



HAL
open science

Caractérisation d'un modulateur optique à base de matériau à changement de phase

Margaux Loison

► **To cite this version:**

Margaux Loison. Caractérisation d'un modulateur optique à base de matériau à changement de phase. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. 2021. hal-03358226

HAL Id: hal-03358226

<https://laas.hal.science/hal-03358226>

Submitted on 29 Sep 2021

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

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

22/09/2021

INSA

INSTITUT NATIONAL
DES SCIENCES
APPLIQUÉES
TOULOUSE

RAPPORT DE STAGE INGÉNIEUR DE 4^{ÈME} ANNEE GÉNIE PHYSIQUE

Caractérisation d'un modulateur optique à base de matériau à changement de phase

5GP (Génie Physique),
LOISON Margaux

LAAS-CNRS,
CALVEZ Stéphane



RAPPORT DE STAGE INGÉNIEUR
DE 4^{ÈME} ANNEE GÉNIE PHYSIQUE

REMERCIEMENTS

Je remercie mon tuteur Stéphane CALVEZ pour son accueil et ses conseils tout au long de mon stage au sein de LAAS. Merci encore d'avoir eu confiance en mes capacités de mener à bien ce projet de quatre mois.

Je remercie également Monsieur CAMON Henri qui m'a continuellement encouragé à faire preuve d'esprit critique, afin d'inscrire mon travail dans une démarche scientifique plus rigoureuse.

Je souhaite aussi remercier toute l'équipe PHOTO dans sa globalité, stagiaires et doctorants comme permanents, pour leur bienveillance.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction :	1
Contexte et objectifs fixés :	2
I – Présentation du principe d’une cavité Fabry-Pérot et de l’état initial du projet	4
1 – Principe de fonctionnement d’une cavité Fabry-Pérot	4
2 – Etat et résultats initiaux du projet MITI	5
3 – Limites techniques liées à l’utilisation de couches d’argent	9
II – Définition et caractéristiques de la structure Fabry-Pérot optimale en vue de sa fabrication ...	10
1 – Etude numérique de la transmission pour différentes structures Fabry-Pérot	10
a) <i>Présentation des ΔT simulés pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ :</i>	13
b) <i>Présentation des ΔT simulés pour un Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂ :</i>	15
c) <i>Présentation des ΔT simulés pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ :</i>	17
2 – Calibration des dépôts métalliques	19
a) <i>Présentation du banc de caractérisation utilisé</i>	19
b) <i>Etude comparative des données expérimentales et théoriques de caractérisation des dépôts métalliques en transmission et réflexion</i>	21
III – Etude comparative en transmission des deux échantillons Fabry-Pérot	24
1 – Présentation du banc de caractérisation pour l’étude en transmission	24
a) <i>Présentation du setup de manipulation en transmission et ses contraintes</i>	24
b) <i>Détermination de la taille du faisceau incident</i>	26
2 – Présentation de la matrice finale de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique locale	28
3 – Présentation et comparaisons des résultats pour les deux échantillons de dispositifs Fabry-Pérot	29
a) <i>Présentation des résultats en transmission sur un cycle thermique du Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ à 10° d’incidence :</i>	30
b) <i>Présentation des résultats en transmission sur un cycle thermique du Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à 10° d’incidence :</i>	33
c) <i>Discussions des résultats et remarques pour la suite du projet</i>	36
Conclusion	38
Bibliographie	39
TABLE DES ANNEXES	40

Introduction :

Dans le cadre de ma quatrième année de cycle ingénieur en spécialité Génie Physique au sein de l'Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse (INSA Toulouse), j'ai réalisé un stage ingénieur de quatre mois au Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes (LAAS).

Le LAAS est un laboratoire de recherche du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) situé à Toulouse. Il est par ailleurs rattaché à deux autres entités du CNRS : l'Institut des sciences de l'information et de leurs interactions (INS2I), et l'Institut des sciences de l'ingénierie et des systèmes (INSIS).

La recherche au sein du LAAS couvre les champs disciplinaires de l'informatique, l'automatique, la robotique, les micro-nano systèmes ; et s'axe selon quatre grandes orientations stratégiques : « Energie », « Espace », « Industrie du futur » et « Transport/mobilités ». Pour répondre aux besoins dans ces domaines l'activité du LAAS regroupe une vingtaine d'équipes de recherche, réparties en six départements scientifiques : « Robotique », « Micro nano bio technologies », « Décision et optimisation », « Hyperfréquences et optique » ainsi que « Réseaux, informatique, systèmes de confiance » (RISC).

J'ai eu l'opportunité de rejoindre le département « Hyperfréquences et Optique : de l'Electromagnétisme aux Systèmes » (HOPES) au sein de son pôle de photonique, l'équipe « PHOTO ». Le département de recherche HOPES est chargé d'étudier les domaines communs à l'électronique et la photonique en rapport avec les matériaux, les composants et les systèmes. Au sein de ce département, l'équipe « PHOTO » mène des projets en lien avec le développement de micro/nano-technologies ou nouveaux composants adaptés à l'intégration photonique et photovoltaïque.

Au niveau de l'étude des matériaux, l'équipe « PHOTO » explore notamment les matériaux à changement de phase pour les commutateurs optiques au travers de projets, tel que le projet CMTS-SLM supporté par la MITI (Mission pour les Initiatives Transverses et Interdisciplinaires) du CNRS et auquel j'ai participé lors de mon stage.

Ce projet, en collaboration avec le Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC) et porté au LAAS par mon tuteur, Monsieur CALVEZ Stéphane, s'intéresse à l'adaptation et l'utilisation de complexes moléculaires à transition de spin (CMTS) dans des systèmes optiques tels que les modulateurs spatiaux de lumière visible (Spatial Light Modulator – SLM).

Contexte et objectifs fixés :

Les matériaux à changement de phase permettent une commutation réversible entre deux phases structurelles différentes lorsqu'ils sont soumis à une excitation externe (pouvant être d'origine thermique, optique ou encore électrique par exemple). Dans le cadre du projet CMTS-SLM, l'intérêt est plus précisément porté sur les matériaux solides à transition de spin permettant une commutation d'indice optique dans le visible.

Le projet CMTS-SLM est une collaboration entre deux entités du CNRS : le LAAS avec son équipe « PHOTO » et le LCC avec son équipe « Matériaux Moléculaires Commutables ». Débuté en 2019, ce projet a permis, lors de la première année de recherche, la détermination des propriétés optiques des derniers composés développés au LCC, la mise en place de méthodes de micro-structuration d'un de ces matériaux : le tri-azolyl de fer ($[\text{Fe}(\text{HB}(1,2,4\text{-triazol-1-yl})_3)_2]$), et enfin la réalisation d'un démonstrateur préliminaire de modulateur optique grâce aux empilements de multi-couches planes de tri-azolyl de fer et de deux métaux. Le complexe moléculaire retenu, le tri-azolyl de fer est un complexe moléculaire à transition de spin, aussi noté « SCO » (pour « spin-crossover complex ») qui commute pour des températures proches ambiantes (autour de 64°C-67°C). Cette première année a d'ailleurs abouti à la publication d'un article dans le *Journal of Materials Chemistry C* ([1]) qui atteste de la faisabilité de la fabrication et du fonctionnement d'une cavité Fabry-Pérot, un empilement multi-couches constitué d'une couche du composé à transition de spin insérée entre deux couches d'argent (noté « Ag »), le tout étant déposé successivement sur toute la surface d'un substrat de silice (SiO_2) (par dépôts dits « pleine plaque »). Par convention, l'empilement est noté air/Ag/SCO/Ag/ SiO_2 et l'échantillon appelé « Fabry-Pérot massif » dans la suite de ce rapport.

Les missions confiées dans le cadre de mon stage s'inscrivent dans la continuité de ce projet et portent globalement sur la caractérisation d'un modulateur optique à changement de phase basé sur des cavités Fabry-Pérot dont les dimensions latérales (parallèlement au plan du substrat) sont sub-millimétriques (appelées par la suite « micro-Fabry-Pérot ») et non plus centimétriques, et où l'excitation thermique se fera localement grâce à des micro-résistances chauffantes plutôt que par échauffement global de l'échantillon complet comme précédemment.

Plus concrètement, les objectifs peuvent être séparés en trois parties complémentaires :

- Premièrement, une partie numérique permettant la définition de l'empilement multi-couches optimal des cavités micro-Fabry-Pérot.
- Dans un second temps, la calibration des techniques de dépôt utilisées (caractérisation en transmission et réflexion d'échantillons de dépôts de couches métalliques d'épaisseurs variables pour établir des valeurs références).
- Enfin, la mise en place d'un banc de caractérisation et l'étude comparative en transmission d'une matrice de micro-cavités Fabry-Pérot et de l'ancien échantillon constitué d'une cavité Fabry-Pérot pleine plaque.

I – Présentation du principe d'une cavité Fabry-Pérot et de l'état initial du projet

1 – Principe de fonctionnement d'une cavité Fabry-Pérot

Une cavité Fabry-Pérot classique se compose de deux miroirs parallèles séparés par une couche de matériau, les miroirs agissent alors comme une cavité résonnante qui filtre la lumière incidente en transmission et/ou réflexion. A l'intérieur de la cavité, le faisceau incident se réfléchit à de multiples reprises, introduisant un déphasage entre chaque faisceau réfléchi. Ce déphasage donne lieu à des interférences constructives ou destructives en sortie de cavité, qui permettent de filtrer les longueurs d'ondes transmises/réfléchies.

Une cavité Fabry-Pérot est donc assimilable à un filtre interférentiel, qui donne des pics de résonance à chaque tour de cavité (aller-retour). Ce filtre est caractérisé par son intervalle spectral libre (ou « free spectral range ») qui correspond à la distance entre deux pics de résonance, ainsi que par sa finesse qui correspond à la largeur du pic de résonance (c'est-à-dire la résolution du Fabry-Pérot)¹.

Pour un film fin de métal donné, on obtient une transmission et réflexion partielles et on observe un phénomène d'absorption, qui comme le déphasage dépendent de l'épaisseur des films et de la cavité². Toujours d'après [3], on obtient pour une cavité Fabry-Pérot formée de deux miroirs métalliques identiques les expressions suivantes :

$$T = \frac{T_M^2(1 - R_M)^{-2}}{1 + F \sin^2(\phi - \phi_r)}$$
$$R = \frac{R_M[(1 + T_M - R_M)^2 - 4T_M \sin^2(\phi - \phi_t) + 4R_M \sin^2(\phi - \phi_r) + 4R_M T_M \sin^2(\phi_r - \phi_t)]}{(1 - R_M)^2 \times [1 + F \sin^2(\phi - \phi_r)]}$$
$$A = 1 - T - R$$

Avec T_M et R_M , respectivement la réflectivité et la transmittance des films métalliques (souvent déterminées par étude numérique), ϕ_r et ϕ_t leur déphasage ; puis $F = 4R_M(1 - R_M)^{-2}$.

¹ D'après [2]

² D'après [3]

La finesse du Fabry-Pérot est déterminée par différents facteurs qui sont : l'épaisseur de la cavité, le saut d'indice entre les couches et la gamme de longueurs d'onde définie.

Les cavités Fabry-Pérot fabriquées dans le cadre du projet CMTS-SLM sont des cavités Fabry-Pérot métalliques (les miroirs sont des fines couches de métal) à quatre interfaces :

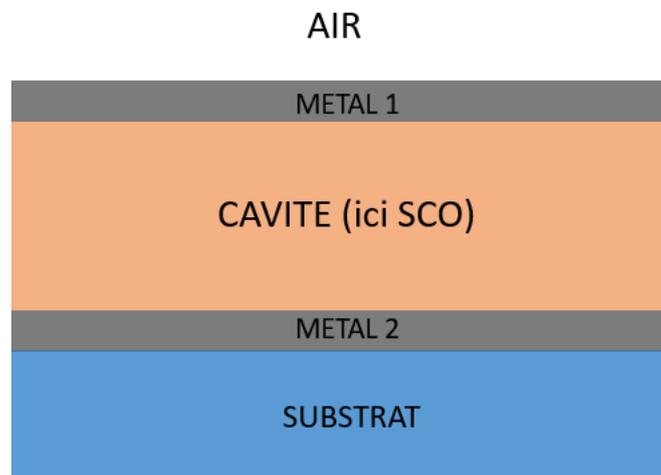


Figure 1: schéma d'un Fabry-Pérot métallique à 4 interfaces comme défini précédemment, c'est-à-dire un Fabry-Pérot air/métal 1/SCO/métal 2/SiO₂

2 – Etat et résultats initiaux du projet MITI

Dans cette première phase du projet, l'échantillon utilisé et dont une photo est présentée en Figure 2 est une cavité Fabry-Pérot métallique pleine plaque, composée d'empilements de couches d'argent et de tri-azolyl de fer, qui seront respectivement notés « Ag » et « SCO ». Les deux couches d'Ag sont d'une même épaisseur nominale de 50 *nm*, pour une épaisseur nominale de SCO de 115 *nm*.

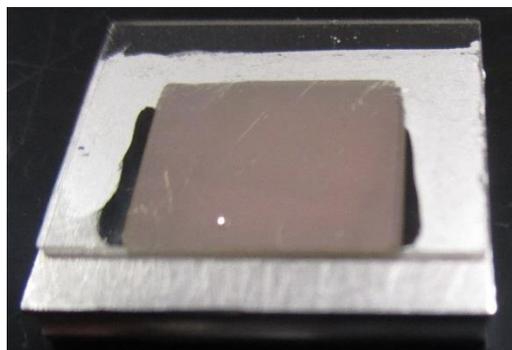


Figure 2: photo de l'échantillon pleine plaque de Fabry-Pérot Ag/SCO/Ag

Pour induire la commutation de l'état bas (« Low-Spin » ou « LS ») à l'état haut (« High-Spin » ou « HS ») du composé, le SCO est excité thermiquement sur une gamme de températures allant de 25°C à 95°C.

La transition apparaît vers une température relativement basse (proche ambiante), qui se situe autour des 65°C, et s’accompagne d’une augmentation d’environ 4,6% de l’épaisseur du film de SCO³.

4

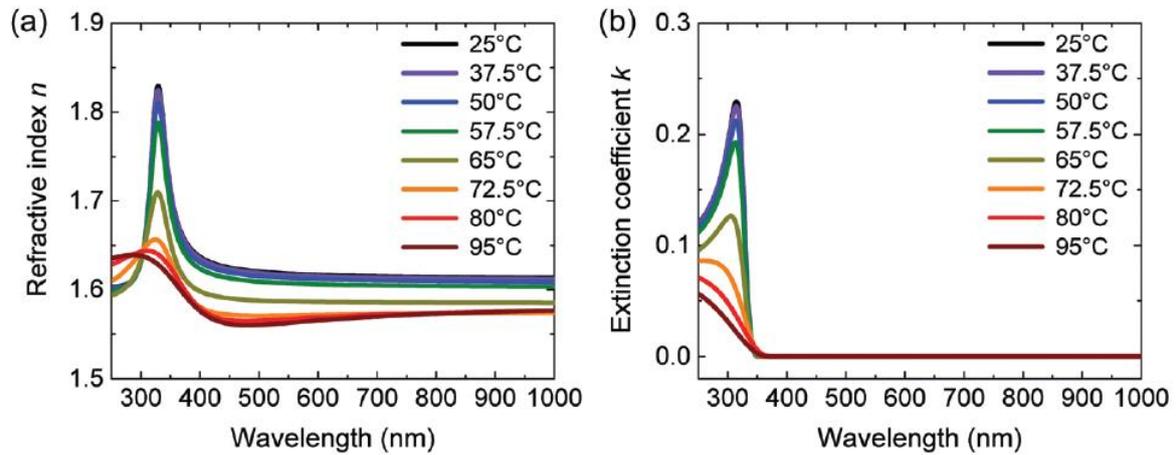


Figure 3: résumé des résultats d’une caractérisation réalisée à l’ellipsomètre (modèle Horiba UVISSEL) d’un film de SCO d’une épaisseur nominale de 100 nm, par le LCC (résultats issus de [1]) :

« (a and b) Optical constants (n and k) in the UV-Vis-NIR region (250–1000 nm) acquired at selected temperatures between 25 and 95°C. »

Les figures n°3(a) et n°3(b) attestent d’un un saut d’indice de réfraction élevé ($\Delta n = 0.2 - 0.04$) ainsi que de faibles pertes par absorption ($k \leq 10^{-4}$) pour des longueurs d’onde supérieure à 350 nm dans les gammes spectrales UV-Visible-Proche IR après commutation de l’état bas à l’état haut du dépôt de SCO⁵.

La commutation d’indice optique mise en évidence dans ces premiers résultats a ensuite été exploitée par la réalisation d’un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ pleine plaque, intégrant le SCO dans sa cavité. Et la figure n°4 ci-dessous rassemble un résumé des différents résultats obtenus concernant les propriétés optiques de cette cavité Fabry-Pérot, déjà développée avant mon arrivée au LAAS.

³ D’après [1] et [4]

⁴ Figures et légende issues de [1]

⁵ D’après [1]

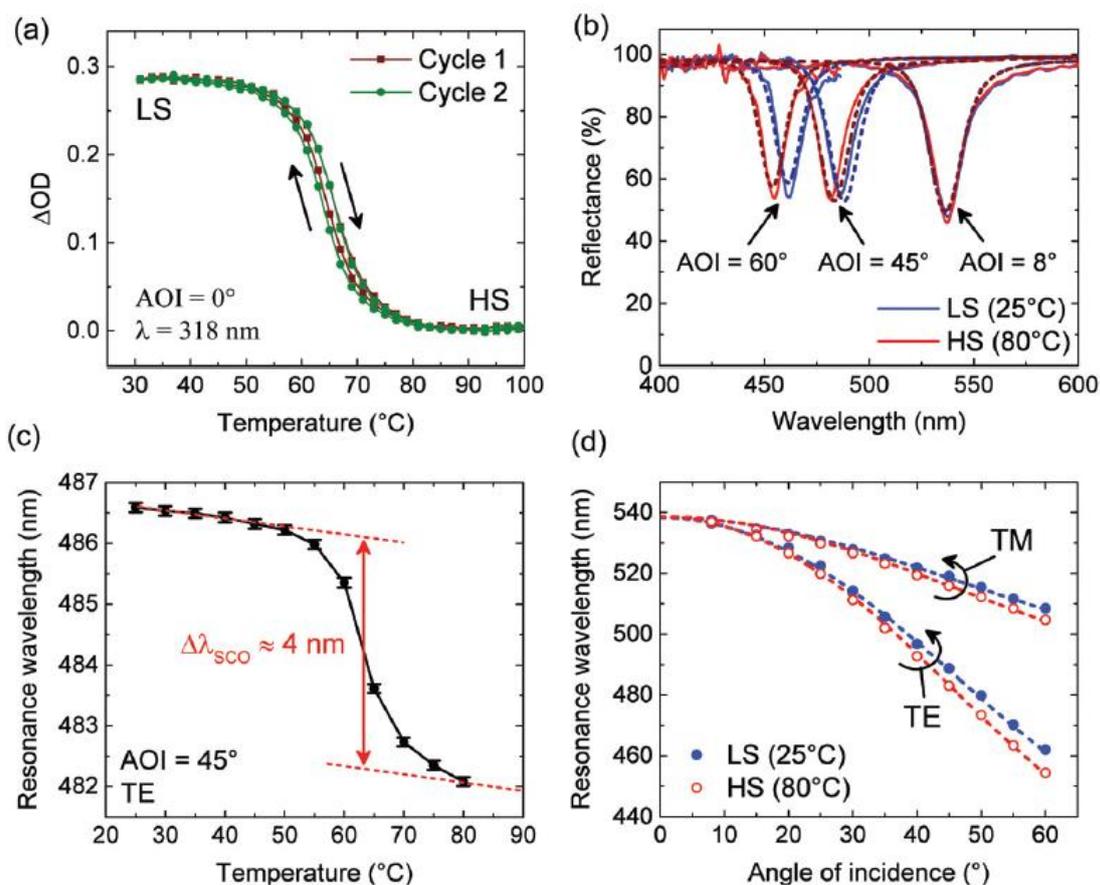


Figure 4: résumé des propriétés optiques du Fabry-Pérot Ag/SCO/Ag conçu par le LCC (résultats issus de [1]) :

« (a) Temperature dependence of the optical density change across the cavity ($\Delta OD = OD - OD_{HS}$) at $\lambda = 318$ nm (normal incidence, non-polarized) along two heating-cooling cycles (2°C min^{-1} scan rate). (b) Reflectance spectra at selected AOI in the two spin states (TE polarization). (c) Cavity resonance (TE polarization, AOI = 45°) as a function of temperature (heating mode). (d) Dispersion curves in the two spin states for TE and TM polarizations. The dotted lines in (b and d) were calculated by means of the transfer matrix method using ellipsometry data. »

La figure n°4(c) met en évidence le caractère modulable de la cavité Fabry-Pérot créée, avec un décalage des pics de résonance (ici un « blue-shift » d'environ 4 nm) qui apparaît lors de la transition de spin.

Dans le cas présenté ci-dessous, plus de dix millions⁷ de cycles thermiques (entre 25 et 100°C) ont été effectués et attestent de la haute endurance de cycle du composé SCO tri-azolyl de fer. L'endurance de cycle est quantifiée par la réversibilité et la stabilité de la transition de spin après un très grand nombre de cycles thermiques, et témoigne de la qualité de la transition de spin.

⁶ Figures et légende issues de [1]

⁷ D'après [5]

Ces premiers résultats sur l'échantillon du Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ pleine plaque, et le développement de méthodes de micro-structuration ont introduit la possibilité de réaliser au LAAS des « micro-cavités » Fabry-Pérot localisées. L'objectif est alors de fabriquer des matrices de Fabry-Pérot où chaque modulateur pourra être chauffé localement, plutôt que de chauffer le substrat entier.

L'approche technologique choisie par le LAAS pour induire localement et thermiquement la commutation consiste à limiter spatialement les cavités Fabry-Pérot à des tailles allant de 50 μm à 300 μm de diamètre et d'intégrer autour des résistances chauffantes. On peut grossièrement résumer les étapes de fabrication de ce nouveau dispositif comme suit :

- Etape 1 : Dépôt tri-couche de Cr/Au/Ti
- Etape 2 : Masquage pour réaliser les pistes de résistance en Ti
- Etape 3 : Isolation (électrique) de la cavité Fabry-Pérot par dépôt d'une couche de SiO₂
- Etape 4 : Isolation (thermique) par dépôt gravure de la couche de SiO₂
- Etape 5 : Dégagement des contacts et pads métalliques
- Etape 6 : Dépôt et délimitation latérale du miroir métallique inférieur (par lithographie et gravure)
- Etape 7 : Dépôt et activation de la couche de SCO.
- Etape 8 : Dépôt du miroir métallique supérieur.

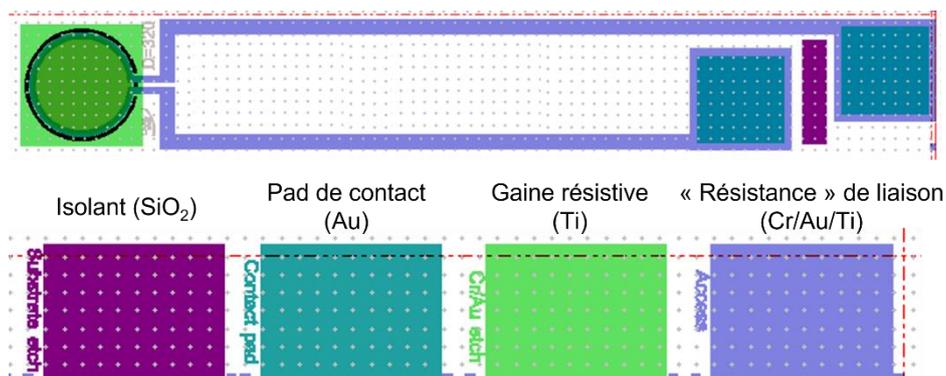


Figure 5: schéma légendé du nouveau dispositif de Fabry-Pérot à excitation thermique intégrée

3 – Limites techniques liées à l'utilisation de couches d'argent

L'utilisation d'argent dans la fabrication de matrice de dispositifs Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ au LAAS introduit des spécificités techniques à respecter ainsi que des défis technologiques qu'il nous a fallu contourner. Tout d'abord il faut considérer deux contraintes concernant les dépôts métalliques supérieur et inférieur. Pour le dépôt de la couche métallique supérieure (qui intervient après le dépôt de SCO), il doit être fait de manière à limiter la dégradation de la couche de SCO par bombardement, ce qui exclut l'utilisation de l'évaporation au canon à électrons. En ce qui concerne la couche métallique inférieure, cette dernière doit être gravée pour fabriquer la micro-structure Fabry-Pérot métallique. La gravure d'argent est un procédé peu usité qui requerrait un développement chronophage, peu adapté au cadre temporel restreint du stage. A contrario, les dépôts et gravures de l'aluminium sont des étapes très courantes des procédés en microélectronique et sont bien maîtrisés au LAAS. La seule contre-indication pratique à l'utilisation de métaux différents est qu'il est nécessaire de changer et nettoyer les creusets entre les deux dépôts.

Aussi afin d'éviter l'accumulation d'étapes chronophages et complexes, nous nous sommes intéressés à l'utilisation d'aluminium (noté « Al ») pour la réalisation des couches métalliques des dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique locale.

II – Définition et caractéristiques de la structure Fabry-Pérot optimale en vue de sa fabrication

Avant de réaliser le premier prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique localisée on souhaite définir, à l'aide d'un script de simulation de cavité Fabry-Pérot métallique air/Métal/SCO/Métal/SiO₂, les paramètres optimaux d'épaisseur de couches, et valider après caractérisation en réflexion et transmission la méthode de dépôt des couches métalliques de cette nouvelle cavité. Au vu du setup de manipulation qui sera présenté par la suite, uniquement les résultats de simulation en transmission seront traités dans cette restitution.

La structure optimale doit maximiser deux aspects : le décalage en longueur d'onde et le contraste entre l'intensité en transmission de l'état bas (« LS », la transmission enregistrée à la température basse fixée entre 20°C-25°C) et celle de l'état haut (« HS », la transmission enregistrée à la température haute fixée à 85°C). Ces deux aspects dépendent de la valeur maximale atteignable en transmission et de la finesse du pic de résonance du Fabry-Pérot (c'est-à-dire sa raideur). Plus l'épaisseur des couches est importante plus l'absorption augmente et l'intensité en transmission diminue, mais d'un autre côté plus l'intensité en réflexion est importante plus le Fabry-Pérot est fin. Il s'agit donc de trouver le bon équilibre entre la raideur du Fabry-Pérot et le maximum d'intensité en transmission atteignable pour une épaisseur de couche métallique donnée.

1 – Etude numérique de la transmission pour différentes structures Fabry-Pérot

Le script mis au point pour simuler la cavité résonnante s'appuie sur des fonctions de calcul de matrices de « scattering »⁸ et de propagation de la lumière dans un empilement multi-couches⁹, respectivement développées par le physicien américain BYRNES Steve, et implémentées numériquement en amont par Monsieur GAUTHIER-LAFAYE (chercheur au sein de l'équipe PHOTO du LAAS) et sont disponibles en Annexe n°1. Pour les calculs qui suivent les tables et dispersion d'indices utilisées proviennent de [8] pour l'argent et de [9] pour l'aluminium, pour le SCO et le SiO₂ les indices ont été déterminés à l'ellipsomètre.

⁸ D'après [6], disponible en Annexe II

⁹ D'après [7], disponible en Annexe II

Pour confirmer l'intérêt d'une structure Fabry-Pérot la simulation est un excellent outil. Elle permet de simuler les réponses en transmission et réflexion de la cavité en fonction de plusieurs paramètres :

- Le type d'empilement défini, en fonction des matériaux utilisés et de l'épaisseur de chaque couche,
- La gamme de longueurs d'onde (notées « λ ») étudiée, on s'intéresse pour le moment au domaine du visible, c'est-à-dire pour des $\lambda \in [450 \text{ nm} ; 750 \text{ nm}]$ environ,
- L'angle d'incidence θ du faisceau incident,
- La température T, qui après transition de spin, entraîne une augmentation d'environ 4,6% de l'épaisseur de la couche de SCO¹⁰.

L'étude de la structure Fabry-Pérot simulée passe donc par l'étude d'un empilement air/Métal/SCO/Métal/SiO₂ aux épaisseurs métalliques variables pour une épaisseur de SCO fixée à 135 nm (l'épaisseur de SCO reste fixe car sa variation n'entraîne qu'un décalage spectral et n'affecte pas la transition de phase). On s'intéresse dans un premier temps à la structure préexistante à base d'argent, c'est-à-dire le Fabry-Pérot pleine plaque air/Ag (50 nm)/SCO (115 nm)/Ag (50 nm)/SiO₂. La simulation de la structure donne dans le visible les résultats en transmission qui suivent, à l'état bas et l'état haut, à 0° et 30° d'incidence.

Variation de la valeur d'intensité en transmission en fonction la longueur d'onde, pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ à 0° et 30° d'incidence

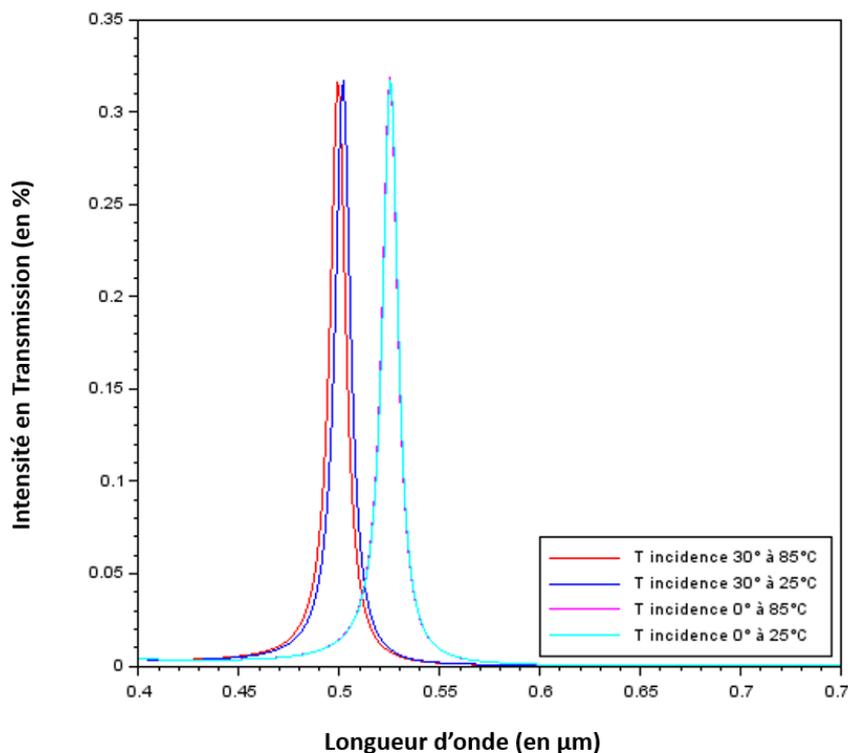


Figure 6: simulation des spectres en transmission à l'état bas (25°C) et l'état haut (85°C) pour un Fabry-Pérot air/Ag (50 nm)/SCO (115 nm)/Ag (50 nm)/SiO₂

¹⁰ D'après [1]

La figure ci-dessus met en évidence deux décalages, le premier introduit par l'angle d'incidence et le second par la transition de phase (passage de l'état bas à l'état haut). Ces décalages créent un contraste entre les deux phases possibles, qui est quantifiable par la différence des intensités en transmission des deux états. On note ΔT le contraste en transmission entre l'état LS et l'état HS de la structure Fabry-Pérot simulée. À une épaisseur donnée le contraste en transmission se présente comme suit :

Contraste d'intensité en transmission entre l'état bas et l'état haut (en valeur absolue) en fonction la longueur d'onde, pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ à 0° d'incidence

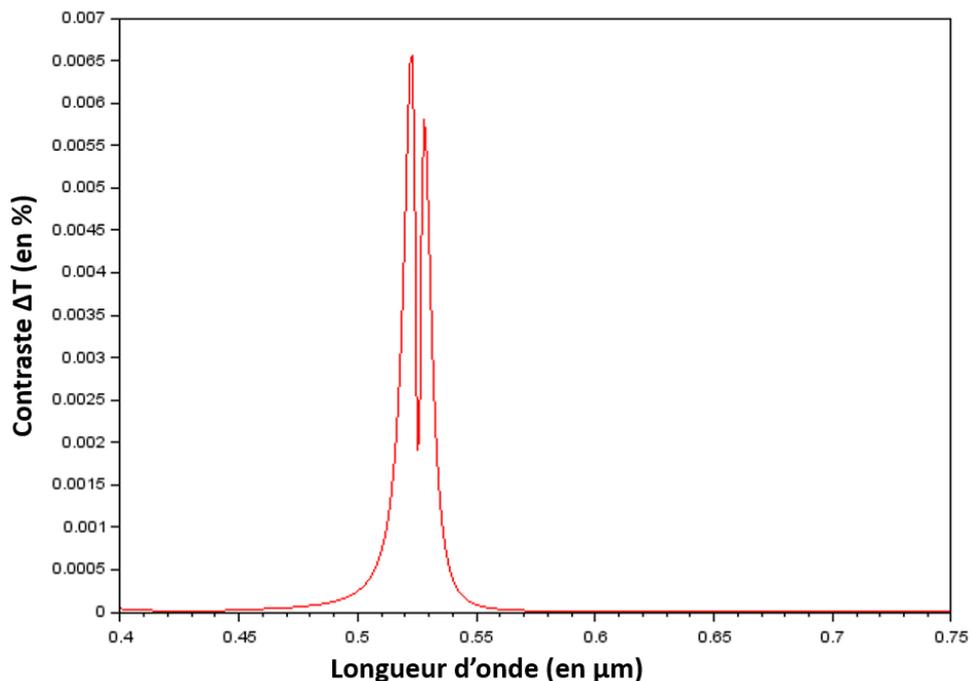


Figure 7: simulation de la valeur absolue du contraste d'intensité en transmission à 0° d'incidence pour un Fabry-Pérot air/Ag (50 nm)/SCO (115 nm)/Ag (50 nm)/SiO₂

Selon l'épaisseur étudiée et l'angle d'incidence choisi, on comprend que ce contraste d'intensité en transmission varie. Pour rendre compte de la répartition et de l'évolution de ce contraste pour différentes épaisseurs de couches métalliques dans le visible on utilise des cartographies 3D (réalisées sous Scilab).

L'étude numérique présentée s'intéresse à l'évolution de ce contraste pour trois différentes structures de Fabry-Pérot, et dans le cadre de la restitution des résultats de simulation on s'intéressera aux angles d'incidence 0° (incidence normale) et 30°.

a) Présentation des ΔT simulés pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂:

La structure Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ avait déjà été mise au point lors de la première année du projet CMTS-SLM. Seront traités ici les résultats de l'étude de la variation de ΔT pour deux angles d'incidence : 0° et 30°, pour mettre en évidence les possibles effets introduits par le décalage angulaire.

Plot 3D de la variation d'intensité Delta_T dans le visible, selon l'évolution des épaisseurs d'argent (epAg) pour $\theta=0^\circ$ et l'épaisseur de SCO (e_SCO)=0,115\mu m

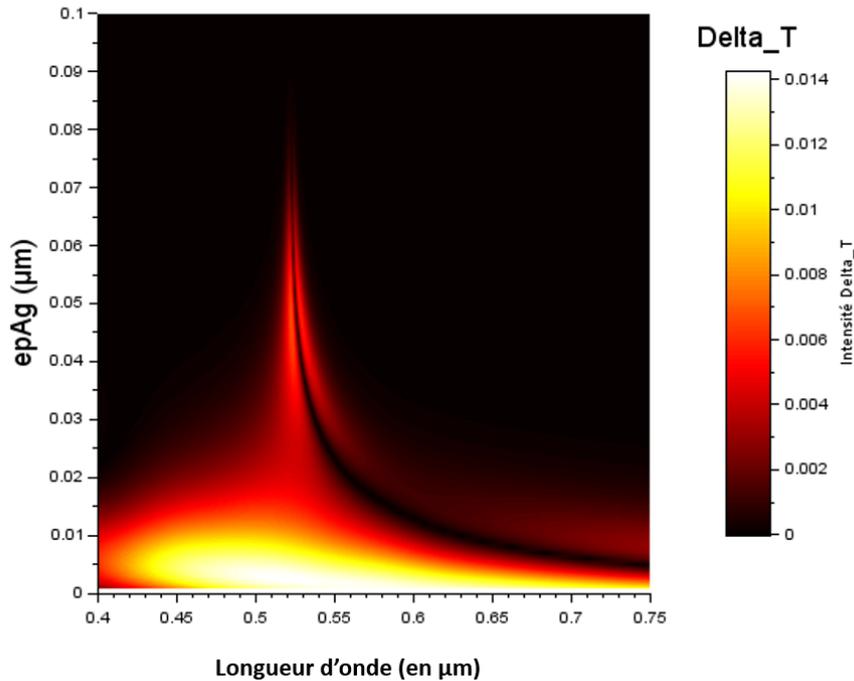


Figure 8: cartographie en trois dimensions (épaisseur d'Ag, longueur d'onde, intensité du contraste en réflexion) de la variation d'intensité ΔT avec l'évolution des épaisseurs d'Ag sur la gamme du visible à incidence normale pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂

Le contraste en transmission pour la structure air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ présente une répartition assez piquée (autour des longueurs d'onde entre 0,520 μm – 0,550 μm). L'intensité maximale de contraste atteint les 1,4% pour des épaisseurs d'argent inférieures à 10 nm et dans la gamme de longueurs d'onde 0,450 μm – 0,550 μm. Pour des épaisseurs d'argent plus importantes (autour des 40 nm – 50nm) le contraste chute à 0,7% d'intensité pour des longueurs d'onde entre 0,520 μm – 0,550 μm. À incidence normale pour une structure Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ le maximum de contraste en transmission est atteint pour des faibles épaisseurs (inférieures à 10 nm voire proches des 5 nm).

En s'intéressant aux résultats à 30° d'incidence on comprend l'intérêt de l'échantillon Fabry-Pérot pleine plaque air/Ag (50 nm)/SCO (115 nm)/Ag (50 nm)/SiO₂.

Plot 3D de la variation d'intensité Delta_T dans le visible, selon l'évolution des épaisseurs d'argent (epAg) pour $\theta=30^\circ$ et l'épaisseur de SCO (e_{SCO})=0,115 μ m

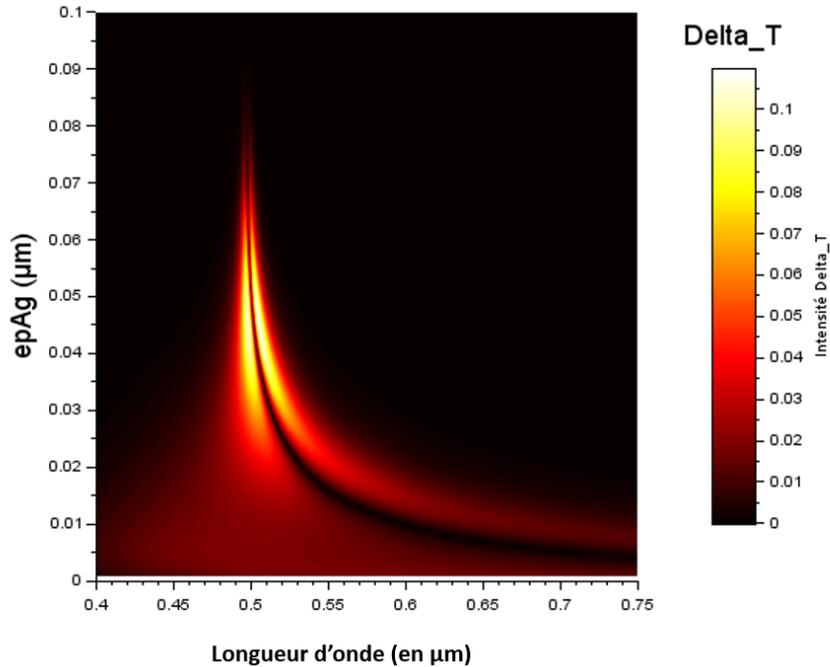


Figure 9: cartographie en trois dimensions (épaisseur d'Ag, longueur d'onde, intensité du contraste en réflexion) de la variation d'intensité ΔT avec l'évolution des épaisseurs d'Ag sur la gamme du visible à incidence normale pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂

En effet, en introduisant lors de la simulation un angle d'incidence de 30° la zone de forte intensité de contraste en transmission s'affine et permet d'atteindre jusqu'à 10% d'intensité pour des épaisseurs d'argent autour des 50 nm. En termes de longueurs d'onde, ce pic de contraste se situe entre les 0,500 μ m – 0,530 μ m. Le décalage angulaire a permis de renforcer le contraste aux épaisseurs d'argent plus importantes qui, à incidence normale, ne permettaient qu'un faible contraste.

Une structure Fabry-Pérot à base d'argent introduit des contrastes intéressants avec le décalage angulaire du faisceau incident, mais semble assez inerte pour une incidence normale. Malgré ces remarques l'utilisation d'argent introduit des défis techniques (gravure et dépôt d'argent) que l'on souhaite éviter. La gravure et le dépôt d'aluminium sont des techniques mieux maîtrisées ce qui introduit la deuxième structure Fabry-Pérot de cette restitution de résultats, la structure air/Al/SCO/Al/SiO₂.

b) Présentation des ΔT simulés pour un Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂ :

Seront traités ici les résultats de l'étude de la variation de ΔT pour un Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂. Comme précédemment les résultats concernent deux angles d'incidence : 0° et 30°.

Plot 3D de la variation d'intensité Delta_T dans le visible, selon l'évolution des épaisseurs d'aluminium (epAlu) pour $\theta=0^\circ$ et l'épaisseur de SCO (e_{SCO})=0,135 μ m

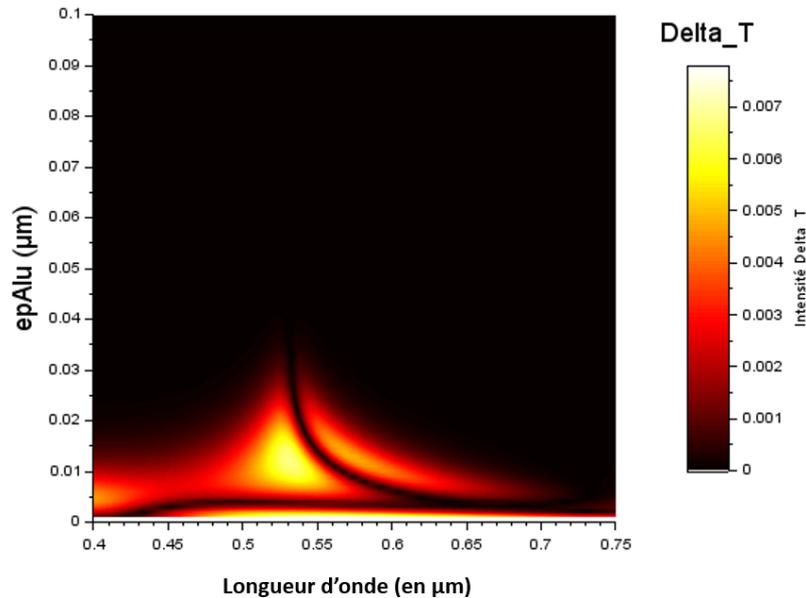


Figure 10: cartographie en trois dimensions (épaisseur d'Al, longueur d'onde, intensité du contraste en réflexion) de la variation d'intensité ΔT avec l'évolution des épaisseurs d'Al sur la gamme du visible à incidence normale pour un Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂

La répartition du contraste en transmission à incidence normale présente un pic plus large et court que celui présent en figure n°8. On repère une zone principale de forte intensité de contraste centrée autour des longueurs d'onde 0,510 μm – 0,550 μm , avec un maximum de contraste autour des 0,8%, atteignable pour des épaisseurs d'aluminium autour des 5 nm – 20 nm.

Ces valeurs de contraste sont assez faibles et restent inférieures à celles proposées à incidence normale par la structure air/Ag/SCO/Ag/SiO₂. Néanmoins à incidence normale, la zone de forte intensité de contraste est accessible pour des épaisseurs d'aluminium jusqu'à deux fois plus importantes que celles présentées pour l'argent (jusqu'à 20 nm pour l'aluminium contre 10 nm pour l'argent). Des épaisseurs d'aluminium autour des 15 nm – 20 nm sont tout à fait réalisables d'un point de vue technologique.

Enfin on s'intéresse aux effets introduits par un décalage angulaire de 30° du faisceau.

Plot 3D de la variation d'intensité Delta_T dans le visible, selon l'évolution des épaisseurs d'aluminium (epAlu) pour $\theta=30^\circ$ et l'épaisseur de SCO (e_{SCO})=0,135 μ m

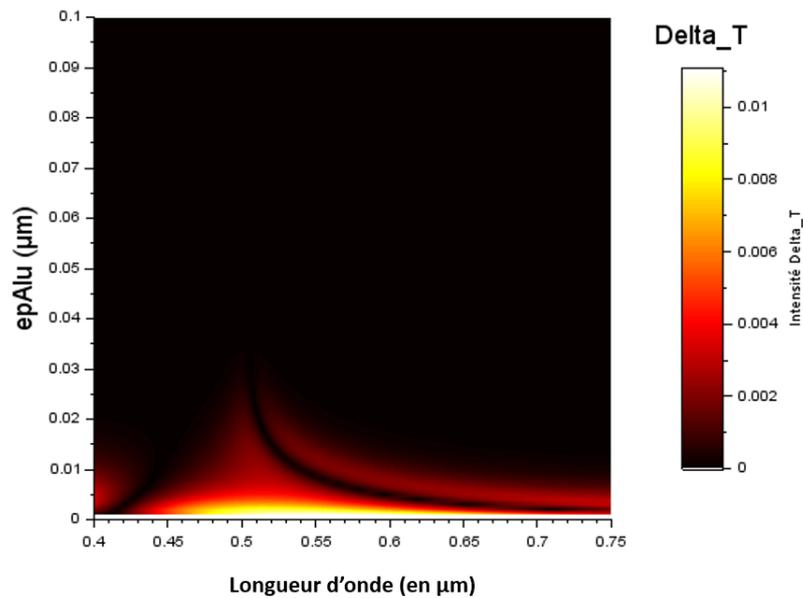


Figure 11: cartographie en trois dimensions (épaisseur d'Al, longueur d'onde, intensité du contraste en réflexion) de la variation d'intensité ΔT avec l'évolution des épaisseurs d'Al sur la gamme du visible à une incidence de 30° pour un Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂

Le décalage de 30° de l'angle d'incidence par rapport à l'incidence normale entraîne un affaissement de la figure de répartition d'intensité de contraste. Le maximum de contraste atteignable augmente légèrement : il se situe autour des 1% d'intensité à 30° d'incidence contre 0,8% d'intensité à incidence normale. Mais ce nouveau maximum est accessible pour des épaisseurs d'aluminium largement inférieures à 10 nm et donc impossibles ou très difficilement réalisables technologiquement.

Les contrastes en transmission proposés le Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂ ne sont pas vraiment convaincants. Avec dans le meilleur des cas une valeur maximale de ΔT autour des 1% pour des épaisseurs d'aluminium inférieures à 10 nm voire proches des 5 nm, difficilement réalisables d'un point de vue technique. Aussi, l'intérêt principal de la structure Fabry-Pérot air/Al/SCO/Al/SiO₂ semble résider uniquement dans sa facilité de mise en place technologique (technique de dépôt d'aluminium connue, pas de creuset à changer, ...) pour des épaisseurs autour des 15 nm – 20 nm.

Un dispositif Fabry-Pérot à base d'argent pourrait présenter des contrastes en transmission plus distincts, et représenter ainsi un véritable intérêt pour la fabrication du prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique localisée. Ce qui introduit la dernière structure Fabry-Pérot de cette restitution, une structure à base d'argent et d'aluminium : le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂.

c) Présentation des ΔT simulés pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂:

La simulation du Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ suit les mêmes principes que les simulations précédentes, la différence intervient principalement dans le traitement de données. Toute la gamme de longueurs d'onde ne pouvant être étudiée en parallèle de la variation d'intensité des contrastes en transmission et réflexion en fonction de l'évolution des couches d'argent et d'aluminium, les cartographies ont été tracées pour une valeur donnée de longueur d'onde. Cette valeur correspond à la longueur d'onde permettant d'atteindre le maximum de contraste en réflexion ou transmission.

Pour éviter de surcharger cette partie du rapport, les résultats simulés en ΔT pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à 30° d'incidence sont disponibles en Annexe II mais ne seront pas traités ici.

Plot 3D de la variation d'intensité Delta_T dans le visible, selon l'évolution des épaisseurs d'aluminium (epAlu) et d'argent (epAg) à une longueur d'onde donnée $\lambda=0,562\mu\text{m}$ pour $\theta=0^\circ$ et l'épaisseur de SCO ($e_{\text{SCO}}=0,135\mu\text{m}$)

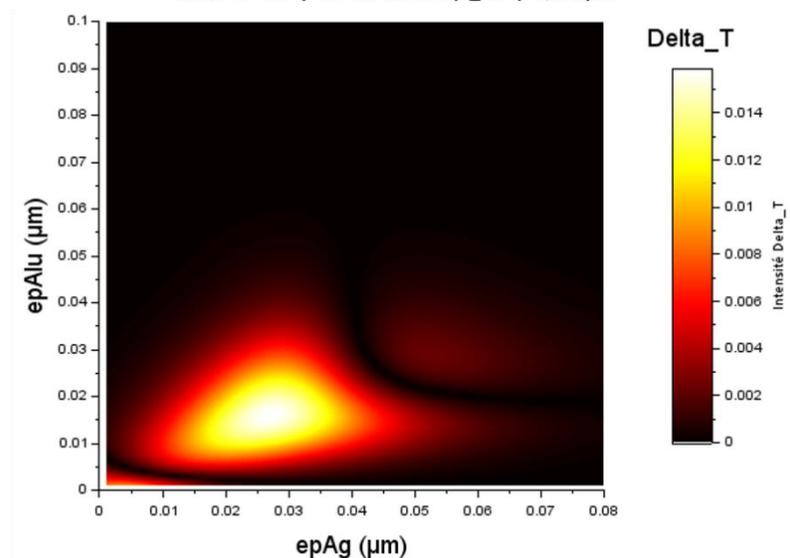


Figure 12: cartographie en trois dimensions (épaisseur d'Al, épaisseur d'Ag, intensité du contraste en réflexion) de la variation d'intensité ΔT avec l'évolution des épaisseurs d'Ag pour $\lambda=0,562\mu\text{m}$ à incidence normale pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂

En transmission le contraste reste assez faible avec une valeur maximale d'intensité de contraste autour des 1,5% atteinte pour des épaisseurs d'argent autour des 20 nm – 40 nm et des épaisseurs d'aluminium plus faibles estimées autour 15 nm – 25 nm.

Le contraste en transmission de la structure air/Ag/SCO/Al/SiO₂ reste plus élevé, à la fois en termes de contraste et d'épaisseur de couche, que pour celui offert par la structure air/Al/SCO/Al/SiO₂. Mais les résultats de la structure mixte présentent des contrastes en transmission moins élevés que pour une structure Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂.

Aussi il semblerait qu'en terme de qualité de contraste en transmission la structure Fabry-Pérot mixte air/Ag/SCO/Al/SiO₂ soit un bon compromis entre la structure air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ (difficile à produire au LAAS) et la structure air/Al/SCO/Al/SiO₂ (plus simple à fabriquer mais peu convaincante au vu des résultats des simulations de contraste).

Enfin concernant les techniques de dépôt, on souhaite réaliser la couche métallique inférieure en aluminium pour pouvoir facilement la graver et la déposer au canon à électrons (qui, comme on le verra, a démontré de meilleurs résultats en terme de qualité de dépôt) et la couche métallique supérieure sera réalisée en argent avec la technique de dépôt par évaporation thermique.

Les épaisseurs fixées pour la conception du premier prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot à activation thermique localise sont : air/Ag (36 nm)/SCO (135 nm)/ Al (16 nm)/SiO₂.

La réalisation pratique de cette structure Fabry-Pérot nécessite une étape intermédiaire de calibration en réflexion pour les dépôts des couches d'argent et d'aluminium. Avec la simulation de couches simples air/Métal/SiO₂ on estime les valeurs attendues en réflexion pour la validation des futurs dépôts témoins d'argent et d'aluminium.

Intensité en réflexion pour deux dépôts de métal sur substrat SiO₂ : dépôt Al = 16 nm ; dépôt Ag = 36 nm

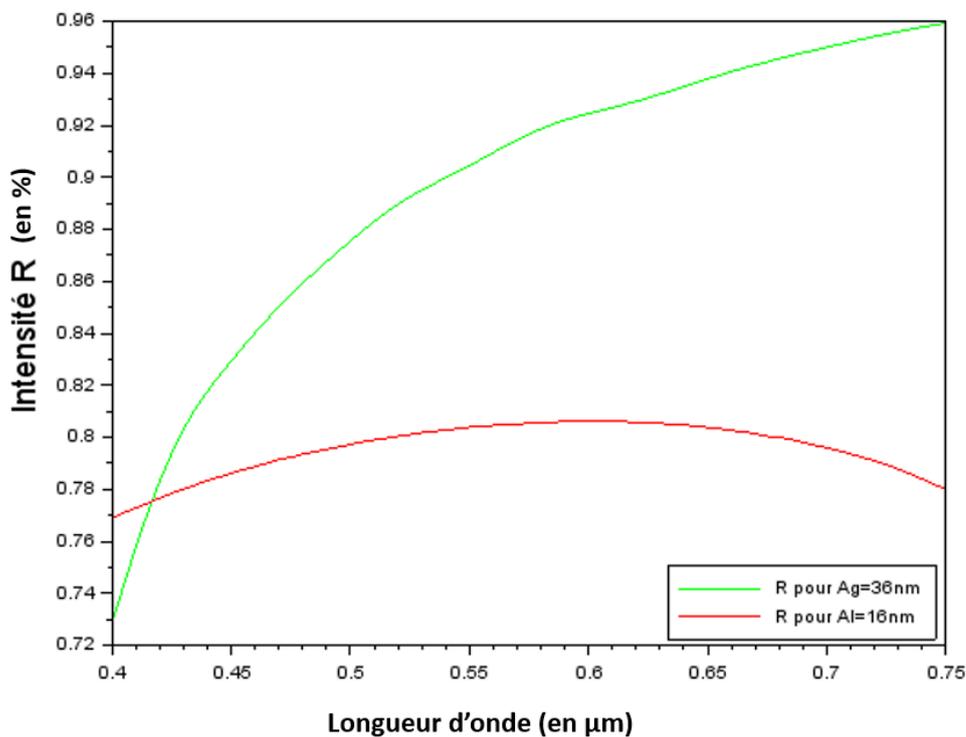


Figure 13: simulation des intensités en réflexion pour deux dépôts métalliques sur substrat SiO₂, respectivement un dépôt d'argent (vert) de 36 nm d'épaisseur et un dépôt d'aluminium (rouge) de 16 nm d'épaisseur

On attend des dépôts métalliques simples d'argent et d'aluminium une intensité en réflexion autour des 77% – 80% pour l'aluminium et d'au moins 90% pour l'argent. Afin de vérifier que ces valeurs sont atteintes par nos techniques de dépôt il est nécessaire de réaliser une étape de calibration.

2 – Calibration des dépôts métalliques

L'étape de calibration des dépôts métalliques est essentielle pour valider une méthode de dépôt et ainsi assurer, aux épaisseurs visées, une intensité en réflexion suffisante pour la cavité Fabry-Pérot. Dans l'objectif de calibrer le dépôt de couches métalliques, c'est-à-dire d'établir les relations entre les épaisseurs déposées, les coefficients de réflexion et de transmission effectifs et les paramètres de dépôt (temps et vitesse de dépôt, cette dernière étant déduite par mesure de masse à la balance à quartz inclus dans l'évaporateur), on réalise des échantillons témoins à étudier en réflexion et transmission. Un échantillon témoin est un dépôt métallique d'une épaisseur visée sur un substrat SiO_2 , chaque témoin est étudié en transmission et réflexion sur le banc de caractérisation représenté ci-dessous. L'épaisseur réelle du témoin est mesurée au profilomètre mécanique après une procédure de « lift-off ».

a) Présentation du banc de caractérisation utilisé

Le banc de caractérisation utilisé pour la calibration des dépôts métalliques est présenté ci-dessous (et une photo légendée est disponible en Annexe III) :

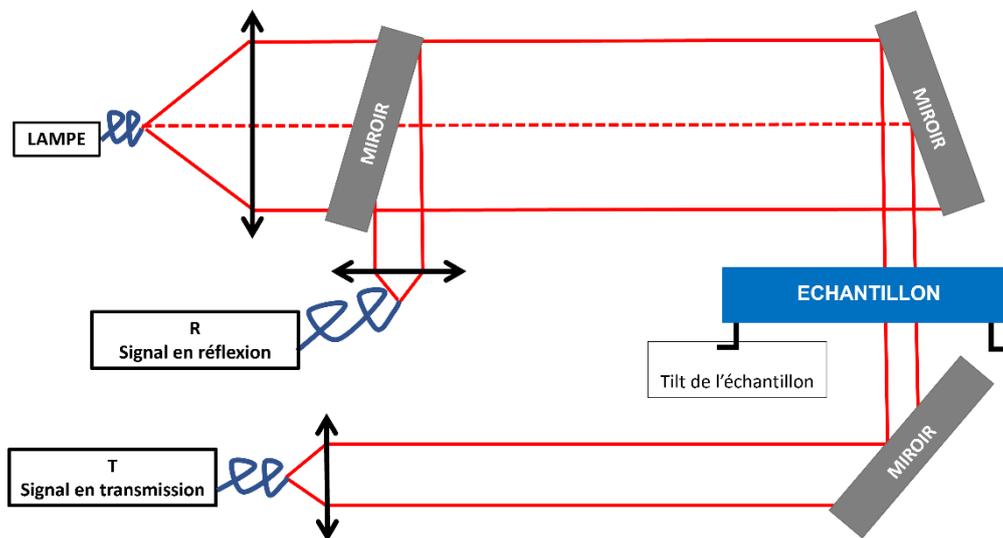


Figure 14: schéma de principe du setup de caractérisation en transmission et réflexion des échantillons de dépôt métallique

Les fibres de sortie sont connectées à un spectromètre, ici nous avons utilisé le spectromètre OceanOptics FLAME UV-VIS, et la fibre d'entrée (diamètre $200 \mu\text{m}$, $NA = 0.22$) est connectée à une lampe blanche tungstène halogène (SLS201L/M). Les signaux acquis en sortie correspondent donc au spectre de la lumière incidente après réflexion et passage dans l'échantillon. Les données sont récupérées et sauvegardées depuis l'application OceanView.

Pour aligner le montage avec l'échantillon on utilise un coupleur 50/50 qui permet de vérifier dans un premier temps que l'on retrouve bien tout le signal d'entrée en retour de fibre, on réalise ainsi un premier alignement de la partie haute du montage. Il est nécessaire par la suite d'aligner la partie du montage qui réceptionne le signal de sortie en réflexion puis la partie basse du montage qui réceptionne principalement le signal de sortie en transmission mais contient aussi une contribution au signal de sortie en réflexion.

Les miroirs sont ajustables par inclinaison, ce qui permet de récupérer en sortie le maximum de signal possible. Ils permettent de récupérer en réflexion les faisceaux réfléchis par la surface de l'échantillon, et de collecter en transmission les faisceaux résiduels qui traversent l'échantillon. Le porte échantillon inclinable lui aussi, est monté sur une platine qui peut se déplacer verticalement en Z et latéralement en X et Y. Il est troué en son centre pour que les signaux récupérés en transmission et réflexion ne correspondent qu'à la réponse de l'échantillon étudié. Pour chaque échantillon on maximise le signal de sortie en réflexion en ajustant au mieux la position et le tilt du porte échantillon et des miroirs de la cage supérieure. Puis de même, on maximise le signal de sortie en transmission en ajustant la position et le tilt du porte échantillon et des miroirs de la cage inférieure.

Pour chaque échantillon on acquiert des spectres de référence miroir notés « Ref_{Miroir} » (avec sur le porte échantillon un miroir d'argent traité au coefficient de réflexion connu et noté « $Coef_{Miroir}$ »), de références à vide notés « Ref_T » et « Ref_R » (pas d'échantillon sur le porte échantillon) et de « background » notés « BKG_T » et « BKG_R » (source de lumière éteinte) en transmission (« T ») et réflexion (« R »), pour pouvoir normaliser les données sous Scilab. Les équations de normalisation sont les suivantes :

$$R_{normalisé} = \frac{Coef_{Miroir}(R - Ref_R)}{(Ref_{Miroir} - Ref_R)} ;$$

$$T_{normalisé} = \frac{(T - BKG_T)}{(Ref_T - BKG_T)} ;$$

Aussi pour simplifier le traitement des données sous Scilab une fonction de normalisation prenant en compte le format des données sauvegardées depuis OceanView, ainsi qu'un script de réarrangement et de sauvegarde au format Scilab des données normalisées, ont été développés dans le cadre du stage.

b) Etude comparative des données expérimentales et théoriques de caractérisation des dépôts métalliques en transmission et réflexion

Pour pouvoir valider une technique de dépôt et estimer au mieux l'épaisseur des couches métalliques déposées plusieurs échantillons de dépôt d'aluminium sont étudiés en transmission et réflexion. Ces dépôts d'aluminium ont été réalisés pour différentes épaisseurs, uniquement par évaporation thermique dans un premier temps puis dans un second temps par dépôt au canon à électrons. Les différentes épaisseurs se situent entre les $8\text{ nm} - 70\text{ nm}$ d'épaisseur visée avec un focus particulier pour les valeurs de 15 nm , 16 nm , 20 nm et 70 nm . Pour la technique de dépôt par évaporation thermique, plusieurs vitesses de dépôt ont aussi été testées pour évaluer l'influence de ce paramètre sur la qualité des dépôts.

Dans un premier temps on va s'intéresser à la vitesse de dépôt et ses influences sur la qualité des dépôts réalisés par évaporation thermique. En parallèle de cette étude on comparera les résultats obtenus avec un dépôt réalisé au canon à électrons.

Naturellement il vient qu'une vitesse de dépôt lente par rapport à l'épaisseur du dépôt à réaliser permet un meilleur contrôle de l'épaisseur réelle déposée, contrairement à une vitesse de dépôt rapide qui peut introduire des incertitudes plus importantes lorsque l'on souhaite atteindre une épaisseur fixée.

Les figures ci-dessous présentent les résultats obtenus pour la caractérisation d'échantillons de trois dépôts d'aluminium :

- Un dépôt par évaporation thermique à la vitesse $0,1\text{ nm/s}$ d'une épaisseur visée de 70 nm ,
- Un dépôt par évaporation thermique à la vitesse $0,5\text{ nm/s}$ d'une épaisseur visée de 70 nm ,
- Un dépôt au canon à électrons à la vitesse $0,5\text{ nm/s}$ d'une épaisseur visée de 15 nm ,

Spectres en réflexion et transmission pour différentes vitesses de dépôt et épaisseurs d'Al

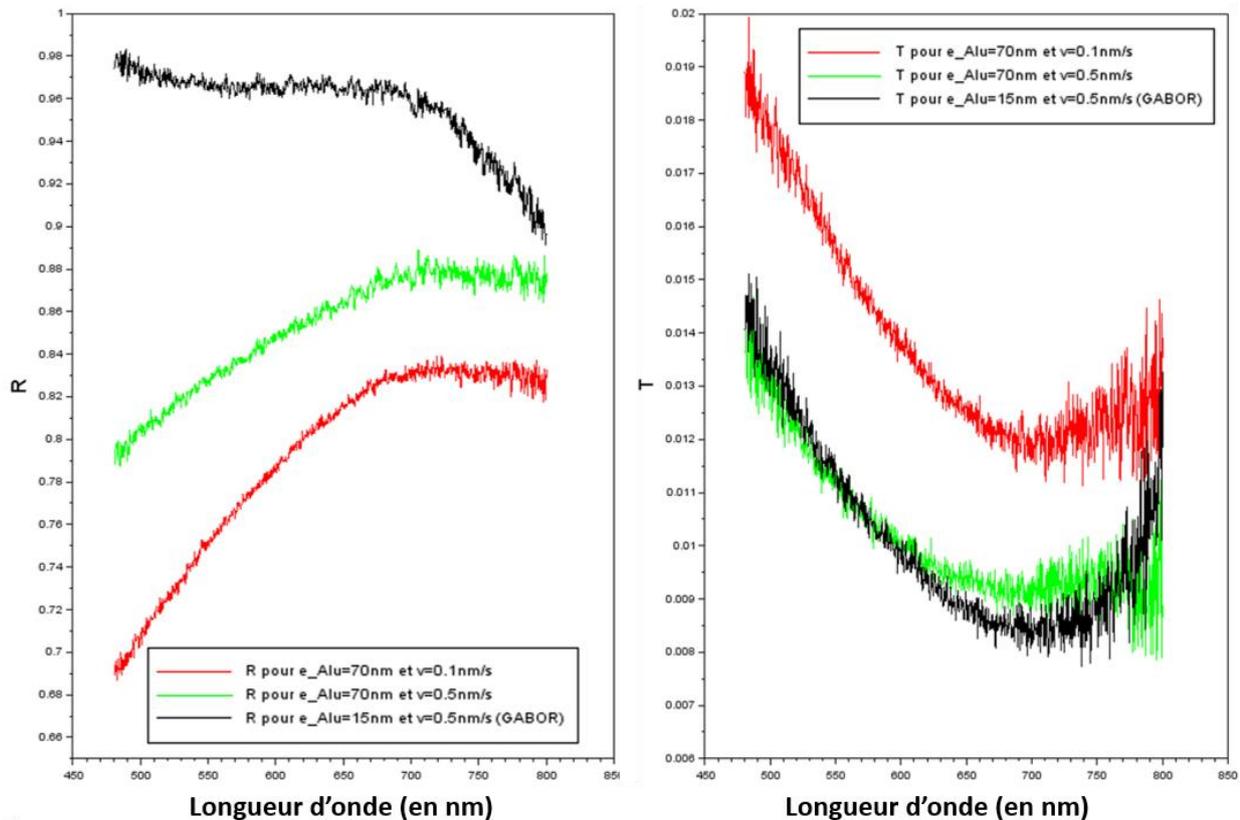


Figure 15: résultat de la caractérisation en réflexion et transmission de trois techniques de dépôt d'Al, deux dépôts d'une couche de 70 nm d'Al par évaporation thermique à 0,1 nm/s et 0,5 nm/s un dépôt d'une couche de 15 nm d'Al par dépôt au canon à électrons à 0,5 nm/s

La caractérisation en réflexion et transmission met en évidence l'influence de la vitesse de dépôt. En effet, pour un dépôt par évaporation thermique réalisé à $0,5\text{nm/s}$, on observe, à partir des longueurs d'onde $\lambda \geq 0,700\ \mu\text{m}$, un plateau de réflectivité à $\sim 88\%$ et de transmittance à $\sim 0,95\%$. Si on compare ces valeurs à celles obtenues pour un dépôt par évaporation thermique réalisé à $0,1\ \text{nm/s}$ d'environ 83% en réflexion et $1,25\%$ en transmission, on en déduit que les vitesses de dépôt rapides permettent d'obtenir des intensités en réflexion plus élevées que celles atteignables lors de dépôts lents.

Il semblerait que les vitesses de dépôt lentes permettent d'obtenir des intensités en transmission plus élevées que lors de dépôt rapide.

Ces observations sont en adéquations avec celles présentées en référence [10]. Une augmentation de l'intensité en transmission pour les vitesses de dépôt lentes avait également été remarquée, et elle serait d'autant plus prononcée que l'épaisseur du dépôt réalisé est grande¹¹. Au contraire, l'intensité en transmission semble relativement indépendante de l'épaisseur pour des vitesses de dépôt rapides.

¹¹ D'après [10]

Ces phénomènes s'expliqueraient par les procédés de nucléation et de coalescence des atomes d'aluminium déposés. Pour les vitesses de dépôt rapides, une grande quantité d'atomes d'aluminium par unité de temps arrive simultanément à la surface du substrat. L'accumulation de cette grande densité d'atome d'aluminium engendre la formation de clusters de taille importante qui forment par coalescence des gros grains d'aluminium à la surface du substrat, et donc une surface d'échantillon rugueuse. Inversement, pour des vitesses de dépôt lentes, une plus petite quantité d'atomes d'aluminium par unité de temps est déposée simultanément : la densité d'atome d'aluminium est donc moindre, réduisant ainsi la taille des clusters. De plus, moins de clusters sont formés côte à côte et leur probabilité de coaliser pour former des grains est moins importante. Avec la diminution de la taille des clusters et de leur probabilité de coaliser entre eux, il résulte la formation éparse de petits grains d'aluminium à la surface du substrat et donc une surface d'échantillon moins rugueuse¹². La vitesse de dépôt influence donc les propriétés optiques de la couche déposée en rendant la surface de l'échantillon plus ou moins rugueuse.

Enfin après avoir mis en évidence l'influence de la vitesse lors de dépôt par évaporation thermique, on s'intéresse aux résultats d'une seconde méthode de dépôt : l'évaporation au canon à électrons.

Les résultats de la caractérisation en réflexion/transmission en lien avec cette technique correspondent aux courbes noires sur la figure n°15 L'échantillon étudié est un dépôt d'aluminium d'une épaisseur visée de **15 nm**, l'épaisseur déposée avec cette technique est donc inférieure à celle déposée par évaporation thermique (de **70 nm** pour rappel). Théoriquement, on pourrait s'attendre à l'augmentation la réflectivité (respectivement diminution de la transmissivité) avec l'augmentation de l'épaisseur du dépôt. Mais on observe pour le dépôt réalisé au canon à électrons une réflectivité atteignant un plateau d'environ **96%**, une valeur nettement supérieure à celles observées dans le cas d'un dépôt par évaporation thermique (pour rappel, entre **83% – 88%**). Le canon à électrons permet une sublimation plus locale et plus énergétique que l'échauffement thermique (résistif du creuset) et donne lieu à un dépôt plus dense, expliquant ainsi les fortes réflectivités même pour des faibles épaisseurs. Dans l'optique de la fabrication d'un Fabry-Pérot métallique, comme souligné dans les calculs, il est nécessaire d'obtenir des fortes intensités en réflexion sur les dépôts métalliques de référence.

Au vu des résultats obtenus par dépôt au canon de couches d'aluminium, on a choisi cette méthode pour la couche métallique inférieure afin de garantir une forte intensité en réflexion.

¹² D'après [10]

III – Etude comparative en transmission des deux échantillons Fabry-Pérot

La structure retenue comme premier prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique localisée est un compromis entre les défis techniques posés par les dépôts d'argent (en raison des bons contrastes ΔT qu'il permet), et la bonne maîtrise des gravures d'aluminium (malgré les faibles contrastes ΔT induits). Ce prototype et l'échantillon de Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ pleine plaque sont étudiés en transmission sur le setup de manipulation monté à cet effet avant d'en comparer les résultats.

1 – Présentation du banc de caractérisation pour l'étude en transmission

Contrairement au setup de manipulation pour la caractérisation des dépôts métalliques (présenté en II – 2 - a), il n'y avait pas de setup pour l'étude en transmission des dispositifs Fabry-Pérot. Par conséquent une partie du travail en amont des mesures a été consacrée à la mise en place de ce setup de manipulation.

Ce dernier devait répondre à un cahier des charges, notamment concernant la taille du faisceau incident. Le rendu final du setup de manipulation ainsi que l'étude sur la taille du faisceau incident sont présentés ci-dessous.

a) Présentation du setup de manipulation en transmission et ses contraintes

Le montage en transmission doit répondre à plusieurs contraintes. Tout d'abord on souhaite réaliser des mesures de spectres en transmission sur la gamme du visible avec des échantillons de Fabry-Pérot, à chauffer entre 20°C – 90°C, et de taille latérale entre 50 μm – 300 μm de diamètre. La taille du faisceau incident doit par conséquent être bien connue et maîtrisée.

L'ensemble du montage sera fibré, avec des fibres de 200 μm ou de 100 μm de cœur, pour une ouverture numérique $NA = 0,22$ qui oblige l'utilisation de focales courtes pour ne pas obstruer la transmission. Enfin pour maximiser le contraste on souhaite pouvoir orienter l'échantillon (incidence oblique), aussi on doit pouvoir choisir et contrôler la polarisation induite du faisceau incident.

Ce dernier doit être focalisé sur la face avant de l'échantillon et ajustable en translation selon l'axe le long du faisceau (noté pour la suite axe Z) et l'axe perpendiculaire à Z (noté axe X) grâce à une platine de positionnement pour permettre un bon alignement. Après passage dans l'échantillon le faisceau doit être recollimaté, puis collecté dans la fibre de sortie. Enfin on souhaite pouvoir observer sa position grâce à une caméra CCD (iDS UI-1540LE-M-GL) à intégrer au montage.

Le porte-échantillon quant à lui doit être ajustable à la fois en translation selon les 3 dimensions possibles Z, X et Y (l'axe Y est l'axe normal au plan ZX) et en rotation autour de Y. Pour la rotation autour de l'axe Y on cherche à atteindre des angles de $\pm 50^\circ$ par rapport à la normale du faisceau sur l'échantillon.

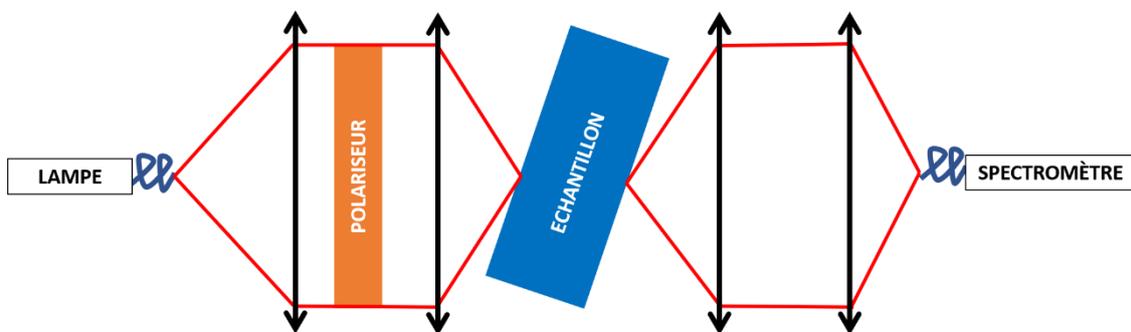


Figure 16: schéma de principe du montage en transmission pour l'étude de dispositifs Fabry-Pérot sous faisceau focalisé

La figure ci-dessus représente le schéma de principe du montage en transmission (des photos légendées du montage sont disponibles en Annexe III), il comprend quatre optiques : deux doublets achromatiques qui assurent une focalisation sur l'échantillon (avec une focale de **19 mm**), une lentille biconvexe de diamètre d'environ **25 mm** qui permet de collimater le faisceau transmis en sortie d'échantillon, et enfin une lentille plan convexe (de focale **100 mm**) pour collecter le faisceau transmis dans la fibre de sortie.

La contrainte introduite par ces optiques à focales courtes est celle de l'encombrement optique, qui réduit drastiquement la gamme de rotation pour du porte-échantillon limitée à $+30^\circ$ par rapport à la normale du faisceau sur l'échantillon. Afin de limiter l'intensité transmise et d'éviter la saturation du spectromètre on utilise un coupleur 50/50 (il divise par deux l'amplitude du signal transmis) pour connecter la source au montage, les fibres du coupleur sont des fibres de **200 μm** de cœur et d'ouverture numérique **$NA = 0,22$** .

b) Détermination de la taille du faisceau incident

La taille du faisceau est un élément déterminant du montage car elle détermine la taille minimale pour la conception d'un échantillon exploitable. La caractérisation de la taille du faisceau s'effectue sur le montage en transmission auquel vient se rajouter une fente verticale, le signal de sortie fibré est détecté à l'aide d'une photodiode reliée à un oscilloscope.

En déplaçant dans les 2 directions (X,Z) de l'espace, on maximise le signal transmis à travers la fente pour déterminer la position du point focal, sa position selon l'axe optique est Z_0 . A la traversée de la fente, le profil de l'intensité transmise peut être assimilable à celle d'un faisceau gaussien. On peut donc, pour une position Z choisie le long de l'axe du faisceau, ajuster avec une gaussienne la courbe d'intensité obtenue en fonction du déplacement X du faisceau sur la fente. Les paramètres renvoyés par ce fit donneront alors la taille du faisceau, qui correspond à valeur de l'origine de la gaussienne calculée pour satisfaire avec le moins d'erreur possible le profil de la courbe expérimentale à ajuster.

On réalise cette même opération pour différentes positions Z autour de Z_0 la distance de départ (pour laquelle le faisceau est focalisé sur la face avant de l'échantillon) : en plus de Z_0 , six points en Z à respectivement $\pm 0,500 \text{ mm}$; $\pm 1 \text{ mm}$; $\pm 1,5 \text{ mm}$ de la position Z_0 (avec $500 \mu\text{m}$ la valeur d'un tour de vis micrométrique pour la platine portant la lentille de focalisation). Par valeur de Z on réalise une série de minimum vingt points de déplacement en X pour traverser de part en part la fente, la traversée est évaluée grâce à l'utilisation de la caméra présente sur le montage.

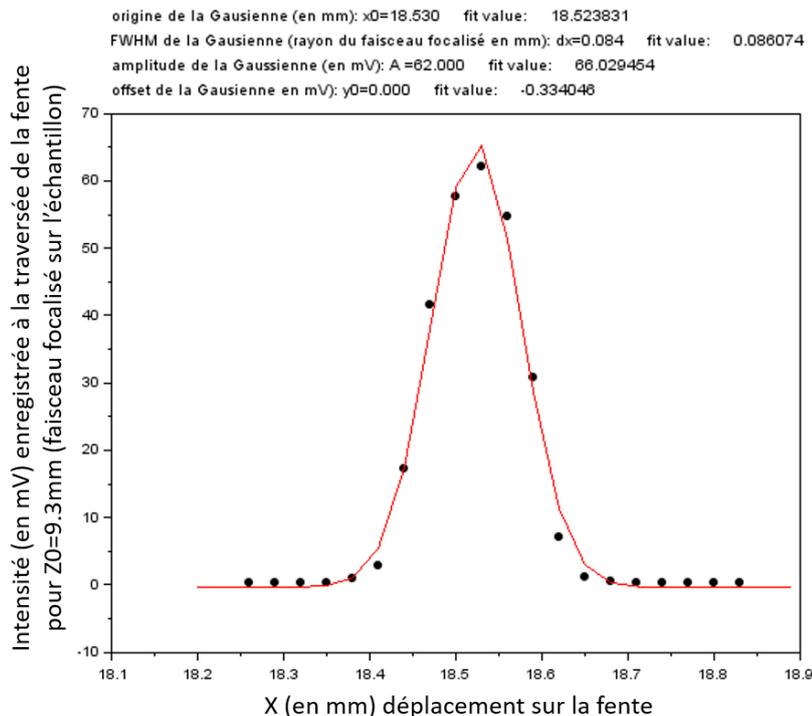


Figure 17: détermination expérimentale de la taille du faisceau sur l'échantillon par fit Gaussien de la variation d'intensité observée lors de la traversée de la fente pour une distance

La figure n°17 représente l'évolution de l'intensité lors de la traversée de la fente verticale, le fit par une Gaussienne permet de trouver la valeur expérimentale du rayon du faisceau. En effet le rayon du faisceau correspond à la largeur à mi-hauteur de la Gaussienne (« Full Width at Half Maximum »). On a donc sur le montage en transmission un faisceau d'environ $0,08 \text{ mm}$ de rayon soit un diamètre d'environ $0,160 \text{ mm} = 160 \mu\text{m}$. Ce résultat est cohérent avec l'utilisation de fibre $200 \mu\text{m}$ de cœur lors de la phase expérimentale.

Aussi on a pu définir la taille minimale d'un échantillon exploitable sur le montage en transmission, soit environ $160 \mu\text{m}$.

Si on s'intéresse à l'évolution de la taille du faisceau en fonction de son éloignement par rapport à Z_0 on voit en figure n°18 que plus on s'éloigne de la position Z_0 plus le faisceau grossit. Pour des déplacements de $+0,5 \text{ mm}$ ou $-0,5 \text{ mm}$ à -1 mm par rapport à la position Z_0 , le rayon du faisceau reste encore dans une gamme cohérente avec les $200 \mu\text{m}$ de diamètre attendus.

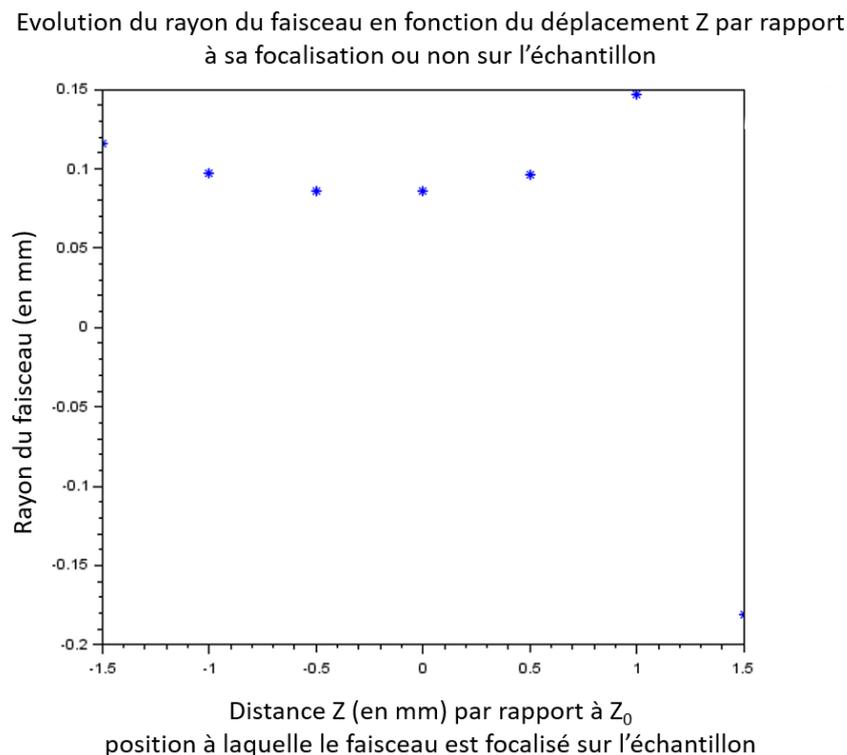


Figure 18: évolution de la taille du faisceau en fonction de sa position par rapport à point Z_0 sur l'axe optique

2 – Présentation de la matrice finale de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique locale

La structure retenue comme premier prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique localisée est un compromis entre les défis techniques posés par les dépôts d'argent (en raison des bons contrastes ΔT qu'il permet), et la bonne maîtrise des dépôts d'aluminium (malgré les faibles contrastes ΔT induits). Ce prototype présente au sein de la matrice des Fabry-Pérot métalliques à base d'argent et d'aluminium structurés comme de la manière suivante : air/Ag(36 nm)/SCO(135 nm)/Al(16 nm)/SiO₂.

Comme décidé précédemment la couche métallique supérieure est réalisée en argent grâce à un dépôt par évaporation thermique, et la couche métallique inférieure est une gravure d'aluminium après un dépôt au canon à électrons. Ces choix respectent les contraintes techniques évoquées en (I – 3) concernant les risques de dégradation, mais l'utilisation d'argent ne pouvant être évitée l'étape de changement des creusets pour le dépôt par évaporation thermique a finalement dû être réalisée.

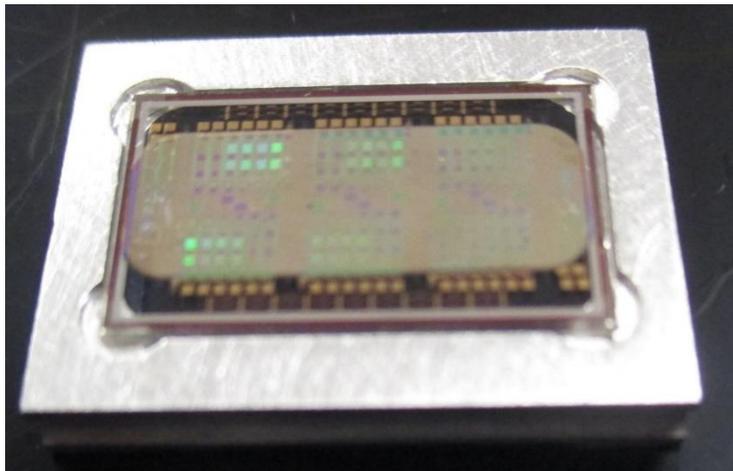


Figure 19: photo de la matrice de dispositifs Fabry-Pérot Al/SCO/Ag à excitation thermique localisée après son collage dans la cassette échantillon

Sur la photo de la matrice d'échantillons (présentée ci-dessus) on peut distinguer les micro-structures réalisées, il y en a de différents types : des dispositifs Fabry-Pérot avec et sans résistance chauffante, des dispositifs Fabry-Pérot à réseau avec et sans résistance chauffante, ainsi que des bornes de tests pour les résistances chauffantes. On s'intéresse aux dispositifs Fabry-Pérot avec résistance chauffante, présents sur la matrice aux endroits suivants :

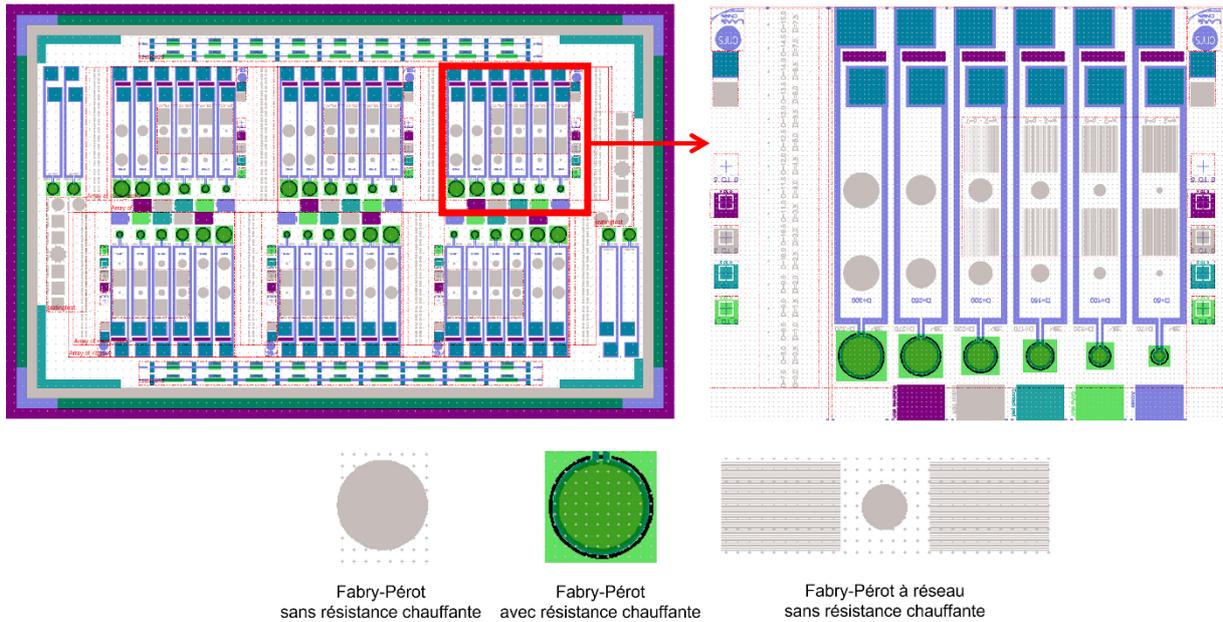


Figure 20: plan schématique légendé de l'arrangement d'une matrice de dispositifs Fabry-Pérot Al/SCO/Ag

Les dispositifs en question se situent aux emplacements des pastilles vertes dans les sous-matrices (exemple de sous matrice entouré en rouge). Chaque sous-matrice est composée de six dispositifs Fabry-Pérot à résistance chauffante de diamètre variable allant de $320\ \mu\text{m}$ à $70\ \mu\text{m}$ par pas de $50\ \mu\text{m}$.

Dans la suite de ce chapitre l'intérêt se portera sur le dispositif Fabry-Pérot à résistance chauffante de $320\ \mu\text{m}$ de diamètre.

3 – Présentation et comparaisons des résultats pour les deux échantillons de dispositifs Fabry-Pérot

Les deux échantillons ont été étudiés en transmission sur le montage présenté en (III – 1 – a), sur une gamme de température allant de 20°C à 85°C par pas de 5°C avec un focus important des acquisitions de spectres en transmission à l'approche de la valeur de température induisant la transition de spin (c'est-à-dire autour des 65°C – 67°C).

La gamme angulaire exploitée pour l'étude des deux Fabry-Pérot s'étend de 0° à 30° par pas de 5° .

On présentera par la suite les résultats obtenus en transmission pour les deux Fabry-Pérot à un angle d'incidence de 10° avant de discuter des problèmes rencontrés lors des manipulations.

Les résultats obtenus aux autres angles d'incidence ne seront pas évoqués ici en raison de leur exploitation limitée, que l'on tentera d'expliquer par la suite.

a) Présentation des résultats en transmission sur un cycle thermique du Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ à 10° d'incidence :

Les données expérimentales ont été ajustées avec des Lorentziennes afin d'en extraire plus facilement les valeurs maximales d'intensités enregistrées.

Variation de la valeur expérimentale d'intensité en transmission en fonction la longueur d'onde, pour le Fabry-Pérot air/Ag(50 nm)/SCO(115 nm)/Ag(50 nm)/SiO₂ à 10° à LS et HS

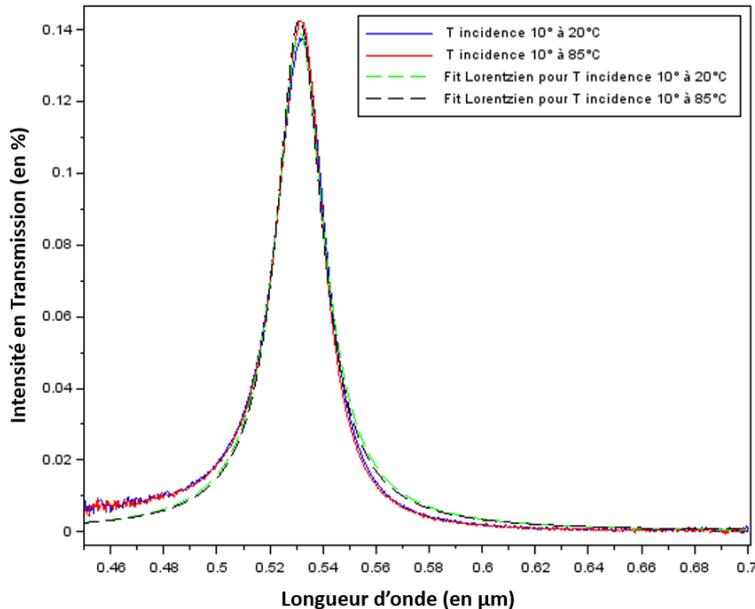


Figure 21: variation expérimentale des valeurs d'intensité en transmission pour l'état bas (LS) et l'état haut (HS) et leurs fits Lorentziens pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ à 10° d'incidence

En figure n°21 sont représentés les fits lorentziens des intensités en transmission enregistrées à l'état bas (en bleu) et à l'état haut (en rouge) pour une incidence de 10°. On aperçoit clairement une augmentation de l'intensité transmise entre les deux phases, et il semblerait qu'il y ait aussi un décalage en longueur d'onde moins visible cependant.

On s'intéresse désormais aux maximums en transmission observés au cours de l'élévation de température et du refroidissement (étude sur un cycle thermique) et les valeurs de longueur d'onde associées pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂. Cette structure a déjà été étudiée par le passé¹³, aussi nous espérons retrouver des résultats similaires.

¹³ D'après [1]

Variation de la valeur maximale en transmission en fonction de la température, pour le Fabry-Pérot Ag/SCO/Ag à 10° d'incidence après avoir fitté les données expérimentales par des Lorentziennes

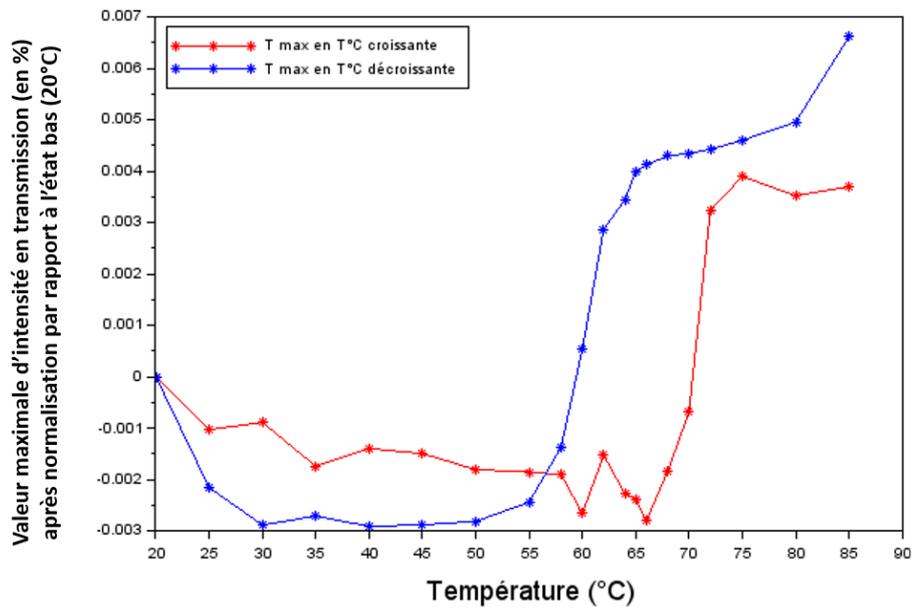


Figure 22: résultats de l'étude en transmission du Fabry-Pérot pleine plaque Ag/SCO/Ag à un angle incident de 10°, représentation de la valeur maximale en transmission en fonction de la température après normalisation par soustraction de la valeur maximale de T à l'état bas (à 20°C) aux autres valeurs maximales de T

L'étude en transmission du Fabry-Pérot pleine plaque air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ à une incidence de 10° permet de retrouver un profil de cycle semblable à celui présenté en partie (I - 2) lors des premières études de cette structure au LCC.

On peut noter une hystérésis importante du cycle, avec un décalage de la température de transition d'environ 10°C entre la montée en température (transition vers les 66°C) et la phase de refroidissement (transition vers les 56°C environ). Elle peut être due au vieillissement du matériau¹⁴.

Le contraste entre la valeur maximale enregistrée en transmission à l'état haut (à 85°C) par rapport à celle de l'état bas atteint seulement 0,4% lors de la montée en température, contre environ 0,7% lors de la phase de refroidissement. Ce contraste entre l'état haut et l'état bas semble plutôt discernable sur la figure ci-dessus, mais reste néanmoins assez faible.

¹⁴ D'après [4]

Si on s'intéresse aux longueurs d'onde associées à ces maximums en transmission on devrait aussi observer un décalage spectral de la courbe de transmission vers les courtes longueurs d'onde, appelé « blue-shift »¹⁵

Variation de longueur d'onde associée au maximum en transmission, en fonction de la température, pour le Fabry-Pérot Ag/SCO/Ag à 10° d'incidence

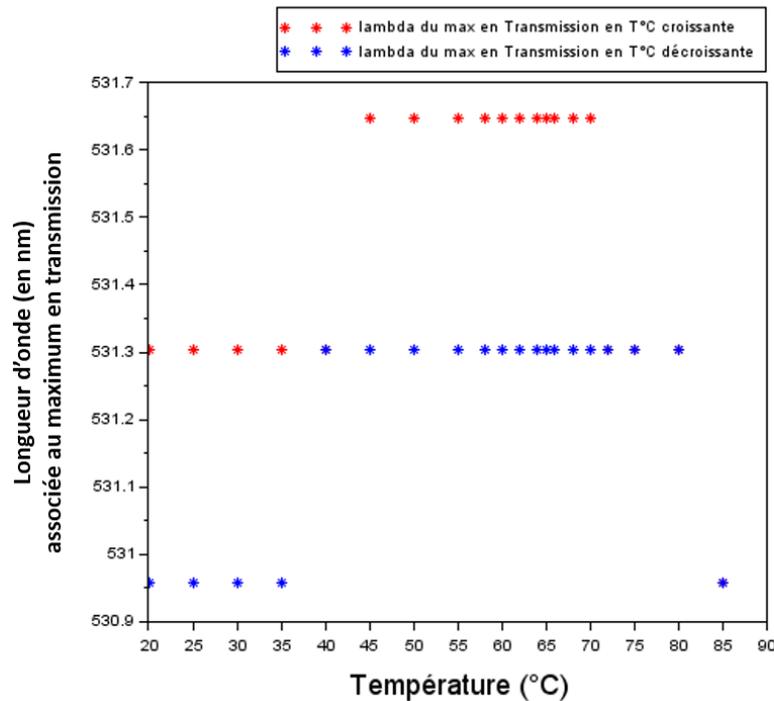


Figure 23: résultats de l'étude en transmission du Fabry-Pérot pleine plaque Ag/SCO/Ag à un angle incident de 10°, représentation des longueurs d'onde associées aux valeurs maximales enregistrées en transmission

On observe en effet un certain décalage des longueurs d'onde associées aux valeurs maximales en transmission, mais ce décalage est loin des 4 nm observés dans l'étude présentée en (I – 2), ici il serait environ dix fois moins important, avec des décalages en longueurs d'onde d'environ +0,4 nm entre l'état haut et l'état bas.

Aussi les résultats obtenus sur le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ correspondent aux résultats déjà observés, mais avec des valeurs de décalage en longueur d'onde et en intensité bien inférieures à celles attendues lors de la transition de spin.

¹⁵ D'après [1]

b) Présentation des résultats en transmission sur un cycle thermique du Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à 10° d'incidence :

On s'intéresse désormais aux résultats de l'étude en transmission à 10° d'incidence, du prototype de matrice de Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à excitation thermique localisée. De même, les résultats expérimentaux ont été ajustés avec des Lorentziennes pour le traitement des données.

Variation de la valeur expérimentale d'intensité en transmission en fonction la longueur d'onde, pour le Fabry-Pérot air/Ag(36 nm)/SCO(135 nm)/Al(16 nm)/SiO₂ à 10° à LS et HS

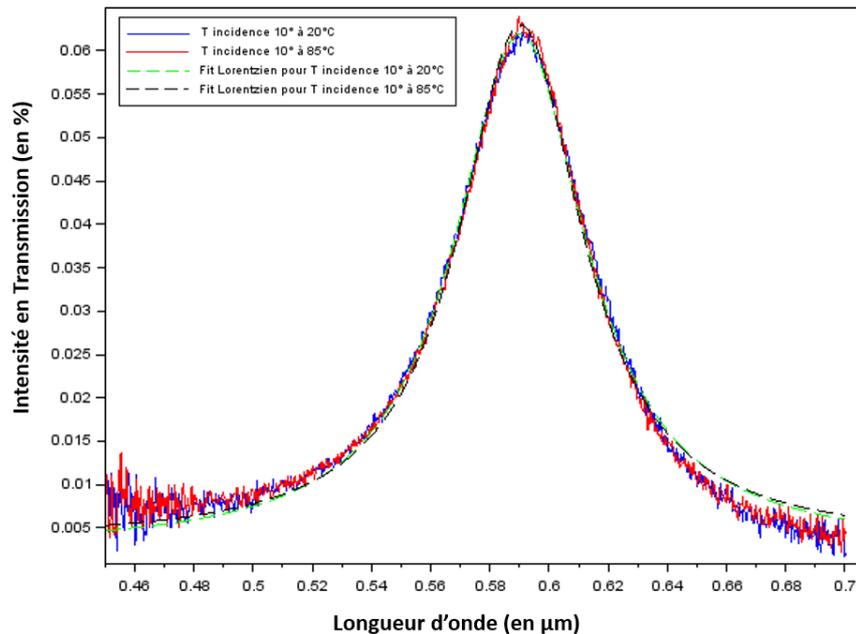


Figure 24: variation expérimentale des valeurs d'intensité en transmission pour l'état bas (LS) et l'état haut (HS) et leurs fits Lorentziens pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à 10° d'incidence

En figure n°24 sont représentés les fits lorentziens des intensités en transmission enregistrées à l'état bas (en bleu) et à l'état haut (en rouge) pour une incidence de 10°. On aperçoit clairement une augmentation de l'intensité transmise entre les deux phases, mais contrairement à la structure précédente le décalage en longueur d'onde est déjà bien moins visible.

On s'intéresse désormais aux maximums en transmission observés au cours de l'élévation de température et du refroidissement (étude sur un cycle thermique) et les valeurs de longueur d'onde associées pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂.

Variation de la valeur maximale en transmission en fonction de la température, pour le Fabry-Pérot Ag/SCO/Al à 10° d'incidence après avoir fitté les données expérimentales par des Lorentziennes

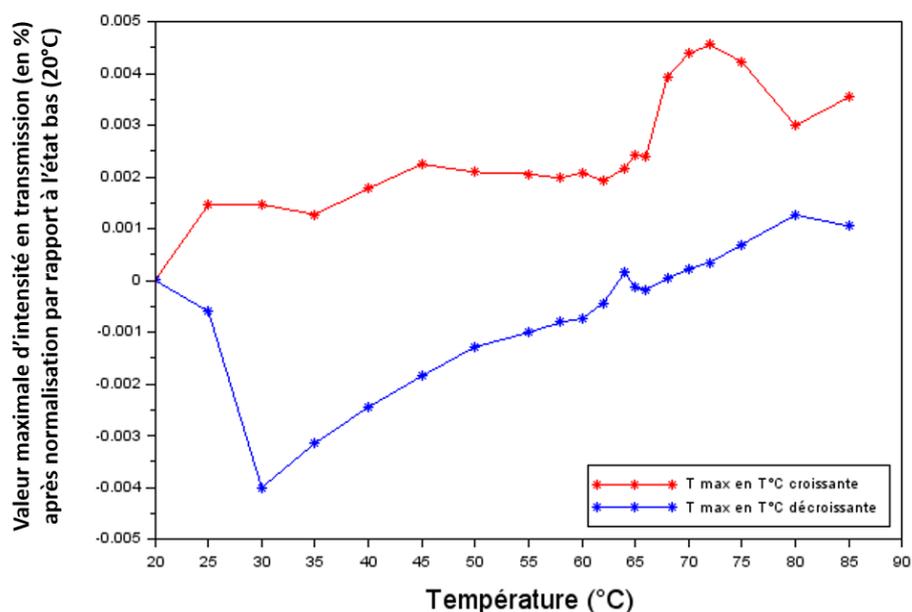


Figure 25: résultats de l'étude en transmission du Fabry-Pérot pleine plaque Al/SCO/Ag à un angle incident de 10°, représentation de la valeur maximale en transmission en fonction de la température après normalisation par soustraction de la valeur maximale de T à l'état bas (à 20°C) aux autres valeurs maximales de T

Contrairement au résultat présenté pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂, le profil attendu n'est pas retrouvé et il n'y a pas de cycle clairement identifiable en intensité de transmission.

La température de transition n'est pas discernable : le décalage brusque observé à 66°C lors de la montée de température disparaît lors de la phase de refroidissement. De plus on observe une rechute de l'intensité après le passage de la température de transition supposée : diminution de l'intensité pour les températures de 75°C à 85°C. Aussi le décalage observé à 66°C pourrait aussi bien être un artéfact de mesure plutôt qu'une indication de transition de l'état bas à l'état haut.

Le contraste entre le LS et le HS reste peu discernable lui aussi avec une variation d'intensité maximale d'environ 0,3% lors de la montée de température, contre seulement 0,1% lors de la phase de refroidissement. Ces contrastes, notamment pour la phase de refroidissement, sont inférieurs et moins discernables que ceux présentés pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂.

Enfin on s'intéresse aux longueurs d'onde associées au maximum de transmission, qui peuvent elles aussi attester ou non par leur décalage d'une transition de phase.

Variation de longueur d'onde associée au maximum en transmission, en fonction de la température, pour le Fabry-Pérot Ag/SCO/Al à 10° d'incidence

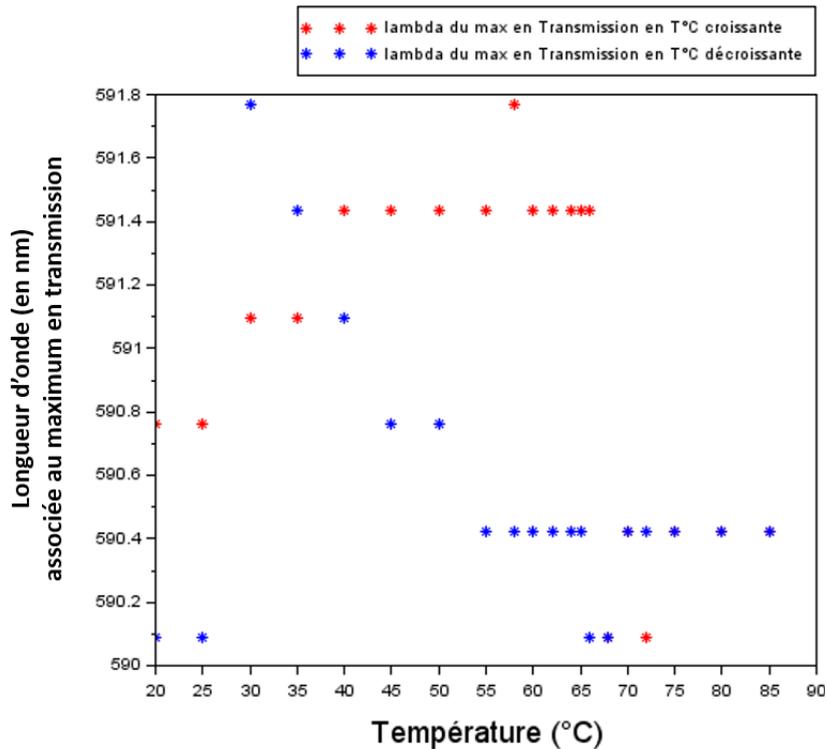


Figure 26: résultats de l'étude en transmission du Fabry-Pérot pleine plaque Al/SCO/Ag à un angle incident de 10°, représentation des longueurs d'onde associées aux valeurs maximales enregistrées en transmission

Les longueurs d'onde associées aux valeurs maximales enregistrées en transmission pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ semblent se décaler dans deux sens différents selon la phase étudiée (refroidissement ou chauffage). Pour la phase de refroidissement on observe un décalage d'environ +0,3 nm entre l'état bas (20°C) et l'état haut (85°C). Mais ce décalage est particulièrement instable en phase de refroidissement à l'approche de la gamme de température 30°C – 50°C. Concernant la phase de montée en température, le décalage observé est d'environ –0,3 nm (les derniers points rouges de 75°C – 85°C sont confondus avec les valeurs enregistrées lors du refroidissement donc avec les points bleus.). Mais on observe entre 40°C et 68°C, c'est-à-dire entre l'état bas et l'état haut, une variation de la longueur d'onde atteignant jusqu'à +0,7 nm par rapport à l'état bas et +1 nm par rapport à l'état haut.

Ces décalages ou instabilités (possiblement issues d'artefact de mesure) en longueur d'onde ne forment pas de cycle distinct attestant d'une transition de phase réversible.

Enfin pour conclure sur la présentation comparative et l'analyse des résultats en transmission il est évident que par rapport au Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ les résultats de la nouvelle structure Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ ne permettent pas d'identifier clairement une transition de phase, aussi bien en longueur d'onde qu'en intensité. À noter aussi que les résultats obtenus avec la structure air/Ag/SCO/Ag/SiO₂, bien que meilleurs ne sont pas nécessairement à la hauteur des résultats attendus pour cette structure. De plus il est aussi nécessaire de préciser que les résultats obtenus aux autres angles d'incidence, aussi bien pour le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Ag/SiO₂ que le Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂, sont très largement moins exploitables : globalement la transition de phase et le cycle ne sont pas du tout ou très peu discernables.

c) Discussions des résultats et remarques pour la suite du projet

Les résultats précédents mettent en évidence l'absence d'une transition de spin distinctement visible en transmission pour un Fabry-Pérot air/Ag(36 nm)/SCO(135 nm)/Al(16 nm)/SiO₂. Cette absence concerne aussi les décalages d'intensité transmise que de longueur d'onde : en effet pour les décalages en longueur d'onde, aucun « blue-shift » n'a été observé cette fois-ci (contrairement aux résultats de [1]).

Certains problèmes concernant le maintien de la position de l'échantillon lors de l'augmentation de la température (vers de température de 60°C à 85°C) ont compliqué les cycles de mesures. Cela introduisait parfois la nécessité de vérifier en cours d'acquisition le bon positionnement de l'échantillon et que la valeur lue en transmission correspondait bien au maximum de transmission possible (vérification de l'alignement). Ces interventions lors des mesures ont probablement introduit des erreurs dans la variation de longueur d'onde et d'intensité en fonction de la température.

Une autre piste pourrait concerner la répartition et diffusion de chaleur. Avec le dispositif actuel il est impossible de savoir si la chaleur induite par l'élément chauffant à effet Peltier se diffuse correctement dans l'échantillon et atteint bien les zones visées. Cette question se pose d'autant plus que les problèmes de gestion et d'évacuation de chaleur ont causé le claquage d'un premier élément chauffant rendant le porte-échantillon inutilisable (car il y est collé) et l'emballement thermique en phase de refroidissement d'un second.

Cette deuxième remarque permet d'introduire un point d'amélioration du banc : le problème lié au design du porte-échantillon. Sur le design actuel le Peltier est collé au porte-échantillon et le refroidissement se fait difficilement. Pour la suite du projet le développement d'un nouveau design pour le système Peltier et porte-échantillon pourrait être intéressant pour mieux maîtriser les phases de refroidissement.

Une troisième remarque concernerait la qualité du dépôt d'aluminium par évaporation au canon à électrons. Cette technique n'ayant été que très peu utilisée au LAAS elle reste perfectible. En effet, les premiers dépôts d'aluminium, réalisés comme référence pour l'évaporation au canon à électrons, laissaient penser que l'épaisseur réelle déposée n'était pas forcément celle visée. De même, l'échantillon témoin pour la couche d'argent est jugé trop « transparent » et l'incertitude sur l'épaisseur réelle d'argent déposée est aussi un facteur à prendre en compte (dépôt d'Ag référence en Annexe IV). Enfin, concernant le prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot Al/SCO/Ag, l'étude de ce dernier au microscope après les multiples séries d'acquisitions, a révélé un détail intéressant.

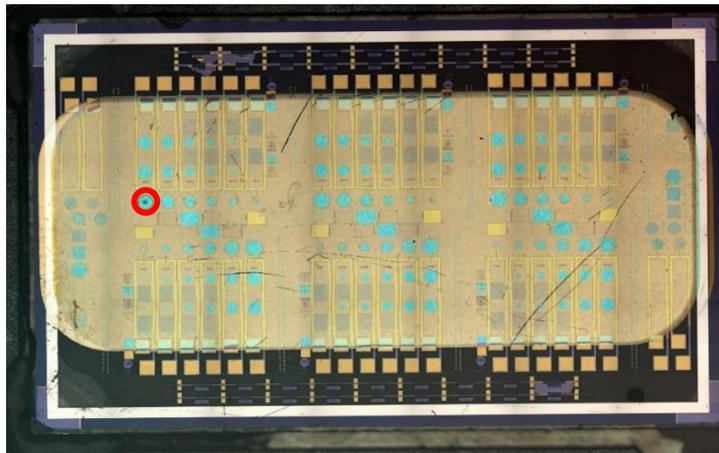


Figure 27: photo au "confocal" du prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot Al/SCO/Ag après plusieurs utilisations

Dans la figure ci-dessus, entouré en rouge, on peut observer une zone noircie à l'intérieur de la structure Fabry-Pérot à résistance chauffante. Cette « solarisation » se situe sur l'échantillon testé lors des différents cycles thermiques. Une tache identique a aussi été observée sur le Fabry-Pérot pleine plaque.

Cela permet dans un premier temps d'identifier un défaut dans la structure : une dégradation de l'échantillon trop rapide au fil des mesures pour permettre une exploitation fiable des résultats. Ce qui pourrait expliquer pourquoi la transition de spin n'était pas systématique visible lors des cycles thermiques (l'incidence normale étant souvent une incidence de faible activation).

Ainsi en plus des différentes remarques découlant des tests en transmission, ce premier prototype a permis la mise en évidence de la nécessité de protéger l'échantillon des effets de « solarisation », soit par l'ajout d'une couche protectrice soit par la limitation du flux de lumière incidente ou encore en réalisant les mesures sous flux d'azote. Par ailleurs, l'utilisation de couche protectrice pour éviter la photocorrosion de l'aluminium a déjà été étudiée et utilisée, notamment pour éviter la « solarisation » par effet plasmonique UV¹⁶.

¹⁶ D'après [11]

Conclusion

Les objectifs établis en début de stage n'ont pas tous pu être remplis, notamment en raison de travaux de maintenance dans les salles de manipulation laser intervenus sur la période du 16 août au 15 septembre. Aussi le projet d'une excitation optique plutôt que thermique, l'étude de réseaux ou encore l'instrumentation d'une source laser accordable n'ont pas pu être abordés ou seulement succinctement.

Les objectifs présentés dans ce rapport correspondent aux objectifs fixés au début du stage qui n'ont pas été amputés en raison des travaux imprévus. Ils rassemblaient la conception d'une structure optimale pour le prototype de matrice de dispositifs Fabry-Pérot à excitation thermique localisée, la mise en place de moyens de calibration des dépôts de couches minces métalliques nécessaires pour sa réalisation, le montage d'un banc de caractérisation en transmission à faisceau focalisé permettant d'étudier la nouvelle structure avant la réalisation pratique d'une première série de tests en transmission.

L'ensemble des objectifs qui n'ont pas pâti de la condamnation des salles de manipulation laser cités ci-dessus ont pu être menés à bien. Malgré leur faible exploitabilité, les résultats obtenus lors des phases de test vont permettre de relancer le projet CMTS-SLM sur de nouvelles pistes : protection de la couche d'aluminium (en s'inspirant de méthode préexistantes), meilleur contrôle du flux de lumière pour éviter d'endommager la structure ou encore l'amélioration des techniques de dépôt d'argent par évaporation thermique et d'aluminium par évaporation au canon à électrons.

Les travaux accomplis lors de ces quatre mois de stage au sein du LAAS m'ont permis de mettre en application mes connaissances acquises à l'INSA (notamment en optique), ils m'ont encouragée à être curieuse et à développer cette curiosité tout au long du stage. Le contexte et les objectifs de mon stage s'inscrivaient dans une démarche scientifique rigoureuse et ancrée dans le réel par l'existence du projet CMTS-SLM, me permettant ainsi de donner du sens aux missions confiées et réalisées. Tout au long du stage j'ai eu l'opportunité de voir de quelle manière l'innovation était appréhendée dans le microcosme particulier d'un laboratoire de recherche.

Du point de vue de mon projet professionnel personnel, ce stage de quatre mois m'a permis de découvrir succinctement « l'univers » la recherche, autrement qu'au travers des témoignages de certains professeurs ou intervenants PPI. Pour la suite, je souhaite mettre en contraste cette expérience avec un stage en entreprise lors de ma cinquième année, afin de déterminer quel environnement de travail et quels types de projets me conviennent le mieux.

Bibliographie

- [1] Y. Zhang *et al.*, « A molecular spin-crossover film allows for wavelength tuning of the resonance of a Fabry–Perot cavity », *J. Mater. Chem. C*, vol. 8, n° 24, p. 8007-8011, 2020, doi: 10.1039/D0TC02094J.
- [2] O. Svelto, « Ray and Wave Propagation Through Optical Media », in *Principles of Lasers*, O. Svelto, Éd. Boston, MA: Springer US, 2010, p. 131-161. doi: 10.1007/978-1-4419-1302-9_4.
- [3] D. C. Hutchings, A. D. Lloyd, I. Janossy, et B. S. Wherrett, « Theory of optical bistability in metal mirrored fabry-perot cavities containing thermo-optic materials », *Opt. Commun.*, vol. 61, n° 5, p. 345-350, mars 1987, doi: 10.1016/0030-4018(87)90079-4.
- [4] V. Shalabaeva *et al.*, « Vacuum deposition of high-quality thin films displaying spin transition near room temperature », *J. Mater. Chem. C*, vol. 5, n° 18, p. 4419-4425, 2017, doi: 10.1039/C7TC00999B.
- [5] K. Ridier *et al.*, « Unprecedented switching endurance affords for high-resolution surface temperature mapping using a spin-crossover film », *Nat. Commun.*, vol. 11, n° 1, p. 3611, juill. 2020, doi: 10.1038/s41467-020-17362-7.
- [6] O. Gauthier-Lafaye, « Explication des calculs théoriques pour l’algorithme récursif de matrice de scattering “Smatrix” ». oct. 06, 2019.
- [7] S. Byrnes, « Explication des calculs théoriques pour l’algorithme de simulation de propagation de lumière dans des empilements plans de multi-couches fines ». déc. 19, 2012.
- [8] P. B. Johnson et R. W. Christy, « Optical Constants of the Noble Metals », *Phys. Rev. B*, vol. 6, n° 12, p. 4370-4379, déc. 1972, doi: 10.1103/PhysRevB.6.4370.
- [9] K. M. McPeak *et al.*, « Plasmonic Films Can Easily Be Better: Rules and Recipes », *ACS Photonics*, vol. 2, n° 3, p. 326-333, mars 2015, doi: 10.1021/ph5004237.
- [10] N. G. Semaltianos, « Thermally evaporated aluminium thin films », *Appl. Surf. Sci.*, vol. 183, n° 3, p. 223-229, nov. 2001, doi: 10.1016/S0169-4332(01)00565-7.
- [11] A. Barulin, J.-B. Claude, S. Patra, A. Moreau, J. Lumeau, et J. Wenger, « Preventing Aluminum Photocorrosion for Ultraviolet Plasmonics », *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 10, n° 19, p. 5700-5707, oct. 2019, doi: 10.1021/acs.jpcllett.9b02137.

TABLE DES ANNEXES

Annexe I : Eléments de calculs théoriques pour les algorithmes de simulation utilisés (sources [6] et [7])

Annexe II : Plots 3D des résultats en ΔT issus de la simulation d'un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à un angle d'incidence de 30°

Annexe III : Photos légendées des deux montages utilisés lors des manipulations.

Annexe IV : Résultats en réflexion de la caractérisation expérimentale de l'échantillon référence pour le dépôt d'argent à 36 *nm* d'épaisseur.

Annexe I : Eléments de calculs théoriques pour les algorithmes de simulation utilisés (sources [6] et [7])

0.1 Onde plane dans un milieu matériel

Nous considérons une onde plane avec la convention $i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$. Les champs sont donc de la forme :

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ \vec{H} &= \vec{H}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}\end{aligned}\quad (1)$$

Avec cette convention, $\text{Im}(k) > 0$ correspond à des pertes. De même, $\text{Im}(\epsilon_r) > 0$ correspond un matériau absorbant. Les équations de Maxwell, s'écrivent :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \vec{J}_f + \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\end{aligned}\quad (2)$$

De la première équation, on tire aisément (en considérant que \vec{E} est selon x et se propage selon z) :

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E} \cdot \vec{y} &= ikE_0 = -\mu \frac{\partial H}{\partial t} \\ &\rightarrow ikE_0 = \mu i\omega H_0 \\ &\rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\epsilon_r} E_0 = \mu_0 \mu_r 2\pi \frac{c}{\lambda_0} H_0 \\ &\rightarrow E_0 = \mu_0 \mu_r \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \sqrt{\epsilon_r}} H_0 \\ &\rightarrow E_0 = \frac{\mu_r}{\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} H_0\end{aligned}\quad (3)$$

0.2 réflexion à une interface

On considère une onde plane incidente sur l'interface entre deux milieux matériel 1 et 2, avec un vecteur d'onde incident décomposé en $\vec{k}_{//}$ dans le plan de l'interface, et \vec{k}_{\perp} , normal à l'interface.

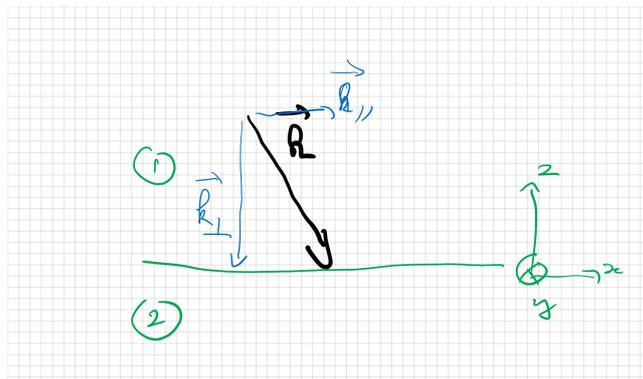


FIGURE 1 – Géométrie utilisée

0.2.1 cas TE (polarisation s)

Dans ce cas, \vec{E} est notre "invariant". On peut écrire la continuité du champ électrique à l'interface :

$$\begin{aligned}E_{i,1} + E_{r,1} &= E_{t,2} \\ \text{soit : } 1 + r &= t\end{aligned}\quad (4)$$

On va maintenant écrire la continuité du champ H tangentiel. Pour cela, nous utilisons $\mu i\omega \vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{E}$. La seule composante qui nous intéresse est selon \vec{x} :

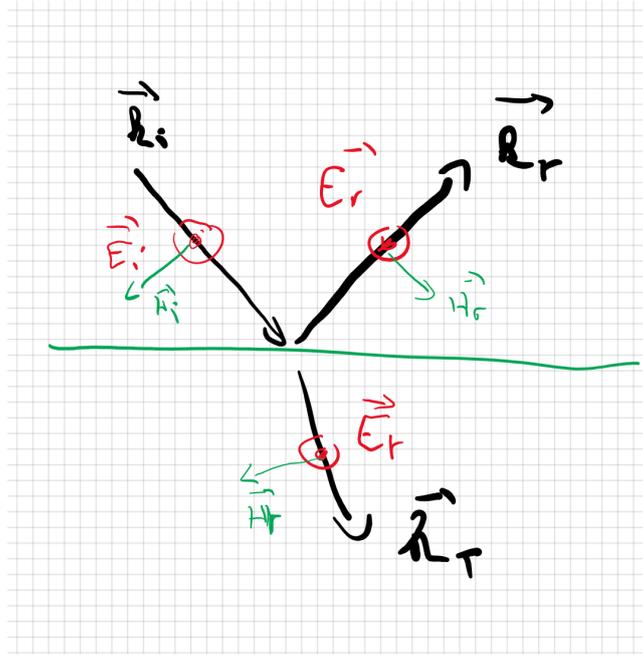


FIGURE 2 – Incidence TE : E_{vec} est constant en orientation, \vec{H} est symétrisé lors de la réflexion pour conserver un trièdre direct

$$\mu i \omega \vec{H} = \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Donc : } \mu i \omega H_{//} = -\frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (5)$$

$$\text{soit : } i H_{//} = -\frac{1}{\mu} i k_{\perp} E_y$$

$$\text{soit : } H_{//} = -\frac{1}{\mu} k_{\perp} E_y$$

A l'interface nous avons donc :

$$-\frac{1}{\mu_1} k_{\perp,1} + \frac{r}{\mu_1} k_{\perp,1} = -t \frac{1}{\mu_2} k_{\perp,2} \quad (6)$$

$$\text{soit : } 1 - r = t \frac{1}{\mu_2} k_{\perp,2} \frac{\mu_1}{k_{\perp,1}} = t \frac{\mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}}$$

Avec 4 + 6 il vient aisément :

$$2 = t + t \frac{\mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}}$$

$$\text{Donc : } t = 2 \frac{1}{1 + \frac{\mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}}} \quad (7)$$

$$\text{Donc : } t = 2 \frac{\mu_2 k_{\perp,1}}{\mu_2 k_{\perp,1} + \mu_1 k_{\perp,2}}$$

Avec 4 - 6 il vient ensuite :

$$\begin{aligned} 2r &= t \left(1 - \frac{\mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}} \right) = t \left(1 - \frac{\mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}} \right) \\ \rightarrow 2r &= t \frac{\mu_2 k_{\perp,1} - \mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}} = 2 \frac{\mu_2 k_{\perp,1}}{\mu_2 k_{\perp,1} + \mu_1 k_{\perp,2}} \frac{\mu_2 k_{\perp,1} - \mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1}} \\ \rightarrow r &= \frac{\mu_2 k_{\perp,1} - \mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1} + \mu_1 k_{\perp,2}} \end{aligned} \quad (8)$$

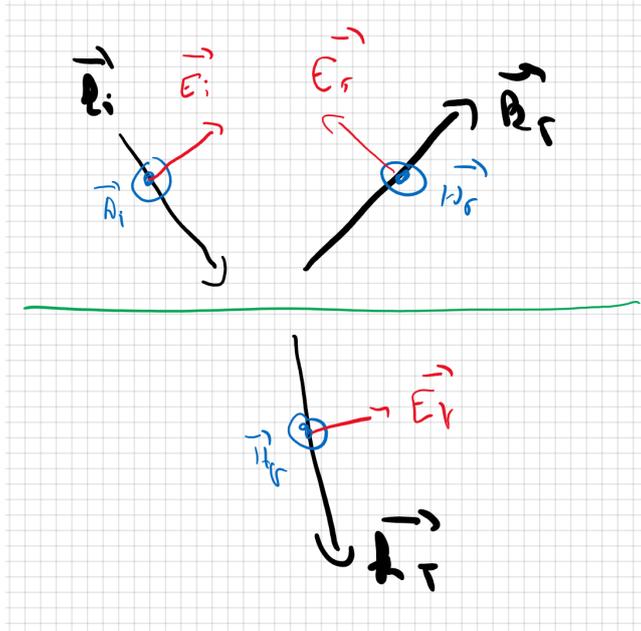


FIGURE 3 – Incidence TM : H_{vec} est constant en orientation, \vec{E} est symétrisé lors de la réflexion pour conserver un trièdre direct

0.2.2 Cas TM (polarisation p)

La continuité du champs \vec{H} tangentiel à l'interface s'écrit :

$$1 + r_H = t_H \quad (9)$$

où l'indice H rappelle que nous raisonnons ici sur le champs magnétique. Pour la continuité du champ \vec{E} tangentiel à l'interface, nous écrivons la composante selon x de \vec{E} :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = -i\omega\epsilon\vec{E} \\ \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ H_y \\ 0 \end{pmatrix} &= -i\omega\epsilon\vec{E} \\ \text{Donc sur } x : -\frac{\partial H_y}{\partial z} &= -i\omega\epsilon E_x \\ \text{Donc : } E_x &= \frac{1}{\omega\epsilon} k_{\perp} H_y \end{aligned} \quad (10)$$

L'équation de continuité s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega\epsilon_1} k_{1,i,\perp} + \frac{r_H}{\omega\epsilon_1} k_{1,r,\perp} &= \frac{t_H}{\omega\epsilon_2} k_{2,t,\perp} \\ \frac{k_{1,\perp}}{\epsilon_{r,1}} (1 - r_H) &= \frac{t_H}{\epsilon_{r,2}} k_{2,\perp} \\ \text{Donc : } 1 - r_H &= t_H \frac{k_{2,\perp}\epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp}\epsilon_{r,2}} \end{aligned} \quad (11)$$

De 9 + 11 il vient :

$$\begin{aligned} 2 &= t_H \left(1 + \frac{k_{2,\perp}\epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp}\epsilon_{r,2}} \right) \\ 2 &= t_H \left(\frac{k_{1,\perp}\epsilon_{r,2} + k_{2,\perp}\epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp}\epsilon_{r,2}} \right) \\ t_H &= 2 \frac{k_{1,\perp}\epsilon_{r,2}}{k_{1,\perp}\epsilon_{r,2} + k_{2,\perp}\epsilon_{r,1}} \end{aligned} \quad (12)$$

De 9 - 11 il vient :

$$\begin{aligned}
2r_H &= t_h \left(1 - \frac{k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2}}\right) \\
2r_H &= t_h \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} - k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2}} \\
2r_H &= 2 \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} + k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}} \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} - k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2}} \\
\text{Soit : } r_H &= \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} - k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} + k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}
\end{aligned} \tag{13}$$

De 3, il vient que le coefficient de réflexion en E est égale au coefficient de réflexion en H . Pour le coefficient de transmission, on a :

$$\begin{aligned}
E_i &= \frac{\mu_{r,1}}{\sqrt{\epsilon_{r,1}}} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} H_i \\
\text{et : } E_t &= \frac{\mu_{r,2}}{\sqrt{\epsilon_{r,2}}} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} H_t \\
\text{Donc : } t &= \frac{E_t}{E_i} = \frac{\mu_{r,2} \sqrt{\epsilon_{r,1}}}{\mu_{r,1} \sqrt{\epsilon_{r,2}}} t_H \\
\text{Soit : } t &= 2 \frac{\mu_{r,2} \sqrt{\epsilon_{r,1}}}{\mu_{r,1} \sqrt{\epsilon_{r,2}}} \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} + k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}
\end{aligned} \tag{14}$$

0.2.3 Synthèse

A final, nous avons donc les expressions suivantes pour l'amplitude du champ E :

	Polarisation TE (s)	Polarisation TM (p)
r	$r = \frac{\mu_2 k_{\perp,1} - \mu_1 k_{\perp,2}}{\mu_2 k_{\perp,1} + \mu_1 k_{\perp,2}}$	$r = \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} - k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} + k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}$
t	$t = 2 \frac{\mu_2 k_{\perp,1}}{\mu_2 k_{\perp,1} + \mu_1 k_{\perp,2}}$	$t = 2 \frac{\mu_{r,2} \sqrt{\epsilon_{r,1}}}{\mu_{r,1} \sqrt{\epsilon_{r,2}}} \frac{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2}}{k_{1,\perp} \epsilon_{r,2} + k_{2,\perp} \epsilon_{r,1}}$

0.2.4 Coefficients en intensité

Pour calculer les coefficients de réflexion/transmission en intensité, il faut calculer les ratios des flux des vecteurs de poynting. Nous devons donc commencer par calculer celui-ci :

$$\begin{aligned}
\vec{\Pi} &= \frac{1}{2} \vec{E} \times \vec{H}^* \\
&= E_0 \left(E_0 \frac{\sqrt{\epsilon_r}}{\mu_r} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_r} k_0} \vec{k} \right)^* \\
&= (E_0 E_0)^* \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{\mu_r^*}{k_0} \vec{k}^*
\end{aligned} \tag{15}$$

La puissance incidente à travers une longueur unité est donc logiquement :

$$P_{in} = (E_0 E_0)^* \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{\mu_r^*}{k_0} k_{\perp}^* \tag{16}$$

En écrivant les ration entre P_{in} , P_r et P_t , il vient simplement :

$$\begin{aligned}
R &= \frac{P_r}{P_{in}} = r r^* \\
T &= \frac{P_t}{P_{in}} = t t^* \frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{k_{2,\perp}}{k_{1,\perp}}
\end{aligned} \tag{17}$$

0.3 Algorithme récursif matrice S

Nous nous intéressons maintenant à la réflectivité/transmission d'un empilement de couches.

0.3.1 Système élémentaire

Le système considéré est décrit sur la figure 4. Il s'agit d'une épaisseur h_1 de matériau ϵ_1 situé avant l'interface avec un matériau ϵ_2 . L'objectif est de relier les ondes à gauche a_1 entrante, b_1 sortante aux ondes a_2 et b_2 entrantes et sortantes juste à droite de l'interface entre les deux matériaux.

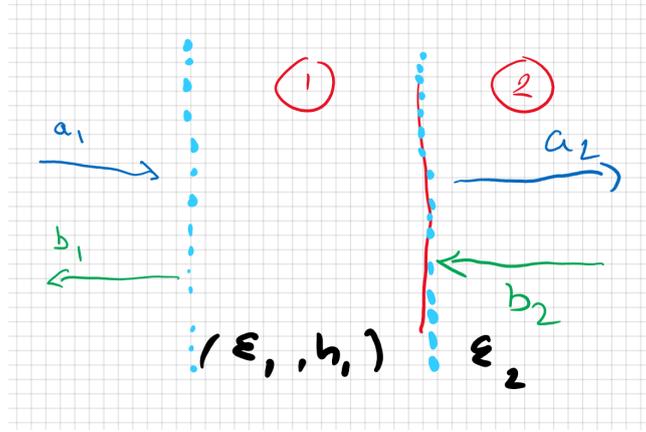


FIGURE 4 – Description du système élémentaire

De façon intuitive, nous pouvons exprimer ces relations sous la forme :

$$\begin{aligned} a_2 &= e^{ik_{\perp,1}h_1} * t_{1,2}a_1 + r_{2,1}b_1 \\ b_1 &= e^{ik_{\perp,1}h_1} * (t_{2,1}b_1 + r_{1,2}e^{ik_{\perp,1}h_1}a_1) \end{aligned} \quad (18)$$

Soit sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} a_2 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_{\perp,1}h_1} * t_{1,2} & r_{2,1} \\ r_{1,2}e^{2ik_{\perp,1}h_1} & t_{2,1}e^{ik_{\perp,1}h_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad (19)$$

C'est une matrice de type S (scattering) qui relie les ondes sortantes aux ondes entrantes. Par la suite, elle sera dénommée \tilde{s}

0.3.2 loi de récursivité

Le système considéré est le suivant :

$$\begin{array}{ccccc} a_0 & & a_{p-1} & & a_p \\ \rightarrow & & \rightarrow & & \rightarrow \\ & \left| S_{p-1} \right| & & \left| \tilde{s}_{p-1} \right| & \\ b_0 & & b_{p-1} & & b_p \\ \leftarrow & & \leftarrow & & \leftarrow \end{array} \quad (20)$$

On considère donc les matrices S suivantes : S_{p-1} , matrice de scattering faisant le lien entre les ondes dans le milieu initial et le début de la couche $p-1$, et \tilde{s}_{p-1} , matrice élémentaire de scattering décrivant le parcours dans l'épaisseur de la couche $p-1$ et le passage de l'interface $p-1 \rightarrow p$.

$$\begin{bmatrix} a_{p-1} \\ b_0 \end{bmatrix} = [S_{p-1}] \begin{bmatrix} a_0 \\ b_{p-1} \end{bmatrix} \text{ et } \begin{bmatrix} a_p \\ b_{p-1} \end{bmatrix} = [\tilde{s}_p] \begin{bmatrix} a_{p-1} \\ b_p \end{bmatrix} \quad (21)$$

Il vient le système suivant :

$$\begin{aligned} a_{p-1} &= S_{11}^{p-1}a_0 + S_{12}^{p-1}b_{p-1} \\ b_0 &= S_{21}^{p-1}a_0 + S_{22}^{p-1}b_{p-1} \\ \text{et} & \\ a_p &= \tilde{s}_{11}^p a_{p-1} + \tilde{s}_{12}^p b_p \\ b_{p-1} &= \tilde{s}_{21}^p a_{p-1} + \tilde{s}_{22}^p b_p \end{aligned} \quad (22)$$

Nous cherchons maintenant à exprimer S_p qui relie a_p et b_0 à a_0 et b_p .

L'objectif est de se "débarrasser" de x_{p-1} . Pour plus de commodité, nous ne notons pas les indices de S et \tilde{s} . Des équations 22.(3) et 22.(4) il vient :

$$\begin{aligned} a_{p-1} &= \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) \\ b_{p-1} &= \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) + \tilde{s}_{22}b_p \end{aligned} \quad (23)$$

On injecte ces valeurs dans 22.1 et 2 :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) &= S_{11}a_0 + S_{12} \left(\tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) + \tilde{s}_{22}b_p \right) \\ b_0 &= S_{21}a_0 + S_{22} \left(\tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) + \tilde{s}_{22}b_p \right) \end{aligned} \quad (24)$$

On peut reprendre 26.1 pour obtenir :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) &= S_{11}a_0 + S_{12}\tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) + S_{12}\tilde{s}_{22}b_p \\ \frac{a_p}{\tilde{s}_{11}} - \frac{\tilde{s}_{12}}{\tilde{s}_{11}}b_p &= S_{11}a_0 + S_{12} \frac{\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} a_p - S_{12} \frac{\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \tilde{s}_{12}b_p + S_{12}\tilde{s}_{22}b_p \\ a_p \left(\frac{1}{\tilde{s}_{11}} - S_{12} \frac{\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \right) &= S_{11}a_0 + b_p \left(\frac{\tilde{s}_{12}}{\tilde{s}_{11}} - S_{12} \frac{\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \tilde{s}_{12} + S_{12}\tilde{s}_{22} \right) \\ a_p \left(\frac{1}{\tilde{s}_{11}} - S_{12} \frac{\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \right) &= S_{11}a_0 + b_p \left(\tilde{s}_{12} \left(\frac{1}{\tilde{s}_{11}} - S_{12} \frac{\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \right) + S_{12}\tilde{s}_{22} \right) \\ a_p \left(\frac{1 - S_{12}\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \right) &= S_{11}a_0 + b_p \left(\tilde{s}_{12} \left(\frac{1 - S_{12}\tilde{s}_{21}}{\tilde{s}_{11}} \right) + S_{12}\tilde{s}_{22} \right) \\ a_p &= a_0 \frac{S_{11}\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12}\tilde{s}_{21}} + b_p \left(\tilde{s}_{12} + S_{12}\tilde{s}_{22} \frac{\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12}\tilde{s}_{21}} \right) \end{aligned} \quad (25)$$

Et 26.2 devient :

$$\begin{aligned}
b_0 &= S_{21}a_0 + S_{22} \left(\tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} (a_p - \tilde{s}_{12}b_p) + \tilde{s}_{22}b_p \right) \\
b_0 &= S_{21}a_0 + S_{22} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} a_p + S_{22} \left(\tilde{s}_{22} - \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \right) b_p \\
b_0 &= S_{21}a_0 + S_{22} \left(\tilde{s}_{22} - \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \right) b_p + S_{22} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \left(a_0 \frac{S_{11} \tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} + b_p \left(\tilde{s}_{12} + S_{12} \tilde{s}_{22} \frac{\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) \right) \\
b_0 &= \left(S_{21} + S_{22} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \frac{S_{11} \tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + \\
&\quad b_p \left(S_{22} \left(\tilde{s}_{22} - \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \right) + S_{22} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \left(\tilde{s}_{12} + S_{12} \tilde{s}_{22} \frac{\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) \right) \\
b_0 &= \left(S_{21} + \frac{S_{22} \tilde{s}_{21} S_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + \\
&\quad b_p S_{22} \left(\tilde{s}_{22} - \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} + \tilde{s}_{21} \frac{1}{\tilde{s}_{11}} \left(\tilde{s}_{12} + S_{12} \tilde{s}_{22} \frac{\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) \right) \\
b_0 &= \left(S_{21} + \frac{S_{22} \tilde{s}_{21} S_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + \\
&\quad b_p \frac{S_{22}}{\tilde{s}_{11}} \left(\tilde{s}_{22} \tilde{s}_{11} - \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} + \tilde{s}_{21} \left(\tilde{s}_{12} + S_{12} \tilde{s}_{22} \frac{\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) \right) \\
b_0 &= \left(S_{21} + \frac{S_{22} \tilde{s}_{21} S_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + \\
&\quad b_p \frac{S_{22}}{\tilde{s}_{11}} \left(\tilde{s}_{22} \tilde{s}_{11} - \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} + \tilde{s}_{21} \tilde{s}_{12} + \tilde{s}_{21} S_{12} \tilde{s}_{22} \frac{\tilde{s}_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) \\
b_0 &= \left(S_{21} + \frac{S_{22} \tilde{s}_{21} S_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + b_p \frac{S_{22}}{\tilde{s}_{11}} \tilde{s}_{22} \tilde{s}_{11} \left(1 + \frac{\tilde{s}_{21} S_{12}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) \\
b_0 &= \left(S_{21} + \frac{S_{22} \tilde{s}_{21} S_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + b_p \frac{S_{22}}{\tilde{s}_{11}} \tilde{s}_{22} \tilde{s}_{11} \frac{1 - S_{12} \tilde{s}_{21} + \tilde{s}_{21} S_{12}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \\
b_0 &= \left(S_{21} + \frac{S_{22} \tilde{s}_{21} S_{11}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}} \right) a_0 + b_p \frac{S_{22} \tilde{s}_{22}}{1 - S_{12} \tilde{s}_{21}}
\end{aligned} \tag{26}$$

On a donc obtenu la nouvelle matrice S_p qui relie les amplitudes des ondes entre 0 et p à partir des matrices S_{p-1} et \tilde{s}_p :

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} a_p \\ b_0 \end{bmatrix} &= [S_p] \begin{bmatrix} a_0 \\ b_p \end{bmatrix} \\
\text{avec : } [S_p] &= \begin{bmatrix} S_{p,11} & S_{p,12} \\ S_{p,21} & S_{p,22} \end{bmatrix} \\
\text{et ou :} & \\
S_{p,11} &= \frac{S_{p-1,11} \tilde{s}_{p,11}}{1 - S_{p-1,12} \tilde{s}_{p,21}} \\
S_{p,12} &= \left(\tilde{s}_{p,12} + S_{p-1,12} \tilde{s}_{p,22} \frac{\tilde{s}_{p,11}}{1 - S_{p-1,12} \tilde{s}_{p,21}} \right) \\
S_{p,21} &= \left(S_{p-1,21} + \frac{S_{p-1,22} \tilde{s}_{p,21} S_{11}}{1 - S_{p-1,12} \tilde{s}_{p,21}} \right) \\
S_{p,22} &= \frac{S_{p-1,22} \tilde{s}_{p,22}}{1 - S_{p-1,12} \tilde{s}_{p,21}}
\end{aligned} \tag{27}$$

On note que la matrice s donne directement les coefficients de réflexion/transmission d'un empilement : avec $a_0 = 1$ et $b_p = 0$, on a directement $a_p = t = S_{p,1,1}$ et $b_0 = r = S_{p,2,1}$.

0.4 Implementation scilab : bibliothèque RT_Smatrix

Nous implémentons ces calculs dans scilab en prenant avantage de la parallélisation potentielle apportée par scilab. Tous les scalaires sont considérés comme des vecteurs, pour limiter ensuite l'utilisation de boucles. Nous implémentons différentes fonctions :

0.4.1 Fonctions de réflectivité/transmission élémentaires

On définit les fonctions rij_p , rij_s , tij_p , tij_s comme :

```

1 function r = rij_p(ki, kj, ni, nj)
2     ///// Efield amplitude reflection coefficients between layers i and j in p
3     → polarization,
4     ///// as a function of the layers index ni and nj,
5     ///// and the projected wzvevectors along the interface normal
6     epsi = ni.^2;
7     epsj = nj.^2;
8     r = (epsj.*ki-epsi.*kj)./(epsj.*ki+epsi.*kj);
9 endfunction
10 function r = rij_s(ki, kj, ni, nj)
11     r = (ki-kj)./(ki+kj);
12 endfunction
13 function t = tij_p(ki, kj, ni, nj)
14     ///// Efield amplitude transmission coefficients between layers i and j in p
15     → polarization,
16     ///// as a function of the layers index ni and nj,
17     ///// and the projected wzvevectors along the interface normal
18     epsi = ni.^2;
19     epsj = nj.^2;
20     t = 2*ni.*nj.*ki./(epsj.*ki+epsi.*kj);
21 endfunction
22 function t = tij_s(ki, kj, ni, nj)
23     ///// Efield amplitude transmission coefficients between layers i and j in
24     → spolarization,
25     ///// as a function of the layers index ni and nj,
26     ///// and the projected wzvevectors along the interface normal
27     t = 2*ki./(ki+kj);
28 endfunction

```

On peut maintenant définir les matrices de transfert \tilde{s}_p Stilde12_spol et Stilde12_ppol. On retrouve exactement les équations 19 (modulo le fait que l'on a écrit $r_{21} = -r_{12}$), avec une dernière dimension "libre" pour simplifier les boucles.

```

1 function matriceS = Stilde12_spol(k1, k2, n1, n2, h1)
2     /// coefficients de passage
3     r12 = rij_s(k1, k2, n1, n2);
4     t21 = tij_s(k2, k1, n2, n1);
5     t12 = tij_s(k1, k2, n1, n2);
6     ///// coefficient de transmission dans le bulk :
7     alpha = exp(%i*k1*h1); /// exp +%i car ikr-omega.t
8     matriceS = zeros(2,2,size(k1,1));
9     matriceS(1,1,:) = alpha.*t12;
10    matriceS(1,2,:) = -r12;
11    matriceS(2,1,:) = r12.*alpha.^2;
12    matriceS(2,2,:) = alpha.*t21;
13 endfunction
14
15 function matriceS = Stilde12_ppol(k1, k2, n1, n2, h1)
16    r12 = rij_p(k1, k2, n1, n2);
17    t21 = tij_p(k2, k1, n2, n1);
18    t12 = tij_p(k1, k2, n1, n2);
19    ///// coefficient de transmission dans le bulk :
20    alpha = exp(%i*k1*h1);
21    matriceS = zeros(2,2,size(k1,1));
22    matriceS(1,1,:) = alpha.*t12;
23    matriceS(1,2,:) = -r12;
24    matriceS(2,1,:) = r12.*alpha.^2;
25    matriceS(2,2,:) = alpha.*t21;
26 endfunction

```

Connaissant \tilde{s}_p , on peut écrire la fonction de récursivité sur les couches (équation 27) :

```

1 function Sn = Srecursif(Sn_1, sn)
2     S11 = Sn_1(1,1,:);
3     S12 = Sn_1(1,2,:);

```

```

4   S21 = Sn_1(2,1,:);
5   S22 = Sn_1(2,2,:);
6
7   st11 = sn(1,1, :);
8   st12 = sn(1,2, :);
9   st21 = sn(2,1, :);
10  st22 = sn(2,2, :);
11
12  nS11 = (1.0./(1-S12.*st21)).*(st11.*S11);
13  nS12 = st12+st11.*S12.*st22./(1-S12.*st21);
14  nS21 = S21+S22.*st21.*S11./(1-S12.*st21);
15  nS22 = (st22.*S22)./(1-S12.*st21);
16  ///// d'ou la nouvelle matrice S de taille 2x2x#lambda
17  Sn = [nS11 nS12; nS21 nS22];
18 endfunction

```

Enfin, la fonction principale va parcourir les couches pour calculer les réflectivités (selon les coefficients de S_n et l'équation 17) :

```

1 function [r_s, t_s, r_p, t_p, R_s, T_s, R_p, T_p, Stotal_s, Stotal_p, SNs, SNp]=
   ↪ StackReflectance(vectN, vectE, lambda, theta)
2   vectK = repmat(2*%pi*vectN(:,1)./lambda(:), 1, size(vectN,2)).*sqrt((vectN./(repmat
   ↪ (vectN(:,1), 1, size(vectN,2))))).^2-repmat(sin(theta).^2, 1, size(vectN, 2))
   ↪ );
3   Nlambdas = size(lambda(:), 'r');
4   Stotal_s = zeros(2,2, Nlambdas);
5   Stotal_p = zeros(2,2, Nlambdas);
6   Stotal_s(1,1,:) = 1.0;
7   Stotal_s(2,2,:) = 1.0;
8   Stotal_p(1,1,:) = 1.0;
9   Stotal_p(2,2,:) = 1.0;
10  SNs = zeros(size(vectN, 'c')-1,2,2, Nlambdas);
11  SNp = zeros(size(vectN, 'c')-1,2,2, Nlambdas);
12  for i=1:size(vectN, 'c')-1
13     si_ipp = Stilde12_ppol(vectK(:,i), vectK(:,i+1), vectN(:,i), vectN(:,i+1),
   ↪ vectE(i));
14     Stotal_p = Srecursif(Stotal_p, si_ipp);
15     SNp(i,:,:,:) = Stotal_p;
16     si_ipp = Stilde12_spol(vectK(:,i), vectK(:,i+1), vectN(:,i), vectN(:,i+1),
   ↪ vectE(i));
17     Stotal_s = Srecursif(Stotal_s, si_ipp);
18     SNs(i,:,:,:) = Stotal_s;
19  end
20  t_s = squeeze(Stotal_s(1,1, :));
21  r_s = squeeze(Stotal_s(2,1, :));
22  t_p = squeeze(Stotal_p(1,1, :));
23  r_p = squeeze(Stotal_p(2,1, :));
24  R_s = (r_s).*(r_s'.');
25  T_s = t_s.*(t_s'.').*vectK(:, $)./vectK(:,1);
26  R_p = (r_p).*(r_p'.');
27  T_p = t_p.*(t_p'.').*vectK(:, $)./vectK(:,1);
28  ///// rmq : x'. ' plus rapide que conj(x)
29 endfunction

```

1 Introduction

Written by Steve Byrnes, 2012. Please email me any feedback. My website is <http://sjbyrnes.com> . Last update/upload: 11 December 2012.

This is a group of programs written in Python / NumPy for simulating light propagation in planar multilayer thin films, including the effects of multiple internal reflections and interference, using the “Transfer Matrix Method”. It can also simulate combinations of thin and thick films (e.g. a thick piece of glass with a multi-layer antireflection coating on one side and a mirror on the other side), or purely thick films.

In addition to calculating how much light is transmitted and reflected, the program can calculate, at any given point in the structure, how much light is being absorbed there. This is a very important feature for solar-cell modeling, for example.

It can also calculate the parameters measured in ellipsometry.

There are three files: `tmm_core.py` contains all the main programs, `examples.py` contains a few example calculations to get you started, and `tests.py` contains a number of programs that perform various tests and consistency checks to confirm that everything is coded and running correctly. There is also the standard `__init__.py`, the home of the main `tmm` namespace, into which are imported all the `tmm_core` functions.

2 Other people’s programs

There are many other free (and non-free) programs that do some or all of what this program does. Here are the ones I know of:

- <http://empy.sourceforge.net/>
- <http://www-swiss.ai.mit.edu/~jaffer/FreeSnell/>
- <http://optics.unige.ch/alexey/reffit.html>
- <http://www.ub.edu/optmat/programs.html>
- <http://www.luxpop.com/>
- <http://thinfilm.hansteen.net/>
- <http://www.lightmachinery.com/optical-calculations.php>
- <http://pypi.python.org/pypi/openTMM>
- <http://www.stanford.edu/group/mcgehee/transfermatrix/>

I have done a few consistency checks between my program and others. They tend to agree perfectly except in the tricky (and somewhat unusual) case of calculating reflected power or

transmitted power when the semi-infinite incoming and/or outgoing medium has a complex index of refraction. [However, I'm confident that my formulas are correct, see below.]

3 Installation

Requires SciPy and NumPy to run. The “examples” also use Matplotlib. Written in Python 2.7. It is very likely compatible with Python 2.6 and perhaps earlier, but I haven't checked. Install via `pip` or just download it directly (it's pure python).

3.1 Installation for dummies

If you've never used Python before, getting started can be a bit tricky. See http://sjbyrnes.com/?page_id=67 for installation advice.

You can install this package by typing `pip install tmm` into a terminal / command line. Or, since the package is pure python and requires no setup or compilation, you can just download it directly. Put the `tmm` folder somewhere that Python can find it. (If you're not sure, type `import sys; sys.path` into IPython.)

To get going, try typing the following in IPython (pylab mode):

```
>> import tmm.examples
>> tmm.examples.sample1()
```

A plot should pop up.

4 Units

The program implicitly requires a unit of length. You can use any unit, but keep it consistent. For example, if wavelength is given in nanometers, the thicknesses of the layers should also be given in nanometers, and the absorption at a given point will be in (fraction of incoming light power per nanometer of depth).

5 Theoretical background

The rest of this document lists the equations that form the basis of the program and explains where they come from. Where possible the equations are based on Bo Sernelius's lecture notes: <http://people.ifm.liu.se/boser/elma/> (especially lecture 13).

6 Wave propagation

The planar film is assumed to be uniform in the x and y directions, so that surfaces are normal to $\hat{\mathbf{z}}$. We assume the wavevector is in the x - z plane. (Or just the z direction if it's normal-incidence). The “forward” direction (direction that normally-incident incoming light is traveling) is $+\hat{\mathbf{z}}$.

The electric field at any given point is a superposition of the forward-moving and backwards-moving electromagnetic waves:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_f^0 e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{E}_b^0 e^{i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}}$$

(Implicitly, you always multiply by $e^{-i\omega t}$ and then take the real part.) Here, \mathbf{k}_f and \mathbf{k}_b is the [angular] wavevectors for forward- and backwards-moving waves; \mathbf{E}_f^0 and \mathbf{E}_b^0 are some constant vectors; and $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ is the complex electric field at any given point \mathbf{r} within a certain layer. The y -components of the \mathbf{k}_f and \mathbf{k}_b are zero, by definition of the x -axis. The x -components of \mathbf{k}_f and \mathbf{k}_b are always real, because we assume the light intensity is uniform along the x and y directions. However, the z component might be complex, representing a wave that is attenuating as it travels through the stack, due to absorption.

The wavevectors is related to the [complex] index of refraction n by:

$$\mathbf{k}_f = \frac{2\pi n}{\lambda_{vac}} (\hat{\mathbf{z}} \cos \theta + \hat{\mathbf{x}} \sin \theta)$$

$$\mathbf{k}_b = \frac{2\pi n}{\lambda_{vac}} (-\hat{\mathbf{z}} \cos \theta + \hat{\mathbf{x}} \sin \theta)$$

where θ is the angle from the normal, λ_{vac} is the vacuum wavelength. That means $n \sin \theta$ is always a real number, but $n \cos \theta$ might not be. This is consistent with Snell's law:

$$n_i \sin \theta_i = n_j \sin \theta_j$$

i.e., $n \sin \theta$ should be the same real number in every layer. Snell's law is the same as saying that the component of \mathbf{k} in the $x - y$ plane is the same in any layer.

7 What is complex refractive index?

When the refractive index is complex, the imaginary part is sometimes called “extinction coefficient”. The larger it is, the more light the material absorbs. Negative extinction coefficient corresponds to stimulated emission. Extinction coefficient, like refractive index, is a unitless number. It should *NOT* be confused with “molar extinction coefficient” or “mass extinction coefficient” in chemistry, which are not unitless. [However, if you know one you can figure out the other. See http://en.wikipedia.org/wiki/Mathematical_descriptions_

of_opacity .] For real-world materials, the extinction coefficient, like the refractive index, is different at different frequencies.

Again, with the conventions used here, $\text{Im } n > 0$ means absorption and $\text{Im } n < 0$ means stimulated emission.

8 Explicit \mathbf{E} , \mathbf{H} , and \mathbf{k} for s-polarization and p-polarization

As usual, *s*-polarization is where the \mathbf{E} -field points in the y -direction, and *p*-polarization is where the \mathbf{H} -field points in the y -direction. (There is no difference between *s* and *p*-polarization for normal-incident light.

Maxwell's equations imply that $\mathbf{H} = \frac{\mu}{\omega} \mathbf{k} \times \mathbf{E}$ for a plane wave. [This works even if \mathbf{k} and/or \mathbf{E} is a complex vector.] Therefore the explicit \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{k} are:

$$\begin{aligned} & \textbf{s-polarization}^1 \\ & \mathbf{E}_f = E_f \hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{E}_b = E_b \hat{\mathbf{y}} \\ & \mathbf{k}_f = \frac{2\pi n}{\lambda_{vac}} (\cos \theta \hat{\mathbf{z}} + \sin \theta \hat{\mathbf{x}}), \quad \mathbf{k}_b = \frac{2\pi n}{\lambda_{vac}} (-\cos \theta \hat{\mathbf{z}} + \sin \theta \hat{\mathbf{x}}) \\ & \mathbf{H}_f \propto n E_f (-\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{z}}), \quad \mathbf{H}_b \propto n E_b (\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{z}}) \end{aligned}$$

Now with p-polarization,

$$\begin{aligned} & \textbf{p-polarization}^2 \\ & \mathbf{k}_f = \frac{2\pi n}{\lambda_{vac}} (\cos \theta \hat{\mathbf{z}} + \sin \theta \hat{\mathbf{x}}), \quad \mathbf{k}_b = \frac{2\pi n}{\lambda_{vac}} (-\cos \theta \hat{\mathbf{z}} + \sin \theta \hat{\mathbf{x}}) \\ & \mathbf{E}_f = E_f (-\sin \theta \hat{\mathbf{z}} + \cos \theta \hat{\mathbf{x}}), \quad \mathbf{E}_b = E_b (-\sin \theta \hat{\mathbf{z}} - \cos \theta \hat{\mathbf{x}}) \\ & \mathbf{H}_f \propto n E_f \hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{H}_b \propto n E_b \hat{\mathbf{y}} \end{aligned}$$

9 Single-interface reflection and transmission amplitudes, sign convention

If you have the interface between two layers 1 and 2, and shine light from 1, then you have the incident amplitude (E_f on the layer 1 side), the reflected amplitude (E_b on the layer 1

¹I'm using Sernelius's convention, where a forward- and backward-moving s-polarized wave have the same amplitude sign if their E -fields point in the same direction. I am also assuming throughout that μ , the magnetic permeability, is approximately equal in each layer.

²I'm using Sernelius's convention, where a forward- and backward-moving p-polarized wave have the same amplitude sign if their H -fields point in the same direction. I am also assuming throughout that μ , the magnetic permeability, is approximately equal in each layer.

side), and the transmitted amplitude (E_f on the layer 2 side). The reflection coefficient r is the ratio of reflected amplitude to incident amplitude, and the transmission coefficient t is the ratio of transmitted amplitude to incident amplitude.

The sign of r depends on what it means for E_b and E_f to have the same sign versus opposite sign. I'm using Sernelius's convention (see previous section and footnotes). In other references, other conventions are used, and therefore r might have the opposite sign. Beware!

The equations for r and t ("The Fresnel Equations") are as given in Sernelius: Traveling from medium 1 into medium 2:

$$r_s = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad , \quad r_p = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}$$

$$t_s = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad , \quad t_p = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}$$

10 Amplitudes for multilayer thin films

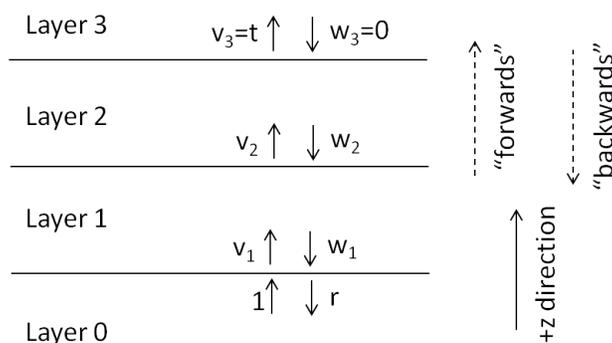


Figure 1 – Sample stack with $N = 4$ (two finite layers between two semi-infinite layers). The labels next to the small arrows indicate wave amplitudes.

Now we have N materials, numbered $0, 1, \dots, N-1$, where the first ("0") and last (" $N-1$ ") layer are semi-infinite. Light with amplitude 1 is entering towards layer 1 (Fig. 1).

At the interface between the $(n-1)$ st and n th material, let v_n be the amplitude of the wave on the n th side heading forwards (away from the boundary), and let w_n be the amplitude on the n th side heading backwards (towards the boundary). (Fig. 1.) ((v_0, w_0) are undefined, while $v_{N-1} = t$ and $w_{N-1} = 0$.) Then

$$\begin{pmatrix} v_n \\ w_n \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} v_{n+1} \\ w_{n+1} \end{pmatrix}$$

where³

$$M_n = \begin{pmatrix} e^{-i\delta_n} & 0 \\ 0 & e^{i\delta_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & r_{n,n+1} \\ r_{n,n+1} & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{t_{n,n+1}}$$

for $n = 1, \dots, N - 2$. Now we want the matrix relating the waves entering the structure to the waves exiting, i.e.:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}.$$

\tilde{M} is given by:

$$\tilde{M} = \frac{1}{t_{0,1}} \begin{pmatrix} 1 & r_{0,1} \\ r_{0,1} & 1 \end{pmatrix} M_1 M_2 \cdots M_{N-1}$$

Combining these two equations allows r and t to be written in terms of the four entries of the matrix \tilde{M} :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{M}_{00} & \tilde{M}_{01} \\ \tilde{M}_{10} & \tilde{M}_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$t = 1/\tilde{M}_{00}, \quad r = \tilde{M}_{10}/\tilde{M}_{00}$$

Incidentally, at this point, it is straightforward to calculate v_n and w_n for every n .

11 Calculating Poynting vector

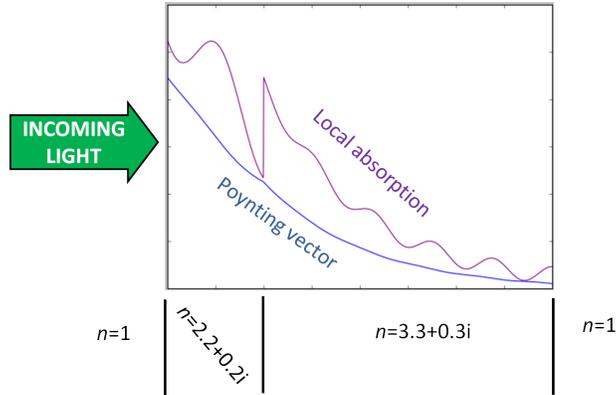


Figure 2 – Sample calculation of local absorption and Poynting vector in a two-layer structure with air on both sides (refractive indices written below the graph).

The next few sections relate to power flows and power absorption: The goal is to be able to generate graphs like Fig. 2. The relevant equations are somewhat hard to find (without typos) in the literature, but I verified them by various consistency checks, such as continuity across interfaces when appropriate, agreement with R and T in simple cases, etc.

³My M 's are a bit different than Sernelius's, because I'm using v and w , the wave amplitudes just *after* an interface, while Sernelius is using x and y , the wave amplitudes just *before* an interface.

I will start by deriving the expression for the normal component of the Poynting vector \mathbf{S} , i.e. $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{z}}$. This dot-product is called “poyn” in the program. It represents the net power flowing forward through the structure at a given point. It is unitless, because it is expressed as a fraction of the total incoming power. Start with s-polarization, using the expressions from a previous section:

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= E_f \hat{\mathbf{y}} + E_b \hat{\mathbf{y}} \\ \mathbf{H} &\propto nE_f (-\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{z}}) + nE_b (\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{z}}) \\ \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} &= \frac{1}{2} \text{Re}[\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{E}^* \times \mathbf{H})] \propto \text{Re}[(E_f^* + E_b^*)(E_f - E_b)n \cos \theta]\end{aligned}$$

After normalizing to incident power:

$$\text{s-polarization: } \quad \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\text{Re} [(n)(\cos \theta)(E_f^* + E_b^*)(E_f - E_b)]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0]}$$

Next, p-polarization:

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= E_f (-\sin \theta \hat{\mathbf{z}} + \cos \theta \hat{\mathbf{x}}) + E_b (-\sin \theta \hat{\mathbf{z}} - \cos \theta \hat{\mathbf{x}}) \\ \mathbf{H} &\propto nE_f \hat{\mathbf{y}} + nE_b \hat{\mathbf{y}} \\ \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} &= \frac{1}{2} \text{Re}[\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{E}^* \times \mathbf{H})] \propto \text{Re}[(\cos \theta)^*(E_f^* - E_b^*)(E_f + E_b)n]\end{aligned}$$

After normalizing to incident power:

$$\text{p-polarization: } \quad \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\text{Re} [(n)(\cos \theta^*)(E_f + E_b)(E_f^* - E_b^*)]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0^*]}$$

12 T (transmitted intensity)

To get the formula for T , the fraction of power transmitted, we just apply the Poynting vector formula above to the special case of the final medium, where $E_b = 0$ (no light is flowing back towards the material from the other side):

$$\begin{aligned}\text{s-polarization: } \quad T &= |t|^2 \frac{\text{Re} [n \cos \theta]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0]} \\ \text{p-polarization: } \quad T &= |t|^2 \frac{\text{Re} [n \cos \theta^*]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0^*]}\end{aligned}$$

where T is the fraction of power transmitted and $t = E_f/E_0$ is the transmission amplitude.⁴

⁴In some references, the complex conjugation for p-polarization is omitted, but I’m very confident it’s correct. Usually the incident and final media are non-absorbing, e.g. air, so $\cos \theta$ is real and it doesn’t matter whether you conjugate θ or not.

13 R (reflected intensity) and “power entering”

The formula for R is just what you expect:

$$R = |r|^2$$

An interesting thing—which had me confused at first—is that the power entering the first layer of the stack (called `power_entering` in the program) is *not* necessarily equal to $1 - R$, as one would expect (energy 1 moving forwards, minus energy R moving backwards). Likewise, it is possible to have $R + T \neq 1$ for an interface between two semi-infinite media. This strange situation only comes up when the starting semi-infinite medium is absorbing. Why does this happen? To find out, read Appendix A!

Quick summary of Appendix A: For an interface between two semi-infinite media, `power_entering` is always equal to T . When the incident semi-infinite medium has real refractive index, `power_entering` is always equal to $1 - R$. The difference between `power_entering` and $1 - R$ is related to an excess or deficit of absorption just before the interface, arising from interference between the incoming and reflected waves. R is defined not by the power that *doesn't* enter the medium, but by the power that *does* enter the reflected wave. See Appendix A.

14 Absorbed energy density

Next, absorbed energy density at a given depth. In principle this has units of [power]/[volume], but we can express it as a multiple of incoming light power density on the material, which has units [power]/[area], so that absorbed energy density has units of 1/[length]. This is the negative derivative (with respect to distance) of the “Poynting” expressions above. Differentiating is straightforward, using $E_f(z) \propto e^{ik_z z}$ and $E_b(z) \propto e^{-ik_z z}$. (Here, $k_z = 2\pi n \cos \theta / \lambda_{vac}$.) The result is:

$$\begin{aligned} \text{s-polarization:} \quad a(z) &= \frac{|E_f + E_b|^2 \operatorname{Im} [n \cos(\theta) k_z]}{\operatorname{Re} [n_0 \cos \theta_0]} \\ \text{p-polarization:} \quad a(z) &= \frac{\operatorname{Im} [n \cos(\theta^*) (k_z |E_f - E_b|^2 - k_z^* |E_f + E_b|^2)]}{\operatorname{Re} [n_0 \cos \theta_0^*]} \end{aligned}$$

Within a given layer, absorption is an analytical function:

$$a(z) = A_1 e^{2z \operatorname{Im}(k_z)} + A_2 e^{-2z \operatorname{Im}(k_z)} + A_3 e^{2iz \operatorname{Re}(k_z)} + A_3^* e^{-2iz \operatorname{Re}(k_z)}$$

where:

$$\begin{aligned}
 \text{s-polarization : } A_1 &= \frac{\text{Im} [n \cos(\theta) k_z]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0]} |w|^2 \\
 A_2 &= \frac{\text{Im} [n \cos(\theta) k_z]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0]} |v|^2 \\
 A_3 &= \frac{\text{Im} [n \cos(\theta) k_z]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0]} v w^* \\
 \text{p-polarization : } A_1 &= \frac{2 \text{Im} [k_z] \text{Re} [n \cos(\theta^*)]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0^*]} |w|^2 \\
 A_2 &= \frac{2 \text{Im} [k_z] \text{Re} [n \cos(\theta^*)]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0^*]} |v|^2 \\
 A_3 &= \frac{2 \text{Re} [k_z] \text{Im} [n \cos(\theta^*)]}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0^*]} v w^*
 \end{aligned}$$

where $v = E_f(0)$ and $w = E_b(0)$.

15 Branch cuts

Snell's law gives $\theta_i = \arcsin(n_0 \sin(\theta_0)/n_i)$. However, the arcsin function is ambiguous—it has branch cuts in the complex plane. How to get the right θ ? With different choices of θ , you can flip the sign of $\cos \theta$, so it's important to get it right.

I've only checked the case I care about, $\text{Re } n > 0$ and $\text{Im } n \geq 0$. In that case, the naive calculation (using the default behavior of arcsine) gives the correct answer for all cases, in both Python⁵ and Mathematica. I think I checked this pretty carefully, see the appendix (Section B) for details.

In more specialized cases, like negative-index materials ($\text{Re } n < 0$) or stimulated-emission media ($\text{Im } n < 0$), results are not guaranteed! Please check this before using!

16 Thick “incoherent” films: Introduction

That finishes the thin-film part of the program. Next, thick films. Here we are interested in hybrid structures containing both thick and thin layers (or even just thick layers). Light loses its coherence when traveling through the thick layers—i.e., the Fabry-Perot fringes are so close together that they cannot be resolved by the experimental measurement, due to factors such

⁵Note: For python, you need to use the arcsine function in SciPy, not the one in NumPy, so that when you calculate the arcsine of a real number greater than 1, e.g. total internal reflection, you get a complex angle instead of nan. Or, you can use NumPy arcsine if you cast its argument to complex.

as random thickness variations, propagation angle variations, and/or wavelength variations. Instead of seeing the fringes, you just see the average.

In this program, there are two types of layers: Coherent layers (treated as in the sections above), and incoherent layers. Generally, a layer should be treated as coherent if its thickness is comparable to the light wavelength or smaller, and incoherent if it's much larger than the light wavelength.

As soon as light enters an incoherent layer, its phase information is thrown out, and only its intensity is remembered. The program has no partial coherence, it's all or nothing!

For more on this topic see these references: Harbecke⁶ and Katsidis⁷. These papers, which I have not read in detail, seem to offer more powerful and general methods than the basic approach I'm using.

17 Thick “incoherent” films: Calculation method

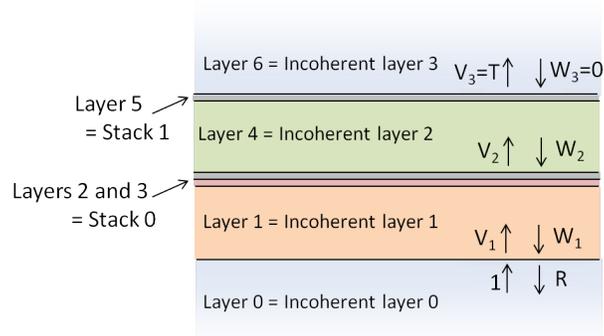


Figure 3 – Variable definitions related to the incoherent calculation program. A “stack” is one or more consecutive coherent layers. Note the three numbering systems: Each layer has a layer index, each incoherent layer has an incoherent layer index, and each stack has a stack index. V_i, W_i are power flows (note the capital letters, not to be confused with the amplitudes v_i, w_i in Fig. 1).

We have a number of incoherent layers $0, 1, \dots, N - 1$. Let V_i be the forward propagation *intensity* and W_i be the backwards *intensity* at the *beginning* of the i th incoherent layer. (Capital letters to distinguish from v, w , the amplitudes in the coherent program, see previous section.) Let X_i and Y_i be forward and backwards at the *end* of the i th incoherent layer. (X_i and Y_i are not explicitly calculated in the program.) Let $T_{i,j}$ be transmissivity from the i th to j th incoherent layer (where $j = i \pm 1$, and $R_{i,j}$ the reflectivity. Then:

$$Y_i = X_i R_{i,i+1} + W_{i+1} T_{i+1,i}$$

⁶<http://dx.doi.org/10.1007/BF00697414>

⁷<http://dx.doi.org/10.1364/AO.41.003978>

$$V_{i+1} = X_i T_{i,i+1} + W_{i+1} R_{i+1,i}$$

$$\begin{pmatrix} X_i \\ Y_i \end{pmatrix} = \frac{1}{T_{i,i+1}} \begin{pmatrix} 1 & -R_{i+1,i} \\ R_{i,i+1} & T_{i+1,i} T_i - R_{i+1,i} R_{i,i+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{i+1} \\ W_{i+1} \end{pmatrix}.$$

Let P_i be the fraction of light that passes successfully through layer i (in a single pass) without getting absorbed, calculated by

$$P_i = e^{-\alpha d_i}, \quad \alpha = \frac{4\pi \operatorname{Im}[n_i \cos \theta_i]}{\lambda_{vac}}$$

where d_i is the layer thickness. Then:

$$\begin{pmatrix} V_i \\ W_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/P_i & 0 \\ 0 & P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_i \\ Y_i \end{pmatrix}$$

Define the matrices L_n by

$$L_n = \frac{1}{T_{i,i+1}} \begin{pmatrix} 1/P_i & 0 \\ 0 & P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -R_{i+1,i} \\ R_{i,i+1} & T_{i+1,i} T_{i,i+1} - R_{i+1,i} R_{i,i+1} \end{pmatrix}$$

for $n = 1, \dots, N-1$. Now we want the matrix relating the intensities entering the structure to the intensities exiting, i.e.:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \tilde{L} \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Then the formula for \tilde{L} is

$$\tilde{L} = \frac{1}{T_{0,1}} \begin{pmatrix} 1 & -R_{1,0} \\ R_{0,1} & T_{1,0} T_{0,1} - R_{1,0} R_{0,1} \end{pmatrix} L_1 L_2 \cdots L_{N-1} = \begin{pmatrix} \tilde{L}_{00} & \tilde{L}_{01} \\ \tilde{L}_{10} & \tilde{L}_{11} \end{pmatrix}$$

$$T = 1/\tilde{L}_{00}, \quad R = \tilde{L}_{10}/\tilde{L}_{00}$$

18 Thick “incoherent” films: Absorption profile, Coherence length

Absorption as a function of depth is not implemented in the program for incoherent layers (at least for now); this section explains why.

Calculating the absorption profile within an “incoherent” layer is not simple to do correctly. If you look up close, the absorption as a function of position would be oscillatory near an interface due to interference between the incoming and outgoing beams; with the oscillations gradually dying down into a smooth exponential farther away from the interface. The “coherence length” describes how far from the interface you need to go before the oscillations

die down. For example, if the incoherence is caused by using a not-quite-monochromatic light source, the coherence length would be related to the bandwidth of the light.

If you are only interested in calculating the *total* amount of light absorbed in each layer, it turns out that you do not need to know the coherence length!! More precisely, the coherence length does not effect the total absorption in (and transmission through) an incoherent layer under two assumptions (which are usually satisfied): (1) The coherence length is large compared to a wavelength; (2) The coherence length is small compared to the layer thickness.⁸

That's the reason that you are not prompted to input coherence lengths in any of the calculations above.

On the other hand, if you want to calculate absorption as a function of depth in an incoherent layer, you *do* need to know exactly what the coherence length is.

I'm not sure what to do here. Asking users to input the coherence length seems a bad strategy as most people probably wouldn't know what it is. Assuming a coherence length of 0 would give grossly inaccurate results very close to the interfaces, which would be OK in some applications but not others.

Since I cannot think of a good way to do it, absorption as a function of depth is not implemented for incoherent layers. Sorry! If you want to see absorption as a function of depth for an incoherent layer, maybe you can use the coherent program and average over slightly varying thicknesses or wavelengths (as appropriate) to get rid of spurious oscillations.

⁸The mathematics of this is that when you have sinusoidal oscillations that die away, their integral is independent of the precise decay properties. Mathematically, $\int_0^\infty e^{ikx}e^{-\alpha x}dx = \frac{1}{-ik+\alpha} \approx \frac{1}{-ik}$; the integral is approximately independent of α as long as $\alpha \ll k$, i.e. as long as the decay length is much larger than the oscillation length.

A Appendix: R (reflected intensity) and “power_entering”

We obviously expect $R = |r|^2$ here (as usual), and that’s correct.

The interesting thing—which had me confused at first—is that the normalized Poynting vector passing through the first interface is *not* necessarily equal to $(1 - R)$, as one would expect (energy 1 moving forwards minus energy R moving backwards). Likewise, it is possible to have $R + T \neq 1$ for an interface between two semi-infinite media. This strange situation only comes up when the starting semi-infinite medium is absorbing. Why does this happen?

To get the exact formulas for Poynting vector at the initial interface, called `power_entering` in the program, we just plug into the normal Poynting vector formula with $E_f = 1$ and $E_b = r$, to get:

$$\text{power entering} = \frac{\text{s-polarization:}}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0 (1 + r^*) (1 - r)]} = (1 - R) + 2 \text{Im}[r] \frac{\text{Im}[n_0 \cos \theta_0]}{\text{Re}[n_0 \cos \theta_0]}$$

$$\text{power entering} = \frac{\text{p-polarization:}}{\text{Re} [n_0 \cos \theta_0^* (1 + r) (1 - r^*)]} = (1 - R) - 2 \text{Im}[r] \frac{\text{Im}[n_0 \cos \theta_0^*]}{\text{Re}[n_0 \cos \theta_0^*]}$$

The first term is what we expect, the second term is strange.

To explain this funny result, start with how R is defined (in the case of an absorbing semi-infinite medium). The most useful and sensible definition—and the one I’m using—is the one shown in Fig. 4: You should be able to say the amount of power going into the reflected beam, at a distance $|z|$ from the interface, *after* the beams have spatially separated, by just calculating $Re^{-\alpha|z|}$ where α is the absorption coefficient. (In fact, that exact calculation is a key ingredient in the incoherent calculation.)

More generally, we naively expect the Poynting vector for $z < 0$ in Fig. 4 to satisfy

$$\mathbf{S}(z) \cdot \hat{\mathbf{n}} = e^{\alpha|z|} - Re^{-\alpha|z|} \quad [\text{formula for without wave interference}] \quad (1)$$

where the first term comes from the incoming wave and the second term from the reflected wave. It is fine to demand this when the beams do not overlap, but we *CANNOT* use this expression in the “Interference here” triangle region of Fig. 4. Instead, there is interference between the forward- and backward-moving waves, which causes oscillations in the absorption profile (“hot-spots” and “nodes”) (see Fig. 2), so there are corresponding oscillations in the Poynting vector (it’s a bit hard to see them in Fig. 2 but they’re there). A bit of extra energy is flowing from the nodes to the nearby hot-spots. Thanks to these oscillations, the Poynting vector right at the edge before the start of the structure may not be $1 - R$.

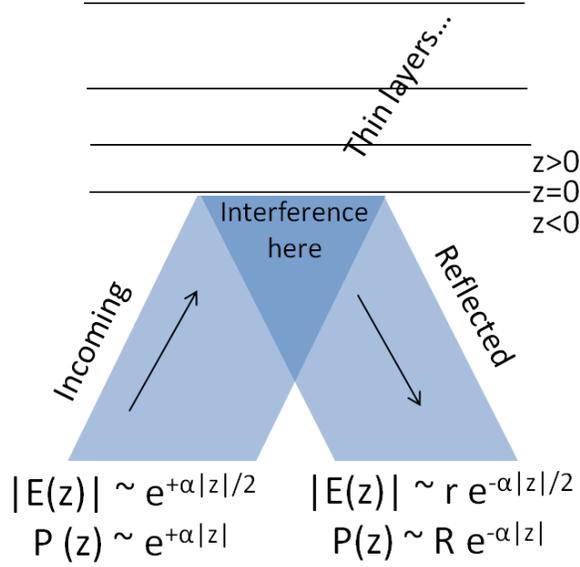


Figure 4 – How the reflected intensity R is defined. Electric field E and power transported P are shown.

If r is real, then there is a node or hot-spot of absorption right at the interface. It turns out that this sort of corresponds to having an integer number of oscillatory cycles, so the oscillations do not effect the power passing through the interface. $R+T = 1$ is still valid. But if r is complex, then you have an extra bit of absorption, or deficit of absorption, compared to the non-oscillating baseline expectation of Eq. (1).

Instead of $R + T = 1$, the formula is:

$$R + T \pm (\text{extra bit or deficit of absorption from how the oscillations cut off}) = 1$$

Again, this comes from the fact that R is defined by Eq. (1), which is not valid when there is interference.

To verify that $R = |r|^2$ is the correct expression to use, we use the Poynting vector formula, plugged in at an arbitrary depth $z < 0$, using $E_f = \exp(2\pi i n z \cos \theta / \lambda_{vac})$ and $E_b = r \exp(-2\pi i n z \cos \theta / \lambda_{vac})$. I'll just do the s-polarized case:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(z) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= \frac{\text{Re}[n_0 \cos \theta_0 (E_f^* + E_b^*) (E_f - E_b)]}{\text{Re}[n_0 \cos \theta_0]} \\ &= \left(e^{-4\pi z \text{Im}[n_0 \cos \theta_0] / \lambda_{vac}} - |r|^2 e^{+4\pi z \text{Im}[n_0 \cos \theta_0] / \lambda_{vac}} \right) + \\ &\quad + \left(2 \frac{\text{Im}[n_0 \cos \theta_0]}{\text{Re}[n_0 \cos \theta_0]} \text{Im}[r e^{4\pi i z \text{Re}[n_0 \cos \theta_0] / \lambda_{vac}}] \right) \end{aligned}$$

The first term corresponds exactly to Eq. (1) with $R = |r|^2$, and the second term is a

sinusoidal oscillation corresponding to interference. When the beams stop overlapping (i.e., below the triangle in Fig. 4), the oscillation term goes away but the other term remains.

In the program, I use the variable “`power_entering`” to describe the net power entering the structure, i.e. the Poynting vector at the front of the first layer. For an interface between two semi-infinite media with light coming from just one side, `power_entering` is always equal to T . When the incident semi-infinite medium has real refractive index, `power_entering` is always equal to $1 - R$.

A.1 Accounting for this effect in the incoherent calculation

One of the things I want to compute in the incoherent calculation is how much light gets absorbed in each layer. Part of that absorption is the “extra” absorption due to the oscillation cut-off at the interface.

At the interface between two incoherent layers, say 0 and 1, let’s say the power flows on the two sides are $P_{f,0}, P_{f,1}, P_{b,0}, P_{b,1}$, where f and b stand forward-moving and backward-moving. The important thing to remember is that the net power actually crossing the interface is *exactly* $P_{f,0}T_{01} - P_{b,1}T_{10}$. Why? Because the transmitted light beams have no funny corrections due to oscillations; they have nothing to *coherently* interfere with them.

Therefore, the “extra” absorption near the interface, not accounted for in the exponential decay of the waves, is exactly equal to

$$(P_{f0} - P_{b0}) - (P_{f0}T_{01} - P_{b1}T_{10}) = P_{f0}(1 - R_{01} - T_{01})$$

extra near-interface absorption on the 0 side, and likewise

$$P_{b1}(1 - R_{10} - T_{10})$$

extra near-interface absorption on the 1 side.

B Appendix: Branch cuts

Snell’s law gives $\theta_i = \arcsin(n_0 \sin(\theta_0)/n_i)$. However, the arcsin function is ambiguous—it has branch cuts. How to get the right θ ?? Remember here, n_i may be an arbitrary complex number, ideally the program will work even for unusual cases like negative-index materials ($\text{Re } n < 0$) or stimulated-emission media ($\text{Im } n < 0$).

Actually, we never care about θ itself, just $\sin \theta$ and $\cos \theta$. The sine has no ambiguity:

$$\sin \theta_i = \frac{n_0 \sin \theta_0}{n_i}$$

The cosine is more problematic, because there are two choices consistent with Snell's law:

$$\cos \theta_i = \pm \frac{1}{n_i} \sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2}$$

Do we want the + or -?? In other words, we can pick between two angles θ and $\pi - \theta$.

B.1 Case that $\text{Im } n > 0$, $\text{Re } n > 0$

For an absorbing material ($\text{Im } n > 0$), a clear requirement is that $\text{Im}(n \cos \theta) > 0$. That way, $\text{Im } k_z > 0$, so the E_f wave in the medium decays rather than amplifying. Another clear requirement is that $R > 1$ or $T < 0$ cannot occur. This translates to $\text{Re}[n \cos \theta] \geq 0$ for s-polarization and $\text{Re}[n \cos \theta^*] \geq 0$ for p-polarization. This amounts to the same thing as saying that the Poynting vector associated with an E_f wave should point forward not backwards.

Important question: Are these two "clear requirements" consistent with each other. Yes!

Theorem: If we choose the θ with $\text{Im}(n \cos \theta) > 0$, then it will also be true that $\text{Re}[n \cos \theta] > 0$.

Proof: As above,

$$n_i \cos \theta_i = \pm \sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2}$$

Given that $\text{Im } n_i > 0$ and $\text{Re } n_i > 0$, it follows that $\text{Im } n_i^2 > 0$. Since $n_0 \sin \theta_0$ is real (the wave intensity is assumed to be uniform in the lateral direction), $(n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2)$ also has a positive imaginary part. Therefore, its square root is in the first or third quadrant of the complex plane. That finishes the proof.

Theorem: If we choose the θ with $\text{Im}(n \cos \theta) > 0$, then it will also be true that $\text{Re}[n \cos \theta^*] > 0$.

Proof:

$$\text{Re}[n_i \cos \theta_i^*] = \text{Re}[n_i^* \cos \theta_i] = \pm \frac{n_i^*}{n_i} \sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2}$$

Let ϕ with $0 < \phi < \pi/2$ be the complex phase of n_i . We have

$$\arg \frac{n_i^*}{n_i} = -2\phi$$

Using the fact that $(n_0 \sin \theta_0)^2$ is a nonnegative real number,

$$\arg n_i^2 = 2\phi, \quad 2\phi \leq \arg(n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2) < \pi$$

If we choose the square-root with positive imaginary part,

$$\phi \leq \arg \sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2} < \pi/2$$

Therefore,

$$-\pi/2 < -\phi \leq \arg \left[\frac{n_i^*}{n_i} \sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2} \right] < -2\phi + \pi/2 < \pi/2$$

That finishes the proof.

B.2 Implementation for $\text{Im } n > 0, \quad \text{Re } n > 0$

If we use the naive

$$\theta_i = \arcsin(n_0 \sin \theta_0 / n_i)$$

do we get the θ_i which satisfies

$$\text{Im}(n_i \cos \theta_i) > 0$$

in all cases? The answer is “Yes”, using the default arcsine branch-cut behavior of Python and Mathematica (which are the same). At least, I randomly generated a few million examples and it always worked in both Python and Mathematica, even when $n_0 \sin \theta_0 < 0$.

B.3 Case that $\text{Im } n = 0, \quad \text{Re } n > 0$

As before,

$$\cos \theta_i = \pm \frac{1}{n_i} \sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2}$$

There are three cases: Total internal reflection where $n_0 \sin \theta_0 > n_i$ and $\cos \theta_i$ is pure imaginary; the ordinary case where $n_0 \sin \theta_0 < n_i$ and $\cos \theta_i$ is pure real, and the boundary case where $n_0 \sin \theta_0 = n_i$ and $\cos \theta_i = 0$. The third one has no ambiguity because $\cos \theta_i = -\cos \theta_i$. Let’s look at the other two cases.

B.3.1 Case $\text{Im } n = 0, \quad \text{Re } n > 0, \text{ Total internal reflection}$

Here, $\text{Re}[n_i \cos \theta_i] = 0$ and $\text{Re}[n_i^* \cos \theta_i^*] = 0$, so no need to worry about the sign of the Poynting vector or $R > 1$ or $T < 0$. The only requirement is that the wave decay rather than amplify, i.e.

$$\text{Im}(n_i \cos \theta_i) > 0$$

B.3.2 Case $\text{Im } n = 0, \quad \text{Re } n > 0, \text{ Total internal reflection implementation}$

If we use the naive

$$\theta_i = \arcsin(n_0 \sin \theta_0 / n_i)$$

do we get the θ_i which satisfies

$$\text{Im}(n_i \cos \theta_i) > 0$$

in all cases? The answer is “Yes”, using the default arcsine branch-cut behavior of Python and Mathematica (which are the same). At least, I randomly generated a few million examples and it always worked in both Python and Mathematica, even when $n_0 \sin \theta_0 < 0$.

B.3.3 Case $\text{Im } n = 0$, $\text{Re } n > 0$, Normal refraction

Here, $\text{Im}(n_i \cos \theta_i) = 0$, so we get no information from whether the wave is decaying or amplifying. The only criterion is $\text{Re}[n_i \cos \theta_i] > 0$ and $\text{Re}[n_i^* \cos \theta_i^*] > 0$ (meaning the Poynting vector points forward, $R < 1$, $T > 0$). In this case it simplifies to $n_i \cos \theta_i > 0$.

B.3.4 Case $\text{Im } n = 0$, $\text{Re } n > 0$, Normal refraction implementation

If we use the naive

$$\theta_i = \arcsin(n_0 \sin \theta_0 / n_i)$$

do we get the θ_i which satisfies

$$n_i \cos \theta_i > 0$$

in all cases? The answer is “Yes”: In both Python and Mathematica, \arcsin for real arguments between -1 and 1 returns an angle between $-\pi/2$ and $\pi/2$, i.e. an angle with positive cosine.

B.4 Stuff I didn’t bother with

I’m not interested in stimulated emission or negative-index metamaterials so I haven’t bother to check these cases. Well, I started out of curiosity, enough to convince myself that things make sense, but didn’t finish.

B.4.1 Case that $\text{Im } n < 0$, $\text{Re } n < 0$

This is *not* stimulated emission, despite $\text{Im } n < 0$. It is absorption. [Remember, with $\text{Re } n < 0$, the direction the wave is “really moving” (the direction of the Poynting vector) is opposite the direction of the wavevector. When $\text{Im } n < 0$, the wave is amplifying in the direction of the wavevector, so it’s “really” decaying.]

Therefore the required criteria are the same as for ordinary absorbing media with $\text{Im } n > 0$ and $\text{Re } n > 0$: $\text{Im}(n \cos \theta) > 0$ (the E_f wave decays rather than amplifies), $\text{Re}[n \cos \theta] \geq 0$ for s-polarization and $\text{Re}[n \cos \theta^*] \geq 0$ for p-polarization (the E_f wave carries energy forwards and $R < 1$ and $T > 0$.)

If we flip the sign of n_i , we do not effect $\sqrt{n_i^2 - (n_0 \sin \theta_0)^2}$, so we do not affect $\cos \theta_i$ (up to a possible sign-flip) nor do we affect $(n_i \cos \theta_i)$ (up to a possible sign-flip). Therefore the proof is exactly the same as before that the two requirements are consistent with each other.

B.4.2 Case that $\text{Im } n < 0, \quad \text{Re } n < 0$ implementation

Didn't bother to check.

B.4.3 Case that $\text{Im } n = 0, \quad \text{Re } n < 0$

Didn't bother to check.

B.4.4 Case of stimulated emission

Didn't bother to check.

Annexe II : Plots 3D des résultats en ΔT issus de la simulation d'un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂ à un angle d'incidence de 30°

Plot 3D de la variation d'intensité Delta_T dans le visible, selon l'évolution des épaisseurs d'aluminium (epAlu) et d'argent (epAg) à une longueur d'onde donnée $\lambda=0,562\mu\text{m}$ pour $\theta=30^\circ$ et l'épaisseur de SCO ($e_{\text{SCO}}=0,135\mu\text{m}$)

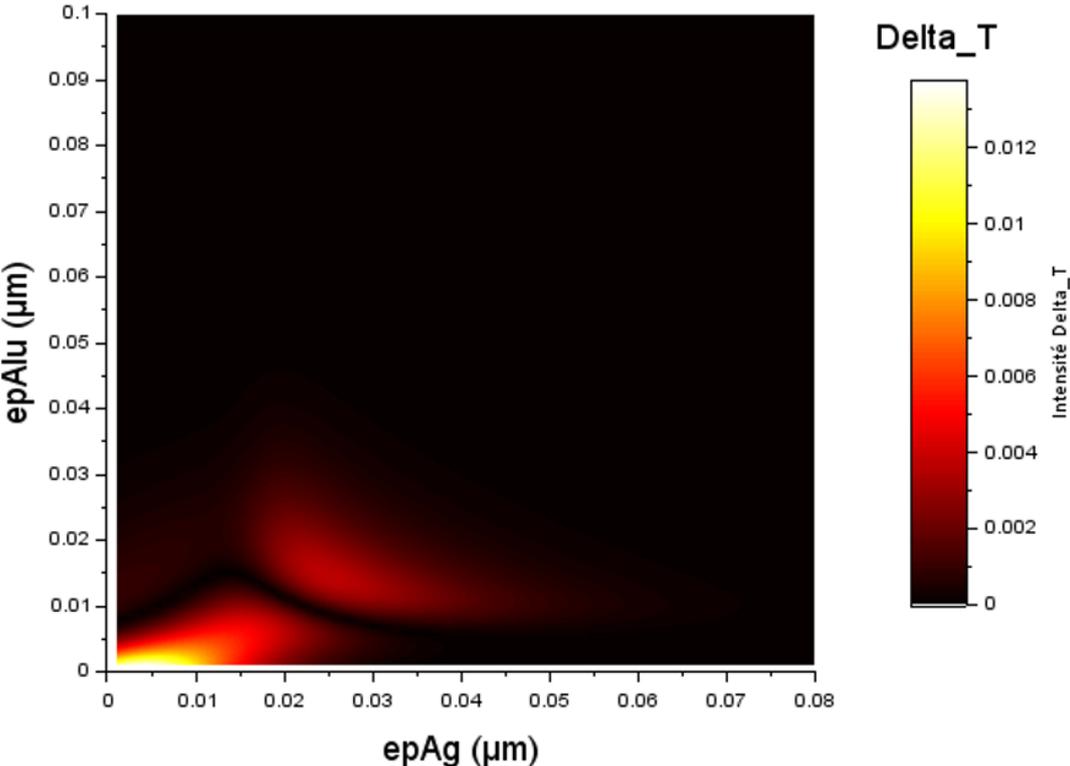


Figure 28: cartographie en trois dimensions (épaisseur d'Al, épaisseur d'Ag, intensité du contraste en réflexion) de la variation d'intensité ΔT avec l'évolution des épaisseurs d'Ag pour $\lambda=0,567\mu\text{m}$ à 30° d'incidence pour un Fabry-Pérot air/Ag/SCO/Al/SiO₂

Annexe III : Photos légendées des deux montages utilisés lors des manipulations.

Pour le montage de caractérisation en transmission et réflexion :

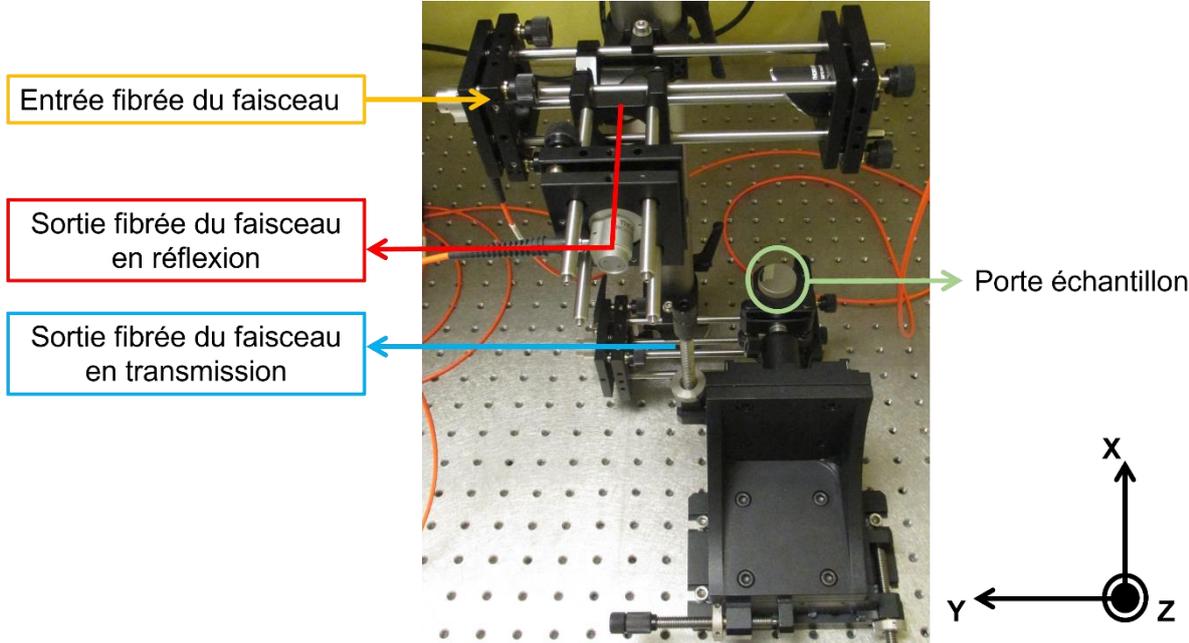


Figure 29: Photo légendée du setup de caractérisation en transmission et réflexion des échantillons de dépôt métallique

Pour le montage en transmission pour l'étude des deux dispositifs Fabry-Pérot :

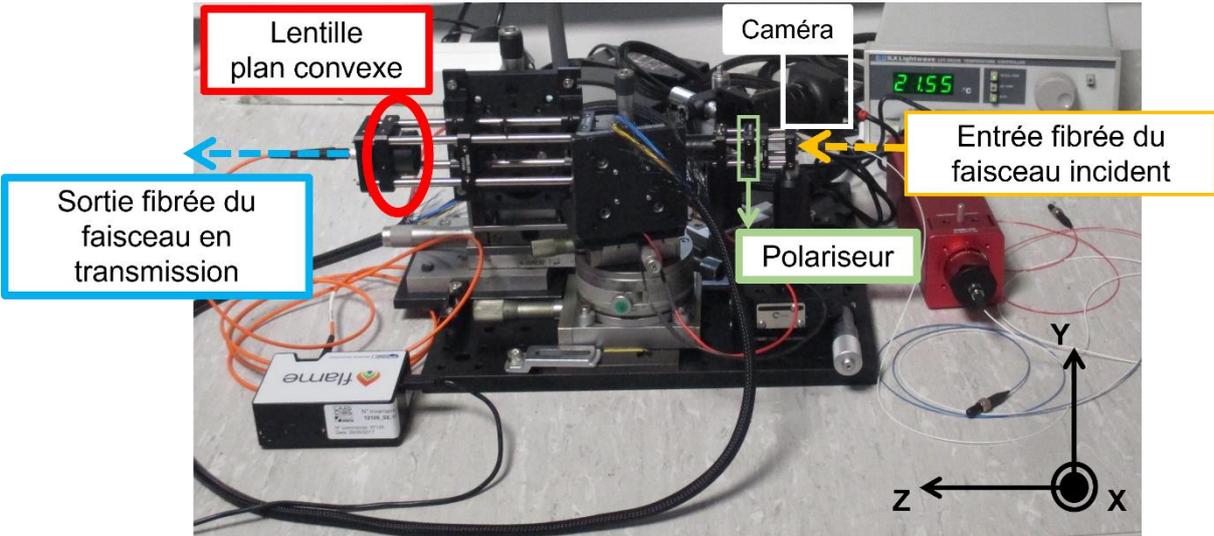


Figure 30: photo légendée du montage en transmission pour l'étude de dispositifs Fabry-Pérot sous faisceau focalisé

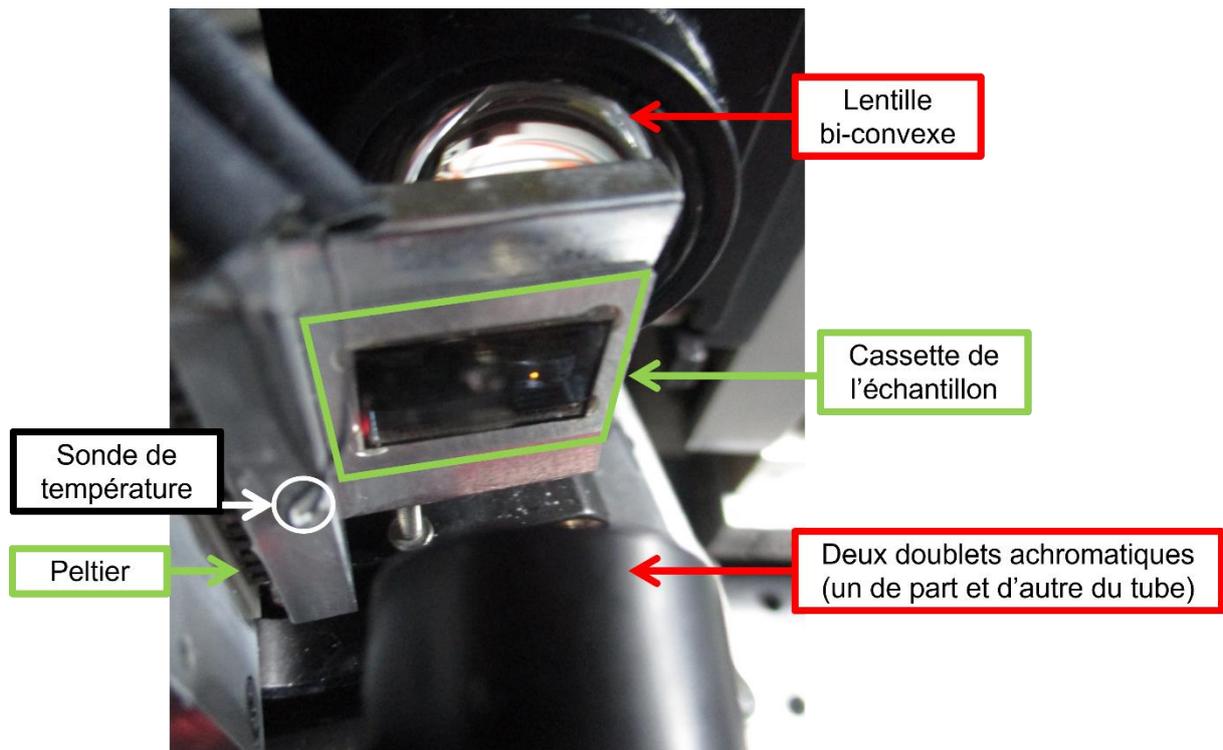


Figure 31: photo du montage en transmission côté échantillon

Annexe IV : Résultats en réflexion de la caractérisation expérimentale de l'échantillon référence pour le dépôt d'argent à 36 nm d'épaisseur.

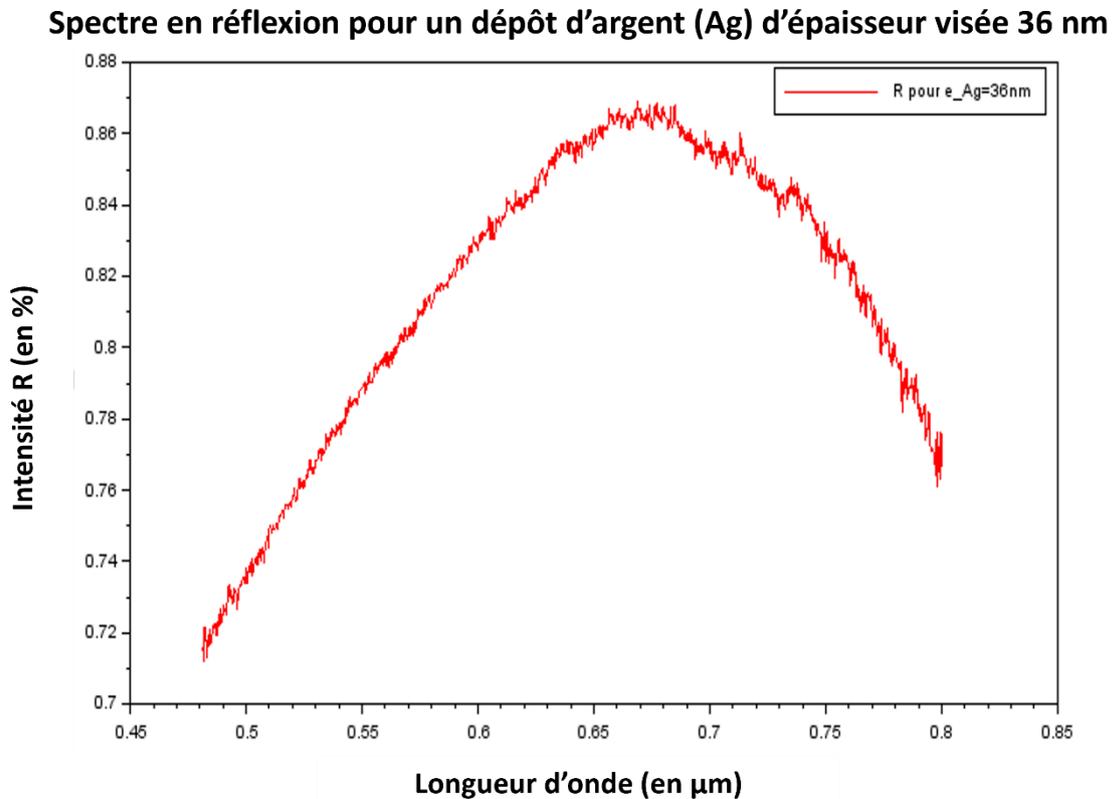


Figure 32: caractérisation expérimentale en réflexion pour le dépôt d'argent référence à l'épaisseur visée 36 nm

On peut noter pour ce dépôt de référence une intensité en réflexion maximale autour des 87% d'intensité, contre les 90% d'intensité attendus nominalement.

INSA Toulouse

135, avenue de Ranguel
31077 Toulouse Cedex 4 - France
www.insa-toulouse.fr



MINISTÈRE
DE L'ÉDUCATION NATIONALE,
DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE