cedex 03.

*(auteur correspondant : pba@univ-nantes.fr)

Résumé - Nous présentons ici une méthode générale de design ab initio de sources thermiques cohérentes planes multicouches. Notre approche consiste, dans un premier temps, à spécifier les propriétés radiatives que doit posséder une source pour rayonner autour de certaines longueurs d'ondes et/ou dans des directions d'espace spécifiques. Nous cherchons ensuite, parmi toutes les configurations possibles, des structures qui conduisent à ces spécifications. L'efficacité de notre méthode est démontrée en concevant, une source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge. Ce travail constitue un premier pas vers le design inverse de structures fonctionnalisées en optique infrarouge et ouvre la voie à de prometteuses applications dans le domaine de la conversion d'énergie thermophotovoltaïque.

Nomenclature

Q	facteur de qualité	t	transmittivité spectrale et directionnelle
r	réflectivité spectrale directionnelle		
<i>Symboles grecs</i>			
ε_i	permittivité diélectrique du milieu i	ω	fréquence, Hz
λ	longueur d'onde, m	θ	angle d'incidence, degré
ω_c	fréquence de collision des électrons	ω_p	pulsation plasma
α	absorbivité spectrale et directionnelle	ε	émissivité spectrale et directionnelle

1. Introduction

Jusqu'à la fin des années 90 une source thermique était présentée comme un objet qui émettait de manière quasi-isotrope sur une large bande spectrale. On sait désormais que ce paradigme est faux et que de nombreux objets micro ou nanostructurés [1-14] sont capable de rayonner dans certaines directions d'espace extrêmement localisées et dans des bandes spectrales très étroites. Jusqu'ici ces matériaux ont été conçues en suivant une démarche pseudo-empirique de type essai-erreur. Les techniques modernes de nanofabrication permettent désormais d'envisager un design plus rationnel (bottom-up) basé uniquement sur les principes de base de l'optique. Dans ce travail nous franchissons cette étape en développant une technique de design ab initio de matériaux multicouches fonctionnels pour l'optique infrarouge. Nous présentons ici le design inverse d'une source thermique partiellement cohérente dans le proche infrarouge et discutons de son utilisation pour améliorer les rendements de conversion de systèmes thermophotovoltaïques.

3. Design ab initio de structures multicouches

Les structures que nous étudions dans ce travail sont décrites sur la figure 5. Il s'agit simplement d'empilements unidimensionnels de N couches de matériaux diélectriques de quelques dizaines de nanomètres et d'épaisseur totale L. Le nombre total de configurations

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

2.1 Algorithme génétique

Les principales étapes de l'AG sont résumées ci-après. *Étape 1* - Pour commencer le processus d'évolution nous générons aléatoirement une population de structures (en général de cent à mille) encore appelées individus. Parallèlement nous définissons les propriétés radiatives cibles (par exemple l'émissivité $\varepsilon_{cible}(\lambda, \theta)$ et la réflectivité $r_{cible}(\lambda, \theta)$ spectrale et directionnelle) que nous désirons obtenir. Afin d'identifier les meilleures configurations structurelles de cette génération, au regard des fonctions cibles que nous avons choisi, nous calculons les propriétés radiatives (la transmittivité $t(\lambda, \theta)$, la réflectivité $r(\lambda, \theta)$ et l'émissivité $\varepsilon(\lambda, \theta)$) de chaque individus. *Étape 2* - L'écart entre les cibles et les propriétés radiatives des structures obtenues est mesurée par une fonction fitness de la forme

$$J = \sum_p \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} [\varepsilon_{cible}(\lambda, \theta) - \varepsilon_{calc}^p(\lambda, \theta)]^2 d\theta d\lambda + \sum_p \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} [r_{cible}(\lambda, \theta) - r_{calc}^p(\lambda, \theta)]^2 d\theta d\lambda \quad (1)$$

Étape 3 - Seules les structures dont la fitness est inférieure à un certain seuil sont retenues pour l'étape suivante de reproduction. Les individus 'enfants' issus du croisement de deux individus 'parents' héritent des caractéristiques de ces derniers. Par exemple dans le cas des structures binaires, deux parents 110010011 et **01011001** se combinent pour donner naissance à deux enfants de structures 11001**1001** et **0101**0011. *Étape 4* - Pour améliorer les performances de l'AG et éviter de converger vers un minimum local, des mutations sont introduites durant le processus d'évolution [15]. *Étape 5* - Afin de conserver le même nombre total d'individus dans la population à chaque génération, de nouvelles structures sont générées aléatoirement. Cette opération permet également d'introduire de la diversité tout au long du processus d'évolution. Ces différentes étapes sont répétées jusqu'à ce qu'une structure optimale soit trouvée.

2.2. Méthode des matrices de transferts

Les propriétés thermoradiatives des individus (réflectivité, transmittivité et émissivité) sont calculées à partir de la matrice de transfert \mathbf{T} (0, L) de leur structure. Véritable signature optique de l'individu cette matrice permet de relier les champs entrants et émergents de part et d'autre de la structure. Cette matrice est le résultat du produit des matrices de transfert élémentaires du milieu. La transmittivité $t(\lambda, \theta)$ et la réflectivité $r(\lambda, \theta)$ spectrales et directionnelles d'une structure découlent directement des composantes de cette matrice de transfert : $t = |1/T_{11}|^2$, $r = |T_{21}/T_{11}|^2$. Par ailleurs, la loi de Kirchoff, permet de calculer l'émissivité spectrale et directionnelle ε à partir de l'absorbivité α : $\varepsilon = \alpha = 1 - t - r$.

2. Source thermique partiellement cohérente : application à la conversion thermophotovoltaïque

Nous présentons ici un exemple de source thermique partiellement cohérente que nous avons obtenu en utilisant le processus d'évolution décrit précédemment. Cette source est destinée à être utilisée comme émetteur sélectif dans un système de conversion d'énergie thermophotovoltaïque à cellule GaSb (Fig.1). Pour synthétiser cette source, trois constituants de base ont été utilisés : l'argent (Ag), le silicium (Si) et le verre (SiO₂). Dans la gamme de longueur [$\lambda_{\min} = 1.3 \mu\text{m}$; $\lambda_{\max} = 1.7 \mu\text{m}$] choisie pour cette étude, le silicium et le verre sont des matériaux transparents et leur permittivité diélectrique peut être approchée [16] par les valeurs réelles et constantes $\epsilon_{\text{Si}} = 11.15$ et $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 2.1025$. L'argent, est quant à lui

correctement décrit par le modèle de Drude $\epsilon_{\text{Ag}} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - i\omega_c)}$, où

$\omega_p = 13.69 \times 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$ est la pulsation plasma et $\omega_c = 2.73 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ est la fréquence de collision des électrons. L'émissivité cible que l'on cherche à atteindre est une gaussienne de la forme $\epsilon_{\text{cible}} = \epsilon_{\text{max}} \exp[-Q^2 \ln \frac{16}{\epsilon_{\text{max}}^4} (\lambda - \lambda^*)^2 / \lambda^{*2}]$ avec $\lambda^* = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)}{90} \theta + \lambda_2$ et $\epsilon_{\text{max}} = 0.95$

(Fig.2). Le gap de conversion du GaSb étant situé à $\lambda_g = 1.7 \mu\text{m}$ nous avons recherché une structure émettant légèrement en dessous de cette longueur d'onde. Aussi nous avons choisi comme domaine d'émission de la source l'intervalle [$\lambda_1 = 1.42 \mu\text{m}$, $\lambda_2 = 1.65 \mu\text{m}$]. Le paramètre Q désigne le facteur de qualité de la source. Il permet de connaître son degré de cohérence spectrale [17]. Dans ce travail ce paramètre est fixé à $Q = 300$. D'autre part, pour pouvoir utiliser cette structure comme revêtement, nous cherchons à atteindre une réflectivité cible complémentaire à l'émissivité cible c'est-à-dire de la forme $r_{\text{cible}} = 1 - t_{\text{cible}} - \epsilon_{\text{cible}}$ où $t_{\text{cible}} \ll 1$. Enfin, Le nombre total de couche est fixé à $N=50$ et leur épaisseur à $d= 50 \text{ nm}$. Sur la figure 3 on constate que l'émissivité (en polarisation s et p) de la source obtenue après 100 générations est très proche des émissions cibles. Un résultat analogue a également été obtenu pour la réflectivité mais il n'est pas présenté ici.

Afin de déterminer l'origine physique de la cohérence partielle du champ rayonné par la structure nous avons examiné le champ électrique à l'intérieur de la source lorsque celle ci est soumise à une excitation (normalisée). Le résultat représenté Fig.4 montre que la cohérence est directement reliée à la présence de mode localisés. En effet, on constate que lorsque la structure est éclairée par une onde à $\lambda = 1.54 \mu\text{m}$ sous un angle de 42° lorsque en polarisation s (resp. 29° en polarisation p) la , le champ interne est très fortement amplifié (de 2 ordres de grandeur) autour de la position $z = 0.75 \mu\text{m}$ ($\Delta z = 0.6 \mu\text{m}$) dans la région où est localisée une couche d'Ag. Une partie importante de cette énergie est alors absorbée par l'Ag et contribue (loi de Kirchoff) à l'émission de la structure dans cette direction et à cette longueur d'onde. En dehors de ces angles aucun couplage résonnant n'est observé et l'émission de la structure est négligeable.

4. Conclusion

Nous avons démontré la faisabilité du design ab initio pour le contrôle des propriétés radiatives de matériaux nanostructurés. Cette approche ouvre des perspectives intéressantes

pour la conception de systèmes de conversion thermophotovoltaïque optimaux. Son extension au design des propriétés de transport (conductivité électrique, conductivité...) des matériaux nanostructurés semble également très prometteuse.

Références

- [1] R. Carminati and J.-J. Greffet, Near-field effects in spatial coherence of thermal sources, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1660-1663 (1999).
- [2] A. V. Shchegrov, K. Joulain, R. Carminati, and J.-J. Greffet, Near-field spectral effects due to electromagnetic surface excitations, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1548-1551 (2000).
- [3] H. Sai et al., Spectral control of thermal emission by periodic microstructured surfaces in the near-infrared region, *J. Opt. Soc. Am. A* **18**, 7, 1471-1476 (2001).
- [4] J. J. Greffet et al., Coherent emission of light by thermal sources, *Nature* **416**, 61 (2002).
- [5] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2486-2489 (1987). Also, see E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059-2062 (1987). For a more recent review, see H. Benisty, S. Kawakami, D. Norris and C. Soukoulis, Photonics and Nanostructures : fundamentals and applications 2, 57-58, (2004).
- [6] M. U. Pralle et al., Photonic crystal enhanced narrow-band infrared emitters, *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 25, 4685-4687 (2002).
- [7] L. McCall et al., Microwave propagation in two-dimensional dielectric lattices, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2017-2020 (1991). E. Yablonovitch et al., Donor and acceptor modes in photonic band structure, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3380-3383 (1991).
- [8] P. Ben-Abdallah and B. Ni, Single defect Bragg stacks for high-power narrow-band thermal emission, *J. Appl. Phys.* **97**, 104910 (2005).
- [9] B.J.Lee, C. J. Fu and Z. M. Zhang, Coherent thermal emission from one-dimensional photonic crystals, *Appl. Phys. Lett.*, **87**, 071904, (2005). See also C. J. Fu, Z. M. Zhang, D. B. Tanner, Planar heterogeneous structures for coherent emission of radiation, *Optics Letters*, **30**, 14, 1873-1875 (2005).
- [10] P. Ben-Abdallah, Thermal antenna behavior for thin-film structures, *J. Opt. Soc. Am. A*, Vol. 21, Issue 7, pp. 1368-1371 (2004).
- [11] I. Celanovic, D. Perreault and J. Kassakian, Resonant-cavity enhanced thermal emission, *Phys. Rev. B* **72**, 075127 (2005).
- [12] S. Enoch et al., A metamaterial for directive emission, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 2013902 (2002).
- [13] S. Zhang et al., Midinfrared resonant magnetic nanostructures exhibiting a negative permeability, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 037402 (2005) see also S. Zhang et al., Experimental Demonstration of Near-Infrared Negative-Index Metamaterial, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137404 (2005).
- [14] A. Battula and S. C. Chen, Monochromatic polarized coherent emitter enhanced by surface plasmons and cavity resonance, *Phys. Rev. B*, **74**, 245407, (2006).see also Ming-Wei Tsai, High performance midinfrared narrow-band plasmonic thermal emitter, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 173116 (2006).
- [15] J. H. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (MIT Press/Bradford Books Edition, Cambridge, MA, 1992).
- [16] E. D. Palik, *Handbook of optical constants of solids*, Academic Press, London (1998).
- [17] L. Mandel and E. Wolf, *Optical coherence and quantum optics*, Cambridge University Press, New York (1995).

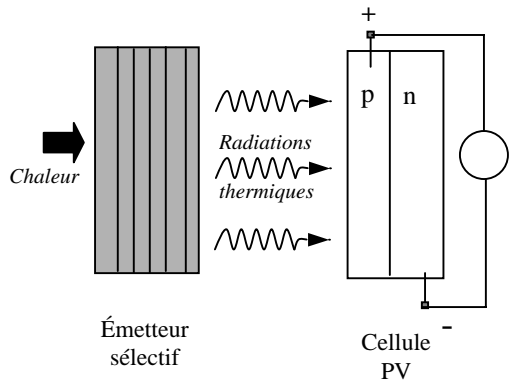


Figure 1 : Schéma de principe d'un système de conversion d'énergie thermophotovoltaïque

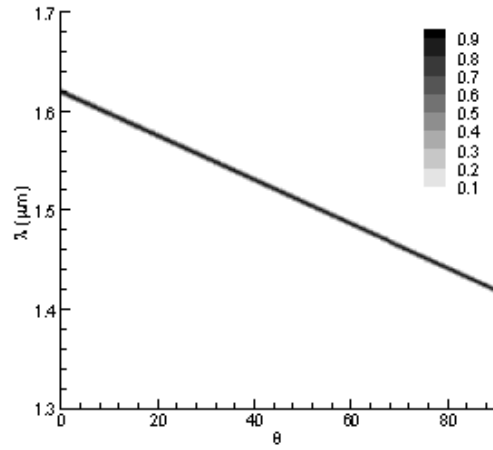


Figure 2 : Spectre d'émission cible

(a)

(b)

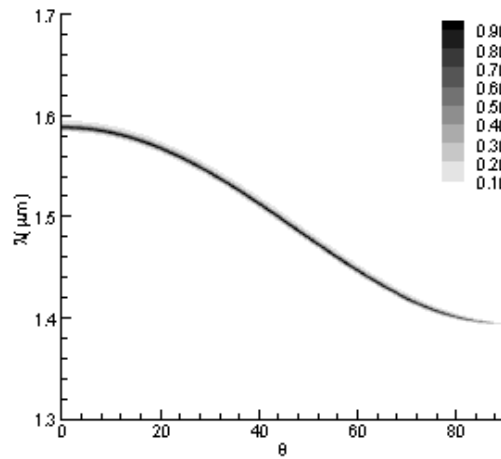
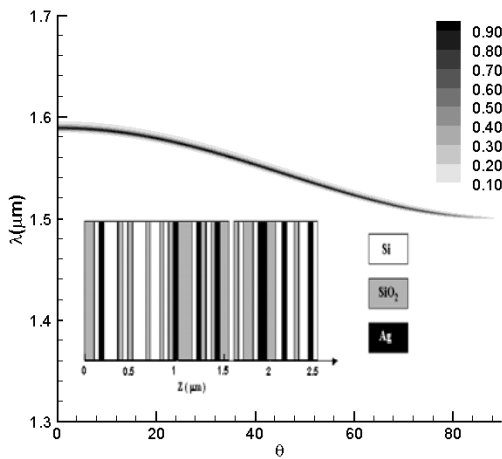


Figure 3 : Spectre d'émission de la structure finale en polarisation *s* (a) et *p* (b). La structure optimisé par algorithme génétique est représentée en (a).

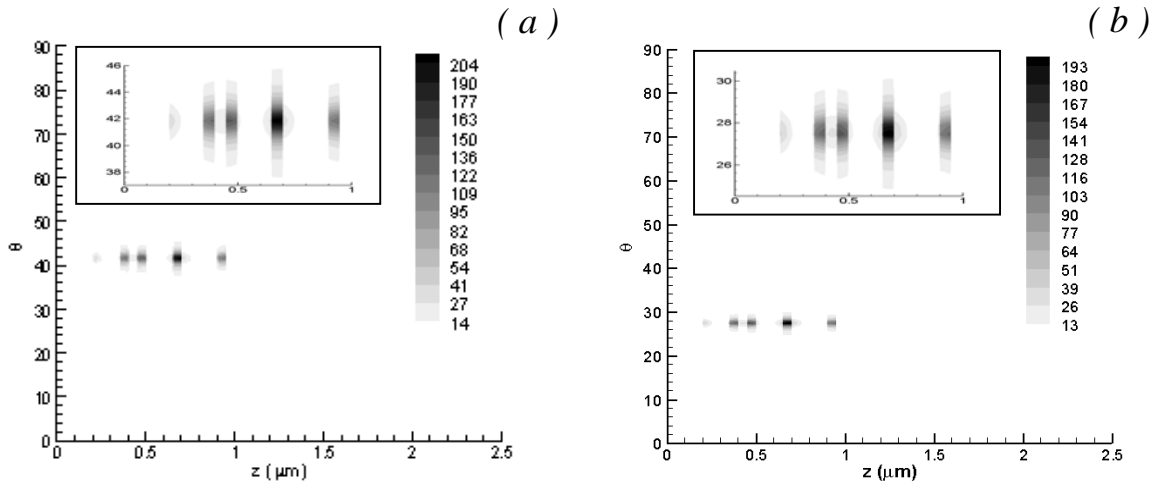


Figure 4 : Distribution spatiale de l'intensité du champ électrique à l'intérieur de la structure lorsqu'elle est soumise à une excitation unitaire polarisée s (a) ou p (b) ($\lambda=1.54\mu\text{m}$).

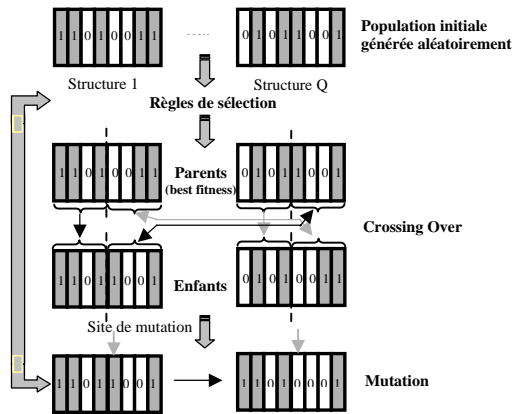


Figure 5 : Schéma de principe de l'algorithme génétique.