



**HAL**  
open science

# Lumière diffusée par les filtres interférentiels complexes : développement d'un banc de métrologie hautes performances et d'outils de synthèse par intelligence artificielle

Marin Fouchier

## ► To cite this version:

Marin Fouchier. Lumière diffusée par les filtres interférentiels complexes : développement d'un banc de métrologie hautes performances et d'outils de synthèse par intelligence artificielle. Optique [physics.optics]. Aix-Marseille Université, 2021. Français. NNT : . tel-03455625

**HAL Id: tel-03455625**

**<https://hal.science/tel-03455625v1>**

Submitted on 29 Nov 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.

.....

## THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue à Aix-Marseille Université  
le 6 octobre 2021 par

### Marin Fouchier

**Lumière diffusée par les filtres interférentiels complexes :  
développement d'un banc de métrologie hautes performances  
et d'outils de synthèse par intelligence artificielle**

**Discipline**

Physique et  
sciences de la matière

**Spécialité**

Optique, Photonique et  
Traitement d'Image

**École doctorale**

ED 352 – Physique et  
sciences de la matière

**Laboratoire**

Institut Fresnel  
CNRS UMR 7249

**Partenaires de recherche**

Centre National d'Etudes Spatiales  
Cilas ArianeGroup



**Composition du jury**

Franck DELMOTTE

*Laboratoire Charles Fabry*

Laurent LAMAIGNÈRE

*CEA CESTA*

Marc FERRARI

*Laboratoire d'Astrophysique de Marseille*

Laurent PINARD

*Laboratoire des Matériaux Avancés*

Catherine GRÈZES-BESSET

*Cilas ArianeGroup*

Claude AMRA

*Institut Fresnel*

Norbert HUBIN

*European Southern Observatory*

Karine MATHIEU

*Centre National d'Etudes Spatiales*

Michel LEQUIME

*Institut Fresnel*

Myriam ZERRAD

*Institut Fresnel*

Rapporteur

Rapporteur

Président du jury

Examineur

Examinatrice

Examineur

Invité

Invitée

Co-directeur de thèse

Directrice de thèse



## Affidavit

Je soussigné, Marin Fouchier, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Myriam Zerrad, Michel Lequime et Claude Amra, dans le respect des principes d'honnêteté, d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect à la fois de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et de la charte d'Aix-Marseille Université relative à la lutte contre le plagiat.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à Marseille, le 6 octobre 2021



Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la [Licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Pas de Modification 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

## Remerciements

La rédaction de ce manuscrit est le fruit de trois années de thèse pendant lesquelles j'ai eu le plaisir de rencontrer et côtoyer de nombreuses personnes à qui je dois la réussite de ces travaux !

Je voudrais remercier Franck Delmotte, professeur à l'Institut d'Optique, et Laurent Lamaignère, directeur de recherche au CEA CESTA, d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse. Merci également à Marc Ferrari, astronome au LAM, Laurent Pinard, directeur du LMA et Norbert Hubin, directeur des programmes de développement technologique à l'ESO, de participer à mon jury.

Merci à Karine Mathieu, ingénieure au CNES, pour son accompagnement et pour l'attention et l'intérêt portés à mes travaux.

J'adresse également mes remerciements à Catherine Grèzes-Besset, responsable du département études et réalisation couches minces de Cilas ArianeGroup, pour son expertise et pour son aide précieuse dans mes réflexions sur la conception des couches minces. J'en profite aussi pour remercier Hélène Krol et les autres personnes de l'entreprise avec qui j'ai eu l'occasion de collaborer.

Je tiens à remercier chaleureusement mes encadrants Myriam Zerrad, Michel Lequime et Claude Amra. Merci pour la confiance que vous m'avez accordée dès le début, pour votre disponibilité de tout instant, votre capacité à m'éclairer lorsque j'en avais besoin et pour la grande pédagogie dont vous avez fait preuve. J'ai beaucoup appris en travaillant à vos côtés et je vous en suis très reconnaissant. Vous m'avez lancé et accompagné sur des chemins que je n'aurais jamais imaginé emprunter !

J'ai évidemment une pensée pour les doctorant·e·s, post-doctorant·e·s et permanent·e·s rencontrés au cours de ces trois dernières années, en premier lieu mes collègues de l'équipe CONCEPT : Paul, Yannick, Dikai, Imran, Xavier, Gabriel et Aude, ça a été un réel plaisir de travailler avec vous. Merci également aux membres de MEMO : Luis, Camille, Valentina, Elena, Faris, Prithu et toutes celles et ceux qui se sont engagés dans ce beau projet. Je compte sur la nouvelle génération pour poursuivre l'aventure ! Je n'oublie pas non plus Claire et la direction du labo qui nous ont aidés depuis le début pour mener à bien nos activités. Merci à Thomas pour les sorties *running*, à Thibault pour les parties de babyfoot. Enfin, merci à Kévin, Cyprien, Bruno et toutes celles et ceux que j'ai côtoyés chaque jour au labo, en pause déjeuner ou lors des animations de diffusion scientifique.

Je remercie également la cellule de culture scientifique d'Aix-Marseille Université de m'avoir accueilli en première année et avec qui j'ai beaucoup appris sur la médiation.

Un grand merci à ma famille et mes amis de m'avoir accompagné au cours de ces trois dernières années et jusqu'au jour de ma soutenance.

Pauline, ma partenaire pour la vie, merci pour ton soutien sans faille, ta bienveillance, tes conseils, tes nombreuses relectures, ta patience lorsque je te parle de physique et ta curiosité pour comprendre mes recherches dans les moindres détails. Tu y es pour beaucoup dans la réussite de cette aventure et il y en a d'autres qui nous attendent !

# Sommaire général

<b>Affidavit</b>	<b>iii</b>
<b>Remerciements</b>	<b>iv</b>
<b>Sommaire général</b>	<b>vi</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre 1. La diffusion lumineuse dans les filtres interférentiels complexes</b>	<b>3</b>
1.1. Éléments de contexte sur les filtres interférentiels	3
1.2. Propriétés spéculaires des filtres interférentiels	4
1.2.1. Composantes élémentaires en espace libre	4
1.2.2. Réponse d'un empilement interférentiel	5
1.3. Grandeurs photométriques de la diffusion	13
1.3.1. BSDF et ARS	13
1.3.2. Diffuseur lambertien	15
1.4. Modèle électromagnétique de la diffusion par une interface	16
1.4.1. Introduction au modèle électromagnétique	16
1.4.2. Introduction à la diffusion par une interface	18
1.4.3. Équivalence rugosité-courant	21
1.4.4. Composantes élémentaires du champ diffusé	22
1.4.5. Cas d'un faisceau faiblement divergent	27
1.4.6. Prise en compte des états de polarisation	29
1.4.7. Flux diffusé	33
1.4.8. ARS	34
1.4.9. Rugosité d'une interface	35
1.5. Modèle électromagnétique de la diffusion par un multicouche	40
1.5.1. Introduction aux multicouches	40
1.5.2. Champ diffusé par une interface d'un multicouche	41
1.5.3. Champ d'excitation sur une interface d'un multicouche	43
1.5.4. Termes de sources sur une interface d'un multicouche	44
1.5.5. Champs diffusés par une interface d'un multicouche	44
1.5.6. Champs diffusés globaux par un multicouche	44
1.5.7. ARS d'un multicouche	46
1.5.8. Corrélacion entre les interfaces	47
1.5.9. Passage au TIS et approximation	48
1.5.10. Application à un filtre Fabry-Perot	49
1.6. Implémentations numériques	54
1.7. Conclusion sur le modèle électromagnétique	56
<b>Chapitre 2. SALSA, un diffusomètre spectralement et angulairement résolu</b>	<b>58</b>
2.1. Présentation de l'instrument	58

2.1.1.	Contexte et historique de SALSA	58
2.1.2.	Description générale de l'instrument	61
2.1.3.	Présentation détaillée des principaux composants	64
2.2.	Description du mode de fonctionnement	74
2.2.1.	Mise en état de marche de l'instrument	74
2.2.2.	Contrôle et ajustement du signal caméra	76
2.2.3.	Acquisition du signal caméra et du bruit	77
2.2.4.	Voie de référence	79
2.2.5.	Synchronisation passive des voies de référence et d'acquisition	80
2.3.	Calibration et qualification métrologique	81
2.3.1.	Introduction à la calibration et à la qualification	81
2.3.2.	Calibration de l'instrument	82
2.3.3.	Qualification de l'instrument	94
2.4.	Caractérisation de la transmission spéculaire de composants complexes	100
2.4.1.	Traitement des acquisitions pour les propriétés spéculaires	100
2.4.2.	Filtre passe-bande dans le visible	104
2.4.3.	Filtre passe-bande dans l'infrarouge	105
2.5.	Caractérisation de la diffusion par des composants complexes	109
2.5.1.	Traitement des acquisitions pour les propriétés diffuses	109
2.5.2.	Filtre passe-bande dans l'infrarouge	109
2.5.3.	Traitement des données et ajustement au modèle	111
2.6.	Répétabilité des mesures	116
2.6.1.	Répétabilité des mesures de transmittance	117
2.6.2.	Répétabilité des mesures de diffusion	117
2.7.	Autres composants	118
2.7.1.	Substrat de carbure de silicium	118
2.7.2.	Réseau de diffraction convexe	119
2.8.	Conclusion et perspectives pour la métrologie	120
<b>Chapitre 3. Outils d'intelligence artificielle pour la synthèse de filtres interférentiels sous contrainte de la diffusion lumineuse</b>		<b>122</b>
3.1.	La synthèse des filtres interférentiels	122
3.1.1.	Présentation du problème et historique	122
3.1.2.	Résolution par la méthode <i>simplex needle</i>	124
3.1.3.	Vers un contrôle de la réponse diffuse	125
3.2.	Présentation des outils d'optimisation	126
3.2.1.	Notions sur les algorithmes évolutionnaires	126
3.2.2.	Notions sur l'apprentissage automatique	128
3.2.3.	Notions sur l'apprentissage profond et les réseaux de neurones	132
3.2.4.	Notions sur les réseaux de neurones à convolution	141
3.3.	Résolution de problème inverse par algorithme évolutionnaire	144
3.3.1.	Résolution par un algorithme DE	144



3.3.2. Variants et synthèse	150
3.4. Design de couches minces par réseaux de neurones artificiels	151
3.4.1. Problème one-to-many	151
3.4.2. Résolution du problème direct	153
3.4.3. Résolution du problème inverse	154
3.4.4. Application : design sous contrainte de la réponse en transmission	157
3.4.5. Application : design sous contrainte de la réponse transmise diffuse	163
3.4.6. Application : ajustement du design avec des données expérimentales	173
3.5. Au-delà des modèles déterministes	176
3.5.1. Autres apprentissages	176
3.5.2. Mixture density network	177
3.6. Conclusion et perspectives sur la synthèse sous contrainte de la diffusion	183
<b>Conclusion et perspectives générales</b>	<b>184</b>
<b>Références</b>	<b>186</b>
<b>Liste de publications et participation aux conférences</b>	<b>190</b>
<b>Abstract</b>	<b>191</b>
<b>Résumé</b>	<b>192</b>

# Introduction

Les filtres interférentiels, aussi appelés filtres couches minces, sont une famille de composants optiques à part entière. Ils sont constitués d'un substrat généralement transparent sur lequel sont déposées de très fines couches de matériaux aux propriétés optiques connues. La technologie des couches minces est massivement utilisée dans l'industrie de l'optique. En effet, presque tous les composants possèdent un traitement de surface adapté à leur utilisation. Un constat assez simple permet d'en comprendre l'intérêt puisqu'un substrat de verre classique reflète environ 4% de la lumière visible. Cette réflexion parasite n'est pas négligeable lorsque le faisceau lumineux traverse de nombreux composants (lentilles, fenêtres optiques, filtres, etc.). La technologie des couches minces surmonte cette limitation et permet notamment de générer des anti-reflets (réflexion nulle) comme des miroirs quasi-parfaits (réflexion proche de 100%), sur des gammes spectrales complètement ajustables.

La modélisation, la conception, la fabrication et la caractérisation de ces composants sont étudiées depuis plusieurs décennies. Les procédés de dépôts énergétiques permettent aujourd'hui de générer des couches denses de matériaux avec un grand contrôle sur leur épaisseur et leur indice. Outre la fabrication, il est également essentiel de développer des modèles physiques fiables, des méthodes de caractérisation précises et des outils de conception puissants.

Les filtres interférentiels sont principalement utilisés pour leurs propriétés spéculaires de réflexion et de transmission. Toutefois, même pour des multicouches déposés sur des substrats parfaitement polis, la présence d'interfaces légèrement rugueuses, ou qui ne sont pas totalement planes, est une source de diffusion lumineuse. L'intensité de la lumière diffusée est faible relativement aux propriétés spéculaires mais elle n'en est pas négligeable pour autant. De nombreuses applications de précision, telle que l'optique pour le spatial ou pour la détection des ondes gravitationnelles, rencontrent des limitations à cause de la diffusion lumineuse. Elle représente à la fois une perte énergétique mais aussi une source de lumière parasite qui restreint les performances des instruments. La compréhension de la diffusion lumineuse par les composants interférentiels fait l'objet d'investigations approfondies depuis plusieurs décennies à l'Institut Fresnel. Trois approches complémentaires sont développées parallèlement pour étudier ce phénomène : la modélisation, la métrologie et la synthèse.

Le **Chapitre 1** présentera un modèle électromagnétique de la diffusion lumineuse par les couches minces optiques. Ce modèle décrit d'abord la diffusion par une interface

faiblement rugueuse avant d'être étendu au cas des multicouches. Il montre une proportionnalité directe entre le niveau de diffusion et la rugosité des interfaces.

Nous exposerons dans le **Chapitre 2** le développement du banc de diffusion SALSA (*Spectral and Angular Light Scattering characterization Apparatus*). Cet outil de métrologie permet de mesurer les réponses spectrales diffuses des composants couches minces. L'instrument surmonte un certain nombre de limitations auxquelles la métrologie de la diffusion fait habituellement face. Les performances inédites de SALSA seront illustrées par la caractérisation de plusieurs échantillons.

Enfin, nous introduirons dans le **Chapitre 3** une méthode de synthèse des couches minces optiques sous contrainte de la réponse spectrale diffuse en utilisant des réseaux de neurones artificiels. La synthèse des composants interférentiels s'appuie principalement sur les réponses spéculaires en transmission et en réflexion. Cependant, aucune méthode à ce jour ne prend également en compte la réponse diffuse. L'essor de l'intelligence artificielle a montré la capacité des réseaux de neurones profonds à résoudre de nombreux problèmes complexes. Cette approche ouvre la voie à une meilleure prise en compte de la diffusion dans le design des filtres interférentiels

L'ensemble de ces travaux a été réalisé avec le soutien du Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) et de Cilas ArianeGroup, dans le cadre du laboratoire commun LABTOP (LABoratoire commun de Traitement OPTique des surfaces).

# Chapitre 1. La diffusion lumineuse dans les filtres interférentiels complexes

## 1.1. Éléments de contexte sur les filtres interférentiels

La modélisation des phénomènes physiques intervenant dans les composants interférentiels fait l'objet d'investigations avancées depuis plusieurs décennies. La compréhension fine de ces processus physiques est indispensable pour garantir la précision des outils de métrologie ainsi que la fiabilité des procédés de conception et de fabrication. Les composants étudiés sont constitués de couches très fines déposées sur un substrat. Les propriétés des matériaux utilisés sont généralement connues et les épaisseurs des couches déposées sont maîtrisées. Les composants interférentiels sont utilisés le plus souvent pour leurs performances intéressantes en transmission ou en réflexion et permettent de synthétiser une infinité de fonctions optiques (passe-haut, passe-bas, passe-bande, filtre *notch*, filtre dichroïque, miroir, etc.). Les technologies de conception et de dépôt permettent aujourd'hui la fabrication de composants très complexes par leur fonction optique et leur composition. Les filtres les plus élaborés comptent jusqu'à plusieurs centaines de couches. Les deux propriétés de transmission et réflexion sont dites spéculaires : la propagation du faisceau transmis et du faisceau réfléchi suit les règles de l'optique géométrique. Par exemple, la direction de propagation du faisceau réfléchi par une interface est séparée du faisceau incident par le double de l'angle d'incidence. L'intérêt de ces composants réside dans le caractère spectral de leur fonction optique. La détermination de ces propriétés pour un filtre multicouche requiert une compréhension fine des processus interférentiels qui agissent dans ces structures. Ces propriétés spéculaires sont comprises et contrôlées depuis les années 1980 [1,2].

Les phénomènes de diffusion sont également une propriété caractéristique des composants interférentiels. Ces processus sont eux aussi étudiés depuis plusieurs décennies [3–8]. Bennett et Porteus ont proposé en 1961 une relation de proportionnalité entre la rugosité d'une interface et sa réflectance en incidence normale [9]. Cette dernière étant décomposée comme la somme d'une contribution spéculaire et d'une contribution diffuse. La rugosité d'une interface peut ainsi être déduite d'une mesure de réflectance. Le modèle utilisé par les auteurs a d'abord été proposé par Davies en 1954 dans le cadre de l'étude de la diffusion des ondes radars par la surface de la mer [10].

En 1979, Bennett et Elson introduisent un modèle angulairement défini de la diffusion lumineuse par une surface [3]. Leur fonction de diffusion compte deux termes : un premier qui dépend uniquement des conditions d'illumination de la surface (longueur d'onde, angle d'incidence, indice de réfraction, etc.), tandis que le second est uniquement

fonction des propriétés statistiques de cette surface. La description des phénomènes de diffusion étant bien plus complexe, l'extension du modèle au cas d'empilements couches minces avec un nombre élevé d'interfaces n'est maîtrisé que depuis quelques années [11,12].

Ce chapitre présente d'abord un modèle électromagnétique des propriétés spéculaires des composants interférentiels dans la section 1.2, puis nous développerons un modèle de la diffusion lumineuse par ces mêmes composants dans la section 1.3. Ces deux modèles sont intégralement extraits d'un ouvrage consacré au sujet et écrit par Claude Amra, Michel Lequime et Myriam Zerrad : « *Electromagnetic Optics of Thin-Film Coatings: Light Scattering, Giant Field Enhancement, and Planar Microcavities* » (Cambridge University Press, 2020) [12].

## 1.2. Propriétés spéculaires des filtres interférentiels

### 1.2.1. Composantes élémentaires en espace libre

La lumière est classiquement représentée comme une onde électromagnétique, composée d'un champ électrique et d'un champ magnétique dont les variations sont décrites par les équations de Maxwell. En espace libre, dans un milieu non chargé et linéaire, le champ électrique d'une onde plane est écrit  $\vec{E}(\vec{\rho}, t)$ , avec  $\vec{\rho}$  une variable spatiale telle que  $\vec{\rho} = (\vec{r}, z)$  et  $t$  la variable temporelle. La transformée inverse temporelle de Fourier de  $\vec{E}$  permet d'écrire :

$$\vec{E}(\vec{\rho}, t) = \int_f \vec{\mathcal{E}}(\vec{\rho}, f) e^{-2i\pi f t} df \quad (1.1)$$

où  $f$  est la fréquence temporelle. Une seconde transformée de Fourier dans le domaine spatial peut également être appliquée, avec  $\vec{v}$  la fréquence spatiale :

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{\rho}, f) = \int_{\vec{v}} \vec{\mathbb{E}}(\vec{v}, z, f) e^{2i\pi \vec{v} \cdot \vec{r}} d\vec{v} = \int_{\vec{v}} \vec{\mathbb{A}}(\vec{v}, f) e^{i\alpha(\vec{v}, f)z} e^{2i\pi \vec{v} \cdot \vec{r}} d\vec{v} \quad (1.2)$$

avec  $\alpha(\vec{v}, f)$  défini par :

$$\alpha^2(\vec{v}, f) = k^2(f) - \sigma^2 \quad (1.3)$$

où  $k = \frac{2\pi n}{\lambda}$  est le vecteur d'onde,  $\lambda$  la longueur d'onde et  $\sigma = |\vec{\sigma}| = 2\pi|\vec{v}|$  la pulsation spatiale. Finalement, en combinant ces deux transformations, nous obtenons la description suivante pour le champ électrique :

$$\vec{E}(\vec{\rho}, t) = \vec{E}(\vec{r}, z, t) = \int_f \int_{\vec{v}} \vec{\mathbb{A}}(\vec{v}, f) e^{i\alpha(\vec{v}, f)z} e^{2i\pi \vec{v} \cdot \vec{r}} e^{-2i\pi f t} d\vec{v} df \quad (1.4)$$

avec  $\vec{\mathbb{A}}(\vec{v}, f)$  la composante élémentaire du champ électrique dans le domaine spatial et le domaine temporel de Fourier. Notons que le repère de la décomposition est choisi de

manière que le champ soit invariant le long de l'axe  $y$  et que toutes les discontinuités soient positionnées le long de l'axe  $z$ . La dépendance temporelle du champ est décrite par le terme  $e^{-2i\pi ft}$ . Puisque nous travaillerons toujours avec des champs monochromatiques, nous omettrons la dépendance temporelle du champ.

## 1.2.2. Réponse d'un empilement interférentiel

### 1.2.2.1. Introduction aux indices effectifs et admittances complexes

Nous considérons un composant constitué d'un empilement de  $p$  couches minces optiques déposées sur un substrat d'indice optique  $n_s$ . Le milieu incident par lequel arrive le faisceau d'illumination du composant est appelé *superstrat* et son indice de réfraction est noté  $n_0$ . Chacune des couches de l'empilement est décrite par son épaisseur  $d_j$ , du même ordre de grandeur que la longueur d'onde, et par son indice optique  $n_j$ . Tous les matériaux sont considérés linéaires, isotropes, homogènes et non chargés. L'empilement est illuminé par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda$  et sous un angle d'incidence  $\theta_0$ . Le repère spatial choisi est tel que toutes les couches sont décrites par des plans parallèles à  $(xOy)$ . Les interfaces entre les couches sont positionnées à des coordonnées  $z$  constantes.

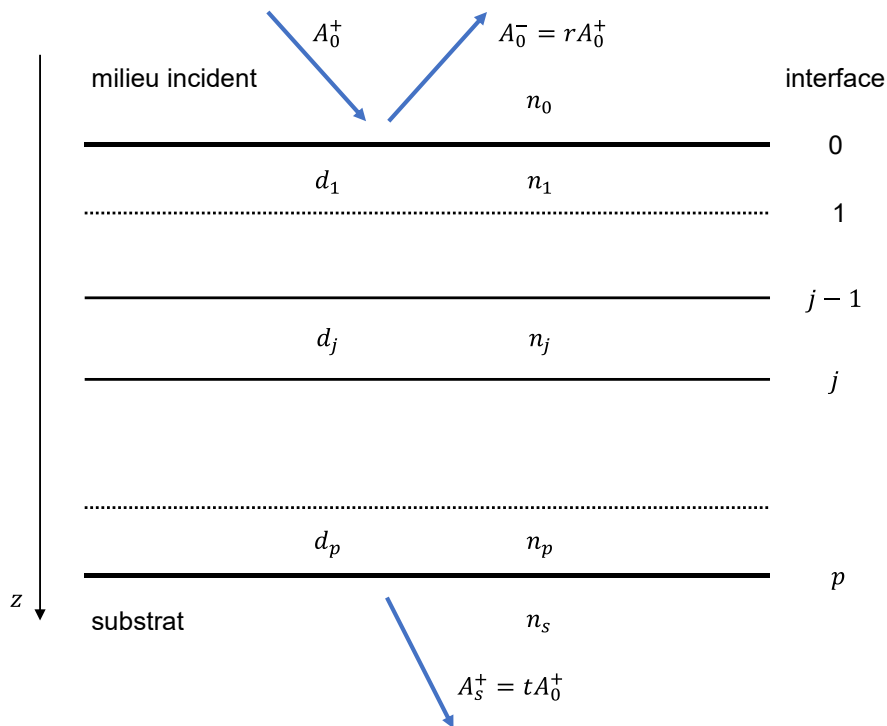


Figure 1.1 Empilement de  $p$  couches minces sur un substrat. Chaque couche possède une épaisseur  $d_j$  et un indice optique de réfraction  $n_j$ . Les interfaces entre les couches sont indicées de 1 à  $p$ .

Le champ incident dans le superstrat est associé à une onde plane progressive, décrite dans l'espace de Fourier par son champ électrique :

$$\vec{\mathbb{E}}_0(\vec{v}, z) = \vec{\mathbb{A}}_0^+ e^{i\alpha_0 z} \quad (1.5)$$

avec  $\alpha_0 = \sqrt{k_0^2 - \sigma^2}$ ,  $\sigma = k_0 \sin \theta_0$  et  $k_0 = \frac{2\pi n_0}{\lambda}$ . L'amplitude  $\vec{A}_0^+$  est considérée comme connue puisque c'est une caractéristique du champ incident. L'exposant "+" identifie la composante progressive. De la même manière, le champ dans le substrat est nécessairement progressif puisqu'il est considéré comme un milieu semi-infini et sans source :

$$\vec{E}_s(\vec{v}, z) = \vec{A}_s^+ e^{i\alpha_s z} \quad (1.6)$$

En revanche, le champ dans les couches de l'empilement est un champ stationnaire résultant de la somme d'une composante progressive (exposant "+") et d'une composante rétrograde (exposant "-"). Pour une couche  $j$  donnée :

$$\vec{E}_j(\vec{v}, z) = \vec{A}_j^+ e^{i\alpha_j z} + \vec{A}_j^- e^{-i\alpha_j z} \quad (1.7)$$

avec  $\alpha_j^2 = k_j^2 - \sigma^2$ . Nous remarquons que la pulsation spatiale  $\sigma$  est identique pour toutes les couches et caractérise la constance des variations transverses du champ. Pour des milieux transparents, c'est-à-dire dont les indices de réfraction sont réels, et en introduisant des angles  $\theta_j$  entre les directions de propagation et les normales de chaque interface, nous obtenons pour tout  $j$  :

$$\sigma = k_j \sin \theta_j = \text{constante} \Rightarrow n_j \sin \theta_j = n_0 \sin \theta_0 \quad (1.8)$$

Cette dernière relation est l'invariant de Snell-Descartes. L'utilisation de la fréquence spatiale  $v$  comme variable du problème s'impose afin d'écarter toute incompatibilité sur les angles suivant que les ondes soient planes ou évanescentes et que le milieu soit absorbant ou transparent.

Dans le cas d'une interface unique, illuminée par une onde plane et pour une incidence nulle ( $\theta_0 = 0$ ), le coefficient de réflexion  $r$  dépendant des indices de réfraction des deux milieux est :

$$r = \frac{n_0 - n_s}{n_0 + n_s} \quad (1.9)$$

Dans le cas d'une incidence non nulle ( $\theta_0 \neq 0$ ), la relation prend maintenant en compte les indices effectifs des milieux. Ces grandeurs considèrent à la fois l'angle d'incidence et la polarisation du champ incident :

$$r = \frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_s}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_s} \quad (1.10)$$

Désormais, nous considérons le cas d'une interface sur laquelle a été déposé un empilement de couches minces optiques. L'indice effectif du substrat est remplacé par une grandeur appelée *admittance complexe* et notée  $Y_0$  :

$$r = \frac{\tilde{n}_0 - Y_0}{\tilde{n}_0 + Y_0} \quad (1.11)$$

### 1.2.2.2. Définition des indices de réfraction effectifs

Considérons une onde progressive dans un milieu homogène, son champ électrique et son champ magnétique sont définis par :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{E}}^+(\vec{v}, z) = \vec{\mathbb{A}}^+(\vec{v})e^{iaz} \\ \vec{\mathbb{H}}^+(\vec{v}, z) = \vec{\mathbb{B}}^+(\vec{v})e^{iaz} \end{cases} \quad (1.12)$$

Les amplitudes des composantes tangentielles de ces champs sont liées par l'indice effectif de réfraction :

$$\vec{\mathbb{B}}_{tg}^+ = \tilde{n}\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{tg}^+ \quad (1.13)$$

La relation entre le champ électrique, le champ magnétique et le vecteur d'onde impose que le champ électrique soit contenu dans un plan perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde. Ce champ peut être décomposé dans un repère orthogonal inclus dans ce même plan. Cette décomposition caractérise deux états du champ électrique appelés *états de polarisation* : l'état TE, pour transverse électrique, et l'état TM, pour transverse magnétique. Dans l'état TE, le champ électrique est perpendiculaire au plan d'incidence ( $xOz$ ), tandis qu'il est parallèle à ce plan dans le cas TM. Les notations TE et TM sont parfois remplacées par les lettres *S* (ou *s*) pour *Senkrecht*, traduction de *perpendiculaire* en allemand, et *P* (ou *p*) pour *Parallel*.

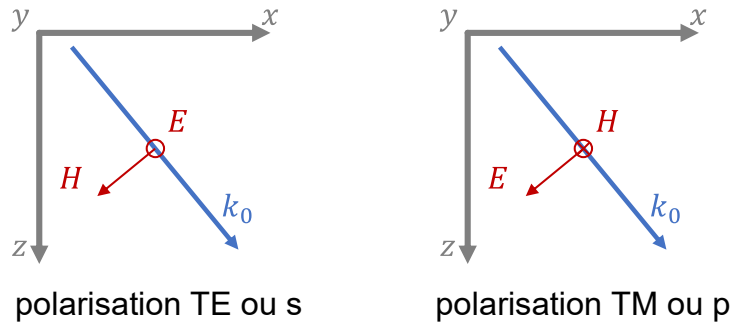


Figure 1.2 Illustration des deux modes de polarisation TE et TM. Dans l'état TE, le champ électrique  $E$  est normal au plan d'incidence. Dans le plan TM, il est inclus dans le plan d'incidence. Le vecteur d'onde  $k_0$ , le champ électrique  $E$  et le champ magnétique  $H$  forment un trièdre direct.

Finalement, une approche géométrique et électromagnétique détaillée dans la littérature nous permet de déterminer l'indice effectif d'un milieu sous illumination d'incidence  $\theta$  par :

$$\tilde{n} = \frac{1}{\eta_v \tilde{\mu}_r} \begin{cases} n \cos \theta & \text{en polarisation TE} \\ n / \cos \theta & \text{en polarisation TM} \end{cases} \quad (1.14)$$

avec  $\eta_v = \sqrt{\mu_v/\epsilon_v}$  l'impédance du vide,  $\mu_v$  la perméabilité du vide et  $\epsilon_v$  la permittivité du vide.



La méthode est identique dans le cas d'une onde rétrograde, à ceci près que la composante selon  $\vec{z}$  du vecteur d'onde change de signe et que la relation entre les composantes élémentaires est la suivante :

$$\vec{\mathbb{B}}_{tg}^- = -\tilde{n}\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{tg}^- \quad (1.15)$$

### 1.2.2.3. Définition des admittances complexes

La notion d'indice effectif peut être généralisée à celle d'admittance complexe dans le cas des champs stationnaires. Cette grandeur met elle aussi en relation les composantes tangentielles du champ électrique et du champ magnétique. À noter que seuls les champs tangentiels seront considérés par la suite. Le champ électrique stationnaire dans une couche  $j$  d'un composant multicouche est décrit par l'équation suivante :

$$\vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(\vec{\nu}, z, f)e^{2i\pi\nu x} = (\vec{\mathbb{A}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z} + \vec{\mathbb{A}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z})e^{i\sigma x} \quad (1.16)$$

avec  $\alpha_j^2 = k_j^2 - \sigma^2$  et  $k_j = \frac{2\pi n_j}{\lambda}$ . Les grandeurs  $\vec{\mathbb{H}}_j$  et  $\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_j$  sont colinéaires par définition. En conséquence, il existe bien une grandeur scalaire notée  $Y$  qui les relie.

$$\vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(\vec{\nu}, z, f) = Y_j(\vec{\nu}, z, f) [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(\vec{\nu}, z, f)] \quad (1.17)$$

En  $z = z_j$ , nous utiliserons la notation  $Y_j = Y_j(\vec{\nu}, z, f)$ . Cette grandeur est appelée *admittance complexe* du milieu d'indice  $j$ . Par construction, l'admittance complexe est l'analogie de l'indice de réfraction du milieu étudié. Cependant, la valeur de l'indice de réfraction est constante dans tout le milieu alors que celle de l'admittance dépend de la coordonnée selon  $z$ . De plus, les champs tangentiels étant continus aux interfaces, l'admittance complexe évolue elle aussi de façon continue dans tout l'empilement. De la même manière que dans le cas d'une seule interface, nous pouvons déterminer le coefficient de réflexion de la structure. À l'interface entre le superstrat et la première couche de l'empilement (interface  $j = 0$ ), la définition de l'admittance donne :

$$\vec{\mathbb{H}}_{0,tg}(\vec{\nu}, 0) = Y_0 [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{0,tg}(\vec{\nu}, 0)] \quad (1.18)$$

Cela entraîne :

$$\vec{\mathbb{B}}_{0,tg}^+ + \vec{\mathbb{B}}_{0,tg}^- = Y_0 [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^+ + \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^-] \quad (1.19)$$

Tandis que le coefficient de réflexion  $r$  est défini par :

$$\vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^- = r \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^+ \quad (1.20)$$

Nous rappelons qu'il s'agit là uniquement des composantes élémentaires tangentielles. Dans le milieu incident, les composantes élémentaires du champ électrique sont reliées à celles du champ magnétique par l'indice effectif.

$$\vec{\mathbb{B}}_{0,tg}^+ = \tilde{n}_0 [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^+] \quad ; \quad \vec{\mathbb{B}}_{0,tg}^- = -\tilde{n}_0 [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^-] \quad (1.21)$$

La combinaison des trois relations précédentes conduit à une expression pour le coefficient  $r$  :

$$\tilde{n}_0[\vec{z} \wedge \vec{\bar{A}}_{0,tg}^+] - r \tilde{n}_0[\vec{z} \wedge \vec{\bar{A}}_{0,tg}^+] = Y_0(1+r)[\vec{z} \wedge \vec{\bar{A}}_{0,tg}^+] \quad (1.22)$$

$$r = \frac{\tilde{n}_0 - Y_0}{\tilde{n}_0 + Y_0} \quad (1.23)$$

La grandeur  $Y_0$  ne dépend pas uniquement des conditions d'illumination et des propriétés de la première couche de l'empilement mais bien de toutes les couches de la structure. Il est alors nécessaire d'utiliser des formules de récurrence pour calculer les admittances de toutes ces couches. Nous pouvons toutefois faire quelques observations à ce stade : le composant se comporte en réflexion comme un substrat d'indice de réfraction  $Y_0$ . Selon la nature de l'empilement, il est possible de modifier la valeur de  $Y_0$  et ainsi de réaliser un anti-reflet en annulant cette réflexion ( $r = 0$ ) ou bien synthétiser un miroir parfait avec une admittance nulle ( $r = 1$ ) ou infinie ( $r = -1$ ). Cette analogie est cependant valable uniquement pour la réflexion et non pour la transmission puisque le coefficient de transmission  $t$  n'a pas la forme analogue de celui d'une interface simple ( $t \neq \frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + Y_0}$ ).

#### 1.2.2.4. Matrice de transfert

Les couches de l'empilement étudié sont chacune d'épaisseur  $d_j$  et d'indice de réfraction  $n_j$ . La couche indiquée  $j$  est comprise entre les interfaces  $j - 1$  et  $j$ . L'origine de l'axe  $z$  est prise à la première interface. En tout point de hauteur  $z$  comprise entre  $z_{j-1}$  et  $z_j$ , nous pouvons décrire les composantes tangentielles du champ électrique et du champ magnétique :

$$\begin{cases} \vec{\bar{E}}_{j,tg}(z) = \vec{\bar{A}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z} + \vec{\bar{A}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z} \\ \vec{\bar{H}}_{j,tg}(z) = \vec{\bar{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z} + \vec{\bar{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z} \end{cases} \quad (1.24)$$

Ceci nous conduit immédiatement aux systèmes d'équations pour des hauteurs respectives de  $z = z_{j-1}$  et  $z = z_j = z_{j-1} + d_j$ , aux interfaces  $j - 1$  et  $j$  :

$$\begin{cases} \vec{\bar{E}}_{j,tg}(z_{j-1}) = \vec{\bar{A}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_{j-1}} + \vec{\bar{A}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_{j-1}} \\ \vec{\bar{H}}_{j,tg}(z_{j-1}) = \vec{\bar{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_{j-1}} + \vec{\bar{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_{j-1}} \end{cases} \quad (1.25)$$

$$\begin{cases} \vec{\bar{E}}_{j,tg}(z_j) = \vec{\bar{A}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_j} + \vec{\bar{A}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_j} \\ \vec{\bar{H}}_{j,tg}(z_j) = \vec{\bar{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_j} + \vec{\bar{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_j} \end{cases} \quad (1.26)$$

La relation entre les composantes tangentielles et l'indice effectif, introduite au paragraphe 1.2.2.2 nous donne également :

$$\vec{\bar{B}}_{j,tg}^\pm = \pm \tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\bar{A}}_{j,tg}^\pm \quad (1.27)$$

Nous pouvons ainsi appliquer un produit vectoriel par  $\tilde{n}_j \vec{z}$  aux relations qui décrivent le champ électrique en (1.25) et en (1.26) :

$$\begin{cases} \tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_{j-1}) = \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_{j-1}} - \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_{j-1}} \\ \tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_j) = \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_j} - \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_j} \end{cases} \quad (1.28)$$

Les relations décrivant le champ magnétique sont conservées :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_{j-1}) = \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_{j-1}} + \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_{j-1}} \\ \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_j) = \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^+ e^{i\alpha_j z_j} + \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^- e^{-i\alpha_j z_j} \end{cases} \quad (1.29)$$

Nous pouvons en déduire par combinaison linéaire des relations précédentes un système de deux équations :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^+ = \frac{1}{2} (\tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_{j-1}) + \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_{j-1})) e^{-i\alpha_j z_{j-1}} \\ \vec{\mathbb{B}}_{j,tg}^- = -\frac{1}{2} (\tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_{j-1}) - \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_{j-1})) e^{i\alpha_j z_{j-1}} \end{cases} \quad (1.30)$$

Par substitution dans les secondes équations de (1.28) et (1.29), nous obtenons les relations suivantes :

$$\begin{cases} \tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_j) = \cos(\alpha_j d_j) [\tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_{j-1})] + i \sin(\alpha_j d_j) \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_{j-1}) \\ \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_j) = i \sin(\alpha_j d_j) [\tilde{n}_j \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_{j-1})] + \cos(\alpha_j d_j) \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_{j-1}) \end{cases} \quad (1.31)$$

De plus, les composantes tangentielles sont continues à l'interface  $j - 1$ , c'est-à-dire  $\vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_{j-1}) = \vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1})$  et  $\vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_{j-1}) = \vec{\mathbb{H}}_{j-1,tg}(z_{j-1})$ . Finalement, en introduisant  $\delta_j = \alpha_j d_j$ , nous pouvons utiliser un formalisme matriciel pour décrire cette dernière relation.

$$\begin{bmatrix} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_j) \\ \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_j) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \\ i \tilde{n}_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) \\ \vec{\mathbb{H}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) \end{bmatrix} \quad (1.32)$$

ou sous une autre forme :

$$\begin{bmatrix} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) \\ \vec{\mathbb{H}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) \end{bmatrix} = M_j \begin{bmatrix} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_j) \\ \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_j) \end{bmatrix} \quad (1.33)$$

avec

$$M_j = \begin{bmatrix} \cos \delta_j & -\frac{i}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \\ -i \tilde{n}_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \quad (1.34)$$

La matrice  $M_j$  est appelée *matrice de transfert* et elle est associée à la couche  $j$ . Elle permet de calculer les champs à l'interface  $j - 1$  à partir des grandeurs calculées à l'interface  $j$ . La matrice de transfert est utilisée pour calculer itérativement les champs aux interfaces en partant du substrat et en terminant par le superstrat. Le terme de phase  $\delta_j$  est sans dimension et est donné par :

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda_v} n_j d_j \cos \theta_j \quad (1.35)$$

### 1.2.2.5. Relation de récurrence entre les admittances complexes

Par définition, les admittances aux interfaces  $j - 1$  et  $j$  sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \vec{\mathbb{H}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) &= Y_{j-1} [\vec{Z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1})] \\ \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_j) &= Y_j [\vec{Z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_j)] \end{aligned} \quad (1.36)$$

En utilisant les relations (1.33) et (1.36) et en faisant le rapport des deux relations obtenues, nous pouvons établir que :

$$Y_{j-1} = \frac{Y_j \cos \delta_j - i \tilde{n}_j \sin \delta_j}{\cos \delta_j - i(Y_j / \tilde{n}_j) \sin \delta_j} \quad (1.37)$$

La relation peut aussi être inversée pour exprimer  $Y_j$  en fonction de  $Y_{j-1}$  :

$$Y_j = \frac{Y_{j-1} \cos \delta_j + i \tilde{n}_j \sin \delta_j}{\cos \delta_j + i(Y_{j-1} / \tilde{n}_j) \sin \delta_j} \quad (1.38)$$

Ces deux dernières équations donnent accès à l'admittance complexe d'une interface, en fonction de l'admittance d'une interface voisine. Mais, ces grandeurs ne sont pas constantes entre les interfaces. Pour une hauteur  $z$  dans la couche indiquée  $j$ , nous avons :

$$Y_{j-1}(z) = \frac{Y_j \cos(\alpha_j(z_j - z)) - i \tilde{n}_j \sin(\alpha_j(z_j - z))}{\cos(\alpha_j(z_j - z)) - i(Y_j / \tilde{n}_j) \sin(\alpha_j(z_j - z))} \quad (1.39)$$

La relation de récurrence doit maintenant être initialisée par une valeur d'admittance connue. Dans le cas d'une onde incidente progressive, l'admittance complexe connue est celle du substrat puisque c'est le seul milieu où l'onde est uniquement progressive, ce qui entraîne  $Y_p = \tilde{n}_s$ . Cette initialisation permet bien de remonter à l'admittance  $Y_0$  du superstrat en partant du substrat.

### 1.2.2.6. Coefficients de transmission et réflexion

L'admittance complexe du superstrat est utilisée pour le calcul du coefficient de réflexion de l'empilement :

$$r = \frac{\tilde{n}_0 - Y_0}{\tilde{n}_0 + Y_0} \quad (1.40)$$

Cette dernière relation illustre également la conclusion du paragraphe 1.2.2.3 : l'admittance  $Y_0$  ne dépend pas que des propriétés de la première couche mais bien de toutes les couches du composant.

Des formules similaires peuvent être établies dans le cas d'une illumination par la face arrière du multicouche : le substrat devient alors le milieu d'incidence. Dans cette configuration, le champ dans le superstrat est nécessairement rétrograde car l'orientation des axes reste inchangée. La récurrence est cette fois-ci initialisée par la valeur d'indice effectif du superstrat  $Y'_0 = -\tilde{n}_0$ . Afin d'éviter toute confusion, une apostrophe est ajoutée au symbole de l'admittance complexe.

Il nous reste maintenant à déterminer le coefficient de transmission. La matrice de passage (1.33) fournit une relation entre les champs tangentiels électrique et magnétique :

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) = \cos \delta_j [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}](z_j) - \frac{i}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \vec{\mathbb{H}}_{j,tg}(z_j) \quad (1.41)$$

Nous pouvons en déduire :

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) = \cos \delta_j [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}](z_j) - i \frac{Y_j}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}](z_j) \quad (1.42)$$

et

$$\vec{\mathbb{E}}_{j-1,tg}(z_{j-1}) = \left[ \cos \delta_j - i \frac{Y_j}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \right] \vec{\mathbb{E}}_{j,tg}(z_j) \quad (1.43)$$

Cette relation de récurrence sur le champ électrique est initialisée à l'interface supérieure :

$$\vec{\mathbb{E}}_{0,tg}(z_0) = \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^+ + \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^- = (1 + r) \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^+ \quad (1.44)$$

Ceci donne immédiatement :

$$\vec{\mathbb{E}}_{0,tg}(z_0) = \prod_{j=1}^p \left[ \cos \delta_j - i \frac{Y_j}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \right] \vec{\mathbb{E}}_{p,tg}(z_p) \quad (1.45)$$

avec  $\vec{\mathbb{E}}_{p,tg}(z_p) = \vec{\mathbb{E}}_{s,tg}(z_p) = \vec{\mathbb{A}}_{s,tg}^+ e^{i\alpha_s z_p}$ , le champ dans le substrat. Nous définissons finalement le coefficient de transmission  $t$  par :

$$\vec{\mathbb{E}}_{s,tg}(z_p) = t \vec{\mathbb{A}}_{0,tg}^+ \quad (1.46)$$

d'où,

$$(1+r)\vec{A}_{0,tg}^+ = \prod_{j=1}^p \left[ \cos \delta_j - i \frac{Y_j}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \right] t\vec{A}_{0,tg}^+ \quad (1.47)$$

et ainsi,

$$t = \frac{1+r}{\prod_{j=1}^p \left[ \cos \delta_j - i \frac{Y_j}{\tilde{n}_j} \sin \delta_j \right]} \quad (1.48)$$

Le calcul du flux transmis et du flux réfléchi présenté dans [12] conduit aux expressions suivantes pour les coefficients de réflexion et transmission en intensité :

$$R = |r|^2 \quad (1.49)$$

$$T = \frac{\Re(\tilde{n}_s)}{\Re(\tilde{n}_0)} |t|^2 \quad (1.50)$$

Tous les matériaux considérés ici sont transparents donc d'absorption nulle ou négligeable. Des calculs complémentaires permettent de déterminer cette valeur d'absorbance  $A$ . Dans le cadre du modèle des propriétés spéculaires, la conservation d'énergie impose que  $R + T + A = 1$ . Ce modèle ne prend pas en compte les propriétés de diffusion des composants couches minces. Ces propriétés seront présentées dans la section 1.4 sur le modèle électromagnétique de la diffusion.

Cette modélisation des réponses spectrales spéculaires des composants interférentiels sera utilisée à de nombreuses reprises par la suite. Une implémentation par pseudo-code est proposée au paragraphe 1.6. Ce modèle, dit des *admittances complexes*, est également utilisé pour la détermination des propriétés de diffusion des couches minces optiques.

### 1.3. Grandeurs photométriques de la diffusion

#### 1.3.1. BSDF et ARS

Considérons une interface légèrement rugueuse séparant deux milieux d'indices optiques différents. Lorsque cette interface est illuminée, la lumière est en partie réfléchie, transmise et absorbée. Une quantité plus faible mais non négligeable est également diffusée dans tout l'espace. La répartition de cette lumière diffusée est définie angulairement mais aussi spectralement. Ce phénomène de diffusion est lié à de nombreux paramètres : l'angle d'incidence, l'angle d'observation, les longueurs d'onde ou encore la rugosité.

Cette répartition de la lumière diffusée est décrite par une fonction de distribution bidirectionnelle du coefficient de luminance. Cette fonction, généralement appelée BSDF pour *Bidirectional Scattering Distribution Function*, a été introduite en 1977 par Nicodemus [13] sous la forme suivante :

$$f_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s; E_i) = \frac{dL_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s; E_i)}{dE_i(\theta_i, \phi_i)} \quad (1.51)$$

La fonction  $f_s$  symbolise la BSDF. La fonction  $L_s$  est la luminance d'un élément de surface  $dS$  dans une direction d'observation  $(\theta_s, \phi_s)$  donnée et exprimée en coordonnées sphériques (voir Figure 1.3). Enfin, la fonction  $E_i$  représente l'éclairement de ce même élément de surface sous une direction d'illumination définie par la direction  $(\theta_i, \phi_i)$ . L'indice  $s$  désigne les grandeurs diffusées (*scattered* en anglais) et l'indice  $i$  désigne les grandeurs incidentes. La BSDF est ainsi la variation de la luminance en fonction de l'éclairement. La luminance étant un flux par unité de surface et d'angle solide, son unité est en  $W.m^{-2}.sr^{-1}$ . L'éclairement est exprimé comme un flux par unité de surface  $W.m^{-2}$ . En conséquence, la BSDF est l'inverse d'un angle solide, c'est-à-dire en  $sr^{-1}$ . La relation est établie pour une longueur d'onde donnée mais la grandeur BSDF est également spectralement définie.

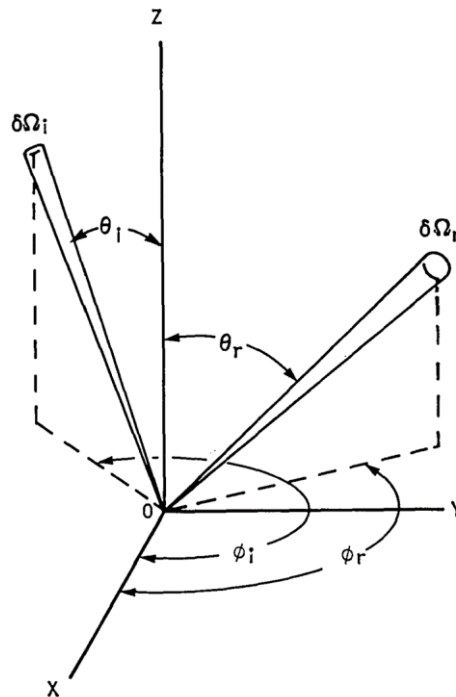


Figure 1.3 Représentation schématique des directions d'illumination incidente et de diffusion, ainsi que les angles  $\phi$  et  $\theta$  qui les définissent. [14]

Le flux incident sur un élément de surface  $dS$ , au voisinage de la direction d'incidence est décrit par :

$$d\Phi_i = L_i \cos \theta_i d\Omega_i dS = dE_i dS \quad (1.52)$$

avec  $d\Omega_i$  l'angle solide sous lequel l'élément de surface  $dS$  est éclairé. La fonction de distribution peut alors être réécrite comme un rapport des luminances, soit :

$$f_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s) = \frac{dL_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s; E_i)}{L_i(\theta_i, \phi_i) \cos \theta_i d\Omega_i} \quad (1.53)$$

Lorsque la BSDF est uniquement étudiée dans le demi-espace réfléchi, elle est appelée BRDF pour *Bidirectionnal Reflectance Distribution Function*. Dans le demi-espace transmis, elle est nommée BTDF pour *Bidirectionnal Transmittance Distribution Function*.

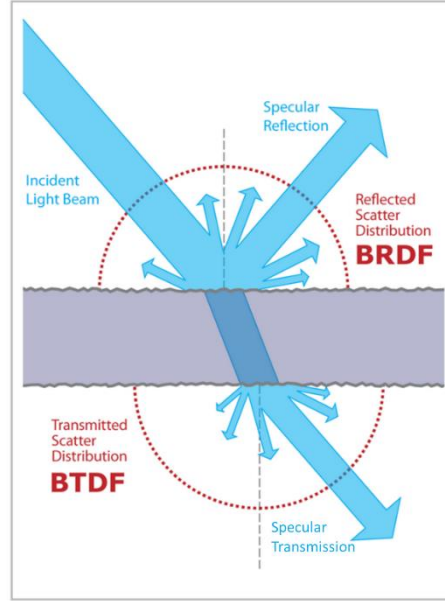


Figure 1.4 Fonctions BSDF, BRDF et BTDF (Crédit : Jurohi - CC BY-SA 3.0, image modifiée).

Il existe une autre grandeur pour décrire la répartition spatiale de la diffusion : la fonction ARS, pour *Angle Resolved Scattering*. Cette fonction est liée à la BSDF par :

$$ARS = BSDF \cos \theta_s \quad (1.54)$$

Cette relation directe justifie que la fonction ARS soit parfois appelée  $BSDF \cos \theta$ . En reprenant les expressions de la BSDF, nous pouvons écrire :

$$ARS(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s) = \frac{dL_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s; E_i)}{L_i(\theta_i, \phi_i) \cos \theta_i d\Omega_i} \cos \theta_s \quad (1.55)$$

Comme pour la BSDF, nous pouvons réécrire cette dernière relation en faisant intervenir l'élément de surface  $dS$  et l'angle solide d'éclairement  $d\Omega_i$  :

$$ARS(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s) = \frac{dL_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s; E_i) \cos \theta_s dS d\Omega_s}{L_i(\theta_i, \phi_i) \cos \theta_i d\Omega_i dS d\Omega_s} = \frac{dP_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s)}{P_i(\theta_i, \phi_i) d\Omega_s} \quad (1.56)$$

Cette dernière expression montre que l'ARS décrit le rapport entre une puissance diffusée  $P_s$  à travers un angle solide  $\Omega_s$ , et une puissance d'éclairement incident  $P_i$ .

### 1.3.2. Diffuseur lambertien

Un diffuseur lambertien est une surface physique dont la BRDF est égale au rapport entre une constante  $\rho$ , appelée *albédo*, et le nombre  $\pi$ . L'expression de la luminance d'un diffuseur lambertien est la suivante :



$$dL_s(\theta_i, \phi_i; \theta_s, \phi_s; E_i) = \frac{\rho}{\pi} dE_i(\theta_i, \phi_i) \quad (1.57)$$

La grandeur albédo est constante dans cette expression mais elle dépend de la longueur d'onde. La puissance totale diffusée dans l'espace par un élément de surface  $dS$  lambertien et soumis à un éclairage  $dE_i$  est :

$$d\Phi_s = \int \int dL_s \cos \theta_s d\Omega_s dS = \frac{\rho}{\pi} dE_i dS \int_0^{2\pi} d\phi_s \int_0^{\pi/2} \sin \theta_s \cos \theta_s d\theta_s = \rho d\Phi_i \quad (1.58)$$

Ceci nous permet également de déterminer une expression pour l'albédo :

$$\rho = \frac{d\Phi_s}{d\Phi_i} \quad (1.59)$$

Cette grandeur est l'équivalent d'un coefficient de réflexion puisqu'elle décrit la variation du flux diffusé en fonction du flux incident. L'utilisation d'un diffuseur lambertien est courante pour la mesure des propriétés de diffusion. Un tel échantillon sert souvent d'étalon puisqu'il diffuse toute lumière incidente de façon homogène et achromatique dans l'espace.

## 1.4. Modèle électromagnétique de la diffusion par une interface

### 1.4.1. Introduction au modèle électromagnétique

Le formalisme classique des couches minces optiques, exposé au paragraphe 1.2, considère uniquement des substrats et interfaces parfaitement lisses. Cette hypothèse est nécessaire pour simplifier le calcul des champs tangentiels aux interfaces et établir le formalisme des admittances complexes. Il permet de décrire les propriétés optiques des composants couches minces : les champs, les coefficients de réflexion et transmission en amplitude (respectivement  $r$  et  $t$ ) et en intensité (respectivement  $R$  et  $T$ ), ainsi que l'absorption  $A$ . Le principe de conservation de l'énergie impose que les intensités vérifient la relation suivante :

$$R + T + A = 1 \quad (1.60)$$

Bien que cette description soit généralement suffisante, elle ne décrit pas complètement la réalité. En effet, l'hypothèse du plan lisse idéal n'est pas vérifiée en pratique, au moins dans le cas des substrats. La surface des substrats est créée par polissage et malgré les progrès importants dans le domaine, tout substrat possède une certaine rugosité non négligeable. Cette rugosité de surface peut être répliquée aux couches minces qui constituent la structure interférentielle. Lorsqu'une surface rugueuse est éclairée par une onde plane, une partie des composantes réfléchies et transmises sont de nature diffuse. Les vecteurs d'onde de ces composantes diffuses sont différents des vecteurs d'onde des composantes spéculaires de réflexion et de transmission. Notons  $D$  l'énergie diffuse, la relation de conservation de l'énergie est maintenant la suivante :

$$R + T + A + D = 1 \quad (1.61)$$

Considérant la nature des matériaux diélectriques et la qualité des procédés de dépôt, nous négligerons la contribution de l'absorption  $A$ . La quantité d'énergie absorbée est dictée par la composante imaginaire des indices optiques des matériaux. Ces valeurs imaginaires effectives sont aujourd'hui de l'ordre de  $10^{-6}$  pour les matériaux diélectriques courants, ce qui est largement négligeable en règle générale. En revanche, la prise en compte de l'énergie diffusée dans le bilan reste primordiale pour contrôler les performances extrêmes des filtres interférentiels. Au-delà de la simple perte énergétique engendrée, la diffusion lumineuse peut affecter de manière critique des systèmes optiques de pointe.

La mission Microcarb portée par le CNES est un exemple de système d'instrumentation optique utilisant des filtres interférentiels pour une application d'observation spatiale. Le satellite devrait être opérationnel en 2021 et mesurera la répartition du dioxyde de carbone dans l'atmosphère. Son instrument principal possède quatre voies d'acquisition spectrale, chacune étant générée par un filtre interférentiel passe-bande. Par souci de compacité, les signaux sont tous collectés par une unique matrice de détection [15,16], comme illustré à la Figure 1.5. La lumière diffusée par l'un des filtres interférentiels pourrait générer de la diaphotie spectrale (*crosstalk*) si l'intensité diffusée venait illuminer la zone de détection d'une bande voisine. Pour éviter ces sources parasites, les zones de détection sont séparées par des bandes non utilisées sur la matrice de détection. Afin de diminuer davantage la taille du dispositif, il serait intéressant de réduire la largeur de ces zones inactives, cela impliquerait de maîtriser la diffusion des bandes spectrales.

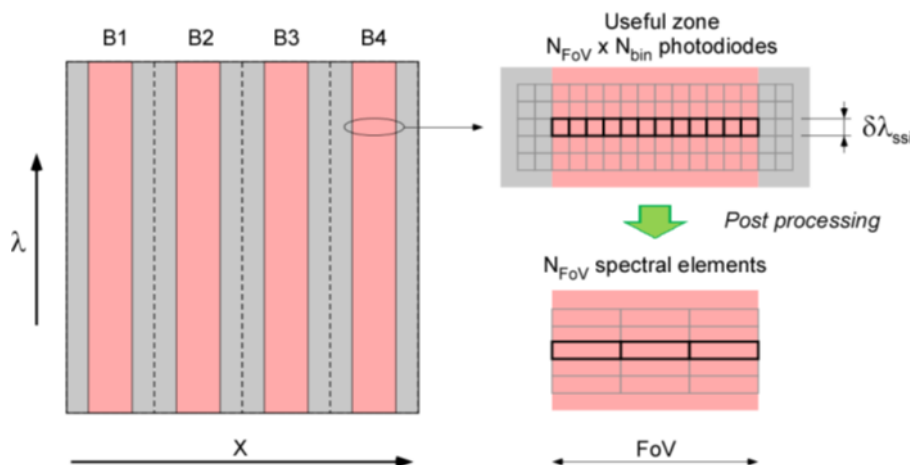


Figure 1.5 Disposition des voies spectrales B1 à B4 (en rose) devant la matrice de détection de l'instrument Microcarb. Les différentes contributions spectrales sont étalées verticalement sur chacune des voies. Les bandes grises sont inutilisées. [16]

Les paragraphes suivants introduisent un modèle électromagnétique de la lumière diffusée, dans le but d'évaluer l'énergie diffusée  $D$  mais aussi de décrire précisément le comportement spectral et angulaire des contributions diffuses. Dans un premier temps,

nous présenterons le cas de la diffusion par une simple interface rugueuse entre deux milieux d'indices optiques différents. Dans un second temps, ces résultats seront étendus au cas d'un multicouche comportant plusieurs interfaces rugueuses.

### 1.4.2. Introduction à la diffusion par une interface

Considérons une interface rugueuse séparant deux milieux semi-infinis désignés par des indices respectifs 0 et 1. L'interface possède une topologie  $h$  et son plan moyen est de coordonnée nulle sur l'axe  $z$  dans un repère cartésien, de manière que l'interface soit décrite par la relation  $z - h(x, y) = 0$ . Les milieux semi-infinis sont homogènes, non magnétiques ( $\mu_r = 1$ ), non chargés et linéaires. L'interface est illuminée par une onde plane. Nous cherchons à déterminer ce qu'il advient des vecteurs d'onde diffusés.

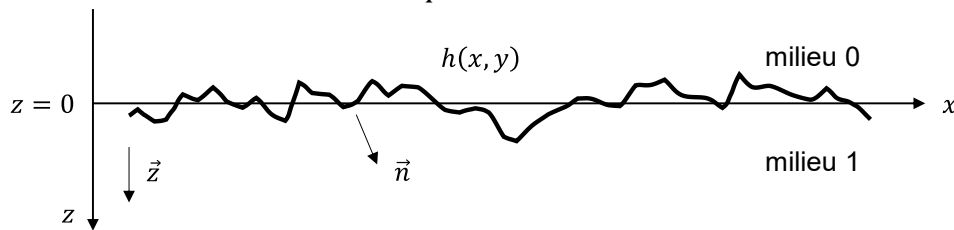


Figure 1.6 Interface rugueuse entre deux milieux 0 et 1 vue dans le plan  $(xOz)$ .

Plusieurs hypothèses sont formulées pour assurer la validité du modèle :

- Premièrement, la rugosité est négligeable devant la longueur d'onde ( $|h| \ll \lambda$ ) et les pentes locales sont elles aussi négligeables ( $|\mathbf{grad} h| \ll 1$ ). Cette hypothèse est vérifiée en pratique et correspond aux caractéristiques des substrats utilisés pour la fabrication des composants interférentiels. Comme cela sera expliqué par la suite, la rugosité et les pentes considérées doivent être associées à des fréquences spatiales pour garantir leur validité. Rugosité et pentes seront considérées au premier ordre ;
- Deuxièmement, la diffusion est toujours négligeable devant la réponse spéculaire. Cette condition est vérifiée pour des faibles rugosités ;
- Troisièmement, les variations locales de diffusion au plus proche de la surface (pour  $|z| < |h|$ ) sont négligées.

Pour décrire les conditions limites à l'interface, nous avons besoin de déterminer les composantes normales à la surface. Notons  $\vec{n}$  le vecteur normal, calculé à partir du gradient de l'équation de la surface et normalisé :

$$\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial y}\right)^2}} \begin{bmatrix} -\frac{\partial h}{\partial x} \\ -\frac{\partial h}{\partial y} \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \vec{n} = \frac{\vec{z} - \mathbf{grad} h}{\sqrt{1 + |\mathbf{grad} h|^2}} \quad (1.62)$$

avec  $\vec{z}$  le vecteur unitaire associé à l'axe  $z$ . Les équations de Maxwell en régime harmonique dans les deux milieux indicés 0 et 1 ( $j = 0, 1$ ), supposés homogènes, isotropes et linéaires, sont les suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{rot} \vec{\mathcal{E}}_j(\vec{\rho}, f) = i\omega\tilde{\mu}_j(f)\vec{\mathcal{H}}_j(\vec{\rho}, f) \\ \mathbf{rot} \vec{\mathcal{H}}_j(\vec{\rho}, f) = -i\omega\tilde{\epsilon}_j(f)\vec{\mathcal{E}}_j(\vec{\rho}, f) \\ \operatorname{div}[\tilde{\epsilon}_j(f)\vec{\mathcal{E}}_j(\vec{\rho}, f)] = 0 \\ \operatorname{div}[\tilde{\mu}_j(f)\vec{\mathcal{H}}_j(\vec{\rho}, f)] = 0 \end{cases} \quad \text{avec } \vec{\rho} = (\vec{r}, z) = (x, y, z) \quad (1.63)$$

Ces équations sont valides au sens des fonctions, dans les demi-espaces et en dehors de l'interface, c'est-à-dire pour  $z < h(x, y)$  dans le milieu 0 et pour  $z > h(x, y)$  dans le milieu 1. Elles doivent être complétées par les conditions aux limites à l'interface, pour  $z = h(x, y) = h(\vec{r})$ . Soit, pour les champs tangentiels :

$$\begin{cases} \vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_1[\vec{r}, h(\vec{r}), f] - \vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_0[\vec{r}, h(\vec{r}), f] = \vec{0} \\ \vec{n} \wedge \vec{\mathcal{H}}_1[\vec{r}, h(\vec{r}), f] - \vec{n} \wedge \vec{\mathcal{H}}_0[\vec{r}, h(\vec{r}), f] = \vec{0} \end{cases} \quad (1.64)$$

et pour les champs normaux :

$$\begin{cases} \tilde{\epsilon}_1(f)\{\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{E}}_1[\vec{r}, h(\vec{r}), f]\} - \tilde{\epsilon}_0(f)\{\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{E}}_0[\vec{r}, h(\vec{r}), f]\} = 0 \\ \tilde{\mu}_1(f)\{\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{H}}_1[\vec{r}, h(\vec{r}), f]\} - \tilde{\mu}_0(f)\{\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{H}}_0[\vec{r}, h(\vec{r}), f]\} = 0 \end{cases} \quad (1.65)$$

Par la suite, nous nous intéresserons uniquement aux composantes des champs à la fréquence  $f$  et nous omettrons donc de mentionner  $f$  dans les différentes équations. Ceci demeure sans conséquence puisque nous restons dans le cas de la diffusion *élastique* (il n'y a pas d'énergie absorbée dans le processus) et sans changement de fréquence car le milieu est linéaire. Nous pouvons maintenant décrire le champ  $\vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, z)$  dans le milieu incident 0 comme la somme d'un champ idéal indicé  $e$  et d'un champ diffusé indicé  $d$ , généré par les irrégularités de l'interface à la même hauteur et dans le même milieu. Pour  $z < h(\vec{r})$ , nous avons :

$$\vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, z) = \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, z) + \vec{\mathcal{E}}_{0,d}(\vec{r}, z) \quad (1.66)$$

Le champ idéal  $\vec{\mathcal{E}}_{0,e}$  étant obtenu lorsque l'interface est parfaitement lisse, il est déterminé par le formalisme des admittances complexes si les conditions d'illumination et les matériaux sont connus. Le champ diffusé  $\vec{\mathcal{E}}_{0,d}$  peut être considéré comme une perturbation du champ idéal, il est généré par la rugosité et est représenté par des courants de surface électriques et magnétiques. Considérant la qualité des surfaces rugueuses, cette perturbation est du premier ordre. Un développement limité de la quantité  $\vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, h)$ , au voisinage de  $h = 0$  et au premier ordre, donne :

$$\vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, h) = \vec{n} \wedge \left\{ \vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, 0) + h \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_0}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} \right\} \quad (1.67)$$

En utilisant les équations (1.62) et (1.66), nous obtenons :

$$\vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, h) = \frac{\vec{z} - \mathbf{grad} h}{\sqrt{1 + |\mathbf{grad} h|^2}} \wedge \left\{ \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0) + \vec{\mathcal{E}}_{0,d}(\vec{r}, 0) + h \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,d}}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} \right\} \quad (1.68)$$

Puisque nous nous limitons au premier ordre, les éléments d'ordre 2 sont négligés et la formule réécrite est la suivante pour le milieu 0 :

$$\vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, h) = \vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0) + \vec{\mathcal{E}}_{0,d}(\vec{r}, 0)] + h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] - \mathbf{grad} h \wedge \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0) \quad (1.69)$$

De la même manière, dans le milieu 1 :

$$\vec{n} \wedge \vec{\mathcal{E}}_1(\vec{r}, h) = \vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) + \vec{\mathcal{E}}_{1,d}(\vec{r}, 0)] + h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} \right] - \mathbf{grad} h \wedge \vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) \quad (1.70)$$

Nous pouvons maintenant réécrire la condition de passage des champs tangents (1.64) au premier ordre en soustrayant les deux relations précédentes :

$$\begin{aligned} \vec{n} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_1(\vec{r}, h) - \vec{\mathcal{E}}_0(\vec{r}, h)] &= \vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] + \vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,d}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,d}(\vec{r}, 0)] \\ &+ h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] - \mathbf{grad} h \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] \end{aligned} \quad (1.71)$$

La relation de passage pour les champs idéaux tangents (1.64) montre que le terme de gauche de cette relation est nul. Nous pouvons ainsi en déduire la relation de passage pour le champ électrique diffusé en  $(\vec{r}, 0)$  :

$$\vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,d} - \vec{\mathcal{E}}_{0,d}] = (\mathbf{grad} h - \vec{z}) \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e} - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}] - h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] \quad (1.72)$$

Dans les deux milieux, le champ idéal satisfait les mêmes équations de Maxwell que le champ réel mais pour un vecteur normal  $\vec{z}$  indépendant de la position  $(x, y)$ . Les composantes tangentes des champs idéaux sont :

$$\begin{cases} \vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] = \vec{0} \\ \vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{H}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{H}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] = \vec{0} \end{cases} \quad (1.73)$$

Tandis que les composantes normales des champs idéaux sont :

$$\begin{cases} \vec{z} \cdot [\tilde{\epsilon}_1 \vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \tilde{\epsilon}_0 \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] = 0 \\ \vec{z} \cdot [\tilde{\mu}_1 \vec{\mathcal{H}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \tilde{\mu}_0 \vec{\mathcal{H}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] = 0 \end{cases} \quad (1.74)$$

La continuité des champs tangentiels modifie la relation de passage du champ électrique (1.72), elle devient alors :

$$\vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,d} - \vec{\mathcal{E}}_{0,d}] = \mathbf{grad} h \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e} - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}] - h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] \quad (1.75)$$

De même, un calcul similaire pour le champ magnétique conduit à la relation de passage suivante :

$$\vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{H}}_{1,d} - \vec{\mathcal{H}}_{0,d}] = \mathbf{grad} h \wedge [\vec{\mathcal{H}}_{1,e} - \vec{\mathcal{H}}_{0,e}] - h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right] \quad (1.76)$$

Rappelons que les milieux sont non magnétiques ( $\tilde{\mu}_1 = \tilde{\mu}_0 = \mu_v$ ), les champs magnétiques idéaux tangentiels et normaux sont continus et l'équation précédente est simplifiée :

$$\vec{z} \wedge [\vec{\mathcal{H}}_{1,d} - \vec{\mathcal{H}}_{0,d}] = -h \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right] \quad (1.77)$$

Revenons à la relation de passage des champs normaux (1.65), nous pouvons la développer de la même manière au premier ordre et aboutir aux formulations respectives du champ électrique et du champ magnétique :

$$\vec{z} \cdot [\tilde{\epsilon}_1 \vec{\mathcal{E}}_{1,d} - \tilde{\epsilon}_0 \vec{\mathcal{E}}_{0,d}] = \mathbf{grad} h \cdot [\tilde{\epsilon}_1 \vec{\mathcal{E}}_{1,e} - \tilde{\epsilon}_0 \vec{\mathcal{E}}_{0,e}] - h \vec{z} \cdot \left[ \tilde{\epsilon}_1 \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \tilde{\epsilon}_0 \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] \quad (1.78)$$

$$\vec{z} \cdot [\vec{\mathcal{H}}_{1,d} - \vec{\mathcal{H}}_{0,d}] = -h \vec{z} \cdot \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right] \quad (1.79)$$

### 1.4.3. Équivalence rugosité-courant

Dans chacun des deux milieux et en se plaçant loin de la surface ( $|z| > |h|$ ), le champ diffusé satisfait les mêmes équations de Maxwell que le champ réel et le champ idéal. Nous avons aussi fait l'hypothèse que les variations du champ diffusé sont nulles au voisinage de l'interface, nous pouvons donc nous assurer de la définition totale du champ diffusé dans la région  $z < 0$  (milieu 0) et dans la région  $z > 0$  (milieu 1). Il ne reste plus qu'à connaître les discontinuités à l'interface pour compléter la définition du champ. Ces discontinuités ont été établies pour une hauteur  $z = 0$  par rapport à une surface de normale constante. Le champ diffusé satisfait les mêmes relations que le champ idéal au sens des fonctions. Ils possèdent tous deux des discontinuités en  $z = 0$  mais la description de ces discontinuités est différente. La discontinuité du champ diffusé est décrite par des courants électriques et magnétiques sur une surface parfaitement plane. Nous transformons les relations de Maxwell au sens des distributions :

$$\begin{cases} \mathbf{rot} \vec{\mathcal{E}}_d(\vec{\rho}, f) = i\omega \tilde{\mu}(f) \vec{\mathcal{H}}_d(\vec{\rho}, f) + \vec{\mathcal{M}} \delta(z) \\ \mathbf{rot} \vec{\mathcal{H}}_d(\vec{\rho}, f) = -i\omega \tilde{\epsilon}(f) \vec{\mathcal{E}}_d(\vec{\rho}, f) + \vec{\mathcal{J}} \delta(z) \\ \mathit{div} [\tilde{\epsilon}(f) \vec{\mathcal{E}}_d(\vec{\rho}, f)] = \mathcal{Q} \delta(z) \\ \mathit{div} [\tilde{\mu}(f) \vec{\mathcal{H}}_d(\vec{\rho}, f)] = \mathcal{P} \delta(z) \end{cases} \quad (1.80)$$

avec  $\delta(z)$  la distribution de Dirac centrée sur  $z = 0$ , à l'interface parfaitement plane entre les deux milieux. Les courants et charges électriques ( $\vec{\mathcal{J}}$  et  $\mathcal{Q}$ ) et magnétiques ( $\vec{\mathcal{M}}$  et  $\mathcal{P}$ ) n'ont d'effet que lorsque  $z = 0$ . Ils sont définis de la manière suivante :

$$\begin{cases} \vec{\mathcal{M}} = \mathbf{grad} h \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e} - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}] - h\vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] \\ \vec{\mathcal{J}} = -h\vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right] \end{cases} \quad (1.81)$$

tandis que les charges  $Q$  et  $\mathcal{P}$  sont données par :

$$\begin{cases} Q = \mathbf{grad} h \cdot [\tilde{\epsilon}_1 \vec{\mathcal{E}}_{1,e} - \tilde{\epsilon}_0 \vec{\mathcal{E}}_{0,e}] - h\vec{z} \cdot \left[ \tilde{\epsilon}_1 \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \tilde{\epsilon}_0 \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right] \\ \mathcal{P} = -h\vec{z} \cdot \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right] \end{cases} \quad (1.82)$$

Finalement, ces dernières équations montrent que les champs rayonnés par une surface rugueuse sont identiques à ceux qui le sont par une surface parfaitement plane mais présentant des courants et charges fictifs, électriques et magnétiques. Ces sources fictives dépendent de la topographie de la surface  $h$  et des champs idéaux ( $\vec{\mathcal{E}}_{j,e}$  et  $\vec{\mathcal{H}}_{j,e}$ ), aussi appelés champ d'excitation, d'où l'indice  $e$ .

#### 1.4.4. Composantes élémentaires du champ diffusé

Les champs diffusés vérifiant les équations de Maxwell établies en (1.80) sont chacun composés de paquets d'onde répondant à l'équation d'Helmholtz dans les milieux 0 et 1 :

$$\Delta \vec{\mathcal{E}}_{j,d}(\vec{\rho}) + k_j^2 \vec{\mathcal{E}}_{j,d}(\vec{\rho}) = \vec{0} \quad \text{avec} \quad k_j^2 = \omega^2 \mu_v \tilde{\epsilon}_j \quad \text{et} \quad j = 0,1 \quad (1.83)$$

Les solutions de cette équation sont la superposition d'une onde progressive et d'une onde rétrograde, de la forme :

$$\vec{\mathcal{E}}_{j,d}(\vec{\rho}) = \vec{\mathcal{E}}_{j,d}(\vec{r}, z) = \int_{\vec{v}_d} \vec{\mathbb{E}}_{j,d}(\vec{v}_d, z) e^{2i\pi \vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2 \vec{v}_d \quad (1.84)$$

avec

$$\begin{aligned} \vec{\mathbb{E}}_{j,d}(\vec{v}_d, z) &= \vec{\mathbb{A}}_{j,d}^+(\vec{v}_d) e^{i\alpha_j^d z} + \vec{\mathbb{A}}_{j,d}^-(\vec{v}_d) e^{-i\alpha_j^d z} \\ \text{où} \quad (\alpha_j^d)^2 &= k_j^2 - \sigma_d^2 = k_j^2 - 4\pi^2 v_d^2 \end{aligned} \quad (1.85)$$

Plaçons-nous dans le cas particulier d'une seule interface entre deux milieux semi-infinis, avec un champ d'excitation se propageant dans le milieu 0. Les ondes diffusées sont nécessairement rétrogrades dans le milieu 0 et progressives dans le milieu 1. Le champ électrique et le champ magnétique dans les milieux 0 et 1 sont respectivement :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{E}}_{0,d}(\vec{v}_d, z) = \vec{\mathbb{A}}_{0,d}^-(\vec{v}_d) e^{-i\alpha_0^d z} \\ \vec{\mathbb{E}}_{1,d}(\vec{v}_d, z) = \vec{\mathbb{A}}_{1,d}^+(\vec{v}_d) e^{i\alpha_1^d z} \end{cases} \quad (1.86)$$

$$\begin{cases} \overline{\mathbb{H}}_{0,d}(\vec{v}_d, z) = \overline{\mathbb{B}}_{0,d}^-(\vec{v}_d) e^{-i\alpha_0^d z} \\ \overline{\mathbb{H}}_{1,d}(\vec{v}_d, z) = \overline{\mathbb{B}}_{1,d}^+(\vec{v}_d) e^{i\alpha_1^d z} \end{cases} \quad (1.87)$$

Pour obtenir une expression des composantes élémentaires des champs diffusés, nous considérons les relations qui définissent les composantes propagatives des paquets d'onde (1.86) et (1.87) mais également les conditions aux limites relatives aux composantes tangentielles de ces mêmes champs (1.75) et (1.77). Puisque les relations (1.86) et (1.87) sont exprimées dans l'espace de Fourier, il nous faut également appliquer des transformées de Fourier aux relations (1.75) et (1.77). Ainsi, les composantes élémentaires du champ électrique et du champ magnétique sont respectivement :

$$\vec{z} \wedge [\overline{\mathbb{A}}_{1,d}^+(\vec{v}_d) - \overline{\mathbb{A}}_{0,d}^-(\vec{v}_d)] = \overline{\mathbb{M}}(\vec{v}_d) \quad (1.88)$$

$$\vec{z} \wedge [\overline{\mathbb{B}}_{1,d}^+(\vec{v}_d) - \overline{\mathbb{B}}_{0,d}^-(\vec{v}_d)] = \overline{\mathbb{J}}(\vec{v}_d) \quad (1.89)$$

Dans ces relations,  $\overline{\mathbb{M}}$  et  $\overline{\mathbb{J}}$  représentent les transformées de Fourier à deux dimensions des grandeurs  $\overline{\mathcal{M}}$  et  $\overline{\mathcal{J}}$ , c'est-à-dire :

$$\overline{\mathbb{M}}(\vec{v}_d) = \int_{\vec{r}} \overline{\mathcal{M}}(\vec{r}) e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \quad \text{et} \quad \overline{\mathbb{J}}(\vec{v}_d) = \int_{\vec{r}} \overline{\mathcal{J}}(\vec{r}) e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \quad (1.90)$$

Dans l'équation (1.89), nous pouvons remplacer les champs  $\overline{\mathbb{B}}_{j,d}^{\pm}$  par leurs composantes tangentielles  $\overline{\mathbb{B}}_{j,d}^{T\pm}$ . Ces dernières sont elles-mêmes exprimées en fonction des coefficients  $\overline{\mathbb{A}}_{j,d}^{T\pm}$  avec la définition des indices effectifs  $\tilde{n}_j$ , selon l'expression générique déjà utilisée à la section 1.2 :

$$\overline{\mathbb{B}}_{j,d}^{T\pm} = \pm \tilde{n}_j^d (\vec{z} \wedge \overline{\mathbb{A}}_{j,d}^{T\pm}) \quad (1.91)$$

où l'indice effectif  $\tilde{n}_j$  est décrit par :

$$\tilde{n}_j^d = \frac{1}{\eta_v \mu_r} \begin{cases} n_j \alpha_j^d / k_j & \text{en polarisation TE} \\ n_j k_j / \alpha_j^d & \text{en polarisation TM} \end{cases} \quad (1.92)$$

avec  $\eta_v$  l'impédance du vide et  $\mu_r$  la perméabilité magnétique relative commune aux deux milieux ( $\mu_r = 1$ ). En remplaçant l'équation (1.91) dans (1.89), nous obtenons :

$$\vec{z} \wedge [\tilde{n}_1^d (\vec{z} \wedge \overline{\mathbb{A}}_{1,d}^{T+}) + \tilde{n}_0^d (\vec{z} \wedge \overline{\mathbb{A}}_{0,d}^{T-})] = \overline{\mathbb{J}}(\vec{v}_d) \quad (1.93)$$

Avec la propriété du double produit vectoriel ( $u \wedge (v \wedge w) = (u \cdot w)v - (u \cdot v)w$ ), la relation se simplifie :

$$[\tilde{n}_1^d (\overline{\mathbb{A}}_{1,d}^{T+}) + \tilde{n}_0^d (\overline{\mathbb{A}}_{0,d}^{T-})] = -\overline{\mathbb{J}}(\vec{v}_d) \quad (1.94)$$

Nous pouvons maintenant déterminer le produit vectoriel  $\vec{z} \wedge \overline{\mathbb{M}}$  à partir de l'équation (1.88) et ce, toujours en utilisant la propriété du double produit vectoriel :



$$\vec{z} \wedge \vec{M}(\vec{v}_d) = \vec{z} \wedge (\vec{z} \wedge [\vec{A}_{1,d}^+ - \vec{A}_{0,d}^-]) = -\vec{A}_{1,d}^{T+} + \vec{A}_{0,d}^{T-} \quad (1.95)$$

Les équations (1.94) et (1.95) constituent un système de deux équations, cela nous permet d'extraire des formules pour les amplitudes  $\vec{A}_{0,d}^{T-}$  et  $\vec{A}_{1,d}^{T+}$  :

$$\begin{cases} \vec{A}_{0,d}^{T-} = -\frac{\vec{J}(\vec{v}_d) - \tilde{n}_1^d \vec{z} \wedge \vec{M}(\vec{v}_d)}{\tilde{n}_0^d + \tilde{n}_1^d} \\ \vec{A}_{1,d}^{T+} = -\frac{\vec{J}(\vec{v}_d) + \tilde{n}_0^d \vec{z} \wedge \vec{M}(\vec{v}_d)}{\tilde{n}_0^d + \tilde{n}_1^d} \end{cases} \quad (1.96)$$

Ces dernières équations expriment la relation entre les courants fictifs  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$ , associés à la rugosité de l'interface, avec les amplitudes des champs diffusés générés par l'interface dans les deux demi-espaces. Il nous faut maintenant déterminer les transformées de Fourier bidimensionnelles de ces courants fictifs.

#### 1.4.4.1. Courant électrique fictif

Les expressions (1.81) et (1.90) permettent d'écrire le courant électrique dans le plan de Fourier :

$$\vec{J}(\vec{v}_d) = -\vec{z} \wedge \int_{\vec{r}} h(\vec{r}) \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \quad (1.97)$$

Dans cette expression, le champ magnétique d'excitation est composé de paquets d'onde. Dans le milieu incident, il s'agit d'une superposition d'ondes progressives et d'ondes rétrogrades réfléchies par l'interface. Dans le second milieu, il y a uniquement des ondes progressives transmises. En utilisant la notation  $\vec{v}_e$  pour la fréquence spatiale du champ d'excitation, nous obtenons :

$$\begin{cases} \vec{\mathcal{H}}_{0,e}(\vec{r}, z) = \int_{\vec{v}_e} [\vec{\mathbb{B}}_{0,e}^+(\vec{v}_e) e^{i\alpha_0^e z} + \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^-(\vec{v}_e) e^{-i\alpha_0^e z}] e^{2i\pi\vec{v}_e \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e \\ \vec{\mathcal{H}}_{1,e}(\vec{r}, z) = \int_{\vec{v}_e} \vec{\mathbb{B}}_{1,e}^+(\vec{v}_e) e^{i\alpha_1^e z} e^{2i\pi\vec{v}_e \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e \end{cases} \quad (1.98)$$

Nous pouvons en déduire :

$$\begin{cases} \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{0,e}}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} = i \int_{\vec{v}_e} \alpha_0^e [\vec{\mathbb{B}}_{0,e}^+ - \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^-] e^{2i\pi\vec{v}_e \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e \\ \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}_{1,e}}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} = i \int_{\vec{v}_e} \alpha_1^e \vec{\mathbb{B}}_{1,e}^+ e^{2i\pi\vec{v}_e \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e \end{cases} \quad (1.99)$$

La composante élémentaire du courant  $\vec{J}$  devient :

$$\vec{J}(\vec{v}_d) = i \int_{\vec{r}} \int_{\vec{v}_e} h(\vec{r}) \alpha_0^e [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^+ - \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^-] e^{-2i\pi(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e d^2\vec{r}$$

$$-i \int_{\vec{r}} \int_{\vec{v}_e} h(\vec{r}) \alpha_1^e [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{1,e}^+] e^{-2i\pi(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e d^2\vec{r} \quad (1.100)$$

Notons  $\hat{h}$  la transformée de Fourier bidimensionnelle du profil de la surface, en intégrant sur  $\vec{r}$ , nous obtenons :

$$\vec{\mathbb{J}}(\vec{v}_d) = i \int_{\vec{v}_e} \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \alpha_0^e [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^+ - \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^-] d^2\vec{v}_e - i \int_{\vec{v}_e} \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \alpha_1^e [\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{1,e}^+] d^2\vec{v}_e \quad (1.101)$$

La définition des indices de réfraction et les propriétés du produit vectoriel nous conduisent à écrire :

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^+ = \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^{T+} = \vec{z} \wedge [\tilde{n}_0^e (\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T+})] = -\tilde{n}_0^e \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T+} \quad (1.102)$$

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^- = \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{0,e}^{T-} = -\vec{z} \wedge [\tilde{n}_0^e (\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T-})] = \tilde{n}_0^e \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T-} \quad (1.103)$$

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{1,e}^+ = \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{B}}_{1,e}^{T+} = \vec{z} \wedge [\tilde{n}_1^e (\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^{T+})] = -\tilde{n}_1^e \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^{T+} \quad (1.104)$$

La continuité de la composante tangentielle du champ idéal en  $z = 0$  entraîne :

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{0,e}(\vec{v}, 0) = \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{1,e}(\vec{v}, 0) \Rightarrow \vec{\mathbb{E}}_{0,e}^T(0) = \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T+} + \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T-} = \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^{T+} = \vec{\mathbb{E}}_{1,e}^T(0) \quad (1.105)$$

Nous avons également :

$$\vec{\mathbb{E}}_{0,e}^T(0) = (1 + r^e) \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T+} = t^e \vec{\mathbb{A}}_{0,e}^{T+} = \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^{T+} \quad (1.106)$$

$$r^e = \frac{\tilde{n}_0^e - \tilde{n}_1^e}{\tilde{n}_0^e + \tilde{n}_1^e} \quad \text{et} \quad t^e = \frac{2\tilde{n}_0^e}{\tilde{n}_0^e + \tilde{n}_1^e} \quad (1.107)$$

Les relations précédentes donnent :

$$\vec{\mathbb{J}}(\vec{v}_d) = i \int_{\vec{v}_e} \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_e) [(\alpha_1^e \tilde{n}_1^e - \alpha_0^e \tilde{n}_0^e) \vec{\mathbb{E}}_{0,e}^T] d^2\vec{v}_e \quad (1.108)$$

Cette dernière relation correspond à la convolution de la transformée de Fourier du profil de la surface avec les composants élémentaires du champ idéal à la surface. Cette transformée est pondérée par un terme qui dépend des indices de réfraction respectifs des deux milieux.

#### 1.4.4.2. Courant magnétique fictif

En utilisant l'expression (1.81), nous pouvons écrire une formulation générique pour le courant fictif magnétique :

$$\begin{aligned} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{M}}(\vec{v}_d) &= \vec{z} \wedge \int_{\vec{r}} \mathbf{grad} h(\vec{r}) \wedge [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \\ &\quad - \vec{z} \wedge \int_{\vec{r}} h(\vec{r}) \vec{z} \wedge \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \end{aligned} \quad (1.109)$$

Le champ idéal est décomposé comme la somme de sa composante tangentielle et de sa composante normale, soit :

$$\vec{\mathcal{E}}_{j,e}(\vec{r}, 0) = \vec{\mathcal{E}}_{j,e}^T(\vec{r}, 0) + [\vec{z} \cdot \vec{\mathcal{E}}_{j,e}(\vec{r}, 0)] \vec{z} \quad (1.110)$$

En utilisant le double produit vectoriel, la relation devient :

$$\begin{aligned} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{M}}(\vec{v}_d) &= \mathbb{I}_1 + \mathbb{I}_2 = \int_{\vec{r}} \mathbf{grad} h(\vec{r}) \{ \vec{z} \cdot [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] \} e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \\ &\quad + \int_{\vec{r}} h(\vec{r}) \left[ \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{1,e}^T}{\partial z} - \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}_{0,e}^T}{\partial z} \right]_{\vec{r},0} e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} \end{aligned} \quad (1.111)$$

Le dernier terme de la relation précédente est identifié à  $\mathbb{I}_2$ , nous pouvons utiliser la même approche que celle employée pour déterminer le courant  $\vec{\mathbb{J}}$ . Ce qui nous conduit à :

$$\mathbb{I}_2 = i \int_{\vec{v}_e} \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \left[ \frac{\alpha_1^e \tilde{n}_0^e - \alpha_0^e \tilde{n}_1^e}{\tilde{n}_0^e} \vec{\mathbb{E}}_{0,e}^T(\vec{v}_e, 0) \right] d^2\vec{v}_e \quad (1.112)$$

Intéressons-nous maintenant au terme  $\mathbb{I}_1$  et notons  $g(\vec{r}) = \vec{z} \cdot [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)]$ ,

$$\mathbb{I}_1 = \int_{\vec{r}} g(\vec{r}) \mathbf{grad} h(\vec{r}) e^{-2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} = \text{TF}\{g \cdot \mathbf{grad} h\}(\vec{v}_d) \quad (1.113)$$

La transformée de Fourier (TF) d'un produit est égale au produit de convolution des transformées de Fourier de chacun des termes. Nous obtenons alors :

$$\text{TF}\{g \cdot \mathbf{grad} h\} = \text{TF}\{g\} \star \text{TF}\{\mathbf{grad} h\} = \hat{g} \star [2i\pi\vec{v}\hat{h}] \quad (1.114)$$

$$\mathbb{I}_1 = \text{TF}\{g \cdot \mathbf{grad} h\}(\vec{v}_d) = 2i\pi \int_{\vec{v}} \hat{g}(\vec{v}) \times (\vec{v}_d - \vec{v}) \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}) d^2\vec{v} \quad (1.115)$$

La propriété de continuité de la composante normale du champ électrique d'excitation nous permet d'écrire :

$$\tilde{\epsilon}_0 \vec{z} \cdot [\vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) - \vec{\mathcal{E}}_{0,e}(\vec{r}, 0)] = (\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1) \vec{z} \cdot \vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) \quad (1.116)$$

Nous pouvons maintenant calculer la transformée de Fourier de  $g$  :

$$\begin{aligned} \hat{g}(\vec{v}) &= \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} \int_{\vec{r}} \vec{z} \cdot \vec{\mathcal{E}}_{1,e}(\vec{r}, 0) e^{-2i\pi\vec{v} \cdot \vec{r}} d^2\vec{r} = \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} \int_{\vec{r}} \int_{\vec{v}_e} \vec{z} \cdot \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^+(\vec{v}_e) e^{-2i\pi(\vec{v}-\vec{v}_e) \cdot \vec{r}} d^2\vec{v}_e d^2\vec{r} \\ &= \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} \int_{\vec{v}_e} \vec{z} \cdot \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^+(\vec{v}_e) \delta(\vec{v} - \vec{v}_e) d^2\vec{v}_e = \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} [\vec{z} \cdot \vec{\mathbb{A}}_{1,e}^+(\vec{v})] \end{aligned} \quad (1.117)$$

L'onde émergente dans le milieu indicé 1 est progressive et monochromatique. Une relation lie les composantes normales et tangentielles du champ électrique :

$$\vec{z} \cdot \vec{A}_{1,e}^+(\vec{v}) = -\frac{2\pi}{\alpha_1} \vec{v} \cdot \vec{A}_{1,e}^+(\vec{v}) = -\frac{2\pi}{\alpha_1(\vec{v})} \vec{v} \cdot \vec{E}_{0,e}^T(\vec{v}, 0) \quad (1.118)$$

Nous pouvons enfin en déduire la forme de la grandeur  $\mathbb{I}_1$  :

$$\mathbb{I}_1 = -4\pi^2 i \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} \int_{\vec{v}} (\vec{v}_d - \vec{v}) \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}) \left[ \frac{\vec{v} \cdot \vec{E}_{0,e}^T(\vec{v}, 0)}{\alpha_1(\vec{v})} \right] d^2\vec{v} \quad (1.119)$$

Finalement, le courant magnétique fictif est de la forme suivante :

$$\begin{aligned} \vec{z} \wedge \vec{M}(\vec{v}_d) = & -4\pi^2 i \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} \int_{\vec{v}_e} (\vec{v}_d - \vec{v}_e) \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \left[ \frac{\vec{v}_e \cdot \vec{E}_{0,e}^T(\vec{v}_e, 0)}{\alpha_1(\vec{v}_e)} \right] d^2\vec{v}_e \\ & + i \int_{\vec{v}_e} \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_e) \left[ \frac{\alpha_1^e \tilde{n}_0^e - \alpha_0^e \tilde{n}_1^e}{\tilde{n}_0^e} \vec{E}_{0,e}^T(\vec{v}_e, 0) \right] d^2\vec{v}_e \end{aligned} \quad (1.120)$$

Nous avons déterminé le courant électrique et le courant magnétique fictifs. Toutes les grandeurs recherchées sont complètement déterminées, notamment les champs diffusés dans les deux milieux :  $\vec{E}_{0,d}^T$  et  $\vec{E}_{1,d}^T$ ,

$$\begin{cases} \vec{E}_{0,d}^T(\vec{r}, z) = - \int_{\vec{v}_d} \frac{\vec{J}(\vec{v}_d) - \tilde{n}_1^d [\vec{z} \wedge \vec{M}](\vec{v}_d)}{\tilde{n}_0^d + \tilde{n}_1^d} e^{2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} e^{-i\alpha_0^d z} d^2\vec{v}_d \\ \vec{E}_{1,d}^T(\vec{r}, z) = - \int_{\vec{v}_d} \frac{\vec{J}(\vec{v}_d) + \tilde{n}_0^d [\vec{z} \wedge \vec{M}](\vec{v}_d)}{\tilde{n}_0^d + \tilde{n}_1^d} e^{2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} e^{i\alpha_1^d z} d^2\vec{v}_d \end{cases} \quad (1.121)$$

avec les expressions de  $\vec{J}$  et  $\vec{z} \wedge \vec{M}$  déterminées aux équations (1.108) et (1.120). Nous remarquons que ce sont les composantes tangentielles du champ électrique d'excitation qui génèrent les courants fictifs.

#### 1.4.5. Cas d'un faisceau faiblement divergent

Les relations établies jusqu'à maintenant décrivent un cas général dans lequel le champ idéal est un paquet d'onde et possède de multiples incidences d'illumination. Les phénomènes de diffusion tels qu'ils sont étudiés en pratique sont principalement générés par des faisceaux faiblement divergents, ce qui permet de réaliser quelques simplifications dans les formules établies. Nous écartons également le cas d'une illumination par onde plane puisque cela engendrerait l'éclairement d'une surface infinie, ce qui poserait à la fois des difficultés calculatoires et ne correspondrait pas à la pratique.

Nous formulons l'hypothèse que le champ idéal à l'interface entre les deux milieux est généré par un faisceau faiblement divergent et monochromatique. Sa direction de propagation fait un angle  $\theta_0^i$  avec la direction normale de cette interface et son vecteur d'onde est noté  $\beta_0^i$ . Un modèle usuellement employé est celui du faisceau gaussien, mais il

peut être étendu à toute autre géométrie, tant que la divergence est faible et que l'approximation  $\alpha_0 \approx k_0$  est vérifiée. Notons  $s_e$  la surface éclairée à l'interface. La transformée de Fourier de cette grandeur intervient dans la définition du champ à l'interface :

$$\vec{\mathbb{E}}_i(\vec{\nu}, 0) = \vec{\mathbb{A}}_i^+(\vec{\nu}) = \int_{\vec{r}} \vec{\mathcal{E}}_i(\vec{r}, 0) e^{-2i\pi\vec{\nu}\cdot\vec{r}} d^2\vec{r} = \hat{s}_e(\vec{\nu}) \vec{\mathcal{E}}_i \quad (1.122)$$

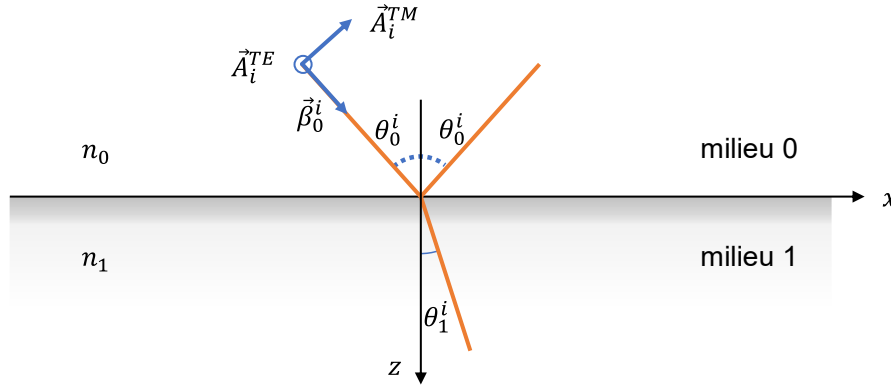


Figure 1.7 Représentation de l'illumination d'une interface plane par un faisceau faiblement divergent avec un angle d'incidence  $\theta_0^i$ .

L'équation précédente permet de trouver une formulation littérale du champ électrique d'excitation :

$$\vec{\mathbb{E}}_{0,e}^T(\vec{\nu}_e, 0) = (1 + r^e) \vec{\mathbb{A}}_i^T(\vec{\nu}_e) = \frac{2\tilde{n}_0^e}{\tilde{n}_0^e + \tilde{n}_1^e} \hat{s}_e(\vec{\nu}_e) \vec{\mathcal{E}}_i^T \quad (1.123)$$

En remplaçant cette expression dans l'équation (1.108), nous pouvons décrire le courant électrique fictif dans cette configuration, en fonction de la fréquence spatiale diffusée :

$$\vec{\mathbb{J}}(\vec{\nu}_d) = i \vec{\mathcal{E}}_i^T \int_{\vec{\nu}_e} \frac{2\tilde{n}_0^e}{\tilde{n}_0^e + \tilde{n}_1^e} (\alpha_1^e \tilde{n}_1^e - \alpha_0^e \tilde{n}_0^e) \hat{h}(\vec{\nu}_d - \vec{\nu}_e) \hat{s}_e(\vec{\nu}_e) d^2\vec{\nu}_e \quad (1.124)$$

Sous l'hypothèse d'un faisceau faiblement divergent et de faible taille, les variations des indices effectifs et des composantes normales des vecteurs d'onde sont quasiment constantes et indépendantes de la fréquence spatiale. Cette supposition nous autorise à sortir ces termes de l'intégrale et leur affecter leur valeur en  $(\vec{\nu}_i, 0)$ , d'où le remplacement des exposants  $e$  par des exposants  $i$ . Nous obtenons ainsi la simplification suivante :

$$\vec{\mathbb{J}}(\vec{\nu}_d) = \frac{2i\tilde{n}_0^i}{\tilde{n}_0^i + \tilde{n}_1^i} (\alpha_1^i \tilde{n}_1^i - \alpha_0^i \tilde{n}_0^i) \vec{\mathcal{E}}_i^T \int_{\vec{\nu}_e} \hat{h}(\vec{\nu}_d - \vec{\nu}_e) \hat{s}_e(\vec{\nu}_e) d^2\vec{\nu}_e \quad (1.125)$$

Nous reconnaissons ici la forme d'un produit de convolution entre  $\hat{h}$  et  $\hat{s}_e$ .

$$\vec{J}(\vec{v}_d) = \frac{2i\tilde{n}_0^i}{\tilde{n}_0^i + \tilde{n}_1^i} (\alpha_1^i \tilde{n}_1^i - \alpha_0^i \tilde{n}_0^i) [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \vec{E}_i^T \quad (1.126)$$

Un raisonnement identique nous conduit à simplifier l'expression du courant fictif magnétique :

$$\vec{z} \wedge \vec{M}(\vec{v}_d) = \frac{2i(\alpha_1^i \tilde{n}_0^i - \alpha_0^i \tilde{n}_1^i)}{\tilde{n}_0^i + \tilde{n}_1^i} [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \vec{E}_i^T - \frac{8i\pi^2 \tilde{n}_0^i}{\tilde{n}_0^i + \tilde{n}_1^i} \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \left\{ \frac{\vec{v}_i}{\alpha_1^i} \cdot [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \vec{E}_i^T \right\} \quad (1.127)$$

Les courants fictifs ont été simplifiés sous l'hypothèse du faisceau faiblement divergent. Nous utilisons désormais ces dernières relations pour reformuler les expressions des amplitudes des composantes élémentaires des champs diffusés, de part et d'autre de l'interface :

$$\begin{aligned} \vec{A}_{0,d}^{T-} &= -\frac{2i}{(\tilde{n}_0^i + \tilde{n}_1^i)(\tilde{n}_0^d + \tilde{n}_1^d)} \\ &\left\{ [\tilde{n}_0^i(\alpha_1^i \tilde{n}_1^i - \alpha_0^i \tilde{n}_0^i) - \tilde{n}_1^d(\alpha_1^i \tilde{n}_0^i - \alpha_0^i \tilde{n}_1^i)] [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \vec{E}_i^T + 4\pi^2 (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \frac{\tilde{n}_0^i \tilde{n}_1^d}{\alpha_1^i} \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \left\{ \vec{v}_i \cdot \vec{E}_i^T \right\} \right\} \end{aligned} \quad (1.128)$$

et

$$\begin{aligned} \vec{A}_{1,d}^{T+} &= -\frac{2i}{(\tilde{n}_0^i + \tilde{n}_1^i)(\tilde{n}_0^d + \tilde{n}_1^d)} \\ &\left\{ [\tilde{n}_0^i(\alpha_1^i \tilde{n}_1^i - \alpha_0^i \tilde{n}_0^i) + \tilde{n}_0^d(\alpha_1^i \tilde{n}_0^i - \alpha_0^i \tilde{n}_1^i)] [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \vec{E}_i^T - 4\pi^2 (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \frac{\tilde{n}_0^i \tilde{n}_0^d}{\alpha_1^i} \frac{\tilde{\epsilon}_0 - \tilde{\epsilon}_1}{\tilde{\epsilon}_0} [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \left\{ \vec{v}_i \cdot \vec{E}_i^T \right\} \right\} \end{aligned} \quad (1.129)$$

L'hypothèse du faisceau faiblement divergent permet de simplifier les expressions des champs en faisant intervenir le produit de convolution entre la transformée de Fourier de la surface et la forme du faisceau d'excitation.

#### 1.4.6. Prise en compte des états de polarisation

##### 1.4.6.1. Introduction aux états de polarisation

Les expressions établies jusqu'ici font intervenir les indices effectifs des matériaux, or ces grandeurs dépendent de l'état de polarisation de la lumière. Le faisceau incident est défini par son vecteur d'onde  $\vec{\beta}_i^0$ . Le plan d'incidence est le plan décrit par ce vecteur d'onde et par le vecteur  $\vec{z}$ , normal à la surface. Les deux états de polarisation accessibles pour le faisceau incident sont les polarisation *s* (ou TE) et *p* (ou TM). L'état de polarisation du champ diffusé est défini dans le plan de diffusion, lui-même décrit par le vecteur d'onde de diffusion (associé à la fréquence spatiale de diffusion  $\vec{v}_d$ ) et  $\vec{z}$ . Le champ diffusé peut également prendre les deux états de polarisation. En conséquence, il y a quatre configurations différentes à étudier : SS, SP, PS et PP. La première lettre de ces sigles

désigne l'état de polarisation du champ incident, la seconde représente l'état de polarisation du champ diffusé.

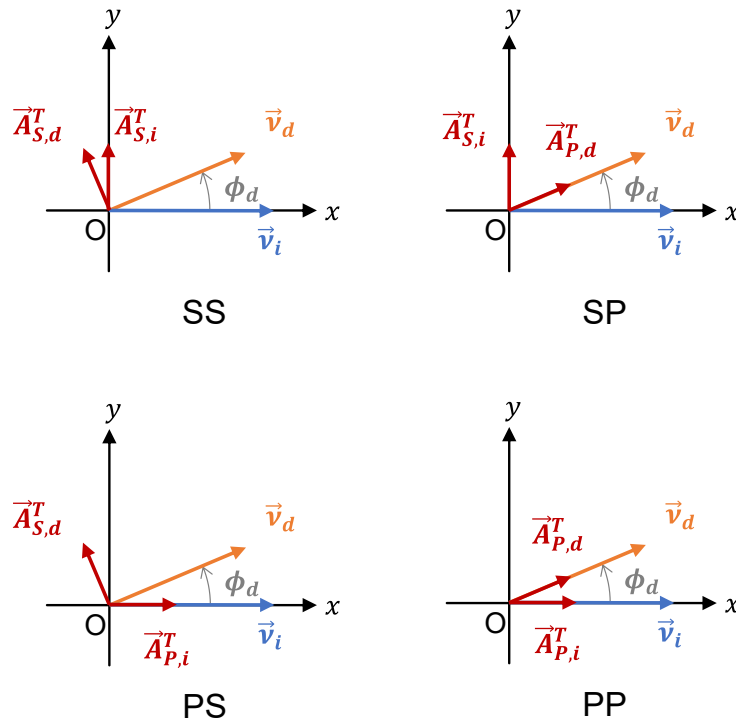


Figure 1.8 Orientation relative du vecteur d'onde d'incidence et du vecteur d'onde de diffusion, dans le plan (xOy) qui est celui de l'interface.

Toute fréquence spatiale de diffusion peut être décomposée dans un repère polaire et dans chacun des deux milieux :

$$\vec{v}_d = \frac{n_j}{\lambda} \sin\theta_j^d \begin{bmatrix} \cos \phi_d \\ \sin \phi_d \end{bmatrix} \quad (1.130)$$

L'angle polaire – ou azimutal –  $\phi_d$  est indépendant du milieu et permet de définir le plan de diffusion polaire dans lequel se propage le champ électrique diffusé de vecteur d'onde  $\vec{\beta}^d$ . L'état de polarisation du champ diffusé est défini dans ce plan : les contributions  $s$  sont normales au plan, tandis que les contributions  $p$  sont contenues dans le plan. L'amplitude du champ diffusé dans le milieu d'incidence (milieu 0) peut être exprimée sous une forme générale :

$$\vec{A}_{0,d}^{-} = S_{0,d}^i \vec{\mathcal{E}}_i^T + P_{0,d}^i (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \{ \vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T \} \quad (1.131)$$

avec  $S_{0,d}^i$  et  $P_{0,d}^i$  des coefficients fonctions des indices de réfraction, de l'angle de diffusion et de l'angle d'incidence.

De la même manière, l'amplitude du champ diffusé dans le milieu 1 peut s'écrire :

$$\vec{A}_{1,d}^{+} = S_{1,d}^i \vec{\mathcal{E}}_i^T + P_{1,d}^i (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \{ \vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T \} \quad (1.132)$$

Un repère orthogonal  $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$  est associé à chacun des champs diffusés,  $\vec{c}$  est toujours colinéaire au vecteur d'onde diffusé,  $\vec{b}$  est normal au plan de diffusion décrit par  $(\vec{c}, \vec{z})$  et  $\vec{a}$  s'obtient par produit vectoriel ( $\vec{a} = \vec{b} \wedge \vec{c}$ ). En restreignant l'étude aux composantes tangentielles des champs incidents et diffusés, donc au plan  $(xOy)$ , seuls les vecteurs  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  sont conservés. Dans le milieu incident :

$$\vec{a}_0 = \begin{bmatrix} -\cos \phi_d \\ -\sin \phi_d \end{bmatrix} ; \quad \vec{b}_0 = \begin{bmatrix} -\sin \phi_d \\ \cos \phi_d \end{bmatrix} \quad (1.133)$$

Tandis que dans le milieu 1 :

$$\vec{a}_1 = \begin{bmatrix} \cos \phi_d \\ \sin \phi_d \end{bmatrix} ; \quad \vec{b}_1 = \begin{bmatrix} -\sin \phi_d \\ \cos \phi_d \end{bmatrix} \quad (1.134)$$

Nous pouvons ainsi transformer les formes générales des amplitudes des champs diffusés pour les polarisations  $s$  et  $p$  :

$$[\vec{A}_{j,d}^T]_s = S_{j,d}^i [\vec{b}_j \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T] + P_{j,d}^i [\vec{b}_j \cdot (\vec{v}_d - \vec{v}_i)] \{\vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T\} \quad (1.135)$$

$$[\vec{A}_{j,d}^T]_p = S_{j,d}^i [\vec{a}_j \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T] + P_{j,d}^i [\vec{a}_j \cdot (\vec{v}_d - \vec{v}_i)] \{\vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T\} \quad (1.136)$$

De plus, indépendamment de l'état de polarisation, la différence entre la fréquence spatiale de diffusion et la fréquence spatiale d'incidence est toujours identique :

$$\vec{v}_d - \vec{v}_i = (n_j/\lambda) \sin \theta_j^d \begin{bmatrix} \cos \phi_d \\ \sin \phi_d \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (n_j/\lambda) \sin \theta_j^i \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1.137)$$

Lorsque le champ incident est de polarisation  $s$ , nous avons :

$$\vec{\mathcal{E}}_i^T = \varepsilon_i \vec{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ \varepsilon_i \end{bmatrix} \quad (1.138)$$

Le produit scalaire  $\{\vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T\}$  est nul, nous obtenons finalement :

$$\begin{cases} A_{0,d}^{SS} = S_{0,d}^i \varepsilon_i \cos \phi_d \\ A_{0,d}^{SP} = -S_{0,d}^i \varepsilon_i \sin \phi_d \\ A_{1,d}^{SS} = S_{1,d}^i \varepsilon_i \cos \phi_d \\ A_{1,d}^{SP} = S_{1,d}^i \varepsilon_i \sin \phi_d \end{cases} \quad (1.139)$$

Pour un champ incident polarisé  $p$ , nous avons :

$$\vec{\mathcal{E}}_i^T = \varepsilon_i \cos \theta_0^i \vec{x} = \begin{bmatrix} \varepsilon_i \cos \theta_0^i \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1.140)$$

Le produit scalaire  $\{\vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T\}$  n'est plus nul et les amplitudes dépendent maintenant des coefficients  $P_{j,d}^i$  :



$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbb{A}_{0,d}^{PS} = - \left\{ S_{0,d}^i - \frac{v_i P_{0,d}^i}{\lambda} n_0 \sin \theta_0^i \right\} \sin \phi_d \mathcal{E}_i \cos \theta_0^i \\ \mathbb{A}_{0,d}^{PP} = - \left\{ S_{0,d}^i \cos \phi_d + \frac{v_i P_{0,d}^i}{\lambda} [n_0 \sin \theta_0^d - n_0 \sin \theta_0^i \cos \phi_d] \right\} \mathcal{E}_i \cos \theta_0^i \\ \mathbb{A}_{1,d}^{PS} = - \left\{ S_{1,d}^i - \frac{v_i P_{1,d}^i}{\lambda} n_1 \sin \theta_1^i \right\} \sin \phi_d \mathcal{E}_i \cos \theta_0^i \\ \mathbb{A}_{1,d}^{PP} = \left\{ S_{1,d}^i \cos \phi_d + \frac{v_i P_{1,d}^i}{\lambda} [n_1 \sin \theta_1^d - n_1 \sin \theta_1^i \cos \phi_d] \right\} \mathcal{E}_i \cos \theta_0^i \end{array} \right. \quad (1.141)$$

Les expressions pour une polarisation incidente  $p$  sont un peu plus complexes. Nous remarquons également que les amplitudes des champs diffusés pour les polarisations croisées (SP et PS) sont nulles dans le plan d'incidence ( $\phi_d = 0$ ).

#### 1.4.6.2. Cas SS

Dans le cas d'une polarisation d'illumination et d'une polarisation de diffusion toutes les deux de type S, nous utilisons les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \alpha_0^i &= k_0 \cos \theta_0^i ; \quad \alpha_1^i = k_1 \cos \theta_1^i ; \quad \alpha_0^d = k_0 \cos \theta_0^d ; \quad \alpha_1^d = k_1 \cos \theta_1^d \\ \tilde{n}_0^i &= \frac{n_0}{\eta_v} \cos \theta_0^i ; \quad \tilde{n}_1^i = \frac{n_1}{\eta_v} \cos \theta_1^i ; \quad \tilde{n}_0^d = \frac{n_0}{\eta_v} \cos \theta_0^d ; \quad \tilde{n}_1^d = \frac{n_1}{\eta_v} \cos \theta_1^d \end{aligned}$$

Après quelques simplifications présentées dans [12], nous obtenons :

$$\mathbb{A}_{0,d}^{SS} = \mathbb{A}_{1,d}^{SS} = \frac{2ik_0 \cos \theta_0^i (n_0 \cos \theta_0^i - n_1 \cos \theta_1^i)}{n_0 \cos \theta_0^d + n_1 \cos \theta_1^d} \cos \phi_d [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \mathcal{E}_i \quad (1.142)$$

#### 1.4.6.3. Cas SP

L'illumination est maintenant de polarisation  $s$ , tandis que la diffusion est de polarisation  $p$ . Les indices effectifs diffusés changent de forme dans les deux milieux.

$$\tilde{n}_0^i = \frac{n_0}{\eta_v} \cos \theta_0^i ; \quad \tilde{n}_1^i = \frac{n_1}{\eta_v} \cos \theta_1^i ; \quad \tilde{n}_0^d = \frac{n_0}{\eta_v \cos \theta_0^d} ; \quad \tilde{n}_1^d = \frac{n_1}{\eta_v \cos \theta_1^d}$$

$$\mathbb{A}_{0,d}^{SP} = -\mathbb{A}_{1,d}^{SP} = - \frac{2ik_0 \cos \theta_0^i (n_0 \cos \theta_0^i - n_1 \cos \theta_1^i)}{n_0 / \cos \theta_0^d + n_1 / \cos \theta_1^d} \sin \phi_d [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \mathcal{E}_i \quad (1.143)$$

#### 1.4.6.4. Cas PS

Les indices effectifs sont désormais :

$$\tilde{n}_0^i = \frac{n_0}{\eta_v \cos \theta_0^i} ; \quad \tilde{n}_1^i = \frac{n_1}{\eta_v \cos \theta_1^i} ; \quad \tilde{n}_0^d = \frac{n_0}{\eta_v} \cos \theta_0^d ; \quad \tilde{n}_1^d = \frac{n_1}{\eta_v} \cos \theta_1^d$$

Un raisonnement similaire aux deux cas précédents conduit à l'expression suivante pour les amplitudes des champs diffusés :

$$\mathbb{A}_{0,d}^{PS} = \mathbb{A}_{1,d}^{PS} = - \frac{2ik_0 (n_0^2 - n_1^2)}{(n_0 / \cos \theta_0^i + n_1 / \cos \theta_1^i) (n_0 \cos \theta_0^d + n_1 \cos \theta_1^d)} \sin \phi_d [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \mathcal{E}_i \quad (1.144)$$

#### 1.4.6.5. Cas PP

Les indices effectifs pour une polarisation incidente et une polarisation diffuse de type  $p$  sont :

$$\tilde{n}_0^i = \frac{n_0}{\eta_v \cos \theta_0^i} ; \tilde{n}_1^i = \frac{n_1}{\eta_v \cos \theta_1^i} ; \tilde{n}_0^d = \frac{n_0}{\eta_v \cos \theta_0^d} ; \tilde{n}_1^d = \frac{n_1}{\eta_v \cos \theta_1^d}$$

La même démarche de calcul que dans le cas PS conduit aux expressions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbb{A}_{0,d}^{PP} = - \frac{2ik_0(n_0^2 - n_1^2)}{\left(\frac{n_0}{\cos \theta_0^i} + \frac{n_1}{\cos \theta_1^i}\right) \left(\frac{n_0}{\cos \theta_0^d} + \frac{n_1}{\cos \theta_1^d}\right)} \left[ \cos \phi_d - \frac{\sin \theta_0^i \sin \theta_0^d}{\cos \theta_1^i \cos \theta_1^d} \right] [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \mathcal{E}_i \\ \mathbb{A}_{1,d}^{PP} = \frac{2ik_0(n_0^2 - n_1^2)}{\left(\frac{n_0}{\cos \theta_0^i} + \frac{n_1}{\cos \theta_1^i}\right) \left(\frac{n_0}{\cos \theta_0^d} + \frac{n_1}{\cos \theta_1^d}\right)} \left[ \cos \phi_d + \frac{\sin \theta_0^i \sin \theta_0^d}{\cos \theta_1^i \cos \theta_0^d} \right] [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \mathcal{E}_i \end{array} \right. \quad (1.145)$$

#### 1.4.7. Flux diffusé

Dans chacun des deux milieux, le flux diffusé est donné comme une fonction de la composante tangentielle et suit la relation suivante :

$$\Phi_j^d = \int_{v_x^d} \int_{v_y^d} \frac{1}{2} \Re\{\tilde{n}_j^d\} |\vec{\mathbb{A}}_{j,d}^T(v_x^d, v_y^d)|^2 dv_x^d dv_y^d \quad (1.146)$$

Les fréquences spatiales sont définies dans un repère cartésien. Toutefois, nous ne cherchons pas à déterminer la totalité du flux diffusé mais sa variation selon la direction d'observation. Nous devons d'abord passer dans un repère polaire en utilisant un changement de variable :  $(v_x^d, v_y^d) \rightarrow (v_d, \phi_d)$  avec  $v_d = \sqrt{(v_x^d)^2 + (v_y^d)^2}$ .

Nous faisons également l'hypothèse que les milieux sont non absorbants et ainsi  $\Re\{\tilde{n}_j^d\} = \tilde{n}_j^d$ . Le flux diffusé devient :

$$\Phi_j^d = \int_{v_d} \int_{\phi_d} \frac{1}{2} \tilde{n}_j^d |\vec{\mathbb{A}}_{j,d}^T(v_d, \phi_d)|^2 v_d dv_d d\phi_d \quad (1.147)$$

La fréquence spatiale diffusée étant définie par  $2\pi v_d = k_j \sin \theta_j^d$ , nous obtenons :

$$dv_d = \frac{k_j}{2\pi} \cos \theta_j^d d\theta_j^d \quad (1.148)$$

La densité spectrale du flux diffusé dans la direction  $(\theta_j^d, \phi_d)$  s'écrit alors :

$$d\Phi_j^d = \frac{1}{2} \tilde{n}_j^d |\vec{\mathbb{A}}_{j,d}^T(v_d, \phi_d)|^2 \left(\frac{k_j}{2\pi}\right)^2 \cos \theta_j^d \sin \theta_j^d d\theta_j^d d\phi_d \quad (1.149)$$

Cette grandeur est généralement mesurée dans un angle solide donné  $d\Omega_j = \sin \theta_j^d d\theta_j^d d\phi_d$ .

$$\frac{d\Phi_j^d}{d\Omega_j} = \frac{1}{2} \left( \frac{k_j}{2\pi} \right)^2 \tilde{n}_j^d \cos \theta_j^d |\vec{A}_{j,d}^T(v_d, \phi_d)|^2 \quad (1.150)$$

Nous devons maintenant normaliser cette expression par le flux incident qui est décrit en utilisant la relation (1.122) :

$$\Phi_0^i = \int_{\vec{v}_e} \frac{1}{2} \Re\{\tilde{n}_0^e\} |\vec{A}_i^{T+}(\vec{v}_e)|^2 d^2\vec{v}_e = \frac{1}{2} \left\{ \int_{\vec{v}_e} \tilde{n}_0^e |\hat{s}_i(\vec{v}_e)|^2 d^2\vec{v}_e \right\} |\vec{\mathcal{E}}_i^T|^2 \quad (1.151)$$

En reprenant le cas du faisceau faiblement divergent et en considérant les indices effectifs  $\tilde{n}_0^e$  et  $\tilde{n}_0^i$  indépendants de la fréquence spatiale, nous pouvons calculer l'intégrale précédente. Nous utilisons également le théorème de Parseval pour modifier la transformée de Fourier de la surface  $S$  illuminée de l'interface.

$$\int_{\vec{v}_e} |\hat{s}_e(\vec{v}_e)|^2 d^2\vec{v}_e = \int_{\vec{r}} |s_e(\vec{r})|^2 d^2\vec{r} = S \quad (1.152)$$

Le flux incident prend la forme suivante :

$$\Phi_0^i = \frac{1}{2} \tilde{n}_0^i S |\vec{\mathcal{E}}_i^T|^2 \quad (1.153)$$

Nous en déduisons le flux normé des relations précédentes :

$$\frac{1}{\Phi_0^i} \frac{d\Phi_j^d}{d\Omega_j} = \left( \frac{n_j}{\lambda} \right)^2 \frac{\tilde{n}_j^d |\vec{A}_{j,d}^T(v_d, \phi_d)|^2}{\tilde{n}_0^i S |\vec{\mathcal{E}}_i^T|^2} \cos \theta_j^d \quad (1.154)$$

Les résultats ont été obtenus sous l'hypothèse d'un faisceau faiblement divergent, peu importe sa forme géométrique, le calcul est possible tant que sa distribution d'amplitude  $\vec{\mathcal{E}}_i$  est connue et que l'approximation  $\alpha_0 \approx k_0$  est vérifiée.

#### 1.4.8. ARS

L'équation (1.154) exprime le flux diffusé par angle solide, normalisé par le flux incident. Rappelons que cette quantité est communément désignée par le sigle ARS (*Angle Resolved Scattering*). L'unité de cette grandeur est l'inverse d'un angle solide ( $sr^{-1}$ ). La grandeur ARS est aussi liée à la BSDF (*Bidirectional Scattering Distribution Function*).

$$ARS = BSDF \cos \theta_d \quad (1.155)$$

Le Chapitre 2 présente un outil métrologique de mesure de la diffusion dans le plan d'incidence ( $\phi_d = 0$ ). Nous avons vu que pour ce cas particulier, les amplitudes des champs diffusés sont nulles pour des polarisations croisées (SP et PS). Nous pouvons déterminer les formules de l'ARS dans le demi-espace réfléchi pour les deux

configurations de polarisation possibles : SS et PP. Pour cela, nous insérons dans (1.154) l'expression de la composante  $\vec{A}_{j,d}^T$  selon l'état de polarisation (paragraphe 1.4.6) et nous obtenons :

$$ARS_0^{SS}(\theta_i; \theta_d, 0) = \left(\frac{n_0}{\lambda}\right)^2 \frac{\cos^2 \theta_0^d}{\cos \theta_0^i} \left[ \frac{2k_0 \cos \theta_0^i (n_0 \cos \theta_0^i - n_1 \cos \theta_1^i)}{n_0 \cos \theta_0^d + n_1 \cos \theta_1^d} \right]^2 \frac{1}{S} |[\hat{h} \star \hat{s}_e]|^2 \quad (1.156)$$

$$ARS_0^{PP}(\theta_i; \theta_d, 0) = \left(\frac{n_0}{\lambda}\right)^2 \frac{1}{\cos \theta_0^i} \left[ \frac{2k_0(n_0^2 - n_1^2)}{\left(\frac{n_0}{\cos \theta_0^i} + \frac{n_1}{\cos \theta_1^i}\right) \left(\frac{n_0}{\cos \theta_0^d} + \frac{n_1}{\cos \theta_1^d}\right)} \right]^2 \times \left[ 1 - \frac{\sin \theta_0^i \sin \theta_0^d}{\cos \theta_1^i \cos \theta_1^d} \right]^2 \frac{1}{S} |[\hat{h} \star \hat{s}_e]|^2 \quad (1.157)$$

Une démarche tout à fait similaire permet d'écrire les formules pour l'ARS dans le demi-espace transmis, avec cette fois-ci  $j = 1$ .

### 1.4.9. Rugosité d'une interface

#### 1.4.9.1. Définition du spectre de rugosité

Le paragraphe précédent a montré que les indicatrices de diffusion sont proportionnelles à  $|[\hat{h} \star \hat{s}_e]|^2$ , avec  $\hat{h}$  la TF de la topographie de la surface, convoluée avec  $\hat{s}_e$ , la TF de l'empreinte de la surface d'excitation illuminée. La fonction  $h_e$  est définie comme le produit de la topographie de l'interface et de la fonction de la surface d'excitation. Cette fonction représente la topographie de la surface excitée :

$$h_e(x, y) = h(x, y)s_e(x, y) \quad (1.158)$$

Les propriétés de la transformée de Fourier justifient que :

$$\hat{h}_e = \hat{h} \star \hat{s}_e \quad (1.159)$$

Lorsque l'empreinte de la surface d'excitation devient très grande,  $\hat{s}_e$  tend vers une distribution de Dirac centrée en  $\vec{v}_i$ . Le produit de convolution disparaît alors au profit de  $\hat{h}$  :

$$[\hat{h} \star \hat{s}_e](\vec{v}_d) \rightarrow \int_{\vec{v}} \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}) \delta(\vec{v} - \vec{v}_i) d^2\vec{v} = \hat{h}(\vec{v}_d - \vec{v}_i) \quad (1.160)$$

Nous introduisons dans le cas général, la notion de spectre de rugosité apparente pour l'interface, soit :

$$\gamma_e(\vec{v}) = \frac{1}{S} |\hat{h}_e(\vec{v})|^2 \quad (1.161)$$

L'ARS peut être réécrite sous une autre forme générale qui prend en compte la rugosité :

$$ARS(\vec{v}_d, \vec{v}_i) = C(\vec{v}_d, \vec{v}_i)\gamma_e(\vec{v}_d) \quad (1.162)$$

Nous remarquons que l'ARS se comprend comme le produit de deux termes. La grandeur  $C$  est déterminée théoriquement, elle dépend de la nature des deux milieux et des caractéristiques de l'illumination. Le second terme  $\gamma_e$  décrit exclusivement la topographie de la surface excitée. Pour une empreinte de surface excitée suffisamment grande, ce terme est équivalent à la rugosité de l'interface prise en  $(\vec{v} - \vec{v}_i)$ .

$$\gamma_e(\vec{v}) = \gamma(\vec{v} - \vec{v}_i) \quad (1.163)$$

Nous allons pouvoir utiliser la topographie de l'interface pour déterminer les flux diffusés. Cette topographie est également décrite par son spectre de puissance de rugosité, ce qui correspond à la TF de la fonction d'autocorrélation  $\Gamma$  du profil spatial de la surface :

$$\Gamma(\vec{t}) = \frac{1}{S} \int_{\vec{r}} h(\vec{r})h(\vec{r} - \vec{t})d^2\vec{r} \quad (1.164)$$

La TF de la fonction d'autocorrélation est :

$$\gamma(\vec{v}) = \frac{1}{S} |\hat{h}(\vec{v})|^2 \quad (1.165)$$

Le carré de la rugosité  $\delta$  de la surface peut être déterminé à partir du spectre de rugosité :

$$\delta^2 = \Gamma(\vec{0}) = \frac{1}{S} \int_{\vec{r}} h^2(\vec{r})d^2\vec{r} = \int_{\vec{v}} \gamma(\vec{v})d^2\vec{v} \quad (1.166)$$

L'intégrale du spectre mesuré représente la variance des fluctuations de hauteur sur le profil de la surface. Cette fonction peut aussi être exprimée en fonction de la dépendance angulaire du spectre de rugosité :

$$\delta^2 = \int_{\vec{v}} \gamma(\vec{v})d^2\vec{v} = \int \int_{v, \phi} \gamma(v, \phi)v dv d\phi = \left(\frac{n}{\lambda}\right)^2 \int \int_{\theta, \phi} \gamma(\theta, \phi) \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \quad (1.167)$$

Introduisons maintenant la moyenne polaire de ce spectre, c'est-à-dire la moyenne de  $\gamma$  sur les angles  $\phi$  :

$$\bar{\gamma}(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{\phi} \gamma(\theta, \phi)d\phi \quad (1.168)$$

Enfin, nous obtenons :

$$\delta^2 = 2\pi \left(\frac{n}{\lambda}\right)^2 \int_{\theta} \bar{\gamma}(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta \quad (1.169)$$

Notons également que la variance des fluctuations de pente peut être déterminée à partir du spectre de rugosité. La démonstration est développée dans [12].

#### 1.4.9.2. Bande passante

La rugosité a peu de sens si elle n'est pas accompagnée d'une évaluation de la bande passante de mesure, c'est-à-dire l'intervalle de fréquences spatiales expérimentalement accessibles. Il est par exemple reconnu que dans le champ lointain et en incidence normale, la lumière ne perçoit pas les variations spatiales dont la période est plus faible que la longueur d'onde. Ce constat implique que la rugosité perçue dépend de la longueur d'onde de fonctionnement de l'instrument. Enfin, la définition rigoureuse de la bande passante permet de comparer les évaluations de la rugosité pouvant être fournies par différents instruments.

Dans le cas d'une large zone d'illumination sur une surface, l'argument du spectre de rugosité dans le plan  $(v_x, v_y)$  est :

$$\vec{v}_d - \vec{v}_i = \vec{v}_{i,d} = \left(\frac{n}{\lambda}\right) \begin{bmatrix} \sin\theta_d \cos\phi_d - \sin\theta_i \\ \sin\theta_d \sin\phi_d \end{bmatrix} \quad (1.170)$$

Nous pouvons déterminer le module au carré de cette fréquence spatiale :

$$|\vec{v}_{i,d}|^2 = \left(\frac{n}{\lambda}\right)^2 \{\sin^2 \theta_i + \sin^2 \theta_d - 2\sin\theta_i \sin\theta_d \cos\phi_d\} \quad (1.171)$$

Cette dernière expression montre que la plus grande fréquence spatiale accessible est obtenue pour  $\phi_d = \pi$  et  $\theta_d = \theta_i = \pi/2$ . Cette configuration est atteinte lorsque l'illumination est en incidence rasante, tout comme la mesure de diffusion dans le même demi-espace. La valeur maximale de fréquence spatiale qui en résulte est  $v_{max} = 2n/\lambda$ . D'autre part, la fréquence spatiale minimale est obtenue pour  $\phi_d = 0$  et  $\theta_d = \theta_i$ , c'est-à-dire lorsque la mesure est réalisée dans le demi-espace réfléchi. Théoriquement il serait possible d'atteindre une fréquence minimale à 0, mais cela ne serait réalisable que pour un faisceau d'illumination non divergent, ce qui n'est pas envisageable dans la pratique. Dans le cas d'un faisceau gaussien, défini par sa taille de *waist*  $\omega_0$ , cette fréquence minimale est estimée comme le double de largeur effective du paquet d'onde :

$$v_{min} \approx 2 \frac{\cos\theta_i}{\pi\omega_0} \quad (1.172)$$

L'intervalle des fréquences spatiales atteignables pour une illumination sous incidence normale, dans le cas d'un faisceau gaussien, est finalement :

$$\frac{2}{\pi\omega_0} \leq v_d \leq \frac{n}{\lambda} \quad (1.173)$$

Une modification de longueur d'onde ou de la divergence du faisceau d'illumination change cet intervalle. La définition de cette fréquence spatiale suit également l'hypothèse que le détecteur ne mesure que la diffusion et non la réflexion spéculaire.

### 1.4.9.3. Détermination expérimentale du spectre de rugosité

La détermination du spectre de rugosité de la surface d'un substrat est essentielle pour une description parfaite des fonctions de diffusion par une interface. Le modèle développé sera étendu au cas des multicouches dans la partie suivante (1.5) mais nous pouvons d'ores et déjà souligner l'importance de cette donnée. Le dépôt de couches successives sur le substrat crée des interfaces rugueuses entre chaque couche. La connaissance de la rugosité du substrat est nécessaire pour évaluer la rugosité de chacune des interfaces et ainsi prédire la réponse en diffusion du composant étudié. Nous avons également vu dans le paragraphe 1.4.9.1 que la fonction ARS est le produit d'un facteur de rugosité et d'une grandeur  $C$  indépendante de la rugosité. Ainsi, à partir d'une mesure expérimentale de l'ARS et de la forme théorique du facteur  $C$ , il est possible de déterminer le terme  $\gamma_e$ . Cette approche est la plus précise mais elle nécessite toutefois de disposer d'un diffusomètre précis, fonctionnant à la longueur d'onde d'intérêt.

D'autres méthodes peuvent être employées pour la détermination du spectre de rugosité comme l'interférométrie en lumière blanche et la microscopie par force atomique. Ces deux techniques échantillonnent la surface d'un substrat donné, le long de deux axes  $x$  et  $y$ , avec un pas  $\Delta$ . Le résultat d'une telle mesure est désigné par la fonction  $h(n\Delta, m\Delta)$ , où  $n$  et  $m$  sont des entiers compris entre 1 et  $N$ , avec  $N$  un entier puissance de 2, par exemple :  $N = 2^9 = 512$ . La surface échantillonnée est donc de dimension caractéristique  $L = N\Delta$ . Le repère de cet échantillonnage est recentré de manière que la position 0 soit au milieu de l'image. Les données sont ensuite soumises à une transformée de Fourier discrète pour donner un échantillonnage dans le plan de Fourier de dimensions  $N \times N$ . Ces données représentent la transformée  $\hat{h}(v_x, v_y)$  de la topographie échantillonnée sur  $(p\Delta v, q\Delta v)$ , où  $p$  et  $q$  varient entre  $-N/2$  et  $N/2$ . Le pas de fréquence spatiale  $\Delta v$  est égal à  $1/L$ . Cette transformée de Fourier discrète peut également être déterminée de la manière suivante :

$$\gamma(p\Delta v, q\Delta v) = \frac{1}{N^2} \left| \sum h(n\Delta, m\Delta) e^{-2i\pi \frac{np+mq}{N}} \right|^2 \quad (1.174)$$

Par application du critère de Shannon, le domaine fréquentiel accessible à la mesure s'étend de  $v_{min} = 1/L$  à  $v_{max} = 1/2\Delta$ . Il est nécessaire que la bande passante couverte par la mesure de rugosité soit compatible avec la fréquence spatiale associée à la longueur d'onde de diffusion recherchée. La mesure de rugosité doit percevoir les contributions rugueuses qui génèrent la diffusion évaluée. Dans le cas de la détermination du spectre de rugosité par mesure de la diffusion, la fréquence maximale atteignable sous incidence normale répond à la relation suivante :

$$\frac{n_0}{\lambda} = \frac{1}{2\Delta} \Rightarrow \Delta = \frac{\lambda}{2n_0} \quad (1.175)$$

Pour la technique par interférométrie à lumière blanche, la relation est optimisée par le ratio entre le grandissement  $M$  du système optique et le pas  $P$  de la matrice de détection de l'image :

$$\Delta = \frac{P}{M} \approx \frac{\lambda}{2} \quad (1.176)$$

La modification du grandissement du système optique modifie la bande passante accessible par la mesure. Il est alors possible de réaliser des mesures multi-échelles pour obtenir le spectre de rugosité sur plusieurs bandes passantes et couvrir ainsi la totalité des fréquences spatiales nécessaires.

#### 1.4.9.4. Caractéristiques statistiques d'une interface rugueuse

Dans la plupart des cas, les surfaces optiques sont isotropes et aléatoires. Leur spectre de rugosité est radial et décroît avec la fréquence spatiale. La méthode la plus précise pour déterminer le spectre de rugosité est d'utiliser des mesures d'ARS et les coefficients théoriques  $C$ . Toutefois, il est parfois nécessaire d'approcher le spectre de rugosité par une expression analytique. La forme de cette expression généralement utilisée est la somme d'une fonction gaussienne et d'une fonction exponentielle. La fonction d'autocorrélation approchée de cette manière peut s'écrire :

$$\Gamma(\tau) = \Gamma_g(\tau) + \Gamma_e(\tau) = \delta_g^2 e^{-\left(\frac{\tau}{L_g}\right)^2} + \delta_e^2 e^{-\frac{|\tau|}{L_e}} \quad (1.177)$$

Le spectre de rugosité associé prend la forme suivante :

$$\gamma(v) = \pi(\delta_g L_g)^2 e^{-(\pi L_g v)^2} + 2\pi(\delta_e L_e)^2 [1 + (2\pi L_e v)^2]^{-3/2} \quad (1.178)$$

Les quatre grandeurs  $\delta_g$ ,  $L_g$ ,  $\delta_e$  et  $L_e$  permettent d'ajuster le modèle. Les paramètres  $\delta$  symbolisent la rugosité, tandis que les paramètres  $L$  représentent la longueur de cohérence. L'intégration de ce spectre de rugosité n'a de sens que si elle est portée sur un intervalle inclus dans la bande passante de fréquences spatiales accessibles. Dans le cas de l'étude de la diffusion dans le spectre visible, des valeurs classiquement utilisées sont :  $L_g=0,1 \mu\text{m}$ ,  $\delta_g=1 \text{ nm}$ ,  $L_e=2 \mu\text{m}$  et  $\delta_e=1 \text{ nm}$ .

Notons que  $\sqrt{\delta_g^2 + \delta_e^2}$  ne définit pas exactement la rugosité de l'interface puisque cette grandeur est associée à une bande passante infinie. La valeur de la rugosité est plutôt l'intégration du spectre de rugosité sur la bande spectrale associée à la mesure.

#### 1.4.9.5. Application : détermination d'un spectre de rugosité d'un substrat

Le spectre de rugosité d'une surface peut être déterminé à partir d'une mesure d'interférométrie en lumière blanche. Cette mesure fournit un tableau de valeurs qui représente la topologie de la surface en chaque pixel de mesure.



Une campagne de plusieurs acquisitions a été menée sur un substrat de saphir avec un microscope interférométrique (ZYGO New View 7300). L'appareil dispose de plusieurs objectifs ( $\times 1$ ,  $\times 10$  et  $\times 100$ ) et d'un zoom (0,5 ou 1). Puisque la modification du grandissement du système modifie la bande passante des fréquences spatiales mesurées, des acquisitions successives en différentes configurations permettent de balayer un spectre large. Chaque image est ensuite traitée suivant la démarche présentée en 1.4.9.3 pour en extraire le spectre de rugosité  $\gamma$ . La Figure 1.9 montre les mesures réalisées sur un substrat de saphir dans différentes configurations. Chacune présente un grossissement et un zoom différent. Plus le grossissement est grand, plus la bande passante se déporte vers les grandes fréquences spatiales. Le modèle du spectre de rugosité décrit comme la somme d'une fonction gaussienne et d'une fonction exponentielle est représenté par  $\gamma_m$ . Cette grandeur est uniquement affichée sur une bande passante qui est celle de l'instrument SALSA présenté au Chapitre 2 et qui mesure les propriétés de diffusion des composants interférentiels.

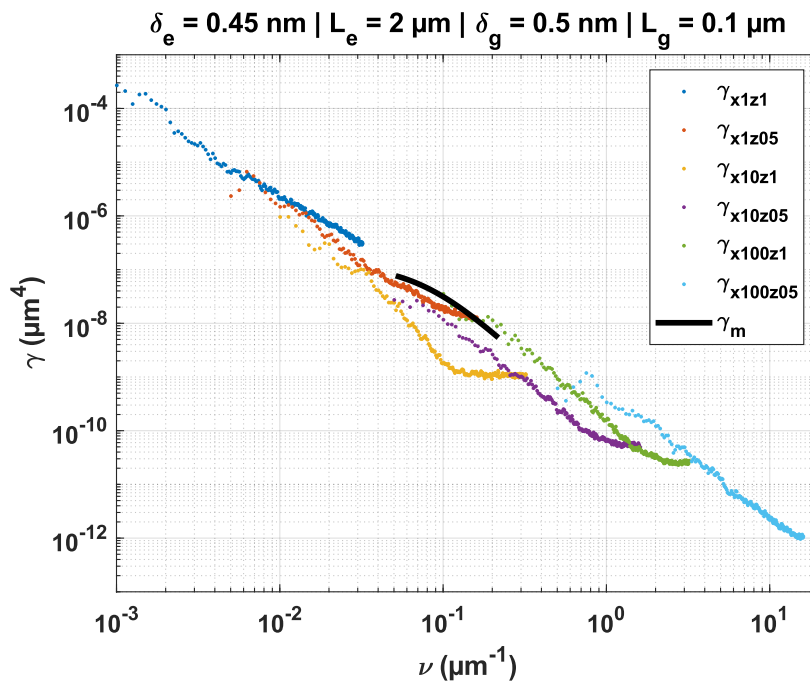


Figure 1.9 Extraction du spectre de rugosité d'un substrat de saphir par microscopie interférentielle (ZYGO New View 7300) et comparaison au modèle sur une bande spectrale d'intérêt.

## 1.5. Modèle électromagnétique de la diffusion par un multicouche

### 1.5.1. Introduction aux multicouches

Le paragraphe 1.4 a présenté le modèle électromagnétique de la diffusion par une interface physique rugueuse entre deux milieux aux propriétés optiques bien définies. Nous allons maintenant étendre ces résultats au cas d'un composant de  $p$  couches minces déposées sur un substrat. Le système possède  $p+1$  interfaces notées de  $0$  à  $p$  puisque nous considérons également le milieu incident et le substrat. Chaque interface est rugueuse, son profil est noté  $h_j(\vec{r})$  et elle est centrée sur une hauteur  $z_j$ .

De manière similaire au cas d'une seule interface, toutes les interfaces légèrement rugueuses sont équivalentes à un plan parfaitement lisse parcouru par un courant fictif magnétique ( $\mathcal{M}_j$ ) et un courant fictif électrique ( $\mathcal{J}_j$ ). Ces courants sont proportionnels aux champs idéaux d'excitation  $\vec{\mathcal{E}}_{j,e}$  et  $\vec{\mathcal{H}}_{j,e}$  à l'interface  $j$ . En utilisant le principe de superposition, le champ diffusé total est la somme des champs diffusés par chaque interface. La seule hypothèse formulée est que toutes les interfaces diffusent : aucun courant fictif n'est nul. Cette approche est valide uniquement pour des surfaces faiblement rugueuses qui ne perturbent pas le champ idéal d'excitation. Comme pour le cas d'une seule interface, le modèle reste du premier ordre. Les champs diffusés n'excitent pas de diffusion sur les autres interfaces : il n'y a pas de diffusion de la diffusion.

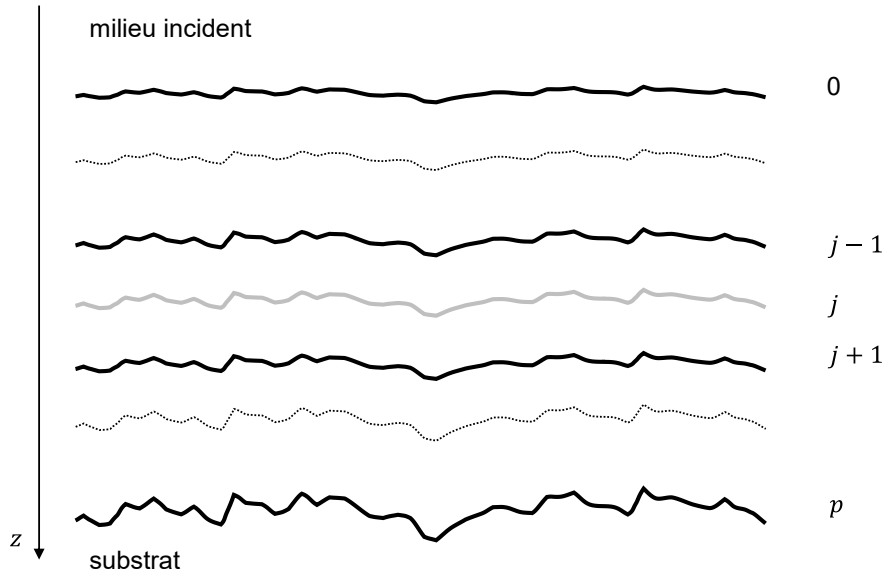


Figure 1.10 Illustration d'un composant de  $p$  couches minces déposées sur un substrat rugueux.

L'une des seules différences avec le cas précédent est que le champ entre les interfaces est stationnaire, les indices de réfraction sont alors remplacés par les admittances complexes.

### 1.5.2. Champ diffusé par une interface d'un multicouche

Considérons l'interface  $j$  séparant deux milieux d'indices optiques  $n_j$  et  $n_{j+1}$ , et qui est parcourue par des courants fictifs ( $\vec{\mathcal{J}}_j, \vec{\mathcal{M}}_j$ ). Ces courants sont responsables des champs diffusés stationnaires de part et d'autre de l'interface.

Pour  $z_{j-1} \leq z \leq z_j$  :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{E}}_{j,d}(\vec{\nu}_d, z) = \vec{\mathbb{A}}_{j,d}^+(\vec{\nu}_d) e^{i\alpha_j^d z} + \vec{\mathbb{A}}_{j,d}^-(\vec{\nu}_d) e^{-i\alpha_j^d z} \\ \vec{\mathbb{H}}_{j,d}(\vec{\nu}_d, z) = \vec{\mathbb{B}}_{j,d}^+(\vec{\nu}_d) e^{i\alpha_j^d z} + \vec{\mathbb{B}}_{j,d}^-(\vec{\nu}_d) e^{-i\alpha_j^d z} \end{cases} \quad (1.179)$$

Pour  $z_j \leq z \leq z_{j+1}$  :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}(\vec{\nu}_d, z) = \vec{\mathbb{A}}_{j+1,d}^+(\vec{\nu}_d) e^{i\alpha_{j+1}^d z} + \vec{\mathbb{A}}_{j+1,d}^-(\vec{\nu}_d) e^{-i\alpha_{j+1}^d z} \\ \vec{\mathbb{H}}_{j+1,d}(\vec{\nu}_d, z) = \vec{\mathbb{B}}_{j+1,d}^+(\vec{\nu}_d) e^{i\alpha_{j+1}^d z} + \vec{\mathbb{B}}_{j+1,d}^-(\vec{\nu}_d) e^{-i\alpha_{j+1}^d z} \end{cases} \quad (1.180)$$

Les amplitudes des champs diffusés sur cette interface  $j$  correspondent au cas d'une interface simple. Ces champs sont discontinus et les relations de passage sont :

$$\begin{cases} \vec{z} \wedge [\vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}(\vec{\nu}_d, z_j) - \vec{\mathbb{E}}_{j,d}(\vec{\nu}_d, z_j)] = \vec{\mathbb{M}}_j(\vec{\nu}_d) \\ \vec{z} \wedge [\vec{\mathbb{H}}_{j+1,d}(\vec{\nu}_d, z_j) - \vec{\mathbb{H}}_{j,d}(\vec{\nu}_d, z_j)] = \vec{\mathbb{J}}_j(\vec{\nu}_d) \end{cases} \quad (1.181)$$

Nous nous intéresserons surtout aux composantes tangentielles :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{H}}_{j,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) = Y'_{j,d} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) \\ \vec{\mathbb{H}}_{j+1,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) = Y_{j,d} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) \end{cases} \quad (1.182)$$

Les champs diffusés (normal, tangentiel, électrique et magnétique) ne sont plus continus contrairement aux champs idéaux. Les admittances ne sont plus continues non plus puisqu'elles sont liées au rapport entre les champs diffusés. L'admittance complexe est alors une fonction discontinue à l'interface  $j$ . Elle doit être calculée par récurrence dans son domaine de continuité ( $z_j < z < z_p$ ), c'est-à-dire en partant de l'admittance de l'interface  $p$  qui sépare la première couche du substrat (d'indice effectif  $\tilde{n}_s^d$ ). L'admittance  $Y'_{j,d}$  est calculée par récurrence dans sa région de continuité ( $0 < z < z_j$ ), en partant de l'interface entre la dernière couche et le superstrat (indice effectif de l'air  $-\tilde{n}_0^d$ ). En substituant (1.182) dans (1.181), nous obtenons :

$$-Y_{j,d} \vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) + Y'_{j,d} \vec{\mathbb{E}}_{j,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) = \vec{\mathbb{J}}_j(\vec{\nu}_d) \quad (1.183)$$

Nous pouvons maintenant calculer  $\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{M}}_j$  en utilisant la première équation de (1.181) :

$$\vec{z} \wedge \vec{\mathbb{M}}_j(\vec{\nu}_d) = -\vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) + \vec{\mathbb{E}}_{j,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) \quad (1.184)$$

Nous obtenons le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \vec{\mathbb{E}}_{j,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) = -\frac{\vec{\mathbb{J}}_j(\vec{\nu}_d) - Y_{j,d} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{M}}_j(\vec{\nu}_d)}{Y_{j,d} - Y'_{j,d}} \\ \vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}^T(\vec{\nu}_d, z_j) = -\frac{\vec{\mathbb{J}}_j(\vec{\nu}_d) - Y'_{j,d} \vec{z} \wedge \vec{\mathbb{M}}_j(\vec{\nu}_d)}{Y_{j,d} - Y'_{j,d}} \end{cases} \quad (1.185)$$

Ces relations sont analogues à celles obtenues pour une seule interface, les indices de réfraction ont été remplacés par les admittances complexes. Il nous reste maintenant à déterminer le champ d'excitation pour chaque interface et les courants fictifs électriques et magnétiques.

### 1.5.3. Champ d'excitation sur une interface d'un multicouche

Nous considérons un champ d'excitation qui vérifie l'hypothèse du faisceau faiblement divergent. Sa direction de propagation moyenne forme un angle  $\theta_0^i$  avec la direction normale du multicouche. La composante élémentaire du champ incident sur l'interface 0 est de la forme :

$$\vec{A}_i^+(\vec{v}_e) = \hat{s}_e(\vec{v}_e) \vec{E}_i^T \quad (1.186)$$

avec  $\hat{s}_e$  la transformée de Fourier de la surface illuminée sur l'interface 0. Seules les composantes tangentielles des champs seront nécessaires pour la détermination des champs diffusés. En utilisant la transformation des champs par les admittances, nous pouvons écrire :

$$\vec{E}_{j,e}^T(\vec{v}_e, z_j) = \frac{1 + r_0^e}{\prod_{l=1}^j \left[ \cos \delta_l^e - i \left( \frac{Y_{l,e}}{\tilde{n}_l^e} \right) \sin \delta_l^e \right]} \hat{s}_e(\vec{v}_e) \vec{E}_i^T \quad (1.187)$$

avec  $\delta_l^e = \alpha_l^e d_l$ , où  $d_l$  est l'épaisseur de la couche  $l$  et  $r_0^e = \frac{\tilde{n}_0^e - Y_{0,e}}{\tilde{n}_0^e + Y_{0,e}}$ .

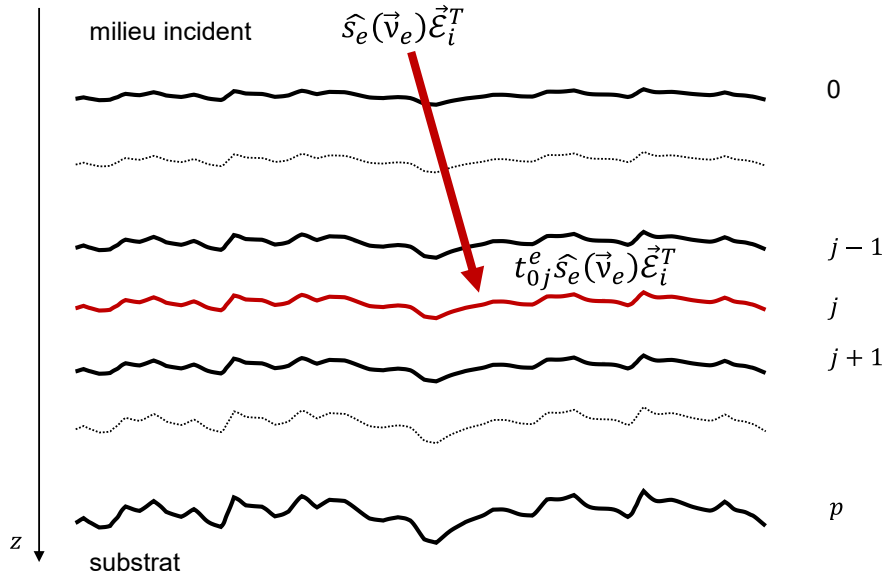


Figure 1.11 Le champ d'excitation de l'interface  $j$  est le produit du champ incident par le coefficient de transmission du demi-empilement supérieur.

Nous pouvons aussi écrire cette dernière relation sous une autre forme :

$$\vec{E}_{j,e}^T(\vec{v}_e, z_j) = \left[ \vec{A}_{j,e}^+(\vec{v}_e) e^{i\alpha_j^e z_j} + \vec{A}_{j,e}^-(\vec{v}_e) e^{-i\alpha_j^e z_j} \right] = t_{0j}^e \hat{s}_e(\vec{v}_e) \vec{E}_i^T \quad (1.188)$$

avec

$$t_{0j}^e = \frac{1 + r_0^e}{\prod_{l=1}^j \left[ \cos \delta_l^e - i \left( \frac{Y_{l,e}}{\tilde{n}_l^e} \right) \sin \delta_l^e \right]} \quad (1.189)$$

Ces relations restent vraies dans le cas d'une seule interface :  $t_{00}^e = 1 + r_0^e$ . Le champ d'excitation d'une interface  $j$  est proportionnel au champ d'excitation incident sur le composant. Il est corrigé par le coefficient de transmission du demi-empilement supérieur puisqu'il traverse toutes les couches de 1 à  $j$  pour arriver à l'interface  $j$ .

#### 1.5.4. Termes de sources sur une interface d'un multicouche

Le raisonnement employé au paragraphe 1.4.4 pour déterminer les courants fictifs sur une simple interface est étendu au cas d'un multicouche. Le champ d'excitation sur l'interface  $j$  est déterminé en fonction du demi-empilement supérieur, du demi-empilement inférieur et du champ d'excitation incident sur le composant. La démonstration complète de ces calculs est détaillée dans [12], nous exposerons ici simplement les résultats. Les expressions littérales du courant fictif électrique et du courant fictif magnétique à l'interface  $j$  sont :

$$\vec{J}_j(\vec{v}_d) = i\{\alpha_{j+1}^i \tilde{n}_{j+1}^i - \alpha_j^i \tilde{n}_j^i\} t_{0j}^i [\hat{h}_j \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \vec{\mathcal{E}}_i^T \quad (1.190)$$

$$\vec{z} \wedge \vec{M}_j(\vec{v}_d) = iY_{j,i} t_{0j}^i [\hat{h} \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \times \left\{ \left[ \frac{\alpha_{j+1}^i}{\tilde{n}_{j+1}^i} - \frac{\alpha_j^i}{\tilde{n}_j^i} \right] \vec{\mathcal{E}}_i^T + \frac{4\pi^2}{\alpha_{j+1}^i \tilde{n}_{j+1}^i} \left[ \frac{\tilde{\epsilon}_{j+1} - \tilde{\epsilon}_j}{\tilde{\epsilon}_j} \right] (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \{ \vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T \} \right\} \quad (1.191)$$

#### 1.5.5. Champs diffusés par une interface d'un multicouche

Nous disposons désormais d'expressions pour les courants fictifs. Nous pouvons alors déterminer complètement la forme des champs diffusés de part de d'autre de l'interface  $j$  en remplaçant les expressions des courants fictifs dans les équations de (1.185).

$$\vec{\mathbb{E}}_{j,d}^T(\vec{v}_d, z_j) = -\frac{it_{0j}^i}{Y_{j,d} - Y'_{j,d}} \times \left\{ \left[ (\alpha_{j+1}^i \tilde{n}_{j+1}^i - \alpha_j^i \tilde{n}_j^i) - Y_{j,d} Y_{j,i} \left( \frac{\alpha_{j+1}^i}{\tilde{n}_{j+1}^i} - \frac{\alpha_j^i}{\tilde{n}_j^i} \right) \right] \vec{\mathcal{E}}_i^T - 4\pi^2 (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \frac{Y_{j,d} Y_{j,i}}{\alpha_{j+1}^i \tilde{n}_{j+1}^i} \left[ \frac{\tilde{\epsilon}_{j+1} - \tilde{\epsilon}_j}{\tilde{\epsilon}_j} \right] \{ \vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T \} \right\} [\hat{h}_j \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \quad (1.192)$$

et

$$\vec{\mathbb{E}}_{j+1,d}^T(\vec{v}_d, z_j) = -\frac{it_{0j}^i}{Y_{j,d} - Y'_{j,d}} \times \left\{ \left[ (\alpha_{j+1}^i \tilde{n}_{j+1}^i - \alpha_j^i \tilde{n}_j^i) - Y'_{j,d} Y_{j,i} \left( \frac{\alpha_{j+1}^i}{\tilde{n}_{j+1}^i} - \frac{\alpha_j^i}{\tilde{n}_j^i} \right) \right] \vec{\mathcal{E}}_i^T - 4\pi^2 (\vec{v}_d - \vec{v}_i) \frac{Y'_{j,d} Y_{j,i}}{\alpha_{j+1}^i \tilde{n}_{j+1}^i} \left[ \frac{\tilde{\epsilon}_{j+1} - \tilde{\epsilon}_j}{\tilde{\epsilon}_j} \right] \{ \vec{v}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i^T \} \right\} [\hat{h}_j \star \hat{s}_e]_{\vec{v}_d} \quad (1.193)$$

#### 1.5.6. Champs diffusés globaux par un multicouche

Suivant le principe de superposition, les champs diffusés globaux sont la somme des champs diffusés par chacune des  $p + 1$  interfaces, dans le demi-espace supérieur

(diffusion réfléctive) et dans le demi-espace inférieur (diffusion transmissive). Ces champs diffusés globaux sont exprimés dans le substrat et dans le superstrat. Le champ diffusé dans le substrat est la somme des contributions diffusées transmises. Pour  $z \geq z_p$  :

$$\vec{\mathcal{E}}_{s,d}^T(\vec{r}, z) = \int_{\vec{v}_d} \vec{\mathbb{A}}_{s,d}^{T+}(\vec{v}_d) e^{2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} e^{i\alpha_s^d(z-z_p)} d^2\vec{v}_d \quad (1.194)$$

avec

$$\vec{\mathbb{A}}_{s,d}^{T+}(\vec{v}_d) = \vec{\mathbb{E}}_{p+1,d}^T(\vec{v}_d, z_p) + \sum_{j=1}^p t_{jp}^d \vec{\mathbb{E}}_{j,d}^T(\vec{v}_d, z_{j-1}) \quad (1.195)$$

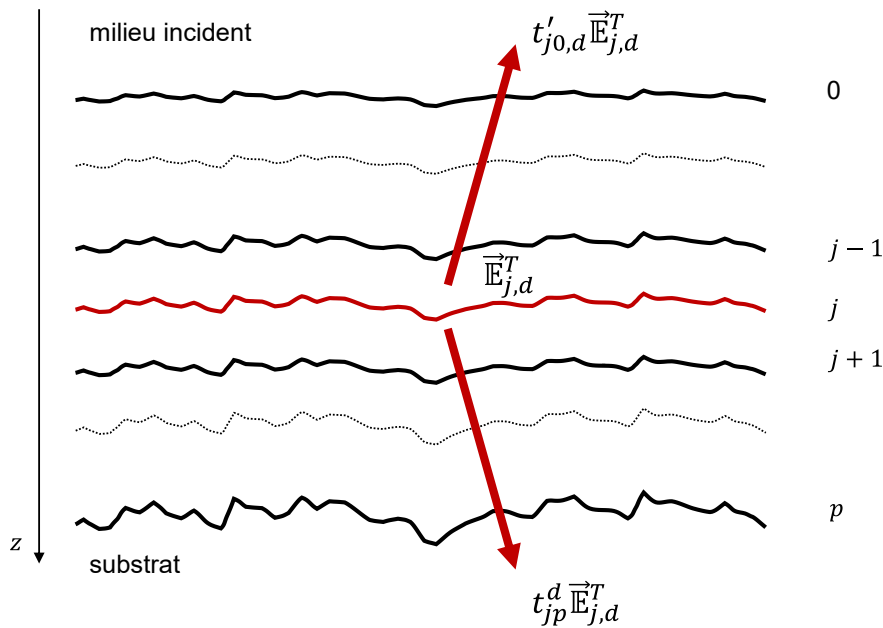


Figure 1.12 Le champ diffusé dans le substrat ou dans le superstrat par l'interface  $j$  est le produit du champ par le coefficient de transmission du demi-empilement inférieur ou supérieur. Par superposition, les champs diffusés par chaque interface s'additionnent.

Puisque ce champ traverse le demi-empilement inférieur, il faut déterminer le coefficient de transmission des couches  $j$  à  $p$ . En utilisant la formule du coefficient de transmission en amplitude donnée au paragraphe 1.2.2.6, nous obtenons :

$$t_{jp}^d = \frac{1}{\prod_{m=j}^p \left[ \cos \delta_m^d - i \left( \frac{Y_{m,d}}{\tilde{n}_m^d} \right) \sin \delta_m^d \right]} \quad \text{avec} \quad \delta_m^d = \alpha_m^d d_m \quad (1.196)$$

De même, le champ diffusé dans le milieu incident (ou superstrat) est la somme des contributions diffusées réfléchies. Il faut également prendre en compte le coefficient de transmission du demi-empilement supérieur traversé par le champ diffusé. Pour  $z \leq 0$  :

$$\vec{\mathcal{E}}_{0,d}^T(\vec{r}, z) = \int_{\vec{v}_d} \vec{\mathbb{A}}_{0,d}^{T-}(\vec{v}_d) e^{2i\pi\vec{v}_d \cdot \vec{r}} e^{-i\alpha_0^d z} d^2\vec{v}_d \quad (1.197)$$

avec

$$\vec{\mathbb{A}}_{0,d}^{T-}(\vec{\nu}_d) = \vec{\mathbb{E}}_{0,d}^{T-}(\vec{\nu}_d, 0) + \sum_{j=1}^p t'_{j0,d} \vec{\mathbb{E}}_{j,d}^{T-}(\vec{\nu}_d, z_j) \quad (1.198)$$

et

$$t'_{j0,d} = \frac{1}{\prod_{m=1}^j \left[ \cos \delta_m^d + i \left( \frac{Y'_{m-1,d}}{\tilde{n}_m^d} \right) \sin \delta_m^d \right]} \quad \text{avec} \quad \delta_m^d = \alpha_m^d d_m \quad (1.199)$$

### 1.5.7. ARS d'un multicouche

Le paragraphe 1.5.4 a montré que les courants fictifs sont tous proportionnels à  $[\hat{h}_j * \hat{s}_e]$ . Les résultats des deux paragraphes précédents ont prouvé que les composantes tangentielles des champs élémentaires diffusés par le multicouche dans l'un des deux milieux extrêmes peut être décrit par une relation générale :

$$\vec{\mathbb{A}}_d^{T\pm} = \sum_{j=0}^p C_j^{\pm} [\hat{h}_j * \hat{s}_e] \vec{\mathcal{E}}_i^{T\pm} \quad (1.200)$$

Cette forme générale est valable quel que soit l'état de polarisation étudié (SS, SP, PS ou PP). Seule la grandeur  $[\hat{h}_j * \hat{s}_e]$  est indépendante de la polarisation. Les coefficients  $C_j^{\pm}$  incluent les sources de diffusion et les transformations induites par la traversée des couches de l'empilement vers le substrat ou vers le milieu incident. Le signe + en exposant de  $C_j^{\pm}$  décrit les contributions au champ diffusé émergent dans le substrat et associé à une onde progressive. Le signe - représente les contributions au champ diffusé émergent dans le superstrat et associé à une onde rétrograde.

Les distributions de diffusion qui apparaissent dans chacun des deux milieux extrêmes pour une seule interface ont été décrites par la relation (1.154) et peuvent se réécrire :

$$ARS^{\pm} = \left( \frac{n_{\pm}}{\lambda} \right)^2 \frac{\tilde{n}_{\pm}^d |\vec{\mathbb{A}}_d^{T\pm}|^2}{\tilde{n}_0^i S |\vec{\mathcal{E}}_i^{T\pm}|^2} \cos \theta_{\pm}^d \quad (1.201)$$

Posons,

$$D_j^{\pm} = \frac{n_{\pm}}{\lambda} C_j^{\pm} \sqrt{\frac{\tilde{n}_{\pm}^d}{\tilde{n}_0^i} \cos \theta_{\pm}^d} \quad (1.202)$$

Nous pouvons alors réécrire l'équation de l'ARS en utilisant ces coefficients  $D_j^{\pm}$  :

$$ARS^\pm = \frac{1}{S} \left| \sum_{j=0}^p D_j^\pm [\hat{h}_j \star \hat{s}_e] \right|^2 \quad (1.203)$$

En remplaçant le produit de convolution  $\hat{h}_j \star \hat{s}_e$  par la transformée de Fourier  $\hat{h}_{e,j}$  du produit  $h_j \times s_e$ , nous obtenons :

$$ARS^\pm = \frac{1}{S} \sum_{j=0}^p |D_j^\pm \hat{h}_{e,j}|^2 + \frac{1}{S} \sum_{j=0}^p \sum_{k \neq j} D_j^\pm [D_k^\pm]^* \hat{h}_{e,j} \hat{h}_{e,k}^* = ARS_{inc}^\pm + ARS_{coh}^\pm \quad (1.204)$$

En conséquence, l'ARS se décompose comme la somme de deux termes indépendants. Le terme  $ARS_{inc}^\pm$  est un terme quadratique, toujours positif et décrit la composante *incohérente* de la diffusion. En revanche, le terme  $ARS_{coh}^\pm$  peut être positif ou négatif et décrit la composante *cohérente* de la diffusion. Nous remarquons que le profil des surfaces est complètement indépendant des autres caractéristiques du problème (longueur d'onde, angle d'incidence, indices de réfraction, épaisseurs des couches, polarisation, etc.).

### 1.5.8. Corrélation entre les interfaces

Rappelons que le spectre de rugosité d'une surface est défini de la manière suivante :

$$\gamma_e(\vec{v}) = \frac{1}{S} |\hat{h}_e(\vec{v})|^2 \quad \text{avec} \quad h_e(\vec{r}) = h(\vec{r})s_e(\vec{r}) \quad (1.205)$$

Nous avons expliqué dans le paragraphe 1.4.5 que lorsque la divergence du faisceau incident tend vers 0, ce spectre de rugosité tend vers une expression asymptotique  $\gamma(\vec{v})$ . Celle-ci est seulement caractérisée par la topographie de la surface. Nous pouvons alors réécrire la composante *incohérente* de la diffusion en fonction de  $\gamma_{e,j} = (1/S) |\hat{h}_{e,j}|^2$ , le spectre de rugosité effectif de l'interface  $j$ .

$$ARS_{inc}^\pm = \frac{1}{S} \sum_{j=0}^p |D_j^\pm \hat{h}_{e,j}|^2 = \sum_{j=0}^p |D_j^\pm|^2 \gamma_{e,j} \quad (1.206)$$

De même pour la composante *cohérente* de la diffusion :

$$ARS_{coh}^\pm = \frac{1}{S} \sum_{j=0}^p \sum_{k \neq j} D_j^\pm [D_k^\pm]^* \hat{h}_{e,j} \hat{h}_{e,k}^* = 2\Re \left\{ \sum_{j=0}^{p-1} \sum_{k > j} D_j^\pm [D_k^\pm]^* \gamma_{e,jk} \right\} \quad (1.207)$$

avec

$$\gamma_{e,jk} = \frac{1}{S} \hat{h}_{e,j} \hat{h}_{e,k}^* \quad (1.208)$$



Cette dernière quantité  $\gamma_{e,jk}$  représente le spectre d'intercorrélation pour les interfaces  $j$  et  $k$ . C'est également la transformée de Fourier de la fonction d'intercorrélation  $\Gamma_{e,jk}$  :

$$\Gamma_{e,jk} = \frac{1}{S} [h_{e,j} \star h'_{e,k}] \xrightarrow{\text{TF}} \frac{1}{S} \hat{h}_{e,j} \hat{h}_{e,k}^* \quad (1.209)$$

avec  $h'_{e,k}(\vec{r}) = h_{e,k}(-\vec{r})$ . Cette fonction évalue la similitude entre les topographies effectives de deux interfaces  $j$  et  $k$ . Nous introduisons maintenant un coefficient de corrélation normalisé  $\alpha_{e,jk}$ , défini par :

$$\gamma_{e,jk} = \alpha_{e,jk} \sqrt{\gamma_{e,j} \gamma_{e,k}} \quad (1.210)$$

que nous pouvons développer comme :

$$\alpha_{e,jk} = \frac{\frac{1}{S} \hat{h}_{e,j} \hat{h}_{e,k}^*}{\sqrt{\frac{1}{S} |\hat{h}_{e,j}|^2 \frac{1}{S} |\hat{h}_{e,k}|^2}} = \frac{[\hat{h}_j \star \hat{s}_i][\hat{h}_k \star \hat{s}_i]^*}{\sqrt{|\hat{h}_j \star \hat{s}_i|^2 |\hat{h}_k \star \hat{s}_i|^2}} \quad (1.211)$$

Sous ces dernières formulations, le flux diffusé peut alors s'écrire :

$$ARS^\pm = \sum_{j=0}^p |D_j^\pm|^2 \gamma_{e,j} + 2\Re \left\{ \sum_{j=0}^{p-1} \sum_{k>j} D_j^\pm [D_k^\pm]^* \alpha_{e,jk} \sqrt{\gamma_{e,j} \gamma_{e,k}} \right\} \quad (1.212)$$

### 1.5.9. Passage au TIS et approximation

Le TIS (*Total Integrated Scattering*) est une fonction caractéristique de la diffusion, la première à avoir été mesurée dès les années 1960 à l'aide d'une sphère intégrante. Cette grandeur sans unité se calcule séparément dans les deux demi-espaces autour d'un échantillon. Le TIS en réflexion, noté également  $TIS_R$ , est le rapport entre le flux diffusé dans le demi-espace réfléchi et le flux incident. La réflexion totale diffuse correspond à une intégration de toutes les contributions angulaires de la diffusion, cette grandeur est donc définie uniquement spectralement. Le TIS peut être calculé à partir de l'ARS en intégrant toutes les contributions angulaires :

$$TIS(\lambda) = \int_{\phi>0}^{2\pi} \int_{\theta>0}^{\frac{\pi}{2}} ARS(\lambda, \theta) \sin \theta \, d\theta d\phi \quad (1.213)$$

Sous l'hypothèse d'isotropie de la rugosité de surface et sous incidence normale, les indicatrices de diffusion vérifient une symétrie de révolution par rapport à la normale à l'échantillon, quel que soit l'état de polarisation. Nous obtenons alors :

$$TIS(\lambda) = 2\pi \int_{\theta>0}^{\frac{\pi}{2}} ARS(\lambda, \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (1.214)$$

### 1.5.10. Application à un filtre Fabry-Perot

L'interféromètre de Fabry-Perot a été mis au point au début du XX<sup>ème</sup> siècle par Charles Fabry et Alfred Perot. Il est constitué de deux miroirs semi-réfléchissants placés face à face et séparés par une lame d'air. Ce montage permet notamment de filtrer des composantes spectrales de manière très spécifique. Une structure analogue est réalisable par dépôt de couches minces optiques. C'est d'ailleurs une formule souvent choisie pour réaliser des fonctions passe-bandes. Cette structure est un exemple commun de composant multicouche dont les propriétés en diffusion présentent des comportements remarquables. Le filtre est composé d'une alternance de couches de deux matériaux différents : un matériau d'indice optique haut  $n_H$ , et un autre d'indice optique bas  $n_L$ . Les épaisseurs des couches sont déterminées relativement à la longueur d'onde de centrage du filtre Fabry-Perot. Cette longueur d'onde notée  $\lambda_0$  est la valeur pour laquelle la transmittance du filtre est maximale. Les deux miroirs entourant la cavité sont des miroirs de Bragg : des empilements de couches d'épaisseur dite quart d'onde, à la longueur d'onde  $\lambda_0$  et à l'angle d'incidence  $\theta_0$ . L'épaisseur physique de ces couches est :

$$d_i = \frac{\lambda_0}{4n_i \cos \theta_0} \quad (1.215)$$

avec  $i$  l'indice désignant la nature du matériau utilisé ( $i = H$  ou  $L$ ). Une couche quart d'onde d'indice *haut* sera notée  $H$ , tandis qu'une couche quart d'onde d'indice *bas* sera notée  $L$ .

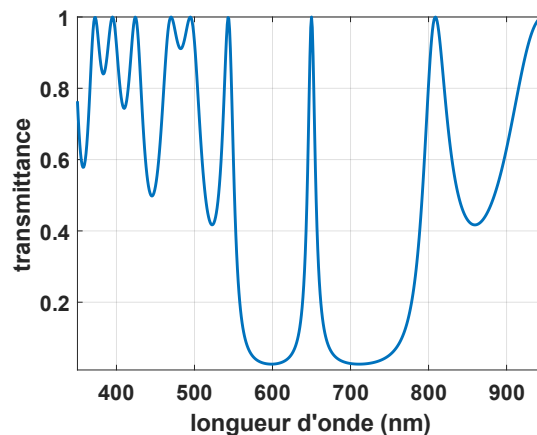


Figure 1.13 Transmittance de la cavité Fabry-Perot centrée à 650 nm tracée en échelle linéaire.

Nous utiliserons un empilement Fabry-Perot HLHLH 6L HLHLH. La cavité possède une épaisseur de 6 fois la couche quart d'onde et elle est d'indice optique *bas*. L'épaisseur de la cavité est toujours un multiple entier pair de celle de la couche quart d'onde. Choisissons une longueur d'onde de centrage  $\lambda_0=650$  nm, des indices optiques non dispersifs :  $n_H=2,15$  et  $n_L=1,45$  et un angle d'incidence nul. Supposons dans un premier temps que le substrat possède le même indice que l'air. Le composant est complètement symétrique et éclairé en incidence normale. La transmittance en échelle linéaire de ce composant est présentée en Figure 1.13. Nous reconnaissons la bande passante centrée à

650 nm et entourée de deux zones de réjection. La cavité étant assez simple, les réjections ne sont pas très fortes ( $\sim 3 \cdot 10^{-2}$ ). Un tracé en échelle logarithmique en Figure 1.14 permet néanmoins de mieux visualiser ces réjections. Une superposition de plusieurs cavités amplifierait davantage ces valeurs de réjection.

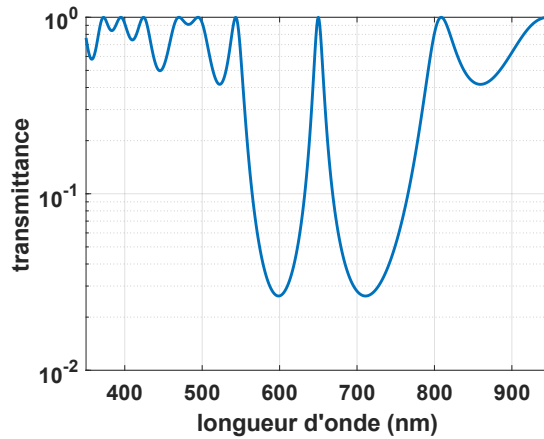


Figure 1.14 Transmittance de la cavité Fabry-Perot centrée à 650 nm tracée en échelle logarithmique.

Nous avons vu précédemment que la diffusion est générée par le champ électrique aux interfaces : plus ce champ d'excitation est intense, plus la diffusion sera importante. La Figure 1.15 présente les variations du champ électrique dans la structure, pour une illumination à 650 nm, polarisée SS et en incidence normale. Les traits pointillés verticaux indiquent les interfaces physiques entre les couches. Nous observons des maxima d'intensité sur 4 interfaces HL et 4 points d'annulation sur des interfaces LH. Les flux diffusés dans l'air par les deux interfaces à gauche de la cavité sont en opposition de phase avec ceux diffusés par les deux interfaces à droite de la cavité. Les flux diffusés dans la direction d'incidence sont donc annulés par effet d'interférence destructive.

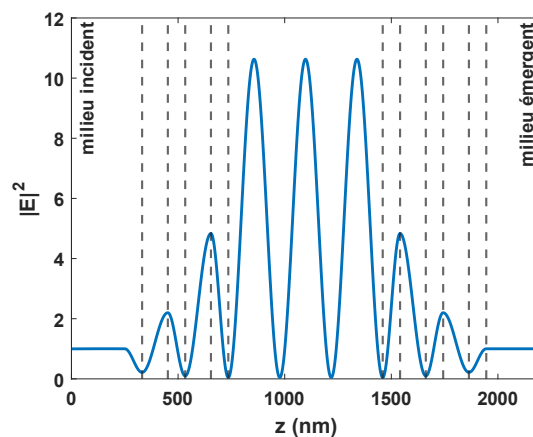


Figure 1.15 Variations de l'intensité du champ électrique à 650 nm dans la structure Fabry-Perot.

Cette annulation totale de la diffusion s'observe uniquement dans le cas de couches complètement *corrélées*, dans le plan d'incidence et pour des états de polarisation SS et PP. Cette configuration de couches *corrélées* est atteinte lorsque la rugosité du substrat

est parfaitement reproduite à toutes les interfaces. Nous supposons également que le coefficient de corrélation est le même pour toutes les couches :

$$\alpha_{e,jk} = \alpha_e = 1 \quad \forall j, k \quad (1.216)$$

Rappelons que la configuration choisie est purement théorique puisqu'elle suppose que l'indice du substrat soit celui de l'air. La Figure 1.16 présente l'ARS calculée de cette structure et montre également en comparaison la diffusion par un substrat de silice classique.

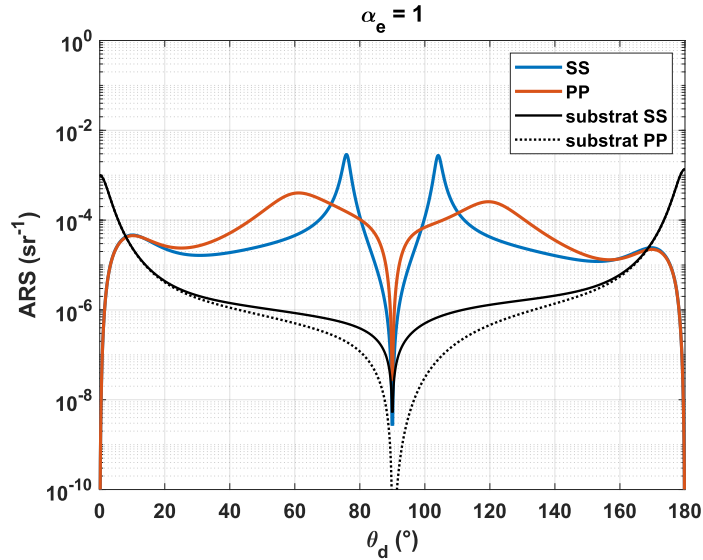


Figure 1.16 ARS de la cavité Fabry-Perot à 650 nm pour des couches corrélées ( $\alpha_e = 1$ ).

La configuration dans laquelle les couches sont *décorrélées* ( $\alpha_{e,jk} = \alpha_e = 0$ ) en Figure 1.17 présente des résultats très différents et il n'y a pas d'annulation de la diffusion aux positions  $0^\circ$  et  $180^\circ$ .

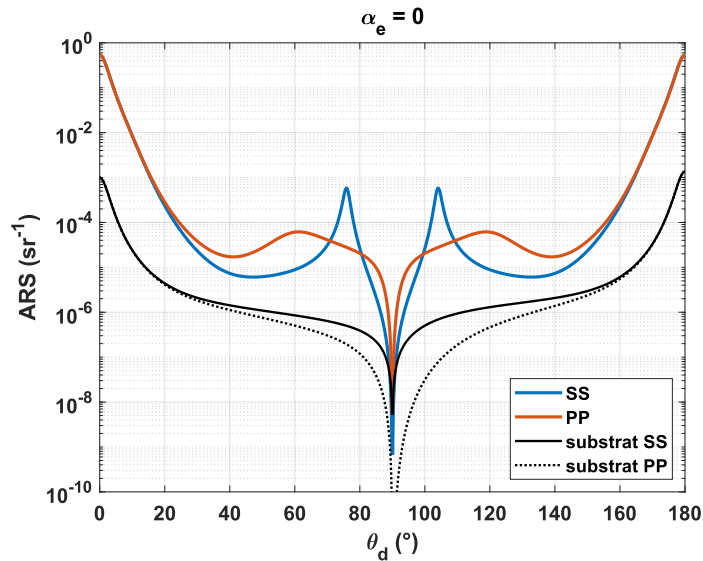


Figure 1.17 ARS de la cavité Fabry-Perot à 650 nm pour des couches décorrélées ( $\alpha_e = 0$ ).

Une comparaison sur plusieurs coefficients de corrélation en Figure 1.18 montre que le comportement des couches *corrélées* est très atypique et extrêmement différent des autres valeurs. Nous remarquons par exemple que le cas  $\alpha_e = 0,99$  ressemble plus au cas *décorrélé* qu'à la configuration *corrélée*. La diffusion aux petits angles, c'est-à-dire proches de  $0^\circ$  ou de  $180^\circ$ , dépend fortement de la corrélation. En revanche, la diffusion aux grands angles en est presque indépendante. Les comportements en fonction de l'état de polarisation sont également caractéristiques des filtres Fabry-Perot. Les bosses concaves mesurées dans le plan d'incidence forment des lobes de diffusion autour du composant. L'angle de diffusion  $\theta_d$  est mesuré depuis la normale de l'échantillon. Le demi-espace réfléchi est compris entre  $0$  et  $90^\circ$ , le demi-espace transmis entre  $90$  et  $180^\circ$ . Enfin, le remplacement du substrat d'air par un substrat de silice supprime les effets d'annulation de la diffusion pour les couches *corrélées*, comme illustré par la Figure 1.19.

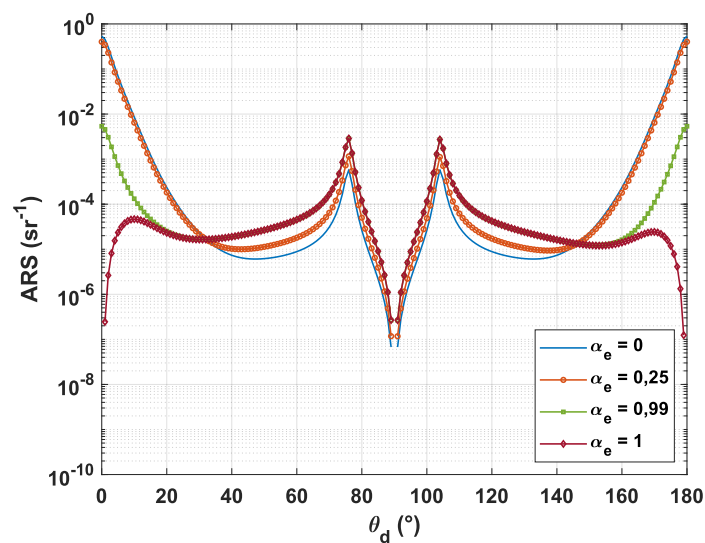


Figure 1.18 ARS de la cavité Fabry-Perot à 650 nm, en polarisation SS et pour diverses valeurs de  $\alpha_e$ .

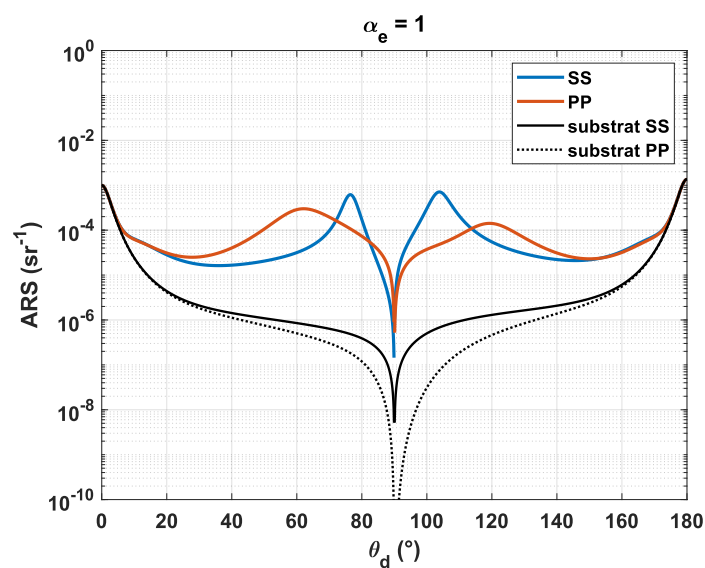


Figure 1.19 ARS de la cavité Fabry-Perot déposée sur un substrat de silice, à 650 nm et pour  $\alpha_e = 1$ .

Le calcul de l'ARS peut être étendu sur une gamme spectrale plus large. La Figure 1.20 et la Figure 1.21 présentent les indicatrices de diffusion de ce même composant. La configuration choisie est celle de couches corrélées, sur une plage de longueur d'onde de 450 nm à 950 nm et sur une plage angulaire de 0 à 180°. Une représentation de carte en fausses couleurs est généralement préférée pour faciliter la lecture de la figure.

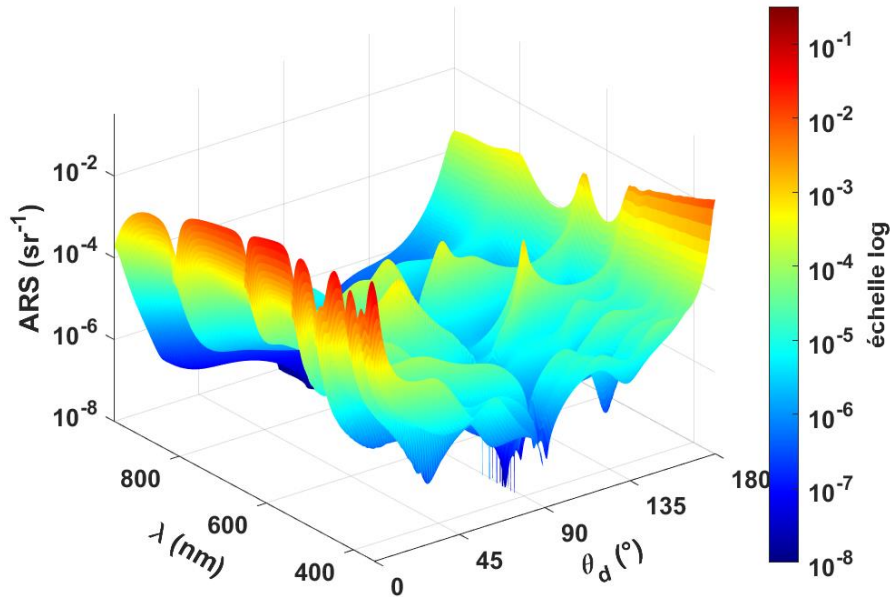


Figure 1.20 Représentation en 3 dimensions de l'ARS de la cavité Fabry-Pérot selon l'angle de diffusion  $\theta_d$  et la longueur d'onde  $\lambda$ . L'axe vertical est représenté en échelle logarithmique.

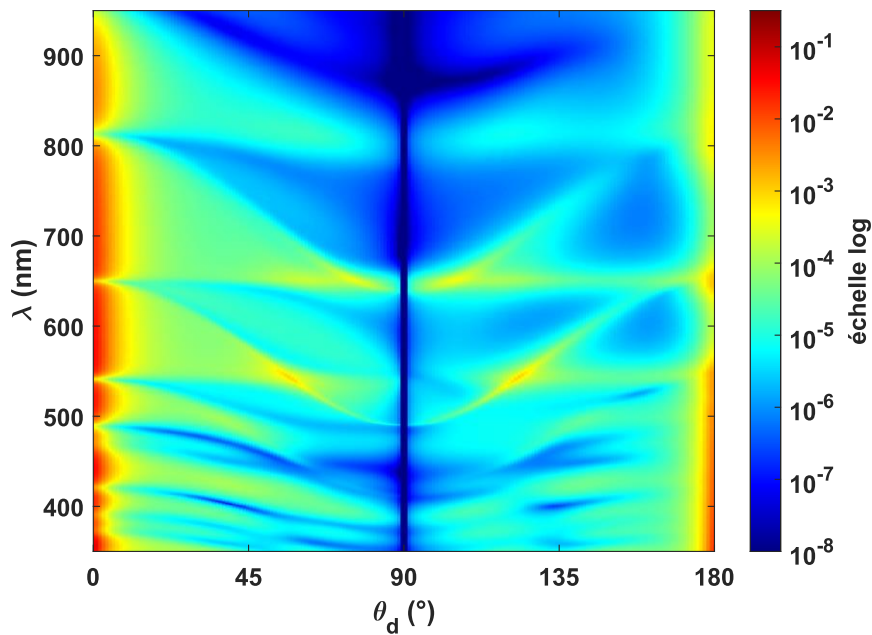


Figure 1.21 Représentation identique à la Figure 1.20 mais en 2 dimensions, sous forme de carte en fausses couleurs.

Les lobes de diffusion observés à 650 nm et proches de 90° (voir Figure 1.19) se retrouvent également sur les représentations 2D ou 3D de l'ARS sur une plage spectrale plus large. Ces observations sur un large spectre permettent d'apprécier les variations d'ARS selon la longueur d'onde de travail. Ces représentations fournissent bien une description spectrale et angulaire des indicatrices de diffusion, comme cela était attendu.

En complément, nous pouvons également intégrer angulairement les valeurs d'ARS afin de déterminer la grandeur TIS en transmission. Sur ce type de composant, la réponse en diffusion  $TIS_T$  ressemble fortement à la réponse spéculaire en transmission mais simplement décalée vers des niveaux plus faibles. L'angle d'incidence étant nul, la réponse en transmission est identique pour les états de polarisation S et P. Cependant, le TIS dépend de l'état de polarisation, même pour une incidence normale.

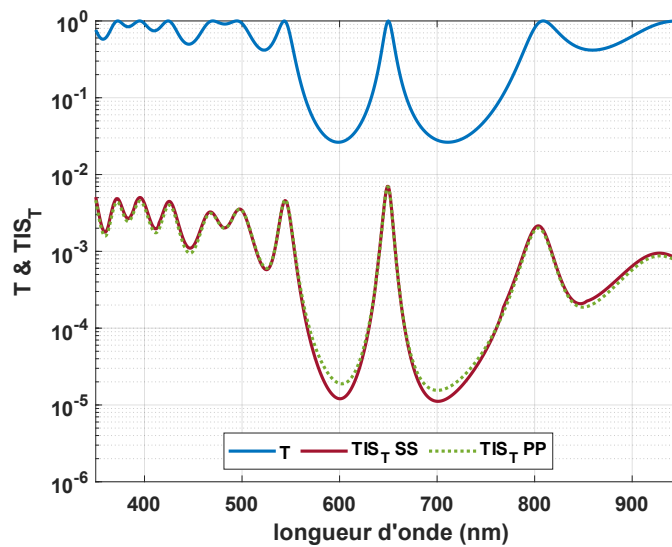


Figure 1.22 Transmittance et TIS en transmission de la cavité Fabry-Perot.

## 1.6. Implémentations numériques

Des implémentations numériques des modèles électromagnétiques de la réponse spéculaire et de la réponse diffuse ont été développées et utilisées dans le cadre de ce travail. Les pseudo-codes de ces fonctions sont présentés au Tableau 1.1 et au Tableau 1.2 pour illustrer les différentes étapes des calculs numériques. La complexité du calcul de la diffusion est supérieure à celle des propriétés spéculaires.

```

% boucle sur les angles d'incidence
for  $n_i = 1:1:N_i$ 
  % boucle sur les longueurs d'onde
  for  $n_\lambda = 1:1:N_\lambda$ 
    % boucle sur les couches
    for  $q = N_L: -1: 0$ 
       $Y_q = f(Y_{q+1})$ 
    end for
  end for
end for

```

```

    % calcul r et t complexes
    {
        r = f(Y0)
        t = f(Y0, Y1, ..., YNL)
    }

    % calcul R et T
    {
        R = f(r)
        T = f(t)
    }
    end for
end for
    
```

Tableau 1.1 Pseudo-code de la fonction de calcul des propriétés spéculaires R&T d'un filtre interférentiel.

```

% boucle sur les angles d'incidence
for ni = 1:1:Ni
    % boucle sur les longueurs d'onde
    for nλ = 1:1:Nλ
        % champs idéaux
        % boucle sur les couches
        for q = NL + 1: -1: 0
            Yq0 = f(Yq+10)
        end

        % champs diffusés par chaque interface
        % boucle sur les angles de diffusion
        for nθ = 1:1:Nθ
            % boucle sur les couches
            for q = NL + 2: -1: 1
                % admittances complexes des demi-empilements
                (1) {
                    Yqd = f(Yq-1d)
                    Yq'd = f(Yq+1'd)
                }
                % différence des deux
                (2) ΔYqd = Yqd - Yq'd
                % champs diffusés
                (1) et (2) ⇒ {
                    Eq,d- = f(ΔYqd, Yqd, Yq0)
                    Eq,d+ = f(ΔYqd, Yq'd, Yq0)
                }
                % transmittance des demi-empilements
                (1) et (2) ⇒ {
                    tq,NLd = f([Yqd: YNLd])
                    t1,q'd = f([Y1'd: Yq'd])
                }
            end for

            % champs total diffusé dans le substrat
            Esubstratd = f(Eq,d+, tq,NLd)q∈[[1,NL]]

            % champs total diffusé dans le superstrat
        end for
    end for
end for
    
```



$E_{superstrat}^d = f(E_{q,d}^-, t_{1,q}^d)_{q \in \llbracket 1, N_L \rrbracket}$ <p style="margin-left: 20px;"><b>end for</b></p> <p style="margin-left: 20px;"><b>end for</b></p> <p style="margin-left: 20px;"><b>end for</b></p>
--

Tableau 1.2 Pseudo-code de la fonction de calcul des champs diffusés d'un filtre interférentiel.

Le nombre d'opérations numériques nécessaires pour le calcul des réponses spéculaires d'un composant multicouche est :

$$N_{spec} = [N + 2] \times N_\lambda \times N_i \quad (1.217)$$

Tandis que le nombre d'opérations nécessaires pour le calcul des indicatrices de diffusion est :

$$N_{diff} = [(7 \times N) + 2] \times N_\theta + N \times N_\lambda \times N_i \quad (1.218)$$

avec  $N$  le nombre de couches dans l'empilement,  $N_\lambda$  le nombre de longueurs d'onde,  $N_i$  le nombre d'angles d'incidence et  $N_\theta$  le nombre d'angles de diffusion.

Par exemple, si nous étudions le cas d'un empilement de 60 couches ( $N = 60$ ) sur un intervalle spectral de 400 nm à 1  $\mu\text{m}$ , avec une résolution de 1 nm ( $N_\lambda = 600$ ), à un seul angle d'incidence ( $N_i = 1$ ) et pour un échantillonnage de la réponse diffuse pour tous les degrés de  $0^\circ$  à  $180^\circ$  ( $N_\theta = 90$  en parallélisant le calcul de la transmission diffuse et de la réflexion diffuse). Le nombre d'opérations numériques nécessaires pour calculer les réponses spéculaires est de 37 200, tandis qu'il faut 22 824 000 opérations pour déterminer les réponses diffuses, soit un nombre environ 600 fois supérieur. Cette comparaison illustre bien la difficulté calculatoire de la détermination des propriétés diffuses.

## 1.7. Conclusion sur le modèle électromagnétique

Le développement d'une modélisation électromagnétique permet de déterminer les réponses spectrales de composants couches minces par le calcul. Nous avons d'abord développé un modèle pour les propriétés spéculaires avant de nous intéresser à la diffusion.

Le modèle électromagnétique de la diffusion présenté dans ce chapitre décrit de façon complète les réponses spectrales et angulaires d'un composant interférentiel. Il a d'abord été appliqué à une interface légèrement rugueuse et a ensuite été étendu au cas d'un multicouche. La rugosité d'une interface est représentée par un courant électrique et un courant magnétique fictifs qui parcourent un plan parfaitement lisse. Ces courants génèrent un champ diffusé, propagé ensuite en champ lointain. Dans le cas d'un empilement multicouche, chaque interface est parcourue par des courants fictifs et ainsi, chacune est source de diffusion. Les champs diffusés sont propagés à travers les demi-empilements supérieurs et inférieurs. Les différentes interfaces génèrent des champs qui

interfèrent entre eux. Les expressions établies montrent une décomposition de la diffusion comme le produit d'un terme de rugosité et d'un autre terme qui dépend uniquement de la structure de l'empilement et des conditions d'illumination.

Les implémentations numériques de ce modèle seront utilisées dans le Chapitre 2 pour comparer les résultats expérimentaux avec la théorie. Le modèle sera aussi au cœur des méthodes d'optimisation mises en place au Chapitre 3 pour la résolution de problème inverse et le design de composants interférentiels sous contrainte de la diffusion.

## Chapitre 2. SALSA, un diffusomètre spectralement et angulairement résolu

### 2.1. Présentation de l'instrument

#### 2.1.1. Contexte et historique de SALSA

L'étude des phénomènes de diffusion par les composants couches minces optiques a fait l'objet d'une recherche approfondie depuis les années 1980 [17,18]. D'abord théoriques, ces travaux ont très vite fait l'objet d'investigations métrologiques. L'objectif est de pouvoir mesurer précisément les niveaux de diffusion lumineuse spectralement et angulairement résolus d'un composant quelconque. L'une des plus grandes difficultés réside dans le fait que les flux diffusés sont généralement très faibles devant les flux spéculaires. D'autre part, il est assez complexe de construire un instrument sensible et précis sur une grande plage spectrale et angulaire.

La mesure de diffusion la plus accessible expérimentalement est celle du TIS (*Total Integrated Scattering*), grandeur définie au paragraphe 1.5.9, en utilisant une sphère intégrante (ou sphère d'Ulbricht). Il s'agit d'une cavité sphérique dont la paroi interne est recouverte d'un matériau hautement diffusant. Elle comporte plusieurs orifices pour laisser entrer la lumière et un détecteur permettant de mesurer l'intensité lumineuse à l'intérieur. Dans une configuration de mesure de la transmission diffuse, l'échantillon d'intérêt est placé sur une des ouvertures. Il est éclairé par un faisceau faiblement divergent généré par une source lumineuse extérieure ; le flux transmis (spéculaire et diffus) entre dans la cavité. La composante spéculaire traverse la sphère et en ressort par une ouverture diamétralement opposée, tandis que la composante diffuse est réfléchi et diffusée par les parois de la cavité. Le détecteur est protégé de façon à ne pas être directement exposé au faisceau spéculaire, il mesure uniquement la transmission diffuse. Parallèlement à cette première mesure, un faisceau lumineux de référence identique à celui d'éclairage accède à la cavité par une troisième ouverture, traverse la sphère et illumine directement un photodétecteur de référence. Cette acquisition de référence sert d'étalonnage à l'acquisition principale. La division du signal de mesure par le signal de référence est directement proportionnelle à la grandeur TIS recherchée. Une configuration semblable est envisageable pour mesurer la composante diffuse de la réflexion. Ce type de montage est disponible sur plusieurs spectrophotomètres usuels. La mesure du TIS est donc relativement facile à implémenter. Toutefois, cette grandeur n'est pas définie angulairement, ce qui est très limitant pour la compréhension fine des phénomènes de diffusion.

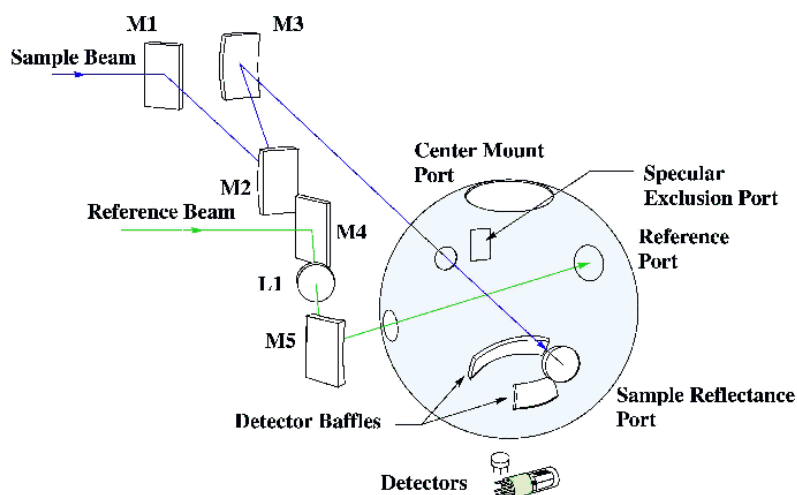


Figure 2.1 Illustration du fonctionnement d'une sphère intégrante sur le spectrophotomètre AGILENT Cary 7000.

L'équipe CONCEPT de l'Institut Fresnel possède une grande expérience dans la métrologie de la diffusion et développe depuis près de dix ans un banc optique de mesure aux performances inédites. Cet instrument s'appelle SALSA, pour *Spectral and Angular Light Scattering characterization Apparatus*. Il s'agit d'un spectrophotomètre pour la métrologie de la lumière diffuse, spectralement et angulairement résolu. Les premières versions de cet instrument ont fait l'objet d'un travail de thèse et de plusieurs publications sur son mode de fonctionnement et ses performances [19–22]. SALSA est utilisable comme spectrophotomètre pour des mesures de transmittance et de réflectance spéculaires. Le banc peut également être utilisé comme diffusomètre pour mesurer la lumière diffusée par des composants optiques. La fonction mesurée est la BSDF (*Bidirectional Scattering Distribution Function*) qui est aussi appelée BRDF (*Bidirectional Reflectance Distribution Function*) dans le demi-espace réfléchi et BTDF (*Bidirectional Transmittance Distribution Function*) dans le demi-espace transmis. Pour rappel, la fonction ARS (*Angle Resolved Scattering*) est liée à la BSDF par la relation :  $ARS = BSDF \cos(\theta)$ , avec  $\theta$  l'angle de diffusion (cf. 1.3.1).

SALSA, dans la dernière configuration en date (avant 2018), opérait uniquement dans le spectre visible (de 400 nm à 1000 nm) avec une résolution meilleure que le nanomètre. Le banc présentait des limites de détection extrêmes, jusqu'à une densité optique de 12 en transmittance et un niveau de détection de la lumière diffusée proche de  $10^{-8} \text{sr}^{-1}$ . L'appareil possède un bras de rotation pour mesurer la diffusion autour de l'échantillon, entre  $-70^\circ$  et  $240^\circ$ , avec une résolution meilleure que le degré. Une représentation schématique de l'instrument SALSA dans sa configuration de l'année 2018 est donnée en Figure 2.2. Le mode de fonctionnement et les performances de cette configuration sont détaillés dans une publication de la même année [21].

Concernant la métrologie optique, le cœur de ce travail de thèse a été la définition et la mise en œuvre des évolutions nécessaires à l'extension de la gamme de fonctionnement

du banc au proche infrarouge, jusqu'à 1700 nm. Le principal défi posé par cet élargissement du domaine spectral a été de conserver les mêmes performances sur le plan de la détectivité, de la dynamique de mesure, de la résolution angulaire et de la résolution spectrale.

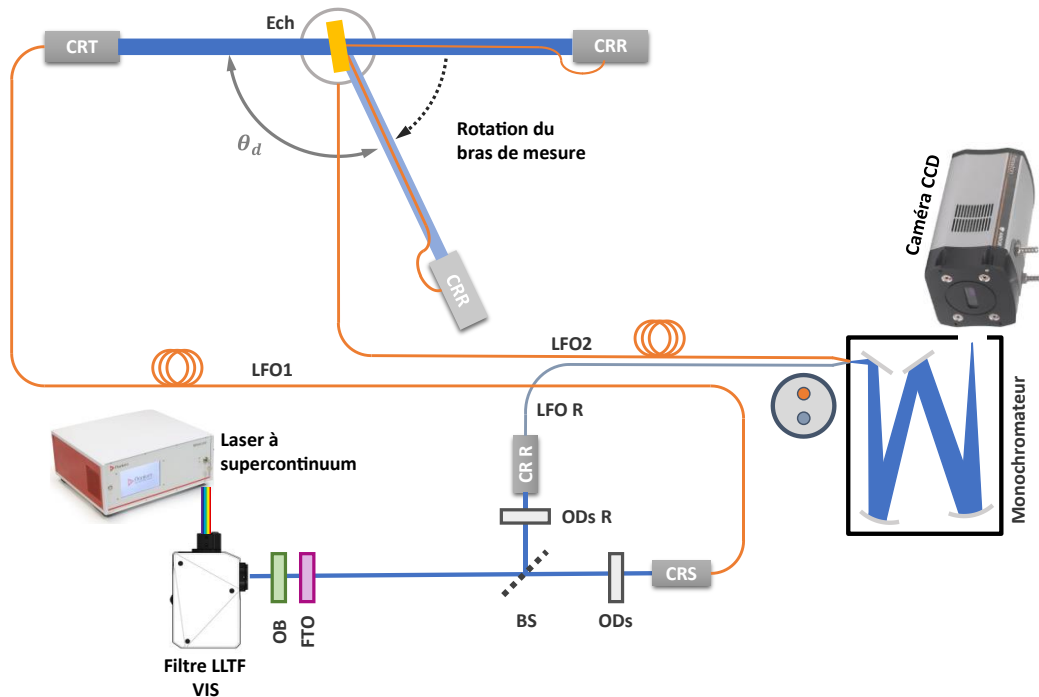


Figure 2.2 Représentation de l'instrument SALSA dans sa configuration SALSA 3 de l'année 2018, avant l'extension du mode de fonctionnement au proche infrarouge. OB : obturateur. FTO : filtre trieur d'ordre. BS : cube séparateur. ODs : densités optiques. ODs R : densités optiques de référence. CRS, CRT, CRR et CR R : collimateurs réflectifs. LFO1, LFO2, LFO R : liaison par fibre optique. Ech : échantillon.  $\theta_d$  : angle de diffusion

Le fonctionnement et le mode d'opération de l'instrument seront détaillés dans les paragraphes suivants. Nous pouvons d'ores et déjà présenter les objectifs fixés pour les caractéristiques principales de SALSA dans sa dernière version que nous appellerons SALSA 4 :

- Plage spectrale continue de 400 nm à 1700 nm ;
- Résolution spectrale meilleure que 1 nm ;
- Plage angulaire continue de  $-70^\circ$  à  $240^\circ$  pour l'angle de diffusion et dans le plan d'incidence ;
- Résolution angulaire d'environ  $0,5^\circ$  ;
- Jusqu'à une densité optique de 13 mesurée pour les propriétés spéculaires, en transmission et en réflexion ;
- Jusqu'à  $10^{-8} \text{sr}^{-1}$  mesurés pour les propriétés diffuses, limite proche de la diffusion de Rayleigh, aussi appelée *diffusion de l'air*.

Ces spécifications sont choisies afin de placer SALSA parmi les meilleurs instruments disponibles pour ce type de mesure. En effet, les spectrophotomètres usuels qui possèdent des modules de mesure de la diffusion sont bien moins performants comme

cela sera illustré plus loin. Nous pouvons citer quelques exemples d'instruments similaires :

- HELIX™ *Spectral Analysis System* de la société Alluxa [23] mesure jusqu'à une densité optique de 8 en transmission sur un large spectre du visible au proche infrarouge ;
- Kola Deep™ *Spectral Measurement System* de la société Semrock [24] mesure jusqu'à une densité optique de 7 en transmission ;
- MLS-1600 de l'Institut Fraunhofer IOF [25] mesure jusqu'à  $10^{-6} sr^{-1}$  en diffusion.

### 2.1.2. Description générale de l'instrument

Une représentation schématique de SALSA est présentée à la Figure 2.3. L'instrument est composé de trois sous-ensembles : le sous-ensemble de *préparation du faisceau*, le sous-ensemble *diffusomètre* et le sous-ensemble de *détection*.

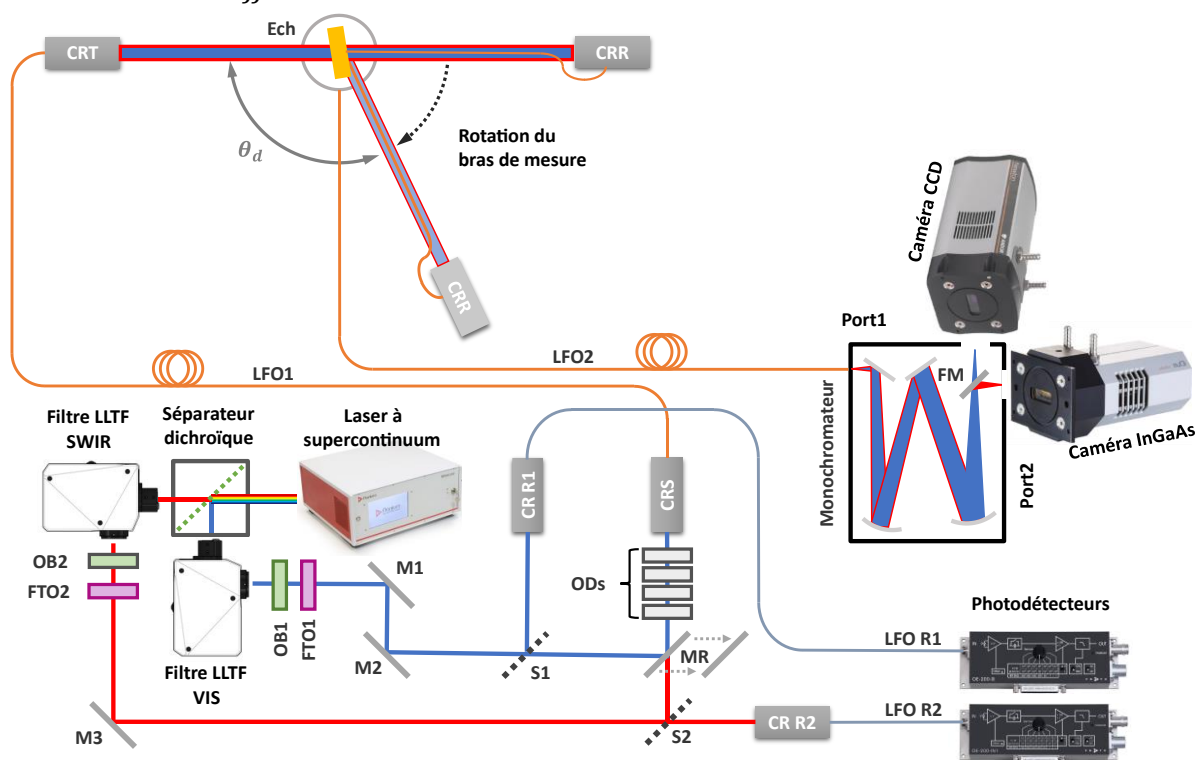


Figure 2.3 Représentation de l'instrument SALSA dans sa configuration SALSA 4. Il se compose d'un sous-ensemble de préparation du faisceau (en bas à gauche), d'un sous-ensemble diffusomètre (en haut) et d'un sous-ensemble de détection (à droite). OB1 et OB2 : obturateurs. FTO1 et FTO2 : filtres trieurs d'ordre. M1, M2 et M3 : miroirs. S1 et S2 : cube et lame séparateur-trice. MR : miroir de renvoi. FM : miroir flip. ODs : densités optiques. CRS, CRT, CRR, CR R1 et CR R2 : collimateurs réflectifs. LFO1, LFO2, LFO R1, LFO R2 : liaison par fibre optique. Ech : échantillon.  $\theta_d$  : angle de diffusion.

Le sous-ensemble de *préparation du faisceau* repose sur l'utilisation d'un laser à supercontinuum produisant un signal lumineux à très large spectre. La sortie fibrée du laser est directement connectée à un séparateur dichroïque qui divise le faisceau vers deux sorties distinctes. Les contributions spectrales de longueurs d'onde inférieures à 950 nm sont réfléchies vers la sortie *visible*, tandis que les contributions aux longueurs

d'onde supérieures sont transmises vers la sortie *infrarouge*. Deux voies spectrales parallèles apparaissent alors en sortie du séparateur dichroïque : nous les appellerons respectivement voie *visible* et voie *infrarouge*. Ces deux voies sont constituées de composants similaires mais adaptés pour chacune des deux plages spectrales. Nous présenterons d'abord les composants de la voie *visible* avant de nous intéresser à la voie *infrarouge*.

La sortie *visible* du séparateur est connectée à l'entrée d'un filtre accordable en longueur d'onde LLTF (*Laser Line Tunable Filter*), noté *Filtre LLTF VIS* sur la Figure 2.3. Ce composant contient un couple de réseaux holographiques dont l'ajustement de la position angulaire détermine la longueur d'onde de centrage du signal généré. Le spectre en sortie du filtre accordable est une raie de faible largeur. Le faisceau lumineux sort en espace libre, il passe ensuite par un obturateur électromécanique (OB1) dont l'ouverture est contrôlée pour s'ouvrir uniquement lors des acquisitions. Deux filtres trieurs d'ordre, respectivement passe-bas et passe-haut centrés à 650 nm, sont montés sur un support de filtres à bascule (FTO1). Ce filtrage supprime les harmoniques en  $\lambda/2$  et  $2\lambda$  (avec  $\lambda$  la longueur d'onde) induites par le filtre accordable LLTF. En effet, la présence de ces harmoniques dans le signal perturberait la chaîne d'acquisition. La position de la bascule dépend de la longueur d'onde de travail. Des miroirs M1 et M2 ajustent la direction de propagation du faisceau dans l'espace et assurent l'alignement avec les composants en aval. Un cube séparateur (S1) réfléchit une partie du flux, environ 10%, vers la voie de *référence visible*, tandis que le faisceau principal est transmis par le cube séparateur, puis réfléchi par un miroir de renvoi (MR) monté sur une platine de translation. Une fois renvoyé, le faisceau traverse quatre étages de densités optiques (ODs, pour *Optical Densities*). Ces quatre étages sont composés de trois supports de filtres à bascule et d'une roue à filtres. Les trois supports à bascule possèdent chacun deux positions : une position sans densité optique (OD 0) et une position de valeur de densité optique respectivement de 3, 3 et 1. La roue à filtres présente quatre positions : OD 0, OD 1, OD 2 et OD 3. La combinaison de ces quatre étages résulte en une densité optique totale comprise entre OD 0 et OD 10, ajustable par pas de 1.

La voie *infrarouge* du sous-ensemble de *préparation du faisceau* est organisée sensiblement de la même façon que la voie *visible*. Un filtre accordable LLTF pour le proche infrarouge (LLTF SWIR, pour *Short-Wave InfraRed*) est directement connecté à la sortie *infrarouge* du séparateur dichroïque. À noter que l'ensemble composé du laser à supercontinuum, du séparateur dichroïque et des deux filtres LLTF sera appelé *bloc source* par la suite. Le contrôle des deux filtres LLTF permet de générer des raies spectrales fines, centrées sur n'importe quelle valeur de longueur d'onde accessible pour l'instrument. Le faisceau sort du filtre LLTF en espace libre. Un obturateur électromécanique (OB2) ne le laisse passer que lors des acquisitions. Un filtre passe-haut trieur d'ordre (FTO2) est placé juste après l'obturateur pour supprimer les contributions en  $\lambda/2$  induites par le filtre accordable. Contrairement à la voie *visible*, un seul filtre trieur d'ordre est nécessaire car seules les contributions aux basses longueurs d'onde

perturbent la chaîne d'acquisition. En effet, les détecteurs ne sont pas sensibles aux longueurs d'onde supérieures à 1700 nm. Le miroir M3 renvoie le faisceau vers la lame séparatrice S2 qui transmet environ 10% du flux vers la voie de *référence infrarouge*. Le faisceau principal est réfléchi en direction des quatre étages de densités optiques (ODs). Sur cette voie-là, le faisceau ne rencontre pas le miroir de renvoi (MR) présent sur la voie *visible*.

Les voies *visible* et *infrarouge* ne sont jamais utilisées simultanément puisque le faisceau généré par le *bloc source* n'emprunte qu'une seule des deux voies. Elles sont recombinaées grâce au miroir de renvoi MR et à son positionnement selon la longueur d'onde de travail. Le miroir est amené en butée d'une platine de translation pour réfléchir la voie *visible* et est translaté de 25 mm pour libérer la voie *infrarouge*. Le faisceau est ensuite couplé à une fibre optique de 50  $\mu\text{m}$  de diamètre de cœur et d'ouverture numérique 0,22 (LFO1). L'extrémité de cette fibre est placée au foyer d'un collimateur réfléchissant à miroir parabolique hors axe (CRS pour *collimateur réfléchissant de sortie*). Elle assure la liaison avec le sous-ensemble *diffusomètre*. Le collimateur réfléchissant, ainsi que tous les autres utilisés sur ce banc optique, est fourni par THORLABS. Le sous-ensemble entier est monté sur une table optique indépendante du reste de l'instrument et est couvert par des capots opaques évitant toute source lumineuse parasite.

Les voies *référence visible* et *référence infrarouge* sont des déviations des deux voies principales. Elles sont toutes deux constituées d'un collimateur réfléchissant (respectivement CR R1 et CR R2) qui couple le faisceau dans une fibre multimode d'un diamètre de cœur de 50  $\mu\text{m}$  et d'une ouverture numérique de 0,22. Chacune de ces deux fibres (respectivement LFO R1 et LFO R2) est reliée à un photodétecteur : l'un en silicium (Si) et le second en arséniure de gallium-indium (InGaAs). Ces voies de référence sont nécessaires pour calibrer le signal mesuré par le sous-ensemble de *détection* (voir 2.4.1 et 2.5.1).

Le sous-ensemble *diffusomètre* est assez simple dans sa constitution : deux collimateurs réfléchissants, un bras mécanique et un échantillon à caractériser. Le premier collimateur réfléchissant, dit de transmission (CRT), délivre en espace libre le faisceau lumineux transmis par la liaison par fibre optique LFO1 depuis le sous-ensemble de *préparation du faisceau*. Le faisceau est collimaté, de faible divergence et sa direction de propagation définit l'origine des angles dans le repère du laboratoire. Il vient illuminer l'échantillon à caractériser, qui le réfléchit, le transmet et/ou le diffuse. Un second collimateur réfléchissant, dit collimateur réfléchissant de reprise (CRR), est monté sur un bras de rotation et collecte la lumière réfléchie, transmise et/ou diffusée selon sa position angulaire. Le positionnement angulaire du bras est assuré par une platine de rotation pas-à-pas. Les collimateurs réfléchissants sont montés sur des dispositifs de positionnement à 6 degrés de liberté pour assurer un alignement exact du diffusomètre. La face avant de l'échantillon est centrée sur l'axe de rotation du bras, de manière à garantir la mesure précise de la diffusion. La rotation du bras et la mesure de diffusion se font dans le plan



d'incidence, pour un angle azimutal nul. Le collimateur de reprise couple le faisceau dans une fibre optique multimode d'une ouverture numérique de 0,22 et dont le diamètre de cœur varie entre 50  $\mu\text{m}$  et 105  $\mu\text{m}$  selon les mesures réalisées. Cette fibre assure la liaison avec le sous-ensemble de *détection*.

Le sous-ensemble de *détection* est constitué d'un monochromateur et de deux caméras. Le monochromateur possède un jeu de miroirs envoyant le faisceau vers un réseau de diffraction en réflexion. Deux réseaux sont montés dos-à-dos sur une tourelle rotative et le choix du réseau utilisé est déterminé par la longueur d'onde de travail. Cette valeur définit également la voie de détection : *visible* ou *infrarouge*. La voie de *détection visible* utilise un réseau de 1800 traits/mm. Il étale spatialement les différentes contributions spectrales du signal focalisées sur la matrice de détection d'une caméra CCD scientifique à bas bruit placée sur le port 1. La voie de *détection infrarouge* comporte un réseau de 760 traits/mm. Le signal réfléchi par le réseau est renvoyé vers une caméra InGaAs à bas bruit montée sur le port 2. Le passage d'une voie à l'autre est assuré par un miroir *flip* (MF) monté sur un volet. Il est positionné de façon à réfléchir le signal vers le port 2 ou rabattu pour le laisser sortir au port 1.

Les principales évolutions apportées à SALSA au cours de cette thèse et pour la nouvelle configuration SALSA 4 sont les suivantes :

- Ajout d'une table optique supplémentaire pour le sous-ensemble de *préparation du faisceau* ;
- Changement de la source laser ;
- Ajout du séparateur dichroïque et du filtre accordable en longueur d'onde LLTF SWIR ;
- Ajout de la voie *infrarouge* dans le sous-ensemble de *préparation du faisceau* ;
- Ajout de la caméra InGaAs dans le sous-ensemble de *détection* ;
- Modification du code de contrôle du banc pour la prise en charge des nouveaux composants.

La présentation générale du banc étant faite, nous pouvons maintenant nous intéresser aux composants essentiels du banc qui garantissent ses performances.

### **2.1.3. Présentation détaillée des principaux composants**

#### **2.1.3.1. Laser à supercontinuum**

Les instruments pour la métrologie des couches minces optiques présentent souvent des limitations concernant la puissance de l'illumination des échantillons et leur plage spectrale de fonctionnement. Les niveaux de lumière diffusée étant généralement très faibles devant les composantes spéculaires de transmission et de réflexion, la source doit être suffisamment puissante pour rendre ces faibles flux détectables. Les spectrophotomètres commerciaux utilisent des lampes à arc au deutérium, des lampes tungstène-halogène ou encore des lampes au xénon. Chacune possède une étendue spectrale assez large et le choix d'une lampe en particulier est dicté par la longueur d'onde

de travail. Toutefois, l'intensité des lampes deutérium et tungstène-halogène est plutôt faible et limitante pour les mesures de diffusion. Pour contourner cette limitation de l'intensité des sources lumineuses, les premiers bancs de diffusion pour la recherche scientifique utilisaient plusieurs lignes de laser ou diodes super-luminescentes en parallèle [26–30]. Chaque laser fournit un signal lumineux de forte intensité mais avec une faible étendue spectrale. La plage spectrale de fonctionnement de l'instrument est discrétisée sur les valeurs de longueurs d'onde de chaque laser. De plus l'utilisation de plusieurs lasers en parallèle est contraignante pour l'alignement d'un banc de mesure.

Le choix du laser à supercontinuum, appelé aussi *laser blanc*, concilie finalement les avantages des deux solutions précédentes : il possède un large spectre continu et une forte intensité [19,31,25]. Toutefois, ce type de source lumineuse présente un fort bruit d'intensité, associé à une dérive temporelle non maîtrisée. Ce problème sera adressé par l'acquisition d'un signal de référence lors des acquisitions de SALSA (cf. 2.2.4).



Figure 2.4 Laser à supercontinuum FIANIUM WL-SC-400-8.

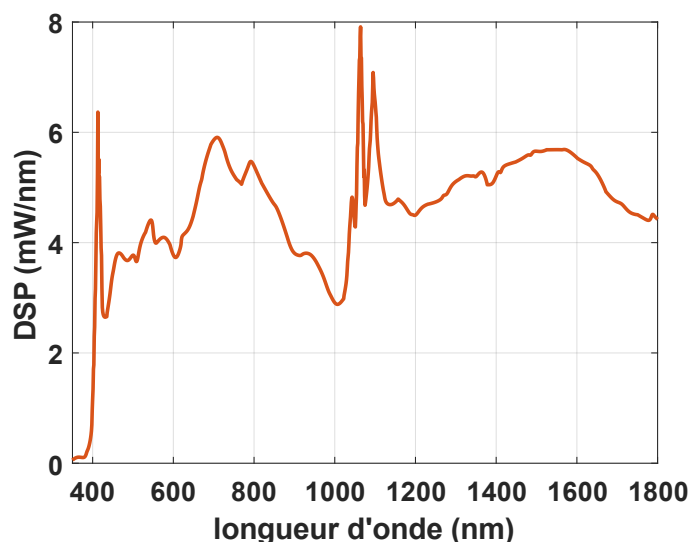


Figure 2.5 Densité spectrale de puissance (DSP) du laser à supercontinuum pour sa puissance maximale. Le pic à 1064 nm correspond à la longueur d'onde du laser de pompe (donnée FIANIUM).

La source utilisée est un laser à supercontinuum FIANIUM WL-SC-400-8. Il produit un signal lumineux dont le spectre s'étale de 400 nm à 2,4  $\mu\text{m}$ , pour une puissance totale intégrée de 8 W à 100% de sa puissance maximale. La densité de puissance moyenne entre 400 nm et 1700 nm est supérieure à 4 mW/nm. Le supercontinuum est généré par

un laser de pompe Nd-YAG (*Neodymium-doped Yttrium Aluminum Garnet*) pulsé à 80 MHz et envoyé dans une fibre à cristal photonique. La constitution de cette fibre génère des effets non-linéaires conduisant à l'étalement du spectre sur une très large gamme. La sortie du laser comporte un collimateur réfléchissant sur lequel est connectée la fibre à cristal photonique. Afin d'assurer une bonne stabilité et un fonctionnement durable, le laser à supercontinuum est seulement utilisé à 80% de sa puissance maximale.

### 2.1.3.2. Filtres accordables LLTF

Le signal lumineux en sortie du laser présente un spectre très large. Pour assurer une résolution spectrale très fine de l'instrument, des filtres accordables sont ajoutés pour restreindre la largeur spectrale du signal à quelques nanomètres. Les filtres accordables LLTF (*Laser Line Tunable Filter*) utilisés sont tous les deux fournis par PHOTON ETC. (référence CONTRAST VIS HP8 pour le visible et CONTRAST SWIR HP8 pour le proche infrarouge). Chacun possède des réseaux holographiques de volume et opère sur une plage de longueurs d'onde spécifique, d'où la nécessité de dissocier les voies *visible* et *infrarouge*. Pour la voie *visible*, le filtre LLTF dispose d'un réseau de diffraction opérant entre 400 nm et 650 nm et un second entre 650 nm et 1000 nm (extensible jusqu'à 1050 nm). Pour la voie *infrarouge*, le LLTF comporte lui aussi deux réseaux mais un seul est utilisé entre 1000 nm et 1700 nm. Le second réseau fonctionne de 1700 nm à 2400 nm mais il ne sera pas utilisé puisque ces longueurs d'onde sont au-delà de la limite de détection du banc. Le séparateur dichroïque en amont des filtres LLTF dissocie théoriquement les longueurs d'onde à la valeur seuil de 950 nm. Toutefois, en considérant également l'efficacité des LLTF, le passage d'une voie à l'autre se fait pour une longueur d'onde de 1021 nm. Cette valeur a été déterminée expérimentalement pour maximiser l'intensité du signal lors du changement de voie.



Figure 2.6 Filtre accordable en longueur d'onde LLTF de PHOTON ETC CONTRAST.

La largeur spectrale du signal en sortie des LLTF est comprise entre 2,5 nm et 4 nm. Le fabricant annonce une réjection supérieure à OD 6 à 45 nm de la longueur d'onde de centrage et une efficacité de l'ordre de 65%. La densité spectrale de puissance en sortie du filtre est presque diminuée de moitié par rapport à celle en sortie du laser. La Figure 2.7 présente le signal normé mesuré en sortie du LLTF pour une longueur d'onde de centrage de 650 nm.

Ces filtres LLTF présentent des caractéristiques non-linéaires et génèrent des harmoniques en  $\lambda/2$  et  $2\lambda$ , avec  $\lambda$  la longueur d'onde de centrage de la raie. Celles-ci sont

d'intensité faible mais suffisante pour perturber la sensibilité globale du banc SALSA. La présence de ces harmoniques dans la voie *visible* avait été observée précédemment [20] et un comportement similaire a été identifié sur la voie *infrarouge*. Pour illustration, des acquisitions ont été réalisées avec un analyseur de spectre (ANDO Optical Spectrum Analyser AQ-6315A) pour des longueurs d'onde dans le proche infrarouge. Le filtre LLTF est réglé sur une valeur de longueur d'onde donnée et le spectre du signal en sortie est échantillonné sur une large bande. Des harmoniques de faibles intensités sont détectées. Ces contributions parasites sont éliminées par des filtres trieurs d'ordre : un filtre passe-haut ou un filtre passe-bas centrés à 650 nm sur la voie *visible* et un filtre passe-haut à 950 nm sur la voie *infrarouge*.

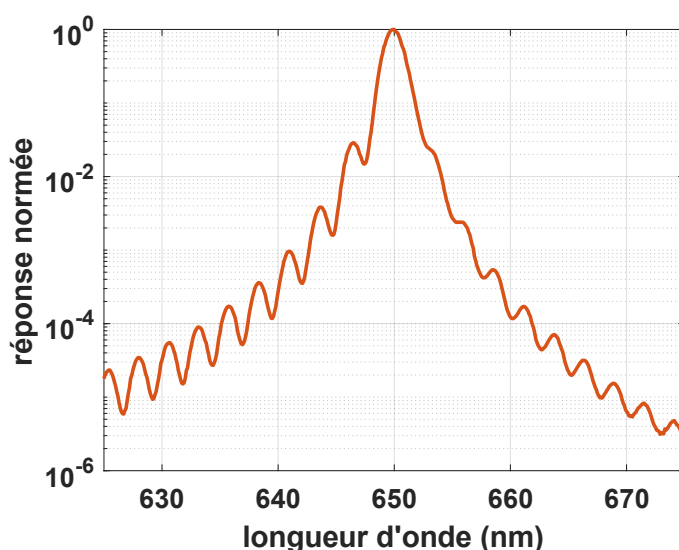


Figure 2.7 Réponse spectrale normée du filtre LLTF de la voie visible, centrée à 650 nm et en échelle logarithmique.

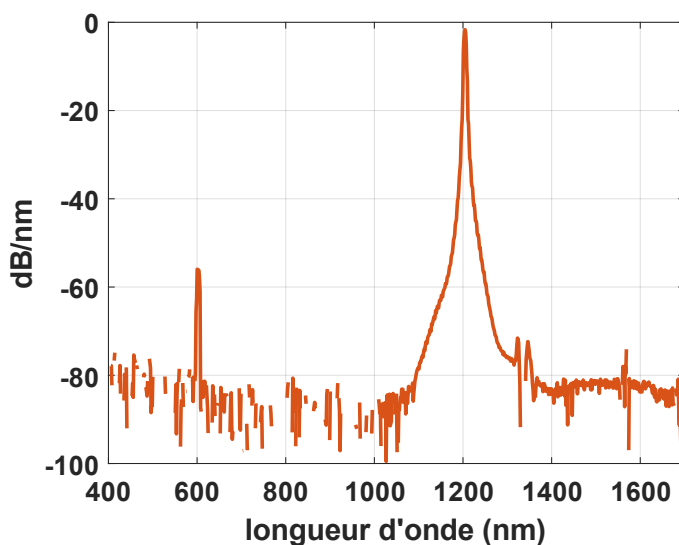


Figure 2.8 Intensité spectrale en sortie du LLTF SWIR mesurée par analyseur de spectre ANDO, pour une longueur d'onde de consigne de 1200 nm, une harmonique de faible intensité à 600 nm est observée.

### 2.1.3.3. Obturateur électromécanique externe

L'obturateur électromécanique choisi est de référence THORLABS SH05. Il s'agit d'un obturateur ultra-rapide d'une ouverture de 12,5 mm de diamètre.



Figure 2.9 Obturateur électromécanique THORLABS SH05

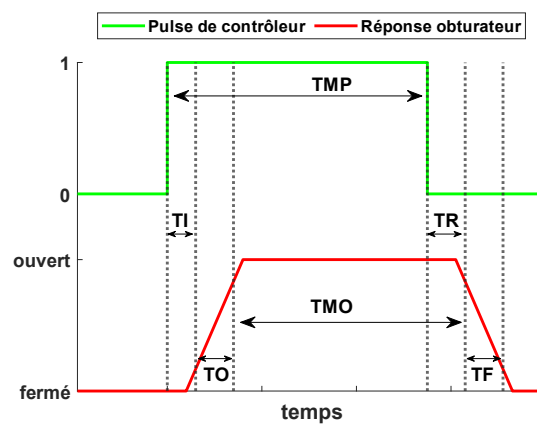


Figure 2.10 Chronogramme de contrôle de l'obturateur (donnée THORLABS).

Sigle	Désignation	Valeur typique (ms)
TI	Temps d'Initialisation : délai entre l'application du signal du contrôleur et l'amorçage de l'ouverture de l'obturateur.	8
TO	Temps d'Ouverture : temps nécessaire pour passer de 20% à 80% d'ouverture de l'obturateur.	3
TR	Temps de Relâchement : délai entre la disparition du signal du contrôleur et l'amorçage de la fermeture de l'obturateur.	13
TF	Temps de Fermeture : temps nécessaire pour passer de 80% à 20% d'ouverture de l'obturateur.	13
TMP	Temps Minimum de largeur de <i>Pulse</i> du contrôleur.	10
TMO	Temps Minimum d'Ouverture de l'obturateur pour un contrôle de durée TMP.	27

Tableau 2.1 Désignation des sigles de la Figure 2.10.

Les ordres d'ouvertures de l'obturateur passent par des signaux numériques TTL (*Transistor-Transistor Logic*). Le passage d'un état à l'autre ne prend que quelques millisecondes. Le chronogramme du contrôle de l'ouverture de l'obturateur est présenté

en Figure 2.10. Le temps minimal d'exposition choisi pour SALSA est de 40 ms. Cette valeur est supérieure au temps minimal d'ouverture de l'obturateur de 27 ms. Le temps et la dynamique d'ouverture et de fermeture ne sont pas particulièrement gênants puisqu'ils sont complètement compensés par la synchronisation des voies d'acquisition et de référence, comme cela sera présenté au paragraphe 2.2.5.

#### 2.1.3.4. Densités optiques de filtrage

Les quatre étages de densités optiques (ODs sur la Figure 2.3) en sortie du sous-ensemble de *préparation du faisceau* ont pour fonction d'ajuster l'intensité du faisceau d'illumination de l'échantillon. Comme mentionné précédemment, ces quatre étages sont composés de trois supports de filtres à bascule (THORLABS MFF101) et d'une roue à filtres (THORLABS FW103H) :

- Le premier support à bascule porte une densité optique neutre OD 3 que le faisceau traverse ou non selon la position de la bascule. La densité traversée est donc de valeur 0 ou 3 ;
- Le second support à bascule est identique au premier ;
- Le troisième support à bascule porte une densité optique neutre OD 1. La densité traversée est donc de valeur 0 ou 1 ;
- La roue à filtres possède 6 emplacements espacés angulairement de 60 degrés. Seuls trois emplacements sont utilisés et portent respectivement des densités optiques neutres de valeur 1, 2 et 3. Un quatrième emplacement vide est utilisé comme densité nulle (OD 0). Les deux derniers emplacements sont inutilisés.



Figure 2.11 Gauche : support de filtre à bascule THORLABS MFF101, la bascule pivote pour insérer ou non la densité optique portée par le support. Droite : roue à filtres THORLABS FW103H.

Les positions respectives de tous ces actionneurs sont contrôlées de manière indépendante pour conduire à une densité totale de 0 à 10, par pas de 1. Les grandeurs mentionnées en unité OD ne sont que des moyens de désigner les composants. En effet, la valeur des densités n'est pas constante sur tout le spectre. Les valeurs exactes ont été mesurées avec un spectrophotomètre commercial (PERKIN ELMER Lambda 1050) et sont présentées en Figure 2.12. Ces valeurs exactes sont prises en compte à la fois pour déterminer le choix des densités à utiliser pour une acquisition, mais également lors du traitement des données après acquisition.

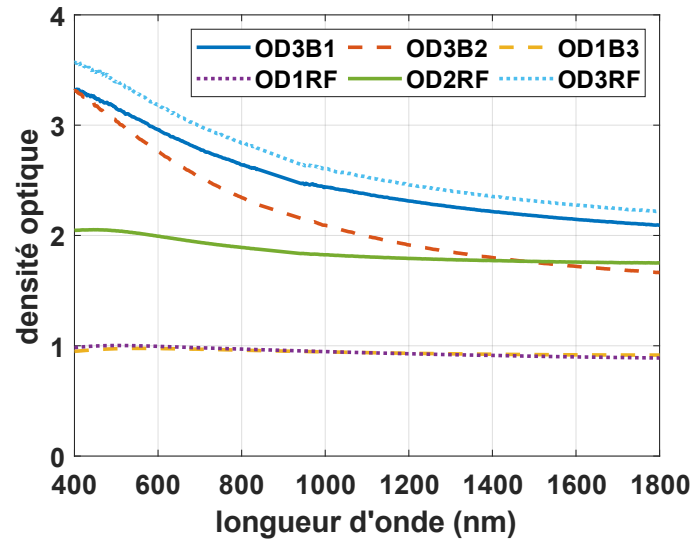


Figure 2.12 Caractérisation des densités optiques. OD3B1 : densité OD 3 sur bascule 1. OD3B2 : densité OD 3 sur bascule 2. OD1B3 : densité OD 1 sur bascule 3. OD1RF : densité OD 1 sur roue à filtres. OD2RF : densité OD 2 sur roue à filtres. OD3RF : densité OD 3 sur roue à filtres.

### 2.1.3.5. Collimateurs réfléchifs

Les liaisons entre les sous-ensembles de SALSA sont assurées par des fibres optiques. Ce type de liaison présente l'avantage de limiter la lumière parasite et de faciliter les connexions entre les parties fixes et les parties mobiles. Toutefois, tous les composants de SALSA ne sont pas fibrés et certains sont traversés par un faisceau en espace libre. En conséquence, il est nécessaire de coupler ces faisceaux en espace libre dans les fibres optiques. Pour cela, nous avons choisi d'utiliser des collimateurs réfléchifs à miroir fournis par THORLABS (RC04-SMA-P01 et RC04-FC-P01). La mention SMA ou FC indique la nature de la connexion avec la fibre optique. Ces derniers sont constitués d'un miroir parabolique hors axe en argent, dont le foyer se trouve exactement à l'extrémité de la fibre connectée. La réflectance du miroir est supérieure à 95% entre 450 nm et 1700 nm. Cette composition assure le fonctionnement du composant sur une très large bande spectrale, sans effet chromatique et tout en garantissant une collimation quasiment parfaite des faisceaux, soit une divergence de l'ordre de  $0,1^\circ$ . Les collimateurs à miroir permettent de coupler un faisceau en espace libre dans une fibre et inversement, de collimater un signal en sortie d'une fibre.

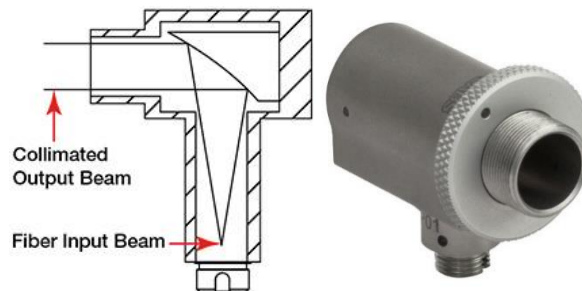


Figure 2.13 Collimateur réfléchif, schéma de principe (gauche) et image du collimateur THORLABS RC04-FC-P01.

### 2.1.3.6. Photodétecteurs de référence

Les deux voies de référence du sous-ensemble de *préparation du faisceau* sont chacune reliées à un photodétecteur FEMTO à entrée fibrée. Pour la voie *visible*, le récepteur choisi est de référence OE-200-SI.

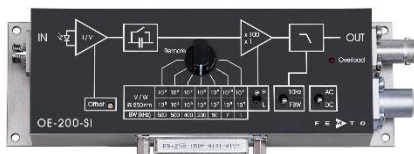


Figure 2.14 Photodétecteur FEMTO OE-200-SI.

Ses caractéristiques sont les suivantes :

- Détecteur silicium (Si) de 1,2 mm de diamètre ;
- Puissance équivalente de bruit inférieure à  $33 \text{ pW}/\sqrt{\text{Hz}}$  et de valeur minimale  $8 \text{ fW}/\sqrt{\text{Hz}}$  ;
- Sensibilité de 0,61 A/W à 850 nm ;
- Courant d'obscurité de 2 pA ;
- Amplificateur de transimpédance au gain ajustable de  $10^3$  à  $10^{11}$  V/W par commande numérique TTL (*Transistor-Transistor Logic*, niveau logique de tension entre un état bas à 0 V et un état haut à 5 V) ;
- Précision du gain de l'ordre de 1% ;
- Signal électrique de sortie continu entre 0 et 10 V ;
- Gain de conversion électrique en Figure 2.15.

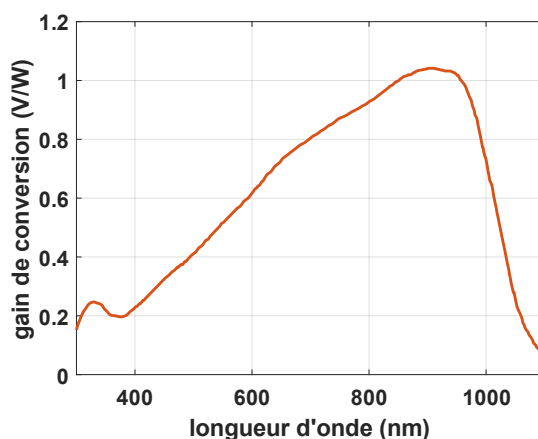


Figure 2.15 Gain de conversion du photorécepteur de la voie de référence visible (donnée FEMTO).

Le récepteur de la voie *infrarouge* est de référence OE-SI-200-IN1 :

- Détecteur InGaAs (*Indium Gallium Arsenide*) de 0,3 mm de diamètre ;
- Puissance équivalente de bruit inférieure à  $22 \text{ pW}/\sqrt{\text{Hz}}$  et de valeur minimale  $7 \text{ fW}/\sqrt{\text{Hz}}$  ;
- Sensibilité de 0,87 A/W à 1310 nm ;
- Courant d'obscurité de 2 pA ;



- Amplificateur de transimpédance au gain ajustable de  $10^3$  à  $10^{11}$  V/W par commande numérique TTL ;
- Précision du gain de l'ordre de 1% ;
- Signal électrique de sortie continu entre 0 et 10 V ;
- Gain de conversion électrique en Figure 2.16.

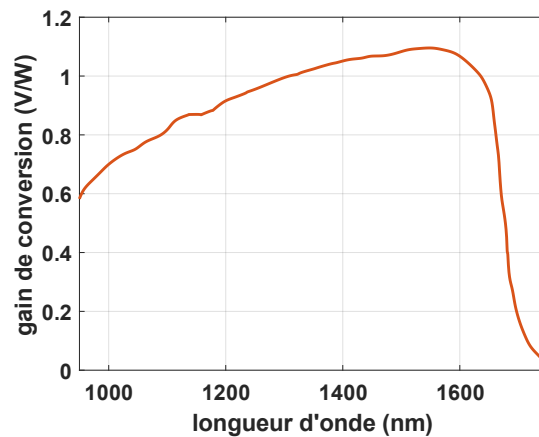


Figure 2.16 Gain de conversion du photorécepteur de la voie de référence infrarouge (donnée FEMTO).

### 2.1.3.7. Monochromateur

Les filtres accordables LLTF constituent un premier étage de filtration efficace mais non suffisant pour atteindre une résolution spectrale de l'ordre du nanomètre. Comme détaillé dans [20], un second étage de filtration est assuré par le monochromateur fourni par ANDOR (Shamrock SR-193i-B1).



Figure 2.17 Monochromateur ANDOR SR-193i-B1.

Cet instrument est un spectrographe de type Czerny-Turner. Il dispose d'une entrée à connexion fibrée, le faisceau lumineux est ensuite réfléchi par un jeu de miroirs et un réseau de diffraction. L'appareil en possède deux, montés dos-à-dos sur une tourelle rotative. Le premier est un réseau holographique de 1800 traits/mm pour la voie *visible* (référence SR2-GRT-1800-FH). Le second possède 760 traits/mm et est blazé à 1050 nm (référence SR2-GRT-0760-1050). Les deux réseaux sont gravés sur des substrats recouverts d'aluminium (Al) et de fluorure de magnésium ( $MgF_2$ ). Le composant présente l'intérêt de disperser spatialement l'information spectrale sur les détecteurs et permet d'isoler les contributions spectrales d'intérêt du reste du signal.

### 2.1.3.8. Caméras scientifiques

Le signal filtré et dispersé spatialement par le spectrographe est collecté et mesuré par deux caméras scientifiques à bas bruit. La voie *visible* de détection est constituée d'une caméra CCD du même fabricant que le monochromateur pour assurer une compatibilité des interfaces mécaniques. Nous l'appellerons *caméra visible*, sa référence est NEWTON DU920P-BVF et elle présente les caractéristiques suivantes :

- Capteur matriciel CCD (*Charge Couple Device*) illuminé par la surface arrière (B, *back illuminated*) optimisé pour le visible (V) et possédant une technologie de minimisation des franges d'interférence à sa surface (F, *anti-fringing*) ;
- La zone d'image est de 26,7 mm × 6,7 mm (largeur × hauteur) pour 1024 × 255 pixels carrés de 26 µm de côté. Le facteur de remplissage du capteur est de 100% ;
- Refroidissement par effet Peltier et température optimale de -80°C ;
- Numérisation sur 16 bits pour une fréquence d'échantillonnage de 3 MHz ;
- Capacité du réservoir de stockage de chaque pixel : 400 000 e<sup>-</sup> ;
- Courant d'obscurité à -80°C : 0,002 e<sup>-</sup>/pixel/s ;
- Bruit de lecture global  $\sigma_{RN}$  de 20 e<sup>-</sup> à la fréquence d'échantillonnage de 3 MHz ;
- Linéarité supérieure à 99% ;
- Efficacité quantique présentée en Figure 2.18.

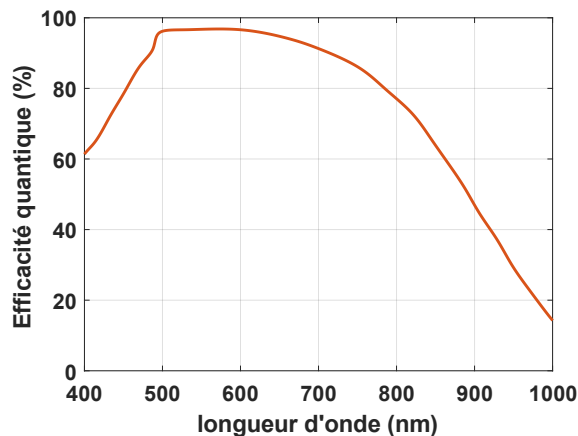


Figure 2.18 Efficacité quantique de la caméra NEWTON à 25°C (donnée ANDOR).

La caméra de la voie *infrarouge* de détection est également fabriquée par ANDOR (référence : iDus DU491A-1.7). Nous l'appellerons *caméra infrarouge* et ses caractéristiques sont les suivantes :

- Capteur InGaAs (*Indium Gallium Arsenide*) en barrette, optimisé pour le proche infrarouge, sensible jusqu'à 1700 nm ;
- La zone d'image est de taille 25,6 mm × 0,5 mm (largeur × hauteur) pour 1 ligne de 1024 pixels rectangulaires de dimension 25 µm × 500 µm ;
- Refroidissement par effet Peltier et pour une valeur maximale de -90°C ;
- Numérisation sur 16 bits pour une fréquence d'échantillonnage de 100 kHz ;

- Capacité du réservoir de stockage de chaque pixel :  $5 \text{ Me}^-$  en configuration haute sensibilité (*high sensitivity mode*) et  $170 \text{ Me}^-$  en mode haute dynamique (*high dynamic range mode*) ;
- Courant d'obscurité à  $-90^\circ\text{C}$  :  $12 \text{ ke}^-/\text{pixel}/\text{s}$  ;
- Bruit de lecture par pixel  $\sigma_{RN}$  de  $580 \text{ e}^-$  en configuration haute sensibilité et  $8150 \text{ e}^-$  en mode haute dynamique ;
- Linéarité supérieure à 99% ;
- Efficacité quantique présentée en Figure 2.19.

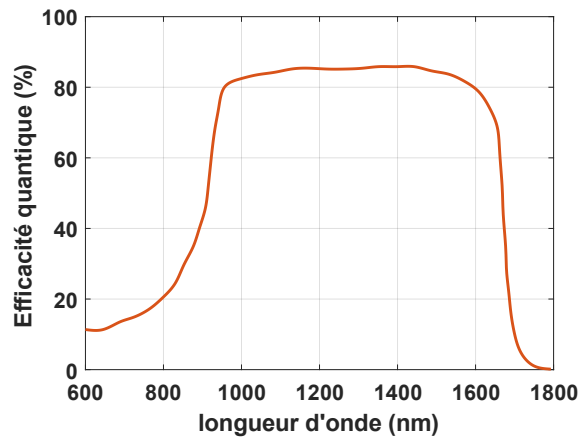


Figure 2.19 Efficacité de la caméra iDus à  $20^\circ\text{C}$  (donnée ANDOR).

L'efficacité quantique de la caméra iDus pour la voie *infrarouge* montre que le détecteur est insensible aux longueurs d'onde supérieures à  $1700 \text{ nm}$ . Bien que le *bloc source* soit capable de générer des raies lumineuses centrées sur des longueurs d'onde supérieures, l'étendue spectrale de SALSA est limitée par le sous-ensemble de *détection*.



Figure 2.20 Caméras ANDOR : Newton DU920P-BVF (gauche) et iDus DU491A-1.7 (droite).

## 2.2. Description du mode de fonctionnement

### 2.2.1. Mise en état de marche de l'instrument

Le laser à supercontinuum est d'abord allumé et réglé pour fournir 80% de sa puissance maximale. Il restera dans cet état tout au long de la campagne de mesure afin de garantir la plus grande stabilité possible de la puissance lumineuse du flux de sortie. Le faisceau lumineux en sortie des filtres accordables LLTF est collimaté, de haute luminance et de faible largeur spectrale. Le signal est centré sur une longueur d'onde  $\lambda$ . Une faible partie de ce flux, environ 10%, est prélevée par un cube séparateur ou une lame séparatrice puis envoyée vers la voie de *référence*. La partie restante du flux, notée  $P(\lambda)$ ,

traverse le jeu de densités optiques neutres, dont la valeur totale  $OD(\lambda)$  varie entre 0 et 10. Pour une longueur d'onde donnée, le signal en sortie du sous-ensemble de *préparation du faisceau* est décrit par une puissance utile notée  $10^{-OD(\lambda)}P(\lambda)$ . Ce flux illumine l'échantillon dont nous cherchons à caractériser les propriétés spectrales de transmission  $T(\lambda)$ , de réflexion  $R(\lambda)$  ou de diffusion  $ARS(\theta, \lambda)$ . L'angle  $\theta_0$  définit l'orientation angulaire de la normale à l'échantillon en référence à la direction de propagation du faisceau d'illumination, c'est-à-dire l'angle d'incidence d'illumination. Cet angle est ajusté manuellement et continûment entre  $0^\circ$  (incidence normale) et  $90^\circ$  (incidence rasante).

Le système de réception du flux lumineux réfléchi, transmis ou diffusé est constitué d'un collimateur réflectif monté sur un bras mécanique motorisé. Le mouvement de rotation est fourni par une platine de rotation pas-à-pas dont la position angulaire  $\theta$  est ajustée entre  $-70^\circ$  et  $240^\circ$  par pas de  $0,01^\circ$ . Le système ainsi conçu peut collecter le flux diffusé dans le plan de l'échantillon et pour tout angle  $\theta_a = \theta - \theta_0$ . Deux positions angulaires particulières sont également atteignables pour la mesure des flux spéculaires transmis ( $\theta = 180^\circ$ ) et réfléchi ( $\theta = 2\theta_0$ ).



Figure 2.21 Interface de contrôle de SALSA sur LabVIEW.

Le contrôle des différents composants du banc est centralisé sur un ordinateur dédié. Toutes les communications sont réalisées via une interface homme-machine conçue sur-mesure avec le logiciel LabVIEW. Le positionnement et l'alignement de l'échantillon sont réalisés manuellement. L'échantillon est maintenu par un porte-échantillon à 6 degrés de liberté, suspendu à une potence. Ensuite, les paramètres généraux de la campagne de mesure sont renseignés dans le programme informatique : la plage spectrale (la longueur d'onde minimale, maximale et le pas d'acquisition) ainsi que la plage angulaire (l'angle

minimal, maximal et le pas d'acquisition). Tous les composants sont initialisés à leurs valeurs par défaut : initialisation du monochromateur, état des étages de densités optiques ODs, temps d'ouverture de l'obturateur électromécanique  $\tau$ , gain des photodétecteurs, température de refroidissement des caméras, etc.

### 2.2.2. Contrôle et ajustement du signal caméra

Pour une longueur d'onde  $\lambda$  donnée et une position angulaire de diffusion  $\theta_d$ , une acquisition consiste tout d'abord à déplacer le bras de rotation en  $\theta = \theta_d + \theta_0$ . La valeur de  $\lambda$  impose le choix de la voie du sous-ensemble de *préparation du faisceau* : voie *visible* si  $\lambda < 1021$  nm, voie *infrarouge* sinon. Ce choix détermine également le filtre LLTF et la voie de *référence* qui seront utilisés ainsi que la position du miroir de renvoi MR et éventuellement le filtre trieur d'ordre de la voie *visible*. Le filtre accordable choisi est centré à la longueur d'onde  $\lambda$ . Une première acquisition est réalisée avec les valeurs par défaut des paramètres  $\tau_i$ , le temps d'ouverture de l'obturateur, et  $OD_i$  l'état des étages de densités optiques. L'ouverture de l'obturateur libère le passage du faisceau lumineux et par conséquent éclaire l'échantillon. Les signaux collectés par la voie de *référence* et la voie de *détection* sont analysés de la manière suivante :

- ✓ Le signal électrique délivré par le photorécepteur de la voie de *référence* doit être compris entre 0,9 V et 9 V, c'est-à-dire ni trop faible, ni saturé. Cet intervalle est choisi de manière à maximiser le rapport signal sur bruit tout en minimisant le bruit de photon. Si la condition n'est pas vérifiée, le gain du photorécepteur est ajusté à la hausse ou à la baisse ;
- ✓ Le signal sur la caméra doit être autour de 70% ( $\pm 12,5\%$ ) de la capacité maximale des puits de stockage des pixels. Cette valeur de 70% est choisie pour éviter la saturation du détecteur et maximiser le rapport signal sur bruit car aucun pixel de la caméra ne doit être saturé. Utiliser tant que possible cette valeur fixée permet aussi de limiter la non-linéarité résiduelle dépendante du remplissage des puits à électrons. Si cette condition n'est pas vérifiée, les paramètres  $\tau_i$  et  $OD_i$  sont ajustés en conséquence par un algorithme. Ce dernier compare la valeur maximale du signal  $S_M$  mesuré par la caméra avec les valeurs limites  $S_{min}$  et  $S_{max}$  admises. Le signal fourni par la caméra est de la forme :

$$S_M(\lambda) = K_M(\lambda)\tau 10^{-OD(\lambda)}P(\lambda)R(\lambda) \quad (2.1)$$

avec  $K_M(\lambda)$  un coefficient caractéristique de la voie de mesure,  $\tau$  le temps d'ouverture de l'obturateur externe,  $10^{-OD(\lambda)}P(\lambda)$  la puissance utile en sortie du sous-ensemble de *préparation du faisceau* et  $R(\lambda)$  la réponse spectrale en transmission, réflexion ou diffusion du composant étudié. Si  $S_M$  n'est pas dans l'intervalle  $[S_{min}, S_{max}]$ , les paramètres  $\tau$  et  $OD$  sont ajustés de manière à diminuer ou augmenter la quantité de photons qui parviennent à la caméra et donc à ajuster le signal mesuré. Un temps d'ouverture très long et une valeur de densité faible favorisent l'augmentation du signal caméra. À l'inverse, un temps d'exposition court et une valeur élevée de densité réduisent le signal caméra. Les paramètres  $\tau$  et  $OD$  possèdent eux-mêmes des valeurs limites :

- $\tau$  est compris entre 40 ms et 100 s. La borne inférieure est imposée par la dynamique de l'obturateur électromécanique. La borne supérieure est choisie arbitrairement pour limiter l'accumulation du bruit dans la caméra et restreindre la durée des campagnes d'acquisition ;
- $OD$  est compris entre 0 et 10.

Plusieurs couples  $(\tau, OD)$  sont possibles et le choix se porte toujours sur le temps d'intégration le plus court. Nous remarquons également que l'algorithme utilise les valeurs exactes de transmittance associées aux densités optiques. Elles ont été mesurées avec un spectrophotomètre PERKIN ELMER (Lambda 1050) et présentées en Figure 2.12, au paragraphe 2.1.3.4.

Si les conditions énoncées précédemment sont respectées, l'acquisition est validée et enregistrée. L'enregistrement génère des écritures dans deux fichiers distincts. Le premier contient des données générées par la caméra sur 1024 valeurs qui correspondent à l'intégration du signal sur une ligne de pixels. Le second enregistre des méta-données sur les conditions d'acquisition : longueur d'onde, angle,  $\tau$ ,  $OD$ , valeur d'intégration du photorécepteur de la voie de *référence*, etc.

### 2.2.3. Acquisition du signal caméra et du bruit

L'ajustement du niveau de signal sur la caméra garantit un rapport signal sur bruit convenable et aucun pixel saturé. Mais, bien que les courants d'obscurité et les bruits de lecture des caméras soient faibles, ils n'en sont néanmoins pas négligeables et doivent être compensés. Les caméras fournissent plusieurs modes d'acquisition. Nous utiliserons toujours le mode *Image* qui correspond à une acquisition pixel par pixel, sans traitement des données. En effet, ce mode offre la meilleure résolution spatiale et conserve toute l'information reçue par le détecteur, contrairement au mode *Full Vertical Binning* qui somme les signaux des pixels d'une même colonne pour une lecture plus rapide. La *caméra visible* possède une matrice de détection CCD de  $255 \times 1024$  pixels (respectivement le nombre de lignes et le nombre de colonnes). L'image de la fibre d'entrée du sous-ensemble de *détection* est formée avec un grandissement de 1,07, sur une zone à mi-hauteur du détecteur. Cette image a alors une hauteur d'environ 4 pixels ; sa largeur dépend du contenu spectral du signal lumineux mais aussi du réseau de diffraction utilisé et de sa dispersion. Le signal est acquis sur une bande de  $50 \times 1024$  pixels. Le bruit est enregistré sur deux zones, en haut et en bas de l'image et chaque bande de bruit fait  $25 \times 1024$  pixels. Le signal étant dispersé latéralement et non verticalement, les zones de mesure du bruit ne sont pas illuminées par le signal dans un mode de fonctionnement normal. Elles sont sommées colonne par colonne et donnent une acquisition de bruit totale sur une ligne de 1024 pixels. De la même manière, les pixels de la bande d'intégration du signal sont additionnés colonne par colonne et résultent eux aussi en une ligne de 1024 pixels. L'acquisition est corrigée par le bruit en soustrayant la ligne de signal par la ligne de bruit.

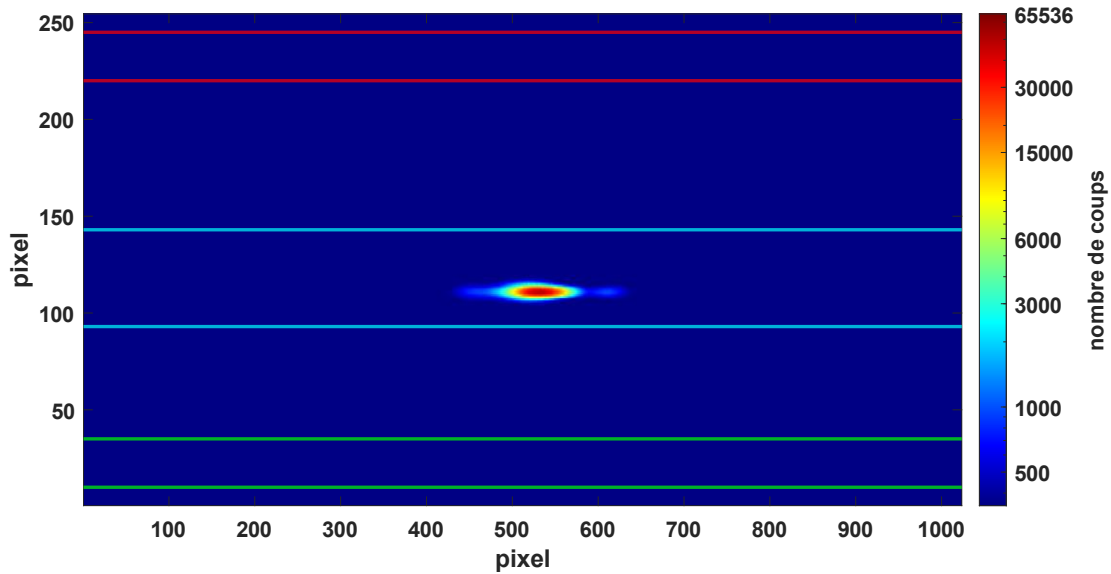


Figure 2.22 Acquisition d'une image avec la caméra Newton d'un signal centré à 700 nm. La zone d'intégration du signal, d'une hauteur de 50 pixels, est délimitée par les traits bleu cyan. Les deux zones d'intégration du bruit, de 25 pixels de hauteur chacune, sont délimitées par les traits verts et rouges.

La Figure 2.22 représente en fausses couleurs l'image d'une acquisition d'une raie spectrale générée par le *bloc source* et centrée à 700 nm. La tache colorée au centre de l'image représente le signal étalé horizontalement selon ses composantes spectrales. La zone d'intégration du signal est délimitée par les traits bleu cyan, tandis que les deux zones de mesure du bruit sont contenues par les lignes rouges et vertes. Le signal d'acquisition est échantillonné sur 16 bits, soit entre 1 et  $2^{16} = 65\,536$  coups.

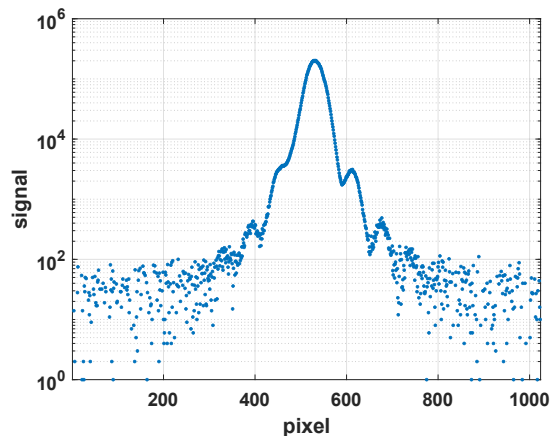


Figure 2.23 Signal résultant de l'intégration de l'acquisition sur la caméra Newton à 700 nm, avec suppression du bruit.

La *caméra infrarouge* possède une barrette de détection de  $1 \times 1024$  pixels (respectivement le nombre de lignes et le nombre de colonnes). Ainsi, il n'est pas possible de réaliser simultanément l'acquisition du signal et du bruit.

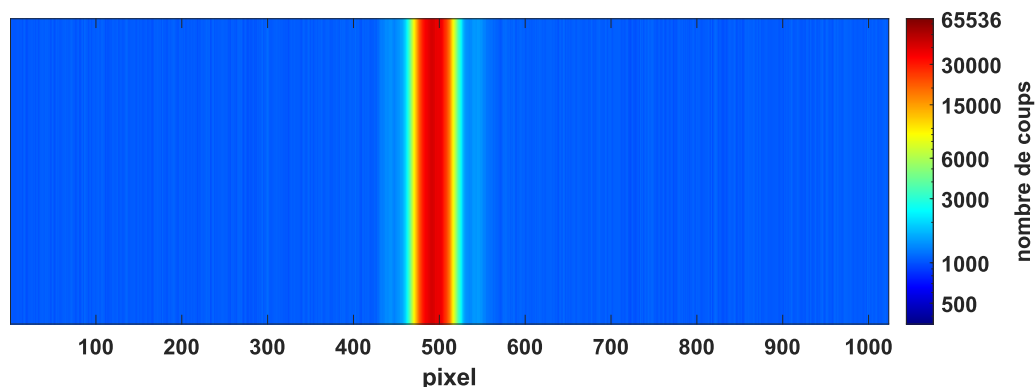


Figure 2.24 Acquisition d'une image avec la caméra iDus d'un signal centré à 1400 nm. Le détecteur est une barrette de pixels (une seule ligne de 1024 pixels). L'intégration du bruit est réalisée par une seconde acquisition dans les mêmes conditions mais sans illumination de l'échantillon.

Une solution envisagée consisterait à utiliser les pixels en bord de détecteur comme référence pour la mesure de bruit. Cependant, cela ne serait pas pleinement satisfaisant car ne fonctionnerait que dans le cas où le signal ne contient qu'une raie spectrale fine et proche de la longueur d'onde de centrage du monochromateur. En conséquence, nous avons opté pour une autre approche. Après chaque acquisition de signal validée, c'est-à-dire respectant les conditions sur le niveau mesuré et sur les paramètres  $(\tau_i, OD_i)$ , est réalisée une acquisition de bruit dans les mêmes conditions mais sans illumination de l'échantillon. En pratique, les conditions sont identiques mais l'obturateur reste fermé pendant toute l'acquisition. Ainsi, de manière comparable au cas de la caméra *visible*, nous obtenons un signal de mesure et un signal de bruit échantillonnés sur 1024 pixels chacun. La soustraction de ces deux signaux donne l'acquisition de mesure corrigée.

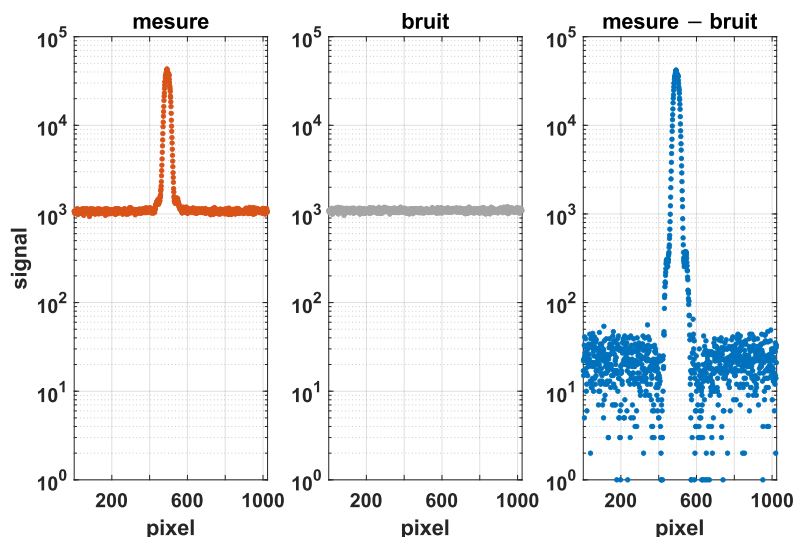


Figure 2.25 Mesure, bruit et mesure corrigée par le bruit qui résultent d'acquisitions sur la caméra iDus à 1400 nm, en échelle logarithmique.

#### 2.2.4. Voie de référence

Le photorécepteur de la voie de *référence visible* et celle de la voie de *référence infrarouge* enregistrent un signal lumineux prélevé dans le sous-ensemble de *préparation*



*du faisceau*. Le niveau de signal et ses variations sont représentatifs du flux d'éclairement de l'échantillon. Les photodétecteurs possèdent chacun un amplificateur dont le gain est ajustable pour garantir un niveau de signal entre 0,9 V et 9 V. Le signal électrique en sortie du photorécepteur est numérisé par une carte d'acquisition NATIONAL INSTRUMENTS USB-6211 à une cadence de 200 kHz.

Comme cela sera présenté dans le paragraphe 2.2.5, l'acquisition du signal sur le photodétecteur commence quelques millisecondes avant l'ouverture de l'obturateur externe et donc avant l'illumination de la voie de *référence*. Le signal enregistré est en forme de créneau, comme illustré dans la Figure 2.26. Les premiers et derniers points d'acquisition correspondent toujours à un niveau bas de signal. Une estimation du bruit est réalisée en moyennant le signal sur 10 ms de part et d'autre du créneau. Cette moyenne de bruit est ensuite soustraite à l'ensemble des données numérisées. Le signal corrigé est ensuite intégré par une somme. L'intégration du signal de la voie de *référence* est stockée en mémoire et est utilisée lors du traitement des données a posteriori. Lorsque le temps d'acquisition  $\tau$  dépasse 10 secondes, la quantité de données numérisées devient trop importante pour la mémoire vive de l'ordinateur. La cadence d'échantillonnage est alors divisée par  $\tau$  afin de réduire la taille des données numérisées par la carte d'acquisition.

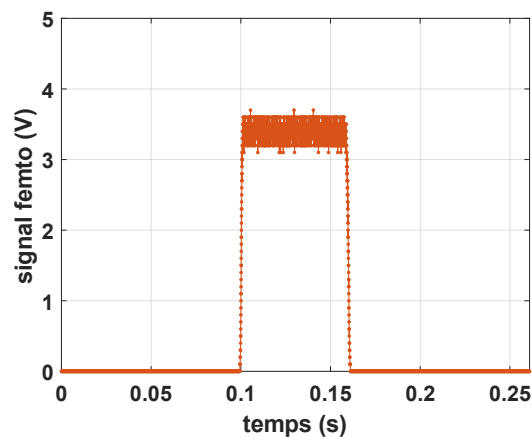


Figure 2.26 Signal d'acquisition de la voie de référence infrarouge, lors d'une mesure à 1400 nm et pour un temps d'ouverture de l'obturateur externe de 55 ms.

La mise en place d'une voie de *référence* est nécessaire pour prendre en compte les fluctuations spectrales et temporelles de la source à supercontinuum. Les lasers blancs présentent une faible stabilité qui est d'autant plus détériorée que les fluctuations du laser de pompe sont susceptibles d'être amplifiées par les effets non-linéaires du supercontinuum. La voie de *référence* réalise une intégration analogique parfaite du signal et enregistre les éventuelles fluctuations de la puissance d'éclairement au cours d'une acquisition.

### 2.2.5. Synchronisation passive des voies de référence et d'acquisition

La synchronisation des voies de *référence* et d'*acquisition* est garantie de manière totalement passive par l'utilisation de l'obturateur mécanique externe. Ce dernier est

indépendant de l'ouverture de la caméra et de celle du photorécepteur de référence. La chronologie est présentée dans la Figure 2.27. Pour chaque acquisition, la date  $\tau_1$  marque le début de l'enregistrement de l'image par la caméra : les puits de stockage des pixels sont déchargés de leurs électrons et le dispositif est prêt pour l'acquisition. Une fois la caméra ouverte, elle émet un signal TTL pour faire part de son état. L'instant  $\tau_2$  est distant de 6 ms de  $\tau_1$  et marque le début de l'acquisition par le photodétecteur de la voie de *référence*. S'en suit un délai de 100 ms avant l'instant  $\tau_3$ , qui marque l'ouverture de l'obturateur mécanique pour un temps  $\tau_i = \tau_4 - \tau_3$ . Une fois l'obturateur refermé, un temps de 100 ms s'écoule avant la fin de l'acquisition du photodétecteur de référence puis 6 ms avant la fermeture de la caméra à la date  $\tau_6$ . De cette manière, les voies *d'acquisition* et de *référence* sont exposées au flux lumineux pendant une durée exactement identique et sont parfaitement synchronisées. La numérisation et le transfert de données de la caméra ne sont réalisés qu'une fois l'obturateur refermé. Il n'y a aucune contrainte de temps pour le traitement de ces informations. La dynamique d'ouverture de l'obturateur externe est également identique pour les deux voies. La sommation des signaux sur les deux voies après leur fermeture respective représente une intégration parfaite. Elle est analogique pour le photodétecteur et numérique pour la caméra.

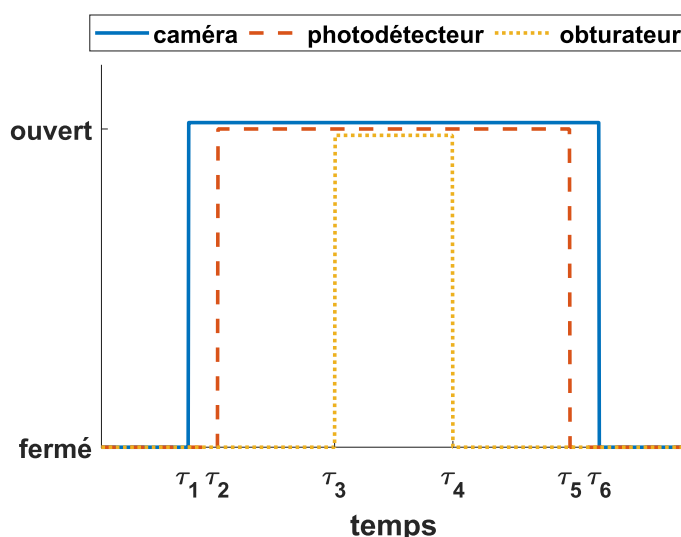


Figure 2.27 Chronogramme de synchronisation passive.

## 2.3. Calibration et qualification métrologique

### 2.3.1. Introduction à la calibration et à la qualification

Les propriétés principales de SALSA et son fonctionnement général ont été détaillés dans les paragraphes précédents (2.1 et 2.2). Des calibrations spectrales sont proposées pour s'assurer que les différents composants sont accordés sur les bonnes longueurs d'onde. Nous verrons par la suite plusieurs mesures de qualification pour justifier les performances annoncées.

## 2.3.2. Calibration de l'instrument

### 2.3.2.1. Calibration des filtres accordables

Les deux filtres accordables LLTF possèdent chacun deux réseaux de diffraction holographiques dont l'orientation angulaire détermine la longueur d'onde de centrage du signal en sortie. Pour la voie *visible*, les deux réseaux fonctionnent respectivement entre 400 et 650 nm et entre 650 et 1000 nm. Pour la voie *infrarouge*, seul le premier réseau sera utilisé entre 1000 et 1700 nm. Un analyseur de spectre (ANDO Optical Spectrum Analyser AQ-6315A) est utilisé comme référence de calibration. La méthode d'étalonnage consiste à mesurer le spectre en sortie des filtres pour différentes longueurs d'onde de consigne. L'analyse de ces spectres révèle un décalage en longueur d'onde comme présenté en Figure 2.28. Le spectre en sortie du filtre LLTF visible est mesuré pour une longueur d'onde de consigne de 750 nm et le signal mesuré est centré sur une valeur de 751,6 nm. Une dizaine de spectres sont ainsi évalués en autant de longueurs d'onde et chaque réseau de diffraction est calibré séparément.

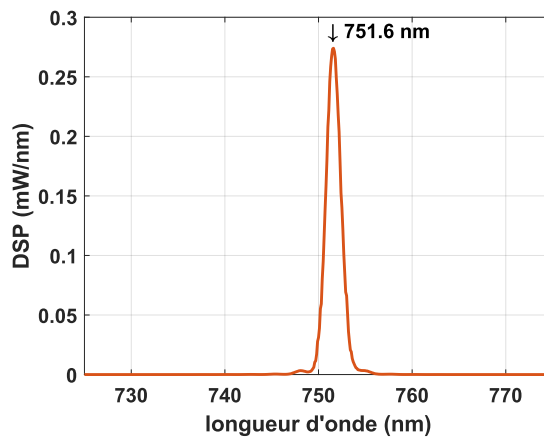


Figure 2.28 Mesure de la densité spectrale de puissance (DSP) en sortie du filtre LLTF visible pour une longueur d'onde de consigne de 750 nm avant calibration.

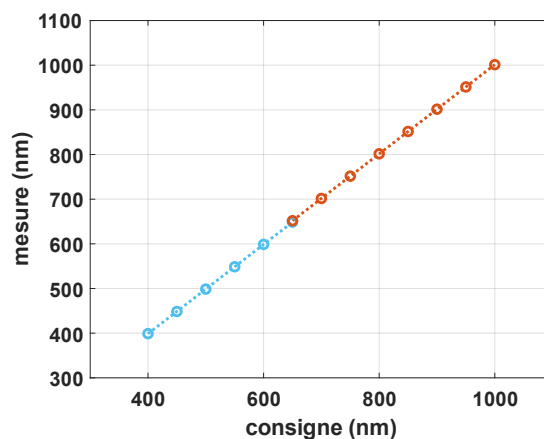


Figure 2.29 Calibration du filtre LLTF visible, les points bleus représentent le réseau #1 (400 nm à 650 nm), les points rouges représentent le réseau #2 (650 nm à 1000 nm). Les données expérimentales sont approchées par des régressions linéaires.

La Figure 2.29 synthétise la relation linéaire observée entre les spectres mesurés (en ordonnées) et les longueurs d'onde de consigne (en abscisses) pour l'étalonnage du filtre de la voie *visible*. La relation entre longueur d'onde de consigne ( $\lambda_{cons}$ ) et longueur d'onde de mesure ( $\lambda_{mes}$ ) est la suivante :

$$\lambda_{mes} = a\lambda_{cons} + b \quad (2.2)$$

avec  $a$  et  $b$  les coefficients déterminés par la régression linéaire, pour chaque réseau de diffraction. La relation est ensuite inversée pour extraire la consigne pour toute longueur d'onde de mesure effective attendue :

$$\lambda_{cons} = \frac{1}{a}\lambda_{mes} - \frac{b}{a} \quad (2.3)$$

Enfin, la qualité de l'étalonnage sur tout le spectre est vérifiée par une seconde campagne de mesure.

Le Tableau 2.2 synthétise le relevé des différentes positions de centrage des raies mesurées en sortie du filtre LLTF de la voie *visible*, avant et après calibration. De faibles écarts, de l'ordre de 0,1 ou 0,2 nm, sont observés entre la consigne et la mesure après calibration. Aucune donnée n'est fournie sur la précision ni sur la répétabilité du réglage du filtre mais il est vraisemblable qu'une faible erreur aléatoire subsiste. Un étalonnage similaire est mené sur la voie *infrarouge*.

	consigne (nm)	avant calibration (nm)	après calibration (nm)
Réseau #1	400	398,9	400,2
	450	448,5	449,8
	500	498,7	500
	550	548,7	549,9
	600	598,8	599,9
	650	648,7	649,9
Réseau #2	650	651,8	-
	700	701,6	699,8
	750	751,6	750
	800	801,6	799,8
	850	851,6	850
	900	901,5	900
	950	951,3	949,9
	1000	1001,2	999,9

Tableau 2.2 Valeurs relevées pour la calibration des deux réseaux du filtre LLTF visible.

La Figure 2.30 montre le spectre obtenu après calibration et pour une consigne à 750 nm, cette fois-ci le signal est parfaitement centré sur la longueur d'onde de consigne.

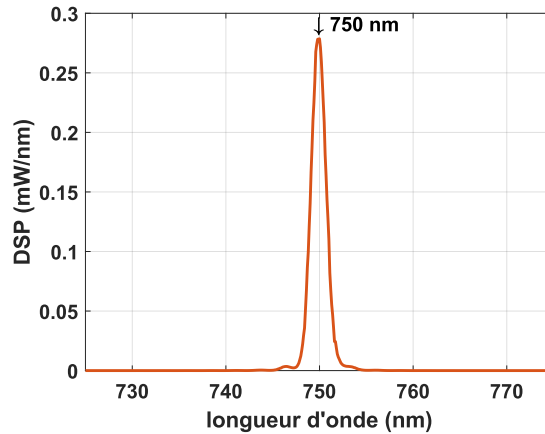


Figure 2.30 Mesure de la densité spectrale de puissance (DSP) en sortie du filtre LLTF visible pour une longueur d'onde de consigne de 750 nm après calibration.

### 2.3.2.2. Calibration du monochromateur avec les filtres accordables

Le monochromateur est également susceptible, du fait de sa construction, de perdre au cours du temps ou après manipulation la calibration affectée par le constructeur. Il est donc nécessaire de disposer d'une méthode d'étalonnage pour ce composant. Comme cela sera évoqué plus loin (cf. 2.3.2), la calibration du monochromateur n'est, dans l'absolu, nécessaire que dans certains cas, notamment pour utiliser un traitement de données *Haute Définition*. Rappelons en quelques mots le fonctionnement d'un spectromètre : un réseau de diffraction disperse spatialement le spectre du faisceau lumineux d'entrée sur un détecteur. Pour une longueur d'onde de consigne donnée, la position angulaire du réseau est ajustée de manière que le signal d'intérêt (c'est-à-dire la longueur d'onde de consigne) soit renvoyé au milieu du détecteur. La calibration du monochromateur couvre deux aspects différents : s'assurer que le signal d'intérêt est bien centré sur la caméra et connaître précisément la valeur de la longueur d'onde associée à chaque pixel de la caméra, pour toute longueur d'onde de consigne.

Le premier aspect n'est pas critique pour le bon fonctionnement de l'instrument. Pour chaque acquisition, une longueur d'onde de consigne  $\lambda_m$  est donnée au monochromateur. La position angulaire du réseau de diffraction est ajustée pour qu'un signal de longueur d'onde  $\lambda_m$  illumine le pixel central (colonne 512) du détecteur. Cette condition n'est pas toujours vérifiée et nous observons un décalage entre la position latérale du maximum du signal  $p_{max}$  vis-à-vis du centre de l'image, le pixel 512 (voir Figure 2.31). Ce décalage est en partie compensé en modifiant la consigne envoyée au monochromateur et par conséquent en changeant la position angulaire du réseau. L'évolution spectrale de cette position est lissée par un polynôme du troisième degré. Cette grandeur lissée est notée  $p_{max,fit}$ . La consigne  $\lambda_m$  est mise à jour en utilisant la valeur de dispersion spectrale  $d_\lambda$  (en nm/pixel) du réseau, donnée par le constructeur ou évaluée expérimentalement. La mise à jour de la valeur respecte la formule suivante :

$$\lambda_m := \lambda_m + (512 - p_{max,fit})d_\lambda \quad (2.4)$$

La modification de la consigne compense partiellement le décalage du signal. Toutefois, l'opération utilise la dispersion spectrale du réseau de diffraction. Cette grandeur est généralement donnée sous forme scalaire et à une longueur d'onde déterminée, ce qui ne rend pas du tout compte de sa dépendance spectrale. La variabilité de la position du maximum de signal en Figure 2.31 laisse également penser que le monochromateur utilisé en fonctionnement normal ne prend pas en compte cette dépendance spectrale puisque l'écart par rapport à la position centrale n'est pas constant. Un phénomène similaire est observé sur la voie *infrarouge* d'acquisition. Pour cet étalonnage, le *bloc source* de SALSA est utilisé comme source lumineuse.

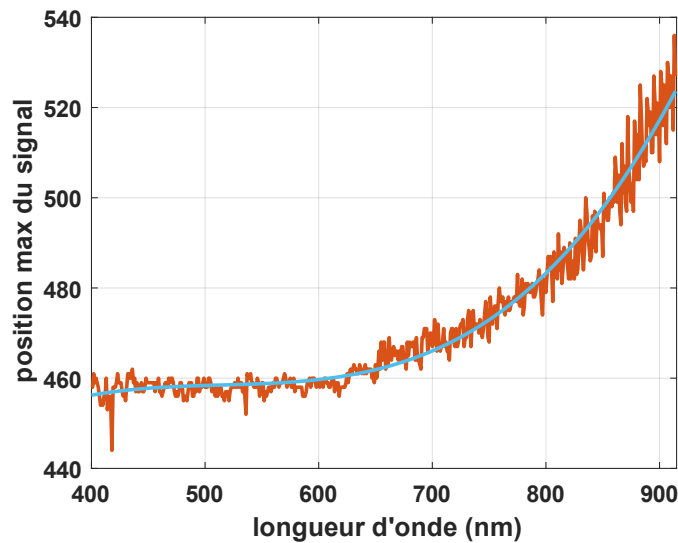


Figure 2.31 Décalage latéral de la position centrale du faisceau  $p_{max}$  sur la caméra de la voie d'acquisition visible (trait orange). La courbe est approchée par un polynôme de degré 3 (trait bleu).

Le second aspect de la calibration concerne la détermination précise de la longueur d'onde associée à chaque pixel le long d'une ligne horizontale du détecteur. Cela revient à déterminer précisément la dispersion du réseau de diffraction pour toute longueur d'onde de consigne. Le paragraphe précédent (2.3.2.1) a montré que nous disposons d'un *bloc source* complètement accordable en longueur d'onde. Nous proposons alors de l'utiliser pour déterminer la dispersion spectrale du réseau de diffraction utilisé sur la voie *infrarouge* d'acquisition. Pour cela, nous cherchons à approcher la grandeur  $\lambda$ , valeur de longueur d'onde en tout pixel  $p$  de la caméra et pour toute consigne  $\lambda_m$ , par un polynôme de degré 1 :

$$\lambda(\lambda_m, p) = (512 - p)a_1(\lambda_m) + a_0(\lambda_m) \quad (2.5)$$

avec  $(512 - p)$  la position  $p$  du signal vis-à-vis du pixel central de l'image (pixel 512). La Figure 2.32 présente une série de 11 acquisitions pour une consigne du monochromateur  $\lambda_m = \lambda_{m0}$  fixée. Chaque raie correspond à un signal généré par le *bloc source*, de longueur d'onde de centrage respective de  $\lambda_m - 50$  nm à  $\lambda_m + 50$  nm, par pas de 10 nm. La position centrale de chaque raie générée est repérée le long de la ligne de pixel.

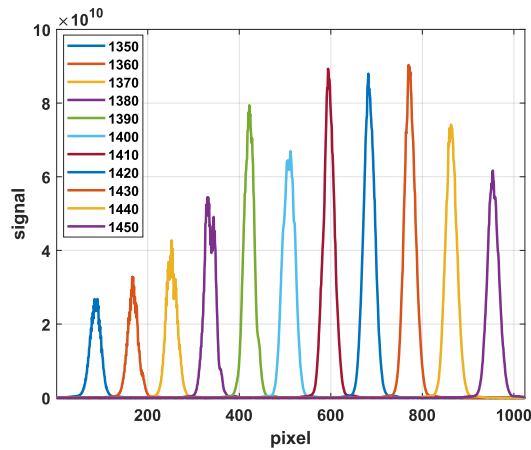


Figure 2.32 Identification de raies spectrales pour une consigne  $\lambda_m$  du monochromateur à 1400 nm. Les 11 signaux sont centrés de 1350 nm à 1450 nm par pas de 10 nm, dispersés dans le même ordre le long de la ligne de pixel du détecteur.

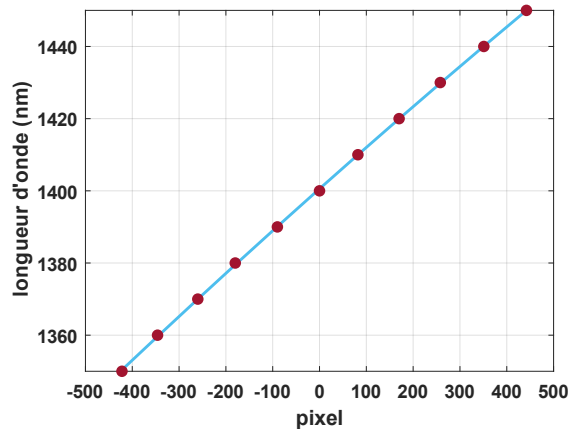


Figure 2.33 Relation linéaire entre les longueurs d'onde de centrage des raies de la Figure 2.32 et l'identification de leur décalage latéral en pixel vis-à-vis de la position centrale de l'image.

La Figure 2.33 montre que la dépendance spectrale de cette position est linéaire :

$$\lambda(\lambda_{m0}, p) = (512 - p)b_1 + b_0 \quad (2.6)$$

Les coefficients  $b_0$  et  $b_1$  sont donc une estimation de  $a_0$  et  $a_1$  pour une consigne  $\lambda_{m0}$  donnée. L'opération est répétée pour 7 valeurs de  $\lambda_m$ , de 1000 à 1600 nm par pas de 100 nm.

L'évolution des coefficients  $a_1$  et  $a_0$  est approchée par un polynôme de degré 2 et illustrée en Figure 2.34. Ceci nous conduit aux expressions suivantes :

$$a_1(\lambda_m) = -1,966 \times 10^{-8} \lambda_m^2 - 2,060 \times 10^{-6} \lambda_m + 0,157 \quad (2.7)$$

$$a_0(\lambda_m) = -8,410 \times 10^{-7} \lambda_m^2 + 1,000 \times 10^{-6} \lambda_m + 0,889 \quad (2.8)$$

Le coefficient  $a_1$  en nm/pixel décrit la dispersion spectrale du réseau de diffraction de la voie *infrarouge* d'acquisition. Les pixels de la caméra sont d'une largeur de 25  $\mu\text{m}$  : il est aisé de retrouver la dispersion en nm/mm, en divisant  $a_1$  par  $25 \times 10^{-3}$ .

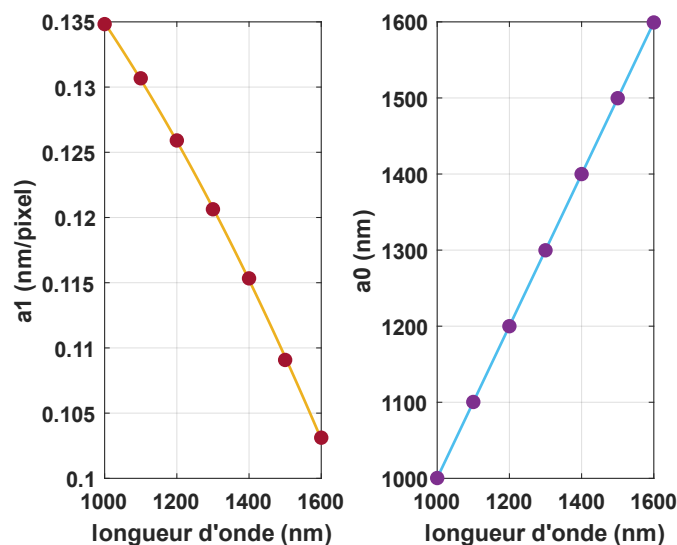


Figure 2.34 Les coefficients  $a_1$  et  $a_0$  sont approchés par des polynômes de degré 2.

La détermination de la dispersion spectrale du réseau de diffraction de la voie *infrarouge* d'acquisition semble correcte. Toutefois, l'opération dépend de la calibration des filtres accordables LLTF. Si cette dernière n'est pas juste, alors la détermination de la dispersion du monochromateur ne pourra certainement pas être correcte non plus. D'autre part, nous avons pu voir que malgré une procédure de calibration rigoureuse, il n'est pas possible d'étalonner parfaitement les filtres LLTF. La largeur des signaux générés induit également des incertitudes sur la localisation du pixel central et leur stabilité est inconnue. Nous envisageons donc une seconde solution pour étalonner le monochromateur indépendamment des filtres accordables : en utilisant une source tierce. Nous choisissons une lampe à décharge gazeuse dont les raies spectrales sont très fines, parfaitement résolues et extrêmement stables.

### 2.3.2.3. Calibration du monochromateur avec des sources gazeuses

La calibration de la voie d'acquisition *infrarouge* est reprise en utilisant cette fois-ci une lampe à décharge contenant du xénon (Xe) sous forme gazeuse (référence : OCEAN INSIGHT Xe2). Cette source donne accès à un ensemble de raies spectrales extrêmement bien définies et caractéristiques du xénon. Les raies les plus intenses sont fournies par la documentation du fabricant et une liste complète est également donnée par Boyce [32]. Seules les raies les plus intenses dans le domaine spectral d'intérêt ont été utilisées.

881,941	992,319	1354,415	1473,281
895,225	1083,837	1365,706	1541,839
904,545	1174,201	1414,244	1597,954
916,265	1223,524	1424,096	1605,328
979,970	1262,340	1436,499	1647,290

Tableau 2.3 Raies spectrales du xénon utilisées pour la calibration de la voie d'acquisition *infrarouge* (nm) [32]



La sortie de la source lumineuse présente une embase FC sur laquelle est connectée une fibre multimode d'un diamètre de cœur de 50  $\mu\text{m}$  et d'une ouverture numérique de 0,22. Un collimateur réflectif projette le faisceau en espace libre. Un miroir à 45° est inséré dans le sous-ensemble de *préparation du faisceau*, entre la sortie du filtre LLTF et l'obturateur externe. De cette manière, le signal emprunte exactement le même trajet que les signaux du *bloc source*. Le miroir sera retiré une fois les acquisitions de calibration terminées. La voie de *référence* est inhibée car le photodétecteur n'est pas assez sensible pour la faible intensité de la source gazeuse. Les acquisitions se déroulent de la même manière que pour la caractérisation d'un composant quelconque, mais il n'y a pas d'échantillon et le *bloc source* est remplacé par la source à xénon.

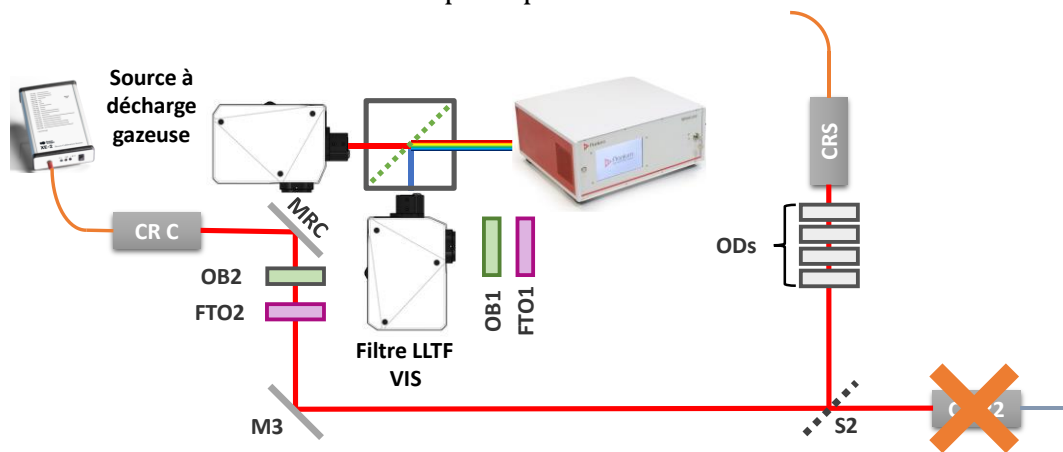


Figure 2.35 Modification du sous-ensemble de préparation du faisceau pour la calibration du banc par utilisation de raies gazeuses. Le bloc source est remplacé par une lampe à décharge gazeuse, le signal est inséré dans la chaîne d'acquisition par un collimateur réflectif (CR C) et un miroir de renvoi (MRC). Ce dernier est retiré une fois la calibration terminée. La voie de référence est inhibée.

La campagne de mesure consiste en une succession d'acquisitions de 900 à 1700 nm par pas de 1 nm. Le spectre de la source est toujours identique, seule la consigne donnée au monochromateur varie. Le fonctionnement est quasiment identique à l'étalonnage du paragraphe précédent (2.3.2.1) avec les filtres accordables. Les raies spectrales gazeuses sont beaucoup plus fines et bien définies : il n'y a pas d'incertitude sur la longueur d'onde associée à chaque raie. De manière similaire à la première méthode de calibration, nous cherchons à déterminer la longueur d'onde  $\lambda$  associée à tout pixel  $p$  de la caméra pour une longueur d'onde de consigne  $\lambda_m$  du monochromateur donnée. La grandeur est approchée par un polynôme de degré 2, de la forme :

$$\lambda(\lambda_m, p) = a_2(\lambda_m)(p - 512)^2 + a_1(\lambda)(p - 512) + a_0(\lambda_m) \quad (2.9)$$

Pour une consigne  $\lambda_m = \lambda_{m0}$  donnée, l'acquisition du signal présente un ensemble de raies spectrales, comme illustré à la Figure 2.36. Puisque la longueur d'onde de consigne est connue et que le réglage du monochromateur est suffisamment correct, nous pouvons associer les raies observées aux valeurs de longueurs d'onde données dans la littérature. Nous vérifions également la cohérence des raies identifiées selon leurs positions respectives. Toutes les raies identifiées dans la littérature n'ont pas été retenues car certaines sont de trop faible intensité pour être localisées sans erreur.

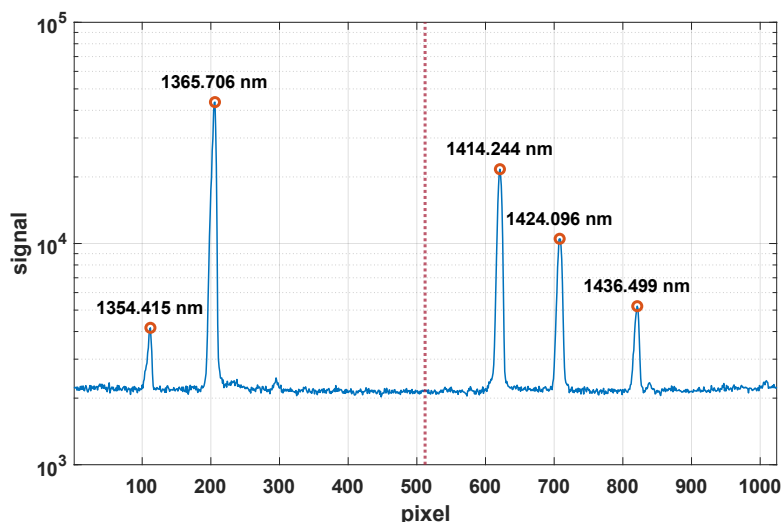


Figure 2.36 Identification des raies spectrales du xénon pour une consigne  $\lambda_m$  à 1400 nm. Cinq raies et leur longueur d'onde associée sont identifiées pour cette acquisition.

L'identification est répétée pour toutes les acquisitions, au nombre de 801 pour cette campagne. Chaque acquisition correspond à une consigne  $\lambda_m$  différente (de 900 nm à 1700 nm par pas de 1 nm). Les raies ne sont pas uniformément réparties sur tout le spectre et l'approche par un polynôme de degré 2 n'est possible que si le nombre de raies présentes sur l'acquisition est supérieur ou égal à 3. Les coefficients  $a_0$ ,  $a_1$  et  $a_2$  sont évalués en chacune des acquisitions, puis des régressions indépendantes (polynômes de degré 2) sont réalisées sur ces trois grandeurs selon la longueur d'onde de consigne. Le résultat de ces régressions est présenté en Figure 2.37. Il met en évidence un accord entre le modèle et la mesure un peu moins bon que dans la calibration avec les filtres accordables. Cependant, le nombre de points de mesures est beaucoup plus important et leur identification est soumise à moins d'erreur, la confiance accordée en ces résultats est donc élevée.

Les valeurs du coefficient  $a_2$  sont très dispersées. Ce terme n'a pas tellement de signification physique et sa valeur relativement faible n'induit pas de variations prépondérantes sur le comportement spectral général. Son impact sur la calibration est minime. Le terme  $a_0$  est proche de  $\lambda_m$ , ce qui se comprend bien par le fait que la calibration du monochromateur vise à ajuster très finement un réglage déjà correct. Le terme  $a_1$  (voir graphique central de la Figure 2.37) est le plus intéressant, il décrit l'évolution de la dispersion spectrale du réseau de diffraction. Les valeurs identifiées sont identiques à celles trouvées par la méthode précédente, par exemple, 0,135 nm/pixel à 1000 nm et 0,101 nm/pixel à 1600 nm. La calibration par utilisation d'une source gazeuse externe présente l'avantage d'être totalement indépendante de l'étalonnage du *bloc source*. La forme retenue pour la dispersion spectrale de la voie d'acquisition *infrarouge* est :

$$a_1(\lambda_m) = -8,691 \times 10^{-9} \lambda_m^2 - 2,957 \times 10^{-5} \lambda_m + 0,174 \quad (2.10)$$

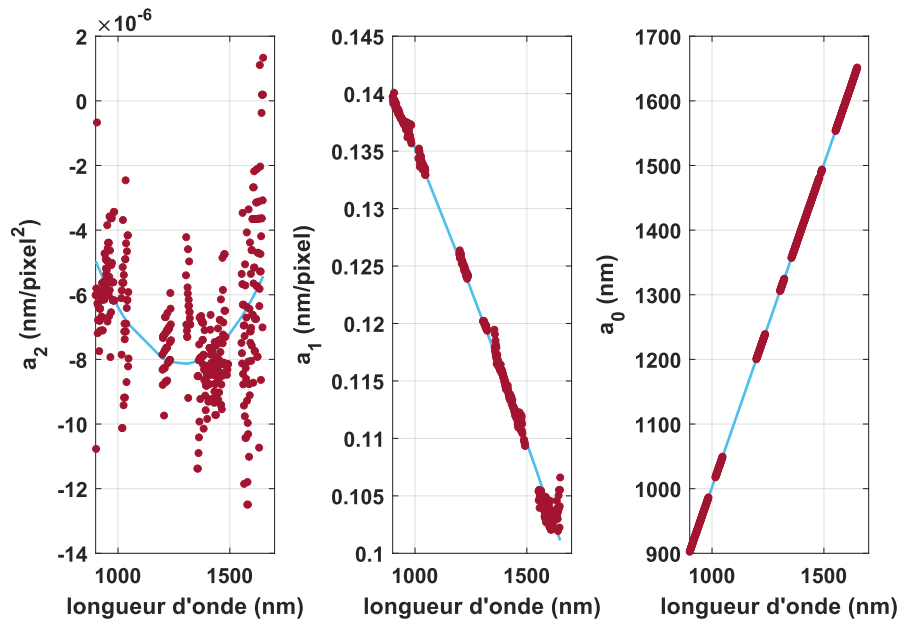


Figure 2.37 Calibration de la voie infrarouge d'acquisition. Coefficients polynomiaux  $a_2$ ,  $a_1$  et  $a_0$  évalués pour chaque acquisition (points rouges) et régression polynomiale au second degré de ces valeurs (traits bleus).

La Figure 2.38 présente le nombre de raies spectrales identifiées pour chaque acquisition. Une régression polynomiale d'ordre 2 nécessite au moins 3 raies.

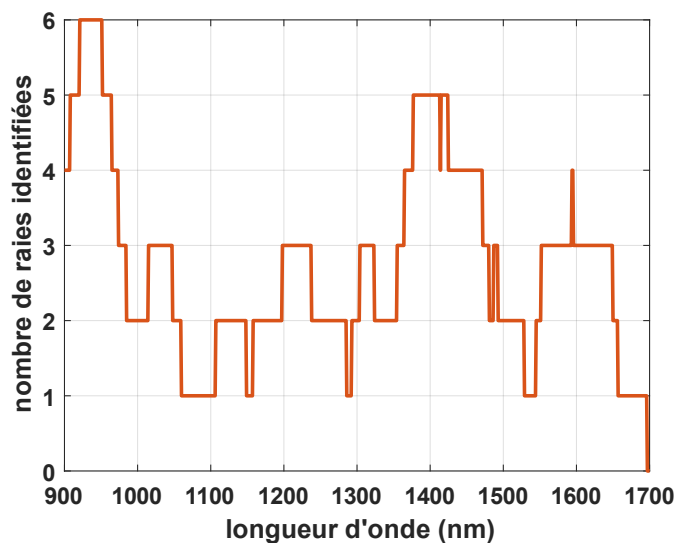


Figure 2.38 Nombre de raies identifiées en fonction de la longueur d'onde de consigne.

Un étalonnage identique a été réalisé pour la voie *visible* d'acquisition avec une source à décharge gazeuse mercure-argon (OCEAN INSIGHT Hg2). Les raies du mercure ont été établies par Bare et Demas [33] et celles retenues pour cet étalonnage sont présentées dans le Tableau 2.4. Les résultats de cette calibration sont exposés en Figure 2.39.

404,656	579,066	738,398	800,616	866,794
407,783	696,543	750,387	811,531	912,297
435,833	706,722	763,511	826,452	922,450
546,074	714,704	772,376	842,465	
576,960	727,294	794,818	852,144	

Tableau 2.4 Raies spectrales du mercure et de l'argon utilisées pour la calibration de la voie d'acquisition visible (nm) [33].

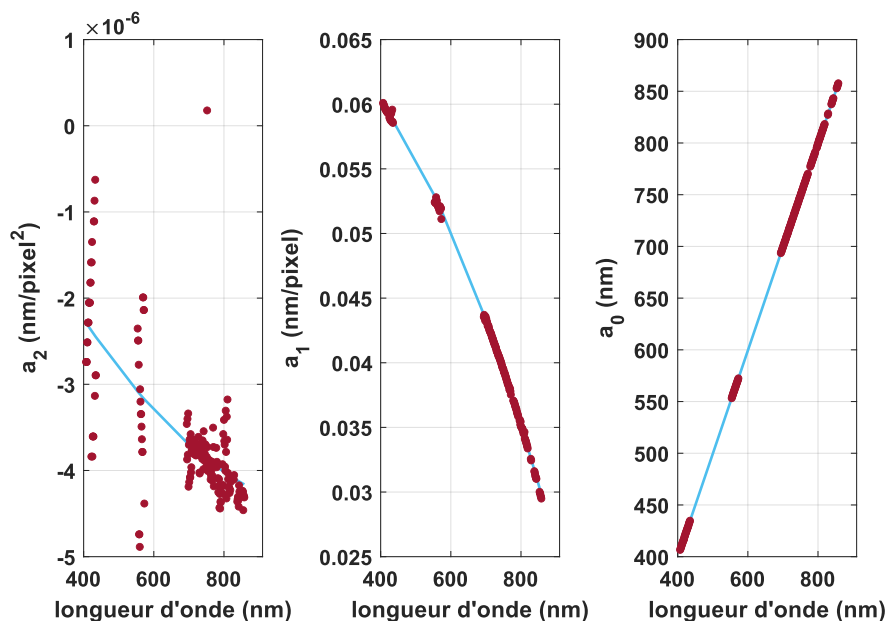


Figure 2.39 Calibration de la voie visible d'acquisition. Coefficients polynomiaux  $a_2$ ,  $a_1$  et  $a_0$  évalués pour chaque acquisition (points rouges) et régression polynomiale au second degré de ces valeurs (traits bleus).

Une identification similaire des raies est réalisée pour un intervalle de longueurs d'onde de 400 à 900 nm. Un modèle semblable à celui développé sur la voie *infrarouge* est utilisé pour décrire l'évolution de la longueur d'onde associée à chaque position latérale et chaque longueur d'onde de consigne. L'expression finale retenue pour la dispersion spectrale de la voie d'acquisition *visible* est un polynôme du second degré :

$$a_1(\lambda_m) = -6,330 \times 10^{-8} \lambda_m^2 + 1,352 \times 10^{-5} \lambda_m + 0,065 \quad (2.11)$$

Les valeurs de dispersions obtenues par cette calibration sont concordantes avec celles identifiées avec la calibration qui utilise le *bloc source*.

#### 2.3.2.4. Calibration des acquisitions

Les mesures réalisées par SALSA sont relatives, c'est-à-dire qu'elles s'appuient sur la mesure d'un étalon aux propriétés connues pour déterminer la grandeur recherchée. Dans le cas de la caractérisation des propriétés spéculaires, la mesure étalon est une mesure sans échantillon, que l'on appelle mesure de *ligne de base*. La transmittance d'un composant est le rapport de la puissance du champ transmis divisée sur la puissance du

champ incident. En l'absence d'échantillon, le détecteur placé en face du collimateur d'émission perçoit directement le champ incident. Lors d'une acquisition avec échantillon, le détecteur perçoit le champ transmis. La calibration par mesure de ligne de base est également valable pour la caractérisation de la réflectance d'un composant.

Concernant la caractérisation des propriétés de diffusion, la mesure de ligne de base n'est pas adaptée pour l'étalonnage puisque la BSDF (ou l'ARS) est le rapport entre la puissance diffusée dans un angle solide et la puissance incidente dans ce même angle solide. La calibration utilise plutôt un échantillon hautement réflectif et homogènement diffusant en réflexion. L'étalon que nous utilisons est fourni par LABSPHERE et est constitué d'un matériau appelé Spectralon®. Ce matériau est un diffuseur lambertien quasi-parfait, c'est-à-dire que sa BRDF est égale au rapport entre une grandeur  $\rho$  et le nombre  $\pi$ . Sa fonction ARS est définie par la relation suivante :

$$ARS(\theta, \lambda) = BRDF \cos(\theta) = \frac{\rho(\lambda)}{\pi} \cos(\theta) \quad (2.12)$$

L'ARS d'un échantillon lambertien suit donc une loi en cosinus. La grandeur  $\rho(\lambda)$  est appelée *albédo* et est égale au rapport de la puissance totale diffusée et la puissance incidente. L'albédo est l'équivalent du coefficient de réflexion pour la diffusion. La définition d'un matériau lambertien impose que  $\rho(\lambda)$  soit quasi-constante, de préférence proche de 1, afin de faciliter l'utilisation de cet étalon. Les données de l'*albédo* fournies par le fabricant sont certifiées par le NIST (*National Institute of Standards and Technology*).

Ces propriétés lambertiennes sont vérifiées comme en témoigne la Figure 2.40 qui présente la dépendance spectrale de l'albédo de l'étalon sur tout le spectre d'intérêt.

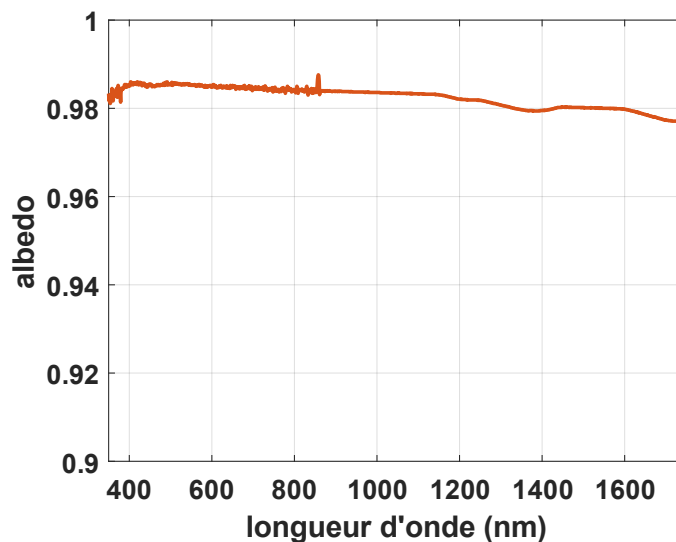


Figure 2.40 Dépendance spectrale de l'albédo de l'étalon Spectralon® (donnée LABSPHERE).



Figure 2.41 Diffuseur lambertien utilisé pour la calibration des mesures de diffusion (LABSPHERE Spectralon®).

L'alignement mécanique de l'instrument et la validation du mode d'acquisition des données sont également assurés par des mesures sur cet étalon puisque nous disposons d'une formule analytique simple pour décrire son ARS. Cette dernière étant décrite, de manière absolue, par une loi en cosinus. Il suffit alors de comparer une acquisition sur l'échantillon lambertien avec une fonction cosinus. Plus les données mesurées sont proches du modèle, plus l'alignement mécanique de l'instrument est bon. La Figure 2.42 montre les résultats d'une acquisition réalisée sur un étalon lambertien pour une longueur d'onde de 800 nm, une incidence de 5° et un balayage angulaire de 5° à 95° par pas de 5° dans le référentiel du laboratoire. Ceci correspond à un intervalle angulaire de 0° (incidence normale) à 90° (incidence rasante) dans le référentiel de l'échantillon. La réponse mesurée est normée pour être comprise entre 0 et 1, et ainsi faciliter la comparaison avec la fonction cosinus. Usuellement, c'est plutôt l'échelle logarithmique qui est utilisée pour la calibration des diffusomètres, nous remarquerons que la comparaison est ici faite en échelle linéaire pour augmenter la précision de l'alignement.

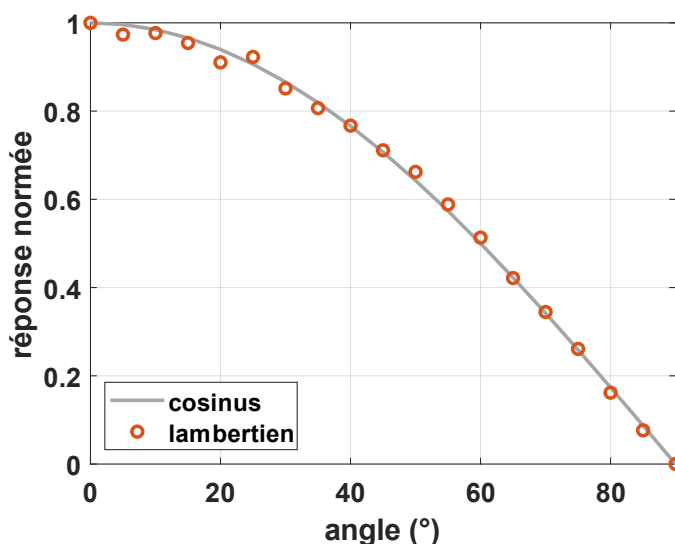


Figure 2.42 Réponse normée d'une mesure angulaire d'un étalon lambertien à une longueur d'onde de 800 nm. La comparaison avec la fonction cosinus (trait gris continu) souligne l'alignement correct de l'instrument.

### 2.3.3. Qualification de l'instrument

#### 2.3.3.1. Dynamique de détection et précision

La performance la plus saillante de SALSA est certainement sa dynamique de détection : jusqu'à une densité optique de valeur 13 mesurée en transmission et en réflexion. Cette performance est justifiée par la caractérisation de densités optiques neutres, plus précisément des monocouches d'argent déposées sur des substrats de silice. Quatre de ces composants ont été fabriqués par l'équipe RCMO (Recherche en Couches Minces Optiques) de l'Institut Fresnel. Plus l'épaisseur est importante, plus la transmittance est faible. Ces composants avaient déjà été utilisés pour une étude sur SALSA 3 efficace dans le spectre visible [21]. La mesure de leur transmittance sur la gamme [400 nm – 1000 nm] avait permis de retrouver avec précision leur épaisseur respective. L'accord avec le modèle était excellent comme exposé à la Figure 2.43. La modélisation utilisée repose sur l'utilisation des admittances complexes, comme présenté au Chapitre 1. Les points colorés symbolisent les données mesurées, tandis que le modèle est représenté par des traits gris continus. La valeur numérique inscrite pour chaque composant indique l'épaisseur évaluée de la couche d'argent concernée.

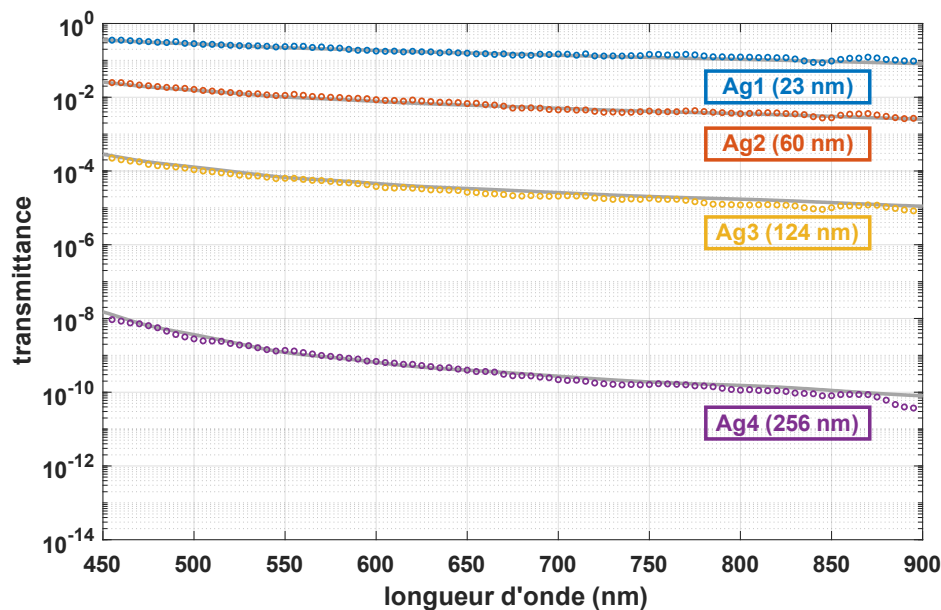


Figure 2.43 Mesure de transmittance sur 4 miroirs d'argent (Ag1, Ag2, Ag3 et Ag4) avec SALSA 3 entre 450 et 900 nm. Les acquisitions (points colorés) sont en accord avec le modèle (traits gris). L'épaisseur respective de chaque monocouche est indiquée par la valeur numérique. (données : [21])

Une caractérisation similaire a été réalisée jusqu'à 1650 nm avec la nouvelle configuration SALSA 4 et est représentée à la Figure 2.44. La comparaison avec la théorie montre encore une fois un excellent accord sur tout le spectre pour les quatre composants testés. Ce résultat confirme que les différentes évolutions apportées au banc n'ont en rien modifié ses performances sur la partie visible. L'étude du quatrième composant Ag4, le plus épais, est particulièrement intéressante puisqu'elle illustre la capacité de SALSA à mesurer de très faibles flux, de l'ordre de  $10^{-11}$  dans le proche infrarouge. L'analyse des

autres composants montre également sa capacité à mesurer correctement des flux un peu plus importants. L'état de l'art pour ce type de mesure de transmittance et sur un très large spectre se situe généralement autour de  $10^{-6}$  pour les spectrophotomètres usuels. SALSA se place donc au moins 5 décades en dessous de cette valeur seuil. [21,24,34]

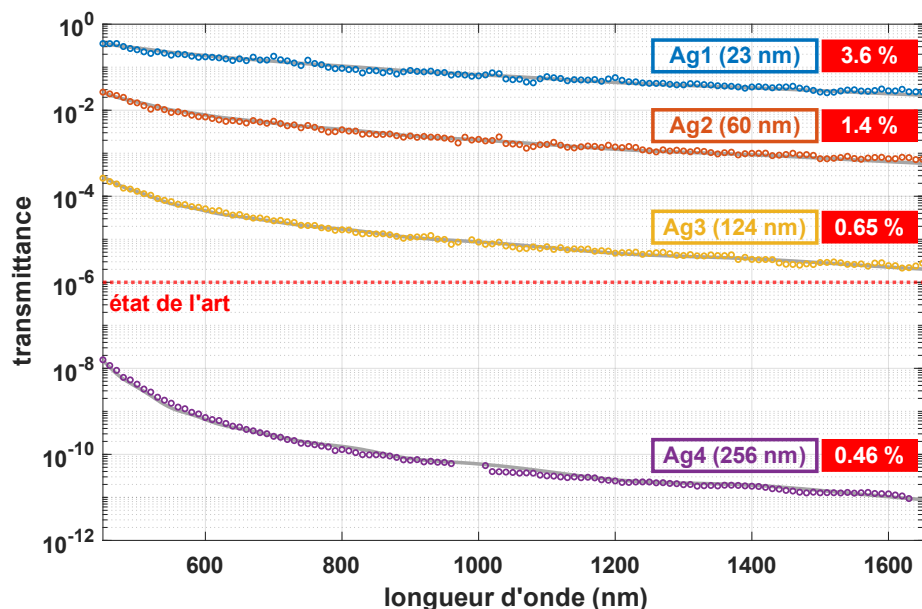


Figure 2.44 Mesure de transmittance sur Ag1, Ag2, Ag3 et Ag4 avec SALSA 4, entre 400 et 1650 nm. La précision de chaque mesure est indiquée en rouge, elle est d'autant meilleure que les niveaux de transmittance sont faibles.

Les acquisitions réalisées sur ces quatre échantillons permettent également de déterminer la précision de la mesure. En effet, les composants considérés sont relativement simples puisqu'ils sont constitués d'une seule couche d'argent. Les niveaux de transmittance dépendent uniquement de l'épaisseur de la couche. Dans cette configuration, l'ajustement du modèle ne dépend que d'un seul paramètre et l'accord avec la mesure exprime la précision de l'acquisition. Ce critère est décrit comme l'écart moyen absolu relatif entre ces deux séries de données et en travaillant sur une échelle de densités optiques.

$$\text{précision} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \left| \frac{\log_{10}(\text{modèle}_{\lambda}) - \log_{10}(\text{mesure}_{\lambda})}{\log_{10}(\text{modèle}_{\lambda})} \right| \quad (2.13)$$

avec  $N$  le nombre de points de mesure. L'évaluation de cette grandeur pour ces quatre échantillons montre que la précision de SALSA est de l'ordre de quelques pourcents et qu'elle est d'autant meilleure que les flux mesurés sont faibles. En effet, la meilleure précision est observée sur le composant Ag4 qui présente les niveaux de transmittance les plus bas. La précision de l'instrument est donc globalement de l'ordre de quelques pourcents. En se limitant aux faibles flux, en dessous de  $10^{-2}$ , la précision de SALSA est même meilleure que 1,5%. Cette dernière valeur est très proche de celle de 1% obtenue sur la configuration précédente de l'instrument.



### 2.3.3.2. Signature de l'instrument

La *signature* de l'instrument représente la limite de détection des faibles flux. Dans le cas d'une mesure de transmittance, il s'agit d'une mesure d'un échantillon opaque, de densité optique supérieure à 15. En conséquence, le signal extrait de cette acquisition se réduit à une estimation du bruit. Cette donnée expérimentale montre bien la capacité de SALSA à mesurer jusqu'à une densité optique de 13 dans le proche infrarouge, soit un coefficient de transmission de l'ordre de  $10^{-13}$ .

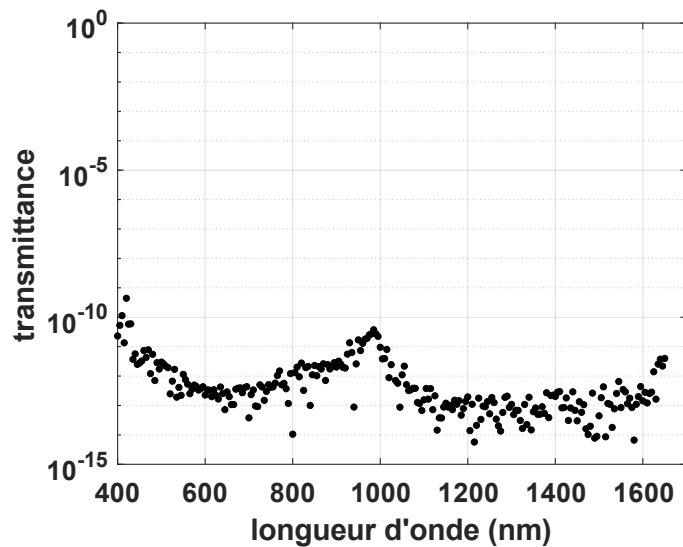


Figure 2.45 Signature de SALSA sur tout le spectre accessible et pour une mesure de transmittance. Le pic autour de 1000 nm est dû au changement de détecteur.

Du fait de la construction du banc, le bruit résiduel mesuré ici est indépendant du temps d'intégration. Ainsi, il suffirait d'augmenter le temps d'intégration pour élever le rapport signal sur bruit et abaisser encore le seuil de détectivité. Mais, afin de limiter la durée des campagnes de mesure, le temps d'intégration maximal est de 100 s.

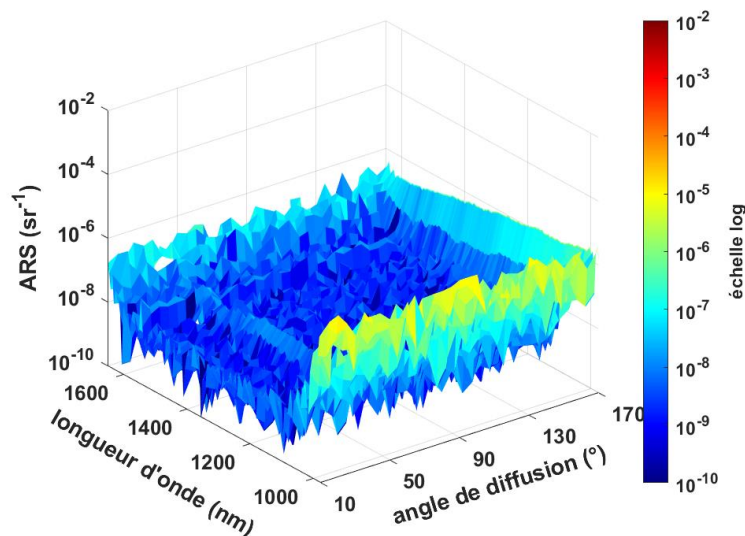


Figure 2.46 Signature de SALSA dans le proche infrarouge et pour une mesure de diffusion.

La *signature* de l'instrument peut également être évaluée pour une mesure de diffusion. Dans ce cas-là, cette grandeur correspond à une acquisition sans échantillon mais avec illumination. Les niveaux de signal détectés sont autour de la valeur de  $10^{-8} sr^{-1}$  ce qui équivaut à la limite fixée par la diffusion lumineuse de l'air par le modèle Rayleigh. La Figure 2.46 présente une acquisition de la *signature* réalisée dans le proche infrarouge. L'évaluation de la *signature* de SALSA dans la partie visible de sa gamme spectrale a été réalisée lors de travaux antérieurs sur l'instrument [20]. La limite de détection autour de  $10^{-8} sr^{-1}$  était déjà observée sur ces longueurs d'onde.

### 2.3.3.3. Résolution spectrale

Les lampes à décharge gazeuse, au mercure-argon et au xénon, utilisées pour la calibration du monochromateur (cf. section 2.3.2.3) produisent des raies d'une largeur spectrale extrêmement fine, de l'ordre de quelques picomètres en théorie. Les acquisitions réalisées par SALSA montrent pourtant des raies spectrales qui s'étalent sur plusieurs pixels, donc de l'ordre du dixième de nanomètre. La largeur à mi-hauteur de chaque raie peut raisonnablement être confondue avec la résolution spectrale du banc. Cette grandeur est mesurée pour toutes les acquisitions. Afin de se prémunir d'éventuels effets de bord, seules les raies identifiées dans une zone centrale de 201 pixels de large sont prises en compte puis moyennées, tel qu'illustré Figure 2.47.

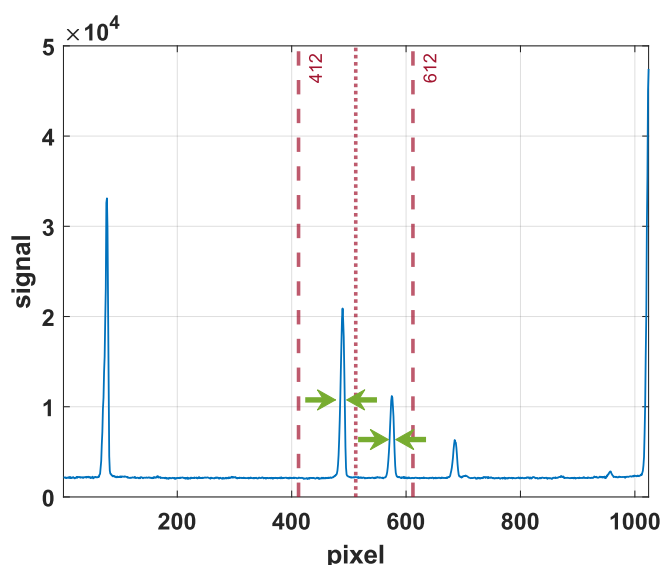


Figure 2.47 Mesure de la largeur à mi-hauteur des raies du xénon à 1415 nm. Seules les raies identifiées entre les pixels 412 et 612 sont considérées.

La résolution spectrale n'est donc pas évaluée sur tout le spectre mais une tendance générale se dessine. L'opération est réalisée pour les deux voies d'acquisition et les résultats sont donnés en Figure 2.48. Ils mettent en avant une résolution spectrale inférieure à 0,4 nm pour la voie *visible* et inférieure à 0,9 nm pour la voie *infrarouge*. Ces valeurs sont en parfait accord avec les spécifications des versions antérieures de l'instrument, pour lesquelles la résolution spectrale était meilleure que 1 nm.

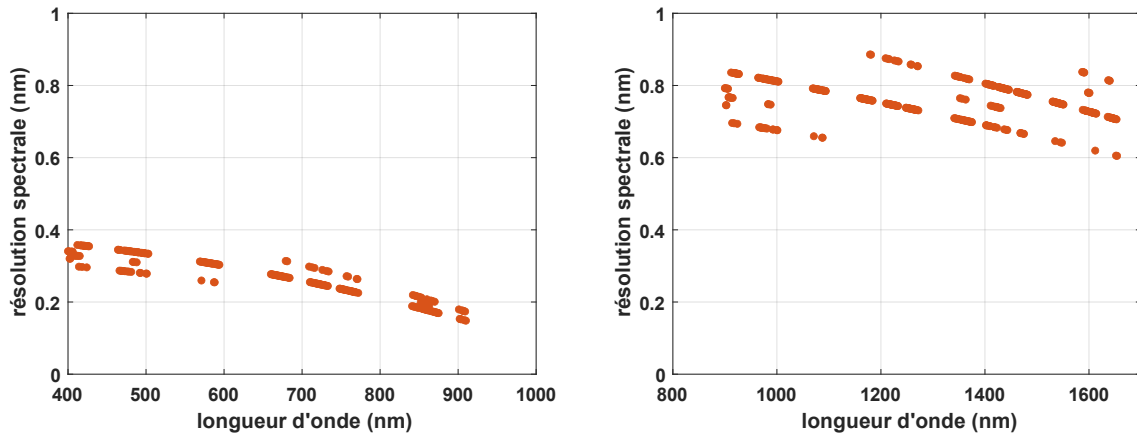


Figure 2.48 Résolution spectrale de SALSA évaluée sur les voies d'acquisition visible (gauche) et infrarouge (droite).

### 2.3.3.4. Résolution angulaire

SALSA réalise des mesures d'ARS (ou de BSDF), une grandeur angulairement définie. Il est ainsi impératif que l'instrument soit angulairement résolu pour que les mesures soient significatives. La détermination de cette résolution passe par la mesure du profil angulaire du faisceau d'illumination : le bras de rotation qui porte le collimateur de réception effectue un balayage angulaire autour de la position du faisceau spéculaire transmis. La réponse mesurée est normée et montre une chute de signal de 8 décades à  $1^\circ$  de la position du faisceau spéculaire. En d'autres termes, pour une observation à un angle donné, les contributions angulaires éloignées de plus de  $1^\circ$  sont négligeables. La Figure 2.49 présente en échelle logarithmique la réponse normée d'un balayage angulaire du faisceau spéculaire transmis, sans échantillon. La présence d'un échantillon peut perturber légèrement ce résultat, surtout dans le cas de composants diffusants.

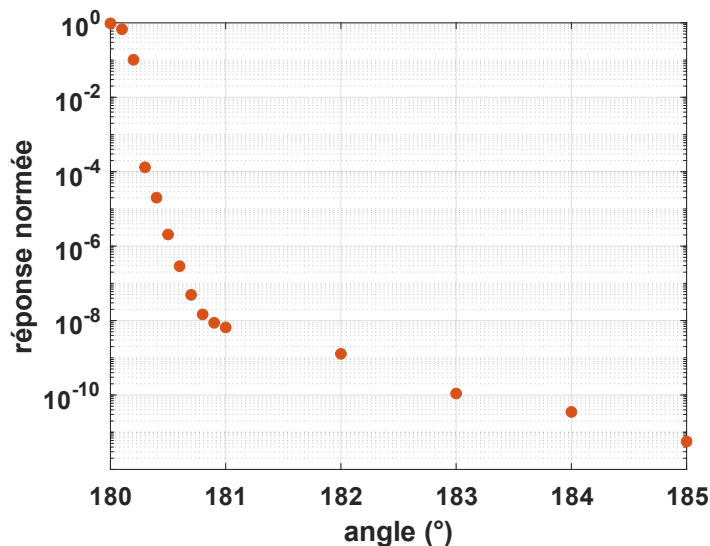


Figure 2.49 Réponse normée de la mesure du profil angulaire du faisceau transmis. Le signal subit une chute de 8 décades à  $1^\circ$  de la position spéculaire à  $180^\circ$ , pour une longueur d'onde de 760 nm.

La Figure 2.50 représente la même réponse normée mais en échelle linéaire cette fois-ci. Nous observons que la largeur à mi-hauteur du profil angulaire du faisceau est de  $0,4^\circ$  (à une longueur d'onde de 760 nm). Cette valeur donne une approximation de la résolution angulaire de l'instrument. Nous remarquons que le profil angulaire est légèrement dyssymétrique et présente un maximum d'intensité à  $179,9^\circ$ . Cela peut provenir d'un défaut d'alignement mécanique mais également d'une légère imprécision dans la détection de mesure. Dans la même configuration mécanique, des mesures du profil angulaire du faisceau ont montré un centrage correct pour des longueurs d'onde de 450 nm et 1650 nm à la Figure 2.51. La mesure de la largeur à mi-hauteur de ces signaux indique que la résolution angulaire de SALSA est d'environ  $0,5^\circ$  sur toute sa gamme spectrale.

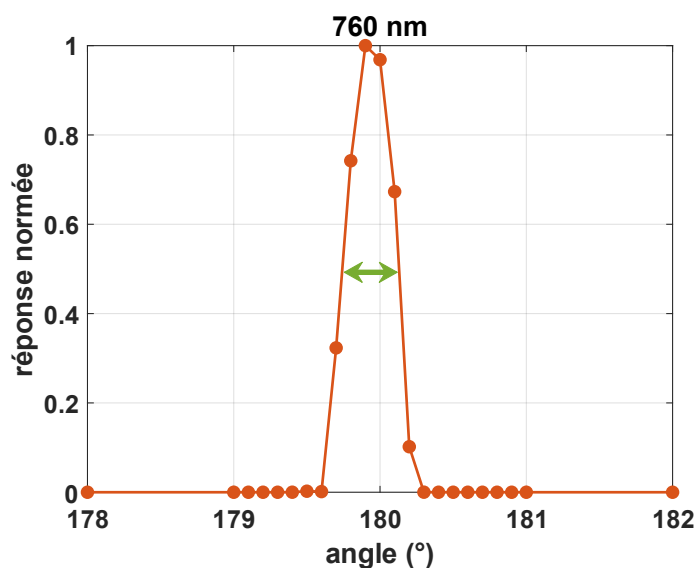


Figure 2.50 Profil angulaire du faisceau, en échelle linéaire. La résolution angulaire à 760 nm, associée à la largeur à mi-hauteur du signal, est de  $0,4^\circ$ .

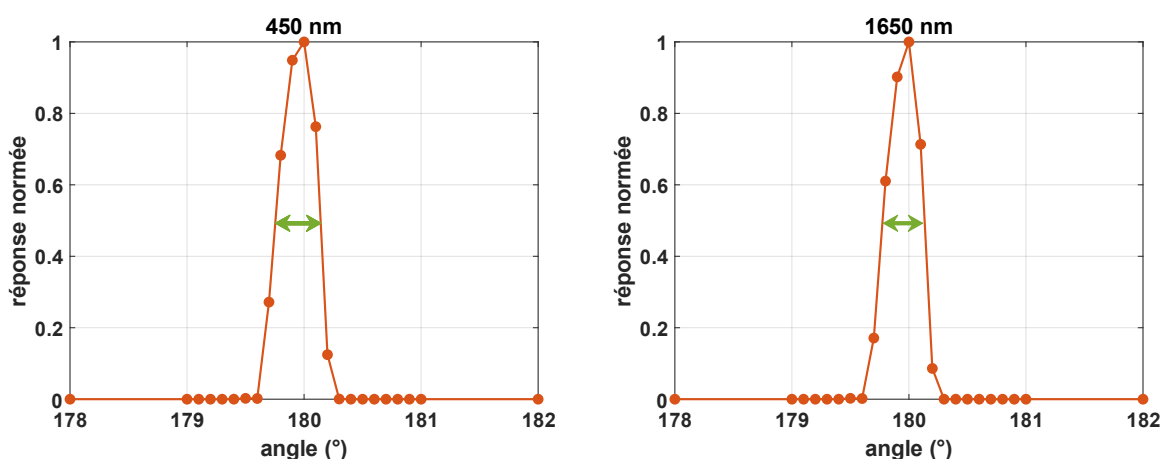


Figure 2.51 Profils angulaires du faisceau pour des longueurs d'onde de 450 nm (gauche) et 1650 nm (droite). La résolution angulaire associée est d'environ  $0,5^\circ$ .

## 2.4. Caractérisation de la transmission spéculaire de composants complexes

### 2.4.1. Traitement des acquisitions pour les propriétés spéculaires

#### 2.4.1.1. Relations littérales

SALSA est capable de caractériser les propriétés spéculaires et diffuses des composants interférentiels. Le traitement des données d'acquisition varie selon la propriété mesurée. Nous nous intéresserons dans un premier temps à la caractérisation des propriétés spéculaires. Comme présenté au paragraphe 2.2.2, le signal fourni par la caméra lors d'une mesure spéculaire est de la forme :

$$S_M(\lambda) = K_M(\lambda)\tau_M 10^{-OD_M(\lambda)}P(\lambda)R(\lambda) \quad (2.14)$$

avec  $K_M(\lambda)$  un coefficient caractéristique de la voie *d'acquisition* de mesure,  $\tau_M$  le temps d'ouverture de l'obturateur externe pour la mesure et  $10^{-OD_M(\lambda)}P(\lambda)$  la puissance utile en sortie du sous-ensemble de *préparation du faisceau* où  $P(\lambda)$  est la puissance utile en sortie du *bloc source*. Dans le cas de la caractérisation des propriétés spéculaires,  $R(\lambda)$  est la réponse spectrale du composant à évaluer, en transmission ou en réflexion. Nous pouvons également donner une expression du signal sur la voie de *référence* lors de cette même mesure :

$$S_{ref,M}(\lambda) = K_{ref,M}(\lambda)\tau_M P(\lambda) \quad (2.15)$$

où  $K_{ref,M}(\lambda)$  est un coefficient caractéristique de la voie de *référence*. Il inclut notamment les propriétés du photodétecteur et du cube (ou de la lame) séparateur. Les termes  $\tau_M$  et  $P(\lambda)$  sont identiques à ceux de la voie *d'acquisition* grâce à la synchronisation passive et à la simultanéité des acquisitions de mesure et de référence. La division du signal de mesure par celui de référence permet d'éliminer ces termes :

$$\frac{S_M(\lambda)}{S_{ref,M}(\lambda)} = \frac{K_M(\lambda)10^{-OD_M(\lambda)}R(\lambda)}{K_{ref,M}(\lambda)} \quad (2.16)$$

Nous remarquons alors que ce rapport perd sa dépendance au temps d'ouverture de l'obturateur externe, ce paramètre permettant uniquement d'ajuster le niveau de signal de la caméra. Les coefficients  $K_M$  et  $K_{ref,M}$ , respectivement caractéristiques de la voie *d'acquisition* et de la voie de *référence*, sont a priori inconnus. Ils sont éliminés par une acquisition de ligne de base dont le signal correspondant est :

$$S_{LB}(\lambda) = K_{LB}(\lambda)\tau_{LB} 10^{-OD_{LB}(\lambda)}P(\lambda) \quad (2.17)$$

Cette fois-ci il n'y a pas d'échantillon donc pas de terme relatif à sa réponse spectrale ( $R(\lambda) = 1$ ). Nous pouvons également donner la forme du signal de la voie de *référence* et le rapport de ces deux dernières grandeurs :

$$S_{ref,LB}(\lambda) = K_{ref,LB}(\lambda)\tau_{LB}P(\lambda) \quad (2.18)$$

$$\frac{S_{LB}(\lambda)}{S_{ref,LB}(\lambda)} = \frac{K_{LB}(\lambda)10^{-OD_{LB}(\lambda)}}{K_{ref,LB}(\lambda)} \quad (2.19)$$

Les acquisitions de mesure et de ligne de base sont réalisées dans les mêmes conditions. Seuls les paramètres  $\tau_i$  et  $OD_i$  diffèrent, les coefficients caractéristiques des détecteurs sont les mêmes pour ces deux acquisitions. Nous obtenons ainsi pour tout  $\lambda$  :

$$K_M(\lambda) = K_{LB}(\lambda) \quad (2.20)$$

$$K_{ref,M}(\lambda) = K_{ref,LB}(\lambda) \quad (2.21)$$

La réponse spectrale spéculaire du composant étudié est alors extraite des relations (2.16) et (2.19) :

$$R(\lambda) = \frac{S_M(\lambda)}{S_{ref,M}(\lambda)} \frac{S_{ref,LB}(\lambda)}{S_{LB}(\lambda)} \frac{10^{-OD_{LB}(\lambda)}}{10^{-OD_M(\lambda)}} \quad (2.22)$$

Nous rappelons que les signaux caméra,  $S_M$  et  $S_{LB}$ , sont des tableaux de 1024 éléments qui correspondent à une intégration d'une image sur une ligne de pixels, corrigée par la soustraction du bruit de mesure. Les signaux des voies de *référence*,  $S_{ref,M}$  et  $S_{ref,LB}$ , sont des nombres réels scalaires. Les valeurs  $OD_i$  des densités optiques utilisées sont connues puisque ces composants ont été soigneusement caractérisés. La valeur  $R(\lambda)$  attendue étant un scalaire, il faut donc transformer les tableaux  $S_M(\lambda)$  et  $S_{LB}(\lambda)$  pour en extraire des grandeurs réelles également. Deux modes de traitement des données d'acquisition ont été utilisés : le mode  $R_{max}$  et le mode  $R_{2n+1}$ .

#### 2.4.1.2. Mode de traitement Rmax

Le mode de traitement  $R_{max}$  isole le pixel  $i_{max}$  qui identifie la position du maximum de signal sur l'acquisition de la ligne de base et ainsi  $S_{LB}(\lambda) = S_{LB}(i_{max}, \lambda)$ . Cette opération suppose que le spectre est parfaitement centré sur la longueur d'onde de travail et qu'il atteint sa valeur maximale en cette même longueur d'onde. En pratique, la calibration des filtres accordables LLTF assure que ce spectre est correctement centré. Pour quelques rares valeurs de longueur d'onde et à cause de comportements atypiques du sous-ensemble de *préparation du faisceau*, la valeur maximale du signal de ligne de base est parfois décalée de quelques pixels par rapport à la valeur de centrage du spectre.

La valeur associée au même pixel  $i_{max}$  est extraite du signal de mesure et  $S_M(\lambda) = S_M(i_{max}, \lambda)$ . L'évaluation de la réponse spectrale  $R(\lambda)$  du composant étudié n'utilise finalement qu'un seul pixel des signaux de la caméra.

$$R(\lambda) = \frac{S_M(i_{max}, \lambda)}{S_{ref,M}(\lambda)} \frac{S_{ref,LB}(\lambda)}{S_{LB}(i_{max}, \lambda)} \frac{10^{-OD_{LB}(\lambda)}}{10^{-OD_M(\lambda)}} \quad (2.23)$$

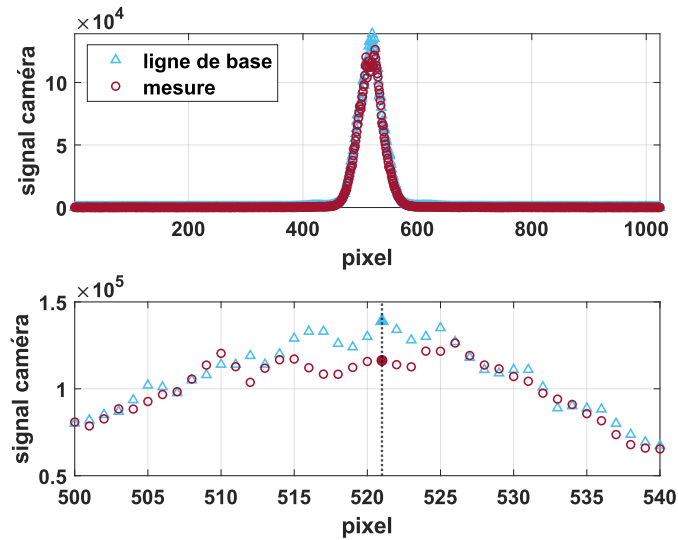


Figure 2.52 Haut : signaux caméra d'une acquisition de ligne de base et d'une de mesure (échantillon F2) à 800 nm. Les signaux bruts sont intégrés sur une ligne de 1024 pixels. Bas : identification du maximum du signal de la ligne de base au pixel 521 pour le traitement  $R_{max}$ . Les pixels considérés sont représentés par un remplissage uni des marqueurs.

La Figure 2.52 présente les signaux caméra pour une acquisition de ligne de base et une de mesure. Ces signaux résultent d'une intégration de l'image réalisée par la caméra sur une ligne de 1024 pixels. Les données sont très semblables : rappelons que les mesures sont configurées pour que ces signaux soient de niveau similaire. Une simple comparaison des hauteurs des deux pics ne permet pas de déterminer la valeur de la réponse spectrale, il faut aussi prendre en compte les autres paramètres des acquisitions. Un agrandissement autour des valeurs centrales des pics montre l'identification de la valeur maximale sur le signal de ligne de base et sur celui de mesure. Les pixels adjacents possèdent des valeurs semblables, si bien que la présence de bruit pourrait tout à fait perturber l'identification de la position du maximum. Le traitement  $R_{2n+1}$  assure une exploitation moins bruitée des données par intégration sur plusieurs pixels. Le composant étudié ici sera appelé F2 (voir 2.4.3).

### 2.4.1.3. Mode de traitement $R_{2n+1}$

Le traitement  $R_{2n+1}$  est une extension du traitement  $R_{max}$ . Cette fois, les signaux de mesure et de ligne de base sont intégrés sur  $n$  pixels de part et d'autre de la position centrale  $i_{max}$ . De cette manière, la détermination de la propriété  $R(\lambda)$  utilise une intégration spectrale de  $2n + 1$  pixels autour de la longueur d'onde d'intérêt. Cette approche permet de lisser les éventuelles imprécisions ou erreurs d'acquisition, par exemple si le spectre de ligne de base est déformé ou que sa valeur maximale ne correspond pas exactement à la longueur d'onde de centrage.

$$R(\lambda) = \frac{\sum_{k=-n}^n S_M(i_{max} + k, \lambda) S_{ref, LB}(\lambda) 10^{-OD_{LB}(\lambda)}}{\sum_{k=-n}^n S_{LB}(i_{max} + k, \lambda) S_{ref, M}(\lambda) 10^{-OD_M(\lambda)}} \quad (2.24)$$

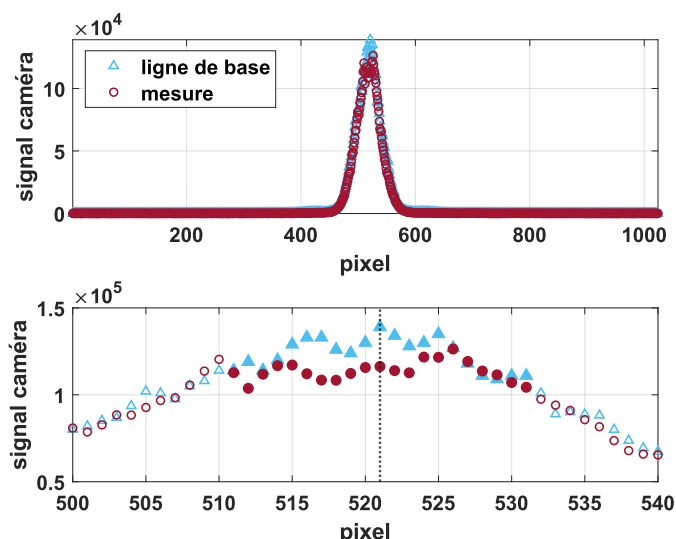


Figure 2.53 Idem que Figure 2.52. Identification de 10 pixels de part et d'autre du pixel central pour un traitement  $R_{21}$  ( $n=10$ ).

La Figure 2.53 présente une configuration similaire à la Figure 2.52 mais cette fois-ci avec un mode de traitement des données  $R_{21}$ , soit  $R_{2n+1}$  avec  $n = 10$ . Pour illustrer notre propos, les valeurs obtenues pour les deux modes de traitement sont exposées au Tableau 2.5. Les deux modes de traitement donnent des résultats légèrement différents. Cette comparaison en un seul point doit être étendue sur un intervalle spectral plus important pour avoir des résultats significatifs.

Traitement	$R(\lambda = 800)$
$R_{max}$	$7,57 \cdot 10^{-4}$
$R_{21}$	$8,33 \cdot 10^{-4}$

Tableau 2.5 Valeurs de la réponse spectrale  $R$  du composant F2 à 800 nm et pour les modes de traitement  $R_{max}$  et  $R_{21}$ .

#### 2.4.1.4. Mode de traitement Haute Définition

Les signaux d'acquisition sur les caméras sont des tableaux de 1024 éléments et pourtant, seuls quelques pixels ont été utilisés jusqu'ici. Ces pixels correspondent à la contribution principale du signal d'illumination de l'échantillon. Toutefois, ce signal possède une largeur spectrale non négligeable de l'ordre de 2 à 3 nm. Pour une acquisition à une longueur d'onde  $\lambda_0$ , les signaux portent ainsi également des informations sur les contributions spectrales voisines. Nous proposons d'améliorer le traitement des données de mesure par un mode *Haute Définition*. Pour un pas d'acquisition identique, la réponse spectrale est échantillonnée avec un pas spectral plus fin. Nous utilisons le terme *Haute Définition* et non pas *Haute Résolution* puisque la résolution de l'acquisition est déterminée par la construction de l'instrument. Ce traitement nécessite de pouvoir assigner précisément à chaque pixel du signal une valeur de longueur d'onde. Il utilise donc les dispersions spectrales des réseaux de diffraction calculées au paragraphe 2.3.2.



Comme les traitements  $R_{max}$  et  $R_{2n+1}$ , le mode *Haute Définition* utilise l'acquisition de ligne de base pour identifier la position du maximum d'intensité du signal sur les acquisitions. Pour chacune, seuls les pixels dont le niveau de signal est supérieur à la moitié du maximum d'intensité sont conservés. Ces pixels constituent la bande passante du traitement *Haute Définition*. La dispersion du réseau permet de déterminer les longueurs d'onde accessibles dans cette bande passante et les pixels concernés sont échantillonnés avec le pas *Haute Définition*. Le rapport du signal de mesure sur le signal de ligne de base donne la valeur de la réponse spectrale pour les points identifiés. L'opération est répétée pour toutes les acquisitions. Si le pas d'acquisition et le pas de traitement *Haute Définition* sont suffisamment fins, la fenêtre spectrale de chaque acquisition se superpose avec celles des acquisitions voisines. Une même composante spectrale est alors évaluée sur plusieurs acquisitions. Ces multiples évaluations sont ensuite moyennées pour donner la réponse spectrale *Haute Définition* du composant étudié.

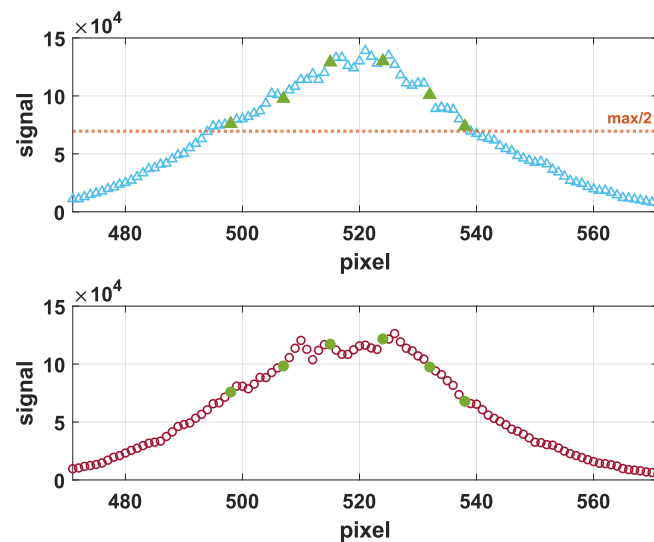


Figure 2.54 Signaux caméra autour du maximum d'intensité pour un traitement Haute Définition. Le pas d'échantillonnage Haute Définition est de 0,3 nm.

La Figure 2.54 présente le traitement *Haute Définition* pour un pas d'échantillonnage de 0,3 nm sur le filtre F2. Les acquisitions sont centrées à 800 nm et il est possible d'identifier 5 contributions spectrales différentes (localisées par des marqueurs verts). La division de ces signaux terme à terme conduit à évaluer la réponse spectrale de l'échantillon pour 5 longueurs d'onde distinctes.

#### 2.4.2. Filtre passe-bande dans le visible

La caractérisation de la transmittance d'un filtre passe-bande complexe appelé F1 avait été réalisée avec les versions précédentes de SALSA [19,20]. Les résultats illustrent les performances encore inédites de l'instrument. La comparaison de la mesure par SALSA avec celle d'un spectrophotomètre classique (Perkin Elmer Lambda 1050) met en évidence la sensibilité bien plus importante de SALSA.

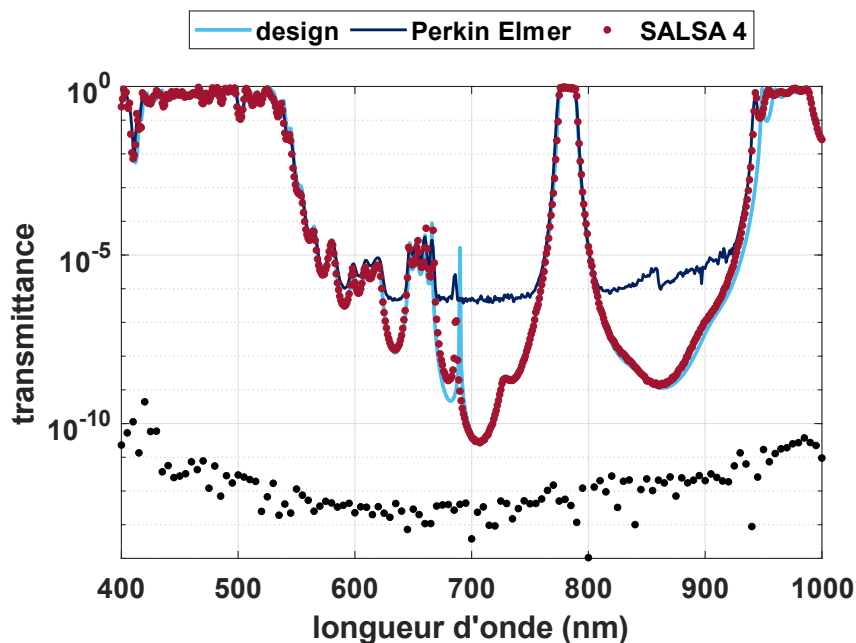


Figure 2.55 Caractérisation de la transmittance du filtre passe-bande F1 dans le spectre visible. Les points noirs en bas de figure représentent la signature de l'instrument.

À la suite du changement de configuration et à l'ajout de la voie *infrarouge*, le même composant F1 a été une nouvelle fois caractérisé pour s'assurer que les performances du banc ont bien été conservées pour la voie *visible*. La Figure 2.55 présente les résultats de cette caractérisation : le composant F1 possède une bande passante d'une largeur de 15 nm centrée sur 782 nm. Les niveaux de transmittance les plus bas dans les bandes de réjection sont compris entre  $10^{-9}$  et  $10^{-10}$ . Ces niveaux sont inaccessibles à la mesure par le spectrophotomètre standard qui atteint un seuil de détectivité autour de  $10^{-6}$ . La *signature* de l'instrument montre qu'il est possible de mesurer jusqu'à une densité optique de 12 sur la partie visible du spectre. Le mode de traitement utilisé pour cette figure est le mode  $R_{max}$ . La courbe appelée *design* représente la valeur de transmittance déterminée par le modèle électromagnétique. La méthode de calcul employée pour déterminer cette grandeur est la méthode des admittances complexes présentée au Chapitre 1.

### 2.4.3. Filtre passe-bande dans l'infrarouge

Pour valider les performances de SALSA dans le proche infrarouge, nous avons utilisé de manière similaire un filtre passe-bande complexe. Ce composant, appelé F2, a été conçu et fabriqué par Cilas ArianeGroup pour le compte du CNES. Ce filtre est destiné à une application spatiale d'observation de la Terre depuis un satellite en orbite. Il est constitué de plus de 80 couches minces optiques et sa réponse spectrale présente de larges zones de hautes réjections, des bords de bande très raides et des pics spectraux très fins. Toutes ces caractéristiques en font un composant dit *complexe* et difficile à caractériser.

Une première mesure est menée avec un spectrophotomètre standard (Perkin Elmer 1050). Les résultats fournis ne sont pas pleinement satisfaisants puisque l'instrument ne peut ni mesurer les niveaux de réjection en-dessous de  $10^{-5}$ , ni résoudre convenablement les pics spectraux extrêmement fins ou encore les bords de bande raides.

Une seconde caractérisation est réalisée avec SALSA, cette fois-ci la mesure montre un excellent accord avec le modèle autant pour les hautes réjections que pour les comportements spectralement définis. Les données expérimentales obtenues par ces deux mesures sont présentées à la Figure 2.56.

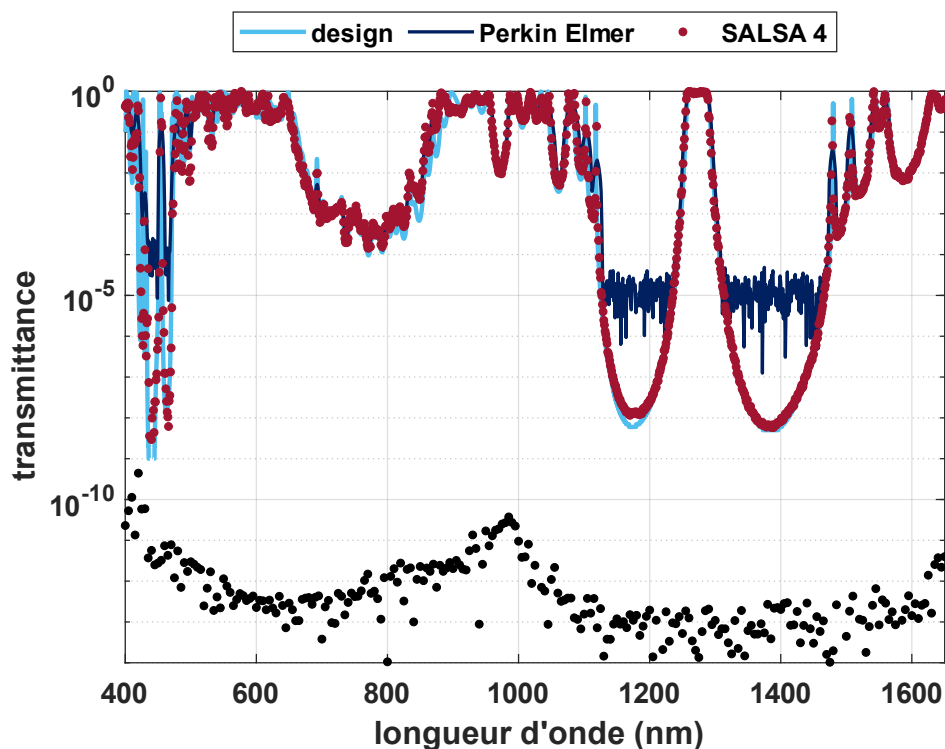


Figure 2.56 Caractérisation de la transmittance du filtre F2 sur tout le spectre accessible par SALSA avec un traitement  $R_{max}$ . Les points noirs en bas de figure représentent la signature de l'instrument.

Les fortes réjections du filtre F2 n'atteignent pas la limite de détection de SALSA en dessous de  $10^{-12}$  dans le proche infrarouge. Pour vérifier les performances de l'instrument, nous superposons le filtre F2 avec la monocouche d'argent Ag2 utilisée pour la qualification de la dynamique de détection de SALSA au paragraphe 2.3.3.1. Cette superposition des fonctions optiques a pour effet d'abaisser les niveaux de transmission et de se rapprocher de la limite de détection. Une mesure est réalisée pour des longueurs d'onde entre 1025 nm et 1275 nm. Cette bande spectrale couvre la bande de réjection centrée sur 1175 nm. Le résultat de cette mesure est présenté en Figure 2.57. Sur un même graphique sont représentés la transmittance mesurée du filtre F2, celle du film Ag2 et celle de la superposition des deux composants F2 & Ag2. La figure présente également le produit des deux réponses spectrales calculées  $F2 \times Ag2$  qui est, comme attendu, en parfait accord avec la mesure des deux composants superposés. La transmittance

résultante de cette superposition n'atteint pas la limite de détection fixée par la *signature* de l'instrument mais elle s'en rapproche beaucoup avec une valeur mesurée de  $10^{-11}$ , soit une densité optique de 11. Le mode de traitement utilisé est le mode  $R_{max}$ .

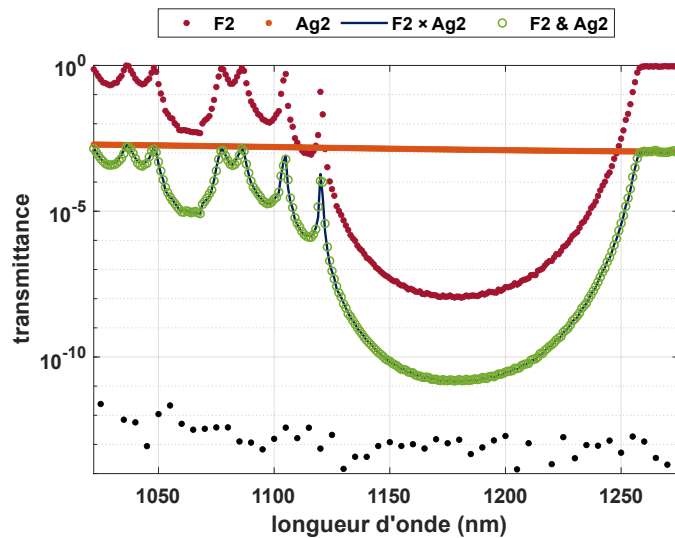


Figure 2.57 Caractérisation de la transmittance du filtre F2 superposé avec la monocouche d'argent Ag2, sur une plage spectrale restreinte (1025 nm à 1075 nm).  $F2 \times Ag2$  est le produit des transmittances calculées,  $F2 \& Ag2$  est la transmittance mesurée de la superposition de Ag2 et de F2.

Le traitement *Haute Définition* pouvant également être appliqué à l'acquisition présentée en Figure 2.56, nous choisissons un pas de 0,3 nm. La réponse spectrale du filtre F2 déterminée par ce mode ressemble en tout point à celle trouvée avec le traitement  $R_{max}$ . La cohérence entre les deux modes se vérifie en comparant les réponses spectrales à l'échelle de quelques nanomètres, comme cela est illustré à la Figure 2.58.

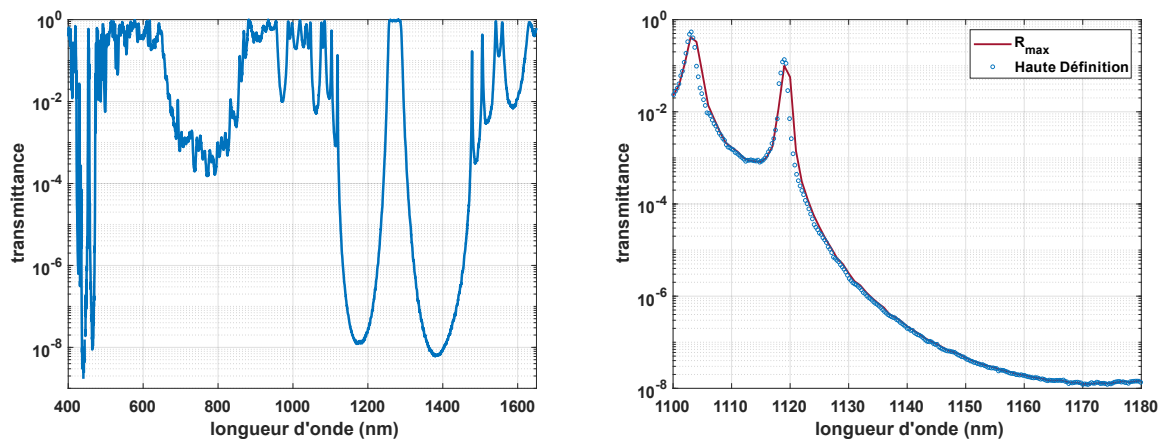


Figure 2.58 Réponse spectrale du filtre F2 déterminée avec le mode de traitement Haute Définition sur tout le spectre accessible par SALSA. Comparaison avec le mode de traitement  $R_{max}$  : les deux modes de traitements sont cohérents.

La Figure 2.59 montre le nombre de points échantillonnés pour chaque contribution spectrale par le traitement *Haute Définition* sur cette même mesure.

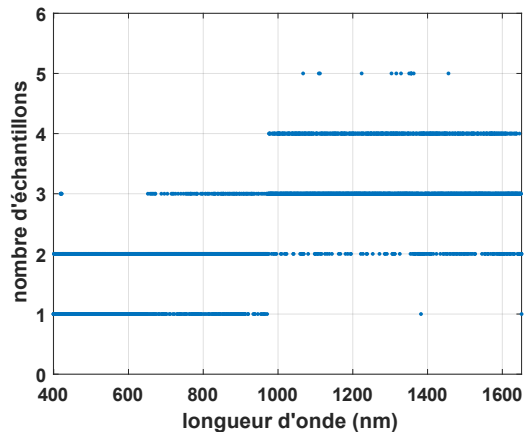


Figure 2.59 Nombre d'échantillons pour le traitement Haute Définition sur la mesure du filtre F2.

Le traitement *Haute Définition* peut aussi réduire le nombre d'acquisitions et ainsi, limiter la durée de la caractérisation d'un échantillon. En effet, pour le filtre F2, si nous ne conservons qu'une seule acquisition sur deux, le pas d'acquisition deviendrait égal à 2 nm. Le traitement *Haute Définition* avec un pas de 1 nm conduit à une réponse spectrale indiscernable de celle obtenue par le traitement  $R_{max}$  initial. Bien que le nombre de points d'acquisition soit divisé par deux, nous obtenons une réponse spectrale identique. Cette utilisation du mode *Haute Définition* doit toutefois être employée avec précaution puisqu'il se peut que certaines résonances spectrales échappent à cette analyse. Nous rappelons également que ce traitement n'améliore pas la résolution nominale de SALSA puisque celle-ci est liée aux propriétés intrinsèques de l'instrument.

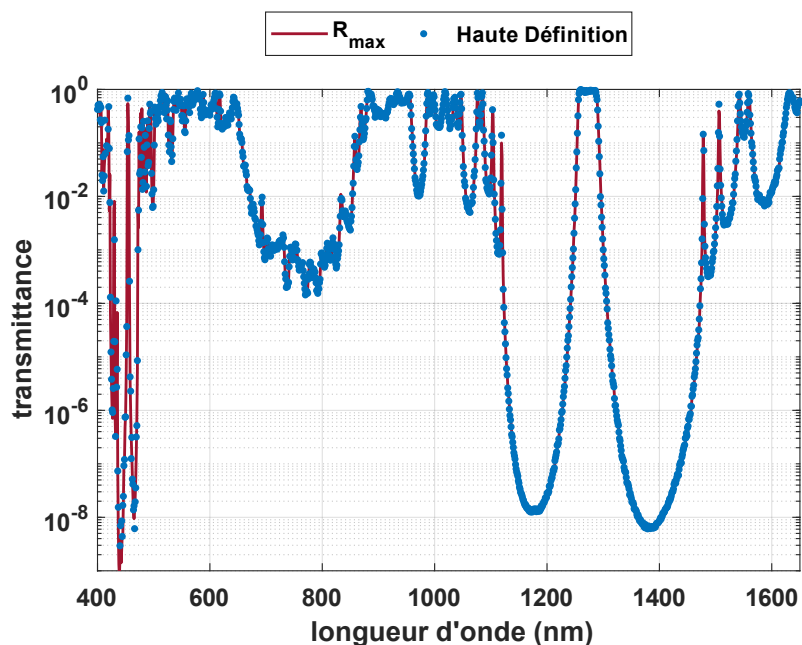


Figure 2.60 Filtre F2, comparaison d'un traitement  $R_{max}$  avec un pas d'acquisition de 1 nm (courbe rouge), et un traitement Haute Définition d'un pas de 1 nm (points bleus) réalisé sur des données d'un pas d'acquisition de 2 nm.

## 2.5. Caractérisation de la diffusion par des composants complexes

### 2.5.1. Traitement des acquisitions pour les propriétés diffuses

Les autres propriétés caractérisables par SALSA sont les indicatrices de diffusion. De la même manière que pour la caractérisation des fonctions spéculaires, la détermination des intensités diffusées est relative. Autrement dit, seules les variations de niveau de diffusion sont mesurées et une calibration est nécessaire pour retrouver les valeurs absolues. Cet étalonnage utilise la mesure de diffusion d'un échantillon lambertien. Contrairement à une acquisition de ligne de base, seule une petite partie de la puissance diffusée par l'échantillon lambertien est récupérée par le collimateur de reprise. Le rapport  $\rho(\lambda)/\pi$  intervient dans la détermination de cette fraction de lumière diffusée totale. Le traitement des acquisitions pour les propriétés diffuses intègre cette constante. L'acquisition de mesure corrigée par la voie de *référence* est décrite par l'expression suivante :

$$\frac{S_M(\lambda, \theta)}{S_{ref,M}(\lambda, \theta)} = \frac{K_M(\lambda, \theta) 10^{-OD_M(\lambda, \theta)} D(\lambda, \theta)}{K_{ref,M}(\lambda, \theta)} \quad (2.25)$$

avec  $S_M(\lambda, \theta)$  et  $S_{ref,M}(\lambda, \theta)$  respectivement le signal de mesure et le signal de référence,  $K_M(\lambda, \theta)$  et  $K_{ref,M}(\lambda, \theta)$  des coefficients caractéristiques des voies de mesure et de référence,  $10^{-OD_M(\lambda, \theta)}$  la valeur de transmittance de la densité optique totale dans le sous-ensemble de *préparation du faisceau* et  $D(\lambda, \theta)$  la réponse diffuse de l'échantillon. Cette fois la réponse de l'échantillon est à la fois spectrale et angulaire.

De même, l'acquisition sur l'échantillon lambertien est de la forme suivante :

$$\frac{S_{Lamb}(\lambda, \theta)}{S_{ref,Lamb}(\lambda, \theta)} = \frac{\rho(\lambda)}{\pi} \times \frac{K_{Lamb}(\lambda, \theta) 10^{-OD_{Lamb}(\lambda, \theta)}}{K_{ref,Lamb}(\lambda, \theta)} \quad (2.26)$$

L'extraction de la réponse diffuse de l'échantillon à partir des deux équations précédentes, en simplifiant les coefficients caractéristiques,  $K_M$  avec  $K_{Lamb}$  et  $K_{ref,M}$  avec  $K_{ref,Lamb}$ , donne :

$$D(\lambda, \theta) = \frac{\pi}{\rho(\lambda)} \frac{S_M(\lambda, \theta)}{S_{ref,M}(\lambda, \theta)} \frac{S_{ref,Lamb}(\lambda, \theta)}{S_{Lamb}(\lambda, \theta)} \frac{10^{-OD_{Lamb}(\lambda, \theta)}}{10^{-OD_M(\lambda, \theta)}} \quad (2.27)$$

Par analogie au mode de traitement  $R_{max}$  et  $R_{2n+1}$  présentés dans le paragraphe 2.4.1, des traitements similaires  $D_{max}$  et  $D_{2n+1}$  sont possibles dans le cas de la caractérisation des propriétés diffuses en intégrant le signal sur une bande de pixels plus ou moins large.

### 2.5.2. Filtre passe-bande dans l'infrarouge

Le filtre passe-bande F2 est maintenant soumis à la caractérisation de ses propriétés diffuses en réflexion et en transmission. Une première campagne de mesure évalue les niveaux de diffusion pour 4 longueurs d'onde choisies (1064 nm, 1115 nm, 1270 nm et 1490 nm), avec un pas d'acquisition angulaire de 1° et un angle d'incidence à 5°. Ces

premières acquisitions montrent des comportements spectraux et angulaires puisque les niveaux de diffusion varient beaucoup selon la longueur d'onde de travail et l'angle de diffusion. Le choix des longueurs d'onde d'acquisition se base sur les caractéristiques de la transmittance du filtre. La valeur 1115 nm correspond au fond d'une zone de réjection, tout comme 1490 nm. La valeur 1270 nm est en plein milieu de la bande passante du filtre. Enfin, la valeur de 1064 nm est une longueur d'onde caractéristique de nombreux systèmes optiques.

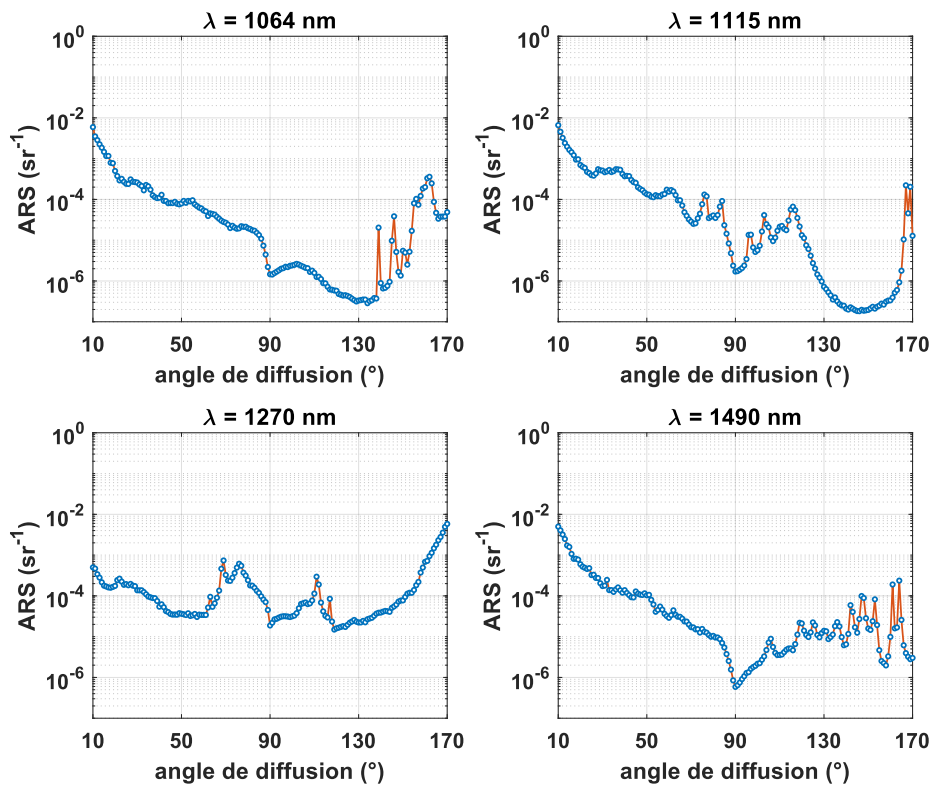


Figure 2.61 Mesures d'ARS sur le filtre F2 pour des longueurs d'onde de 1064 nm, 1115 nm, 1270 nm et 1490 nm.

La dépendance spectrale et angulaire des niveaux de diffusion nous incite à réaliser une seconde campagne d'acquisition sur un spectre plus large. Ce même échantillon F2 est soumis à la caractérisation de ses niveaux de diffusion pour des longueurs d'onde de 975 nm à 1650 nm, par pas de 5 nm et pour des angles de diffusion de 10° à 170°, par pas de 5°. Cette mesure compte 4 488 points d'acquisition et a duré plus de 6 jours d'opération continue. Des acquisitions d'étalonnage avec l'échantillon lambertien ont également été réalisées pour toutes les longueurs d'onde. La nappe de diffusion présentée en Figure 2.62 représente les niveaux d'ARS mesurés en fausses couleurs et en échelle logarithmique. La couleur rouge représente des zones de forte diffusion, près de la réflexion spéculaire à 10° ou proche de la transmission spéculaire, par exemple. À l'inverse, le bleu symbolise les zones de très faible diffusion. Des comportements analogues à ceux observés sur la réponse spéculaire en transmission se retrouvent dans la réponse diffuse. Par exemple, les deux zones de couleur bleue observées dans

l'intervalle spectral [1100 ; 1480 nm] et sur la plage angulaire [130 ; 170°] correspondent aux deux bandes de réjection mesurées sur la réponse spéculaire en transmission.

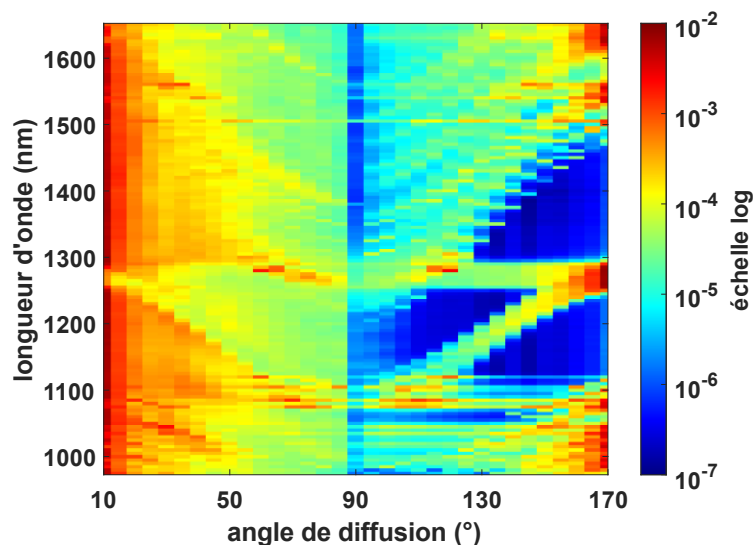


Figure 2.62 Nappe de diffusion du filtre F2. Représentation en fausses couleurs des valeurs d'ARS pour des longueurs d'onde de 975 nm à 1650 nm (en ordonnées) et des angles de diffusion de 10° à 170° (en abscisses). L'échelle des couleurs est logarithmique.

### 2.5.3. Traitement des données et ajustement au modèle

Le modèle électromagnétique de la diffusion des filtres interférentiels présenté au Chapitre 1 permet de calculer numériquement la réponse diffuse de tout composant dont les propriétés sont bien connues. Pour rappel, ce modèle considère :

- ✓ Les caractéristiques de l'empilement multicouche, c'est-à-dire l'épaisseur de chacune des couches et son indice optique ;
- ✓ Les propriétés de rugosité dans la structure, notamment le coefficient de corrélation de la rugosité entre les couches et une approximation du spectre de rugosité du substrat ;
- ✓ Les conditions d'illumination de l'échantillon : l'angle d'incidence, les longueurs d'onde de travail et les angles de diffusion.

Les conditions d'illumination et les caractéristiques de l'empilement multicouche sont généralement bien connues. En revanche, la détermination du spectre de rugosité est plus complexe. Deux solutions émergent pour évaluer cette grandeur : effectuer une mesure de topographie avec un appareil tiers puis approcher le spectre de rugosité par la somme d'une gaussienne et d'une exponentielle ou bien extraire directement le spectre de rugosité des mesures de diffusion. Puisque nous disposons de mesures des niveaux de diffusion pour toute la gamme de longueur d'onde d'intérêt, nous choisissons la seconde option.

Le banc SALSA donne accès à la fonction ARS, c'est-à-dire la mesure de la dépendance spectrale de l'indicatrice angulaire de diffusion d'un filtre couche mince dans les demi-espaces réfléchis ( $ARS^-$ ) et transmis ( $ARS^+$ ). Nous utiliserons la notation  $ARS^\pm$  pour



désigner la fonction dans son ensemble qui intègre ces deux demi-espaces. Pour un empilement de  $p$  couches déposées sur la face avant d'un substrat, l'expression théorique de la grandeur  $ARS^\pm$  est :

$$ARS^\pm = \sum_{j=0}^p |D_j^\pm|^2 \gamma_{e,j} + 2\Re \left\{ \sum_{j=0}^{p-1} \sum_{k>j} D_j^\pm (D_k^\pm)^* \alpha_{e,jk} \sqrt{\gamma_{e,j} \gamma_{e,k}} \right\} \quad (2.28)$$

Le premier terme de la partie droite de cette égalité est appelé composante *incohérente* de l'indicatrice de diffusion ( $ARS_{inc}^\pm$ ), tandis que le second terme est une composante dite *cohérente* ( $ARS_{coh}^\pm$ ). Le traitement des données utilisé jusqu'à maintenant suppose que le coefficient de corrélation  $\alpha_{e,jk}$  entre chacune des interfaces est identique pour toutes ces interfaces ( $\alpha_{e,jk} = \alpha_e, \forall j, k$ ). De même, les spectres de rugosité de ces différentes interfaces physiques sont tous identiques à celui du substrat ( $\gamma_{e,p} = \gamma_e, \forall p$ ). La relation peut donc être réécrite :

$$ARS^\pm = \left[ \sum_{j=0}^p |D_j^\pm|^2 + 2\alpha_e \Re \left\{ \sum_{j=0}^{p-1} \sum_{k>j} D_j^\pm (D_k^\pm)^* \right\} \right] \gamma_e \quad (2.29)$$

ou encore :

$$ARS^\pm(\theta_d, \lambda) = [D_{inc}^\pm(\theta_d, \lambda) + \alpha_e D_{coh}^\pm(\theta_d, \lambda)] \gamma_e (v_d - v_i) \quad (2.30)$$

avec :

$$v_d - v_i = \frac{\sin\theta_d - \sin\theta_i}{\lambda} \quad (2.31)$$

Les grandeurs  $D_{inc}^\pm(\theta_d, \lambda)$  et  $D_{coh}^\pm(\theta_d, \lambda)$  sont déterminées numériquement par le modèle et ne considèrent que les caractéristiques de la structure interférentielle. La détermination de ces coefficients est totalement indépendante de la rugosité et de la corrélation des interfaces. Puisque les valeurs de la fonction  $ARS^\pm$  sont connues par la mesure et que le modèle électromagnétique nous permet de calculer les valeurs des coefficients  $D^\pm$ , nous pouvons en déduire le spectre de rugosité  $\gamma_e$  et la valeur du coefficient de corrélation  $\alpha_e$ . Le modèle est ainsi ajusté aux données mesurées.

La démarche proposée pour le traitement des données et l'ajustement du modèle est la suivante :

1. Calculer numériquement les valeurs de  $D_{inc}^\pm(\theta_d, \lambda)$  et  $D_{coh}^\pm(\theta_d, \lambda)$  sur l'ensemble de la plage spectrale et angulaire d'intérêt, couverte par l'enregistrement expérimental de la fonction  $ARS(\theta, \lambda)$ . Le calcul est réalisé avec un pas angulaire de  $0,1^\circ$  et un pas spectral de  $0,1$  nm puisque les coefficients possèdent des résonances extrêmement fines qu'il est important de résoudre convenablement ;

2. Autour de chacune des valeurs  $\lambda$  et  $\theta$  utilisées lors de l'acquisition expérimentale, intégrer les valeurs théoriques sur des intervalles  $\pm\Delta\lambda$  et  $\pm\Delta\theta$  représentatifs de la résolution angulaire et spectrale de l'instrument de mesure. Les valeurs retenues sont respectivement  $0,5^\circ$  et  $0,8$  nm. Les grandeurs intégrées sont notées  $\bar{D}_{inc}^\pm(\theta_d, \lambda)$  et  $\bar{D}_{coh}^\pm(\theta_d, \lambda)$  ;
3. Définir la plage de fréquences spatiales  $[v_{min}, v_{max}]$  correspondant à l'enregistrement expérimental puis échantillonner régulièrement cette plage avec un pas  $\Delta v$ . Les valeurs obtenues sont notées  $v_n$  et vérifient la relation suivante :

$$v_n = \frac{\sin\theta_n - \sin\theta_i}{\lambda_n} \quad (2.32)$$

4. Choisir une valeur particulière pour le coefficient de corrélation  $\alpha_e$  et pour chaque valeur de  $v_n$ , rechercher la valeur de  $\gamma_e(v_n)$  minimisant l'écart quadratique moyen entre l'ensemble des mesures expérimentales  $ARS^\pm(\theta_n, \lambda_n)$  et les valeurs qui résultent du modèle théorique  $[\bar{D}_{inc}^\pm(\theta_d, \lambda) + \alpha_e \bar{D}_{coh}^\pm(\theta_d, \lambda)]\gamma_e(v_n)$  ;
5. Reporter sur un graphique unique gradué en unités semi-log les différentes valeurs de  $\gamma_e(v_n)$  obtenues et approcher la dépendance en  $v_n$  par un polynôme de degré 4 avec une contrainte de décroissance ;
6. Recommencer les opérations 4 et 5 pour un ensemble de valeurs de  $\alpha_e$  régulièrement réparties entre 0,75 et 1. Identifier le couple de grandeurs  $(\alpha_e, \gamma_e)$  minimisant l'écart quadratique global entre les valeurs expérimentales et la représentation paramétrique du spectre de rugosité.

Concernant la valeur prise par le coefficient  $\alpha_e$ , lorsqu'elle est égale à 0 les couches sont dites *décorrélées*, tandis qu'elles sont *corrélées* pour  $\alpha_e = 1$ . Les procédés de dépôt actuels produisent des empilements couches minces qui conservent généralement bien la rugosité d'une interface à l'autre, la valeur effective de  $\alpha_e$  est souvent élevée, autour de 0,9 pour des empilements simples. Plus le nombre de couches est important, plus le coefficient de corrélation tend à diminuer. Enfin, l'hypothèse formulée sur la constance du coefficient de corrélation et du spectre de rugosité pourrait être affinée. Cela nécessiterait de pouvoir accéder expérimentalement aux informations de chaque interface, ce qui n'est pas possible avec les techniques de métrologie actuelles.

De façon à disposer d'un grand nombre de valeurs mesurées par longueur d'onde, les mesures expérimentales utilisées dans un premier temps sont celles présentées en Figure 2.61, à savoir : 1064, 1115, 1270 et 1490 nm. Le coefficient  $\alpha_e$  est échantillonné sur 250 valeurs régulièrement réparties entre 0,75 et 1. Pour chaque  $\alpha_e$ , les valeurs du spectre de rugosité  $\gamma_e$  sont ajustées de manière à minimiser la fonction de mérite suivante :

$$MF(\alpha_e) = \sqrt{\frac{1}{8N} \sum_{i=0}^4 \sum_{n=1}^N [\log_{10} ARS_{exp}^\pm(\theta_n, \lambda_i) - \log_{10} ARS_{th}^\pm(\theta_n, \lambda_i; \alpha_e)]^2} \quad (2.33)$$

où  $N$  est le nombre de points d'acquisition angulaire pour chacune des 4 longueurs d'onde considérées. Les valeurs des 4 spectres de rugosité identifiés sont concaténées et approchées par un polynôme de degré 4. Le minimum de la fonction de mérite est mesuré pour une valeur  $\alpha_e = 0,795$  comme illustré à la Figure 2.63.

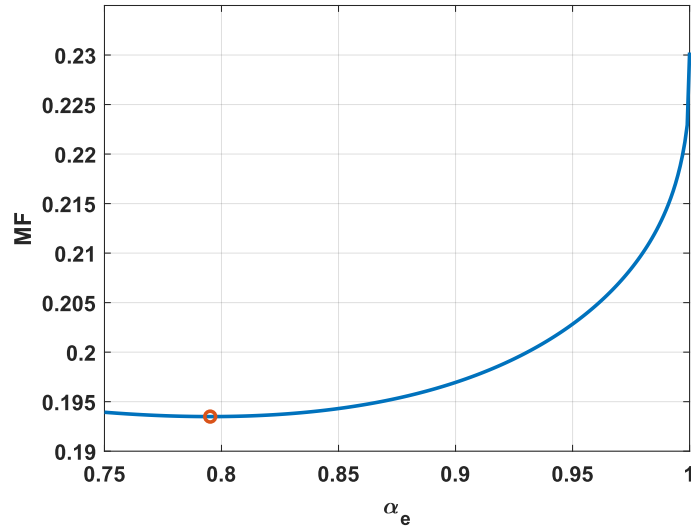


Figure 2.63 Fonction de mérite suivant la valeur du coefficient de corrélation  $\alpha_e$ . Identification du minimum par le cercle orange pour une valeur de 0,795.

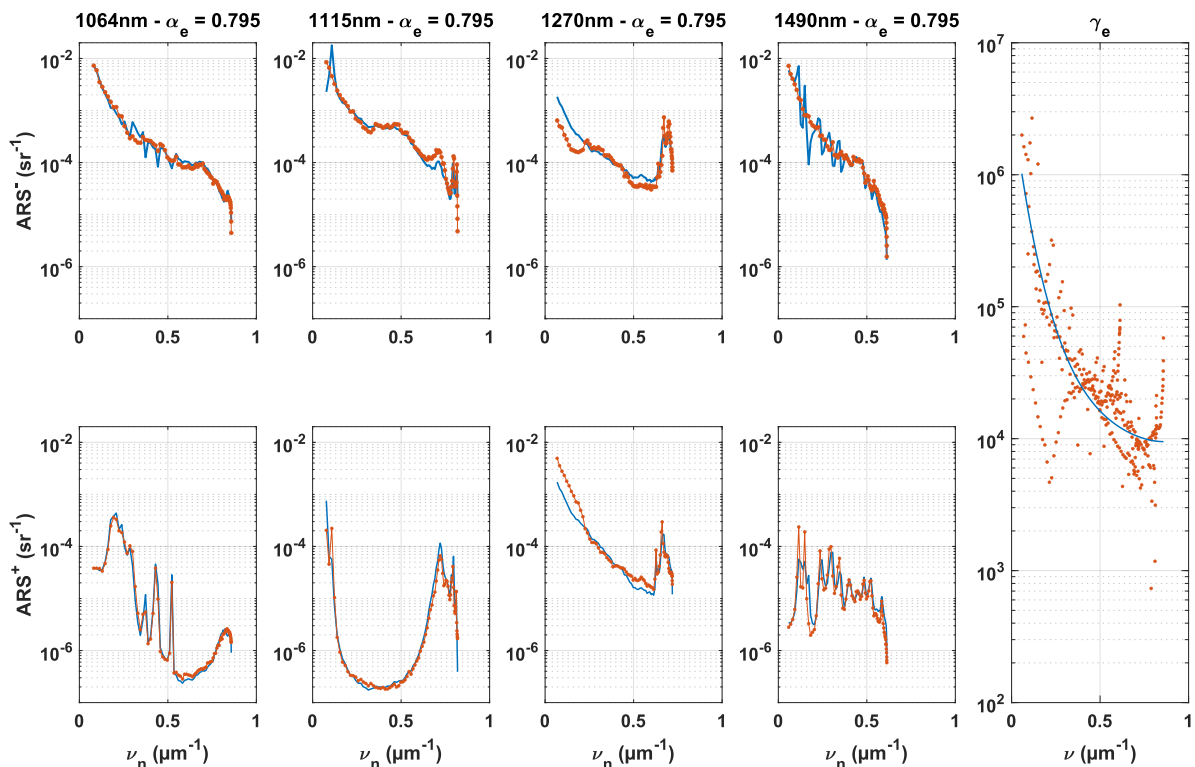


Figure 2.64 Comparaison entre  $ARS_{exp}$  (points orange) et  $ARS_{th}$  (traits bleus) dans le demi-espace réfléchi (haut) et dans le demi-espace transmis (bas), pour 4 longueurs d'onde. Les paramètres  $\alpha_e$  et  $\gamma_e$  du modèle  $ARS_{th}$  ont été ajustés aux données expérimentales.

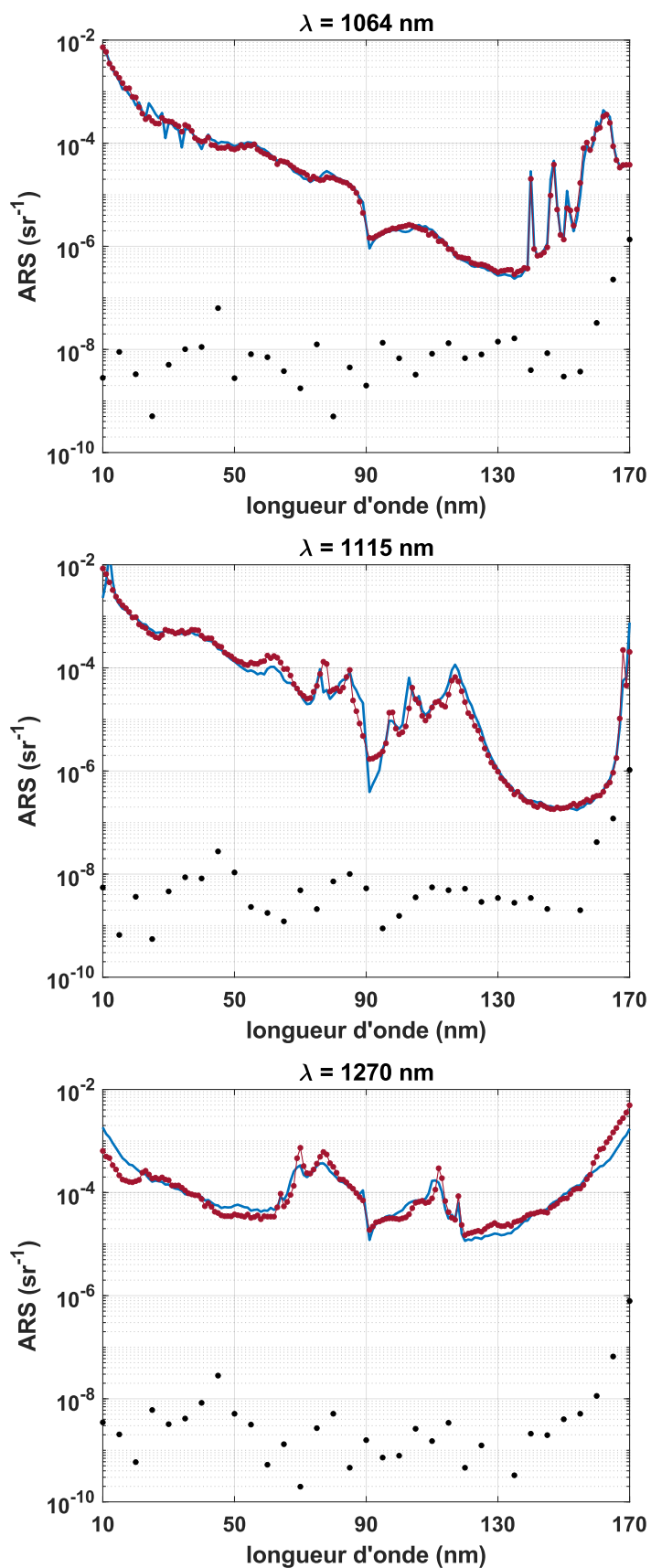


Figure 2.65 Comparaison du modèle de diffusion ajusté (trait bleu) avec les mesures expérimentales d'ARS (points rouges), pour trois longueurs d'onde. La signature de SALSA pour les mesures en diffusion est représentée par les points noirs.

Maintenant que nous disposons d'une évaluation du coefficient de corrélation et du spectre de rugosité, nous pouvons étendre les calculs théoriques à la mesure de nappe, c'est-à-dire pour des longueurs d'onde de 975 nm à 1650 nm, par pas de 5 nm. Le pas d'acquisition angulaire est cette fois de 5°, de 10 à 170°. Les données mesurées sont comparées avec le modèle ajusté grâce à l'étude sur les 4 longueurs d'onde particulières. La comparaison entre modèle et mesure met en avant le très bon accord entre les deux sources de données comme illustré à la Figure 2.66.

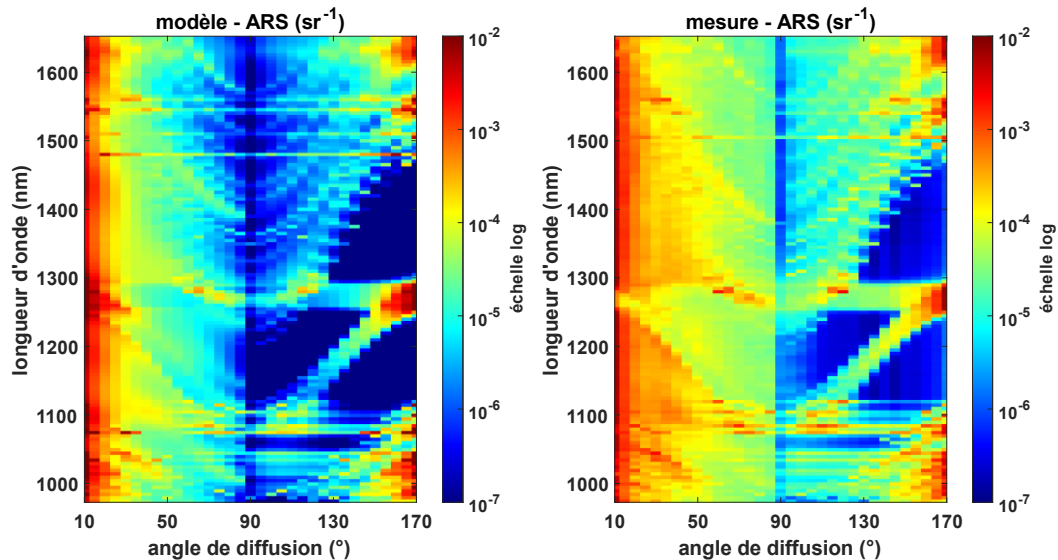


Figure 2.66 Comparaison de la nappe ARS mesurée avec le modèle ajusté.

Les nappes d'ARS présentent des similarités remarquables, tant pour les niveaux de diffusion que pour les variations spectrales et angulaires, observées dans les deux cas. La comparaison illustre la cohérence entre la précision du modèle et la qualité de l'instrument de métrologie. Toutefois, la figure représentant les données mesurées montre un fond diffus résiduel, en particulier pour les grandes longueurs d'onde. Celui-ci s'explique par la diffusion par la face arrière de l'échantillon qui n'a pas été prise en compte dans le calcul. Cette contribution de la face arrière est décrite dans l'ouvrage [12].

## 2.6. Répétabilité des mesures

Les mesures présentées dans les sections 2.4 et 2.5 présentent un très bon accord avec les modélisations électromagnétiques. Toutefois, la question de la répétabilité de ces acquisitions est un point important à évaluer, il est nécessaire de s'assurer que SALSA fournit bien des résultats similaires pour plusieurs caractérisations réalisées sur un même composant. Ce critère de répétabilité est évalué par l'écart moyen absolu relatif entre deux acquisitions à différentes dates dans le temps (le calcul est identique à celui de la précision des mesures en 2.3.3.1). Les échantillons utilisés pour cette étude sont conservés en environnement propre de salle blanche, ce qui permet de limiter les risques de contamination et de dégradation. Nous supposons donc qu'ils n'ont pas subi d'altération dans le temps et constituent des étalons. Le fait que SALSA lui-même soit également installé en salle blanche assure également une bonne répétabilité des mesures.

### 2.6.1. Répétabilité des mesures de transmittance

La répétabilité des mesures de transmittance est évaluée par la caractérisation des deux filtres passe-bandes F1 et F2 présentés dans les sections 2.4.2 et 2.4.3. Ils ont respectivement été caractérisés à 1 an et 2 ans d'intervalle. Le calcul de la répétabilité ne porte que sur les valeurs relatives à des niveaux de transmittance inférieurs à  $10^{-2}$ . Les résultats de ces mesures sont présentés en Figure 2.67. Dans les deux cas, l'écart relatif est faible pour les faibles flux. En revanche, il est beaucoup plus important pour les mesures des flux plus intenses (entre  $10^{-2}$  et 1). Cela illustre une fois encore le fait que SALSA a été conçu pour la détection des faibles flux optiques. Globalement, pour ces mesures de transmittance, la répétabilité de SALSA est meilleure que 3%.

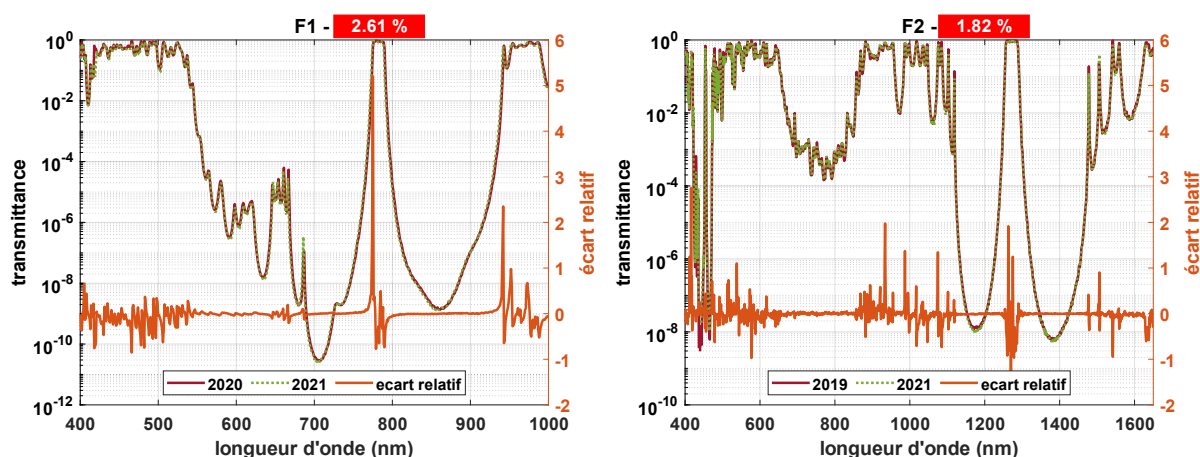


Figure 2.67 Répétabilité des mesures de transmittance de F1 (gauche) et F2 (droite), respectivement à 1 an et 2 ans d'intervalle et pour les flux inférieurs à  $10^{-2}$ . Les répétabilités sont respectivement de 2,61% et 1,82%.

### 2.6.2. Répétabilité des mesures de diffusion

La répétabilité des mesures de diffusion est évaluée par des acquisitions d'ARS sur le filtre F2, pour différentes longueurs d'ondes et de quelques semaines à un an d'intervalle.

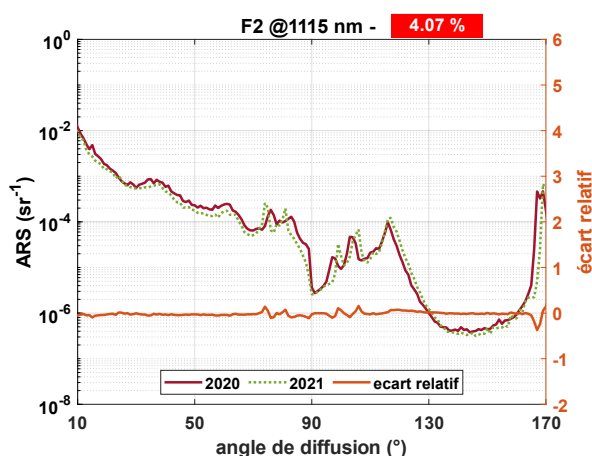


Figure 2.68 Répétabilité de la mesure d'ARS sur F2 à 1 an d'intervalle et à 1115 nm. La répétabilité est de 4,07%.

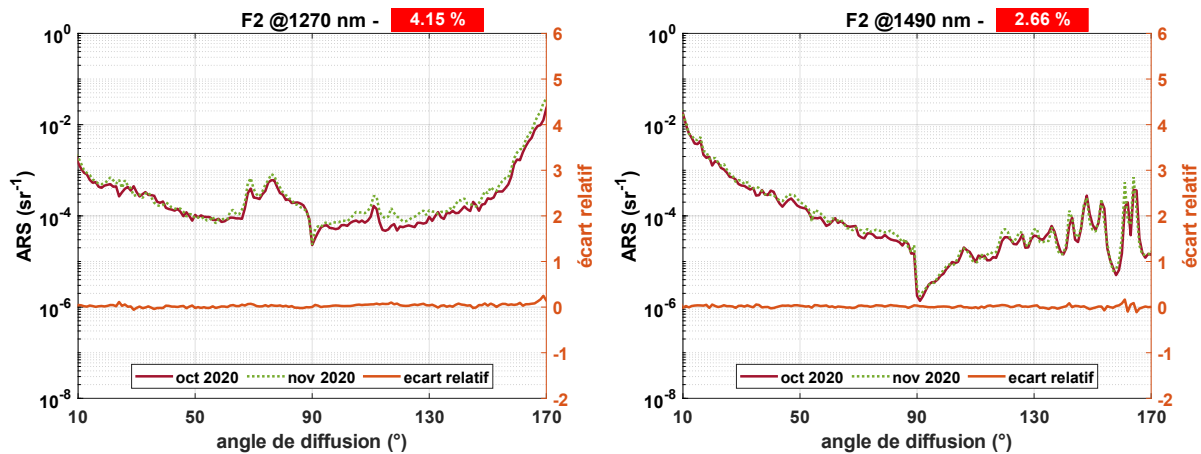


Figure 2.69 Mesure de répétabilité sur le composant F2 à plusieurs semaines d'intervalle, à 1270 nm et 1490 nm. La répétabilité meilleure que 5%.

La répétabilité sur les mesures de diffusion est donc également très bonne, meilleure que 5%. Les valeurs obtenues sont légèrement plus grandes que dans le cas de la mesure de transmittance. Ces résultats sont à mettre en perspective avec la reproductibilité de la mesure. En effet, dans le cas d'une mesure de diffusion, l'alignement de la face avant de l'échantillon avec l'axe de rotation du bras de détection est une opération critique alors qu'elle n'a que peu d'impact sur les mesures de transmittance. Cet alignement supplémentaire amoindrit de fait la répétabilité de la mesure de diffusion par rapport à celle de transmittance.

## 2.7. Autres composants

SALSA a été pensé et conçu pour des mesures de diffusion par des composants interférentiels mais des mesures d'ARS sont possibles et utiles pour un grand nombre applications. Ainsi, n'importe quel composant optique peut être caractérisé par l'instrument, sous condition qu'il soit possible de le maintenir sur le porte-échantillon.

### 2.7.1. Substrat de carbure de silicium

Le carbure de silicium (SiC, pour *Silicon Carbide* en anglais) est un matériau utilisé dans la construction de nombreux systèmes optiques spatiaux. En effet, il présente une faible dilatation thermique, une très grande dureté, une forte rigidité et une excellente conduction thermique. Un procédé courant de fabrication utilise le dépôt chimique en phase vapeur du carbure de silicium sur un substrat. Il est intéressant de pouvoir accéder aux propriétés en diffusion du SiC puisqu'il entre dans la constitution de nombreux composants.

Une mesure à 800 nm a été réalisée sur un échantillon de SiC. Les résultats présentés en Figure 2.70 ne montrent pas de comportements spectraux particuliers. L'indicatrice de diffusion dans le demi-espace réfléchi suit une réponse généralement observée sur les substrats optiques sans traitement de surface. Nous observons une décroissance régulière de la diffusion avec l'augmentation de l'angle d'observation. La mesure est

comparée avec une modélisation qui utilise l'indice de réfraction du SiC fourni par Wang et al. [35].

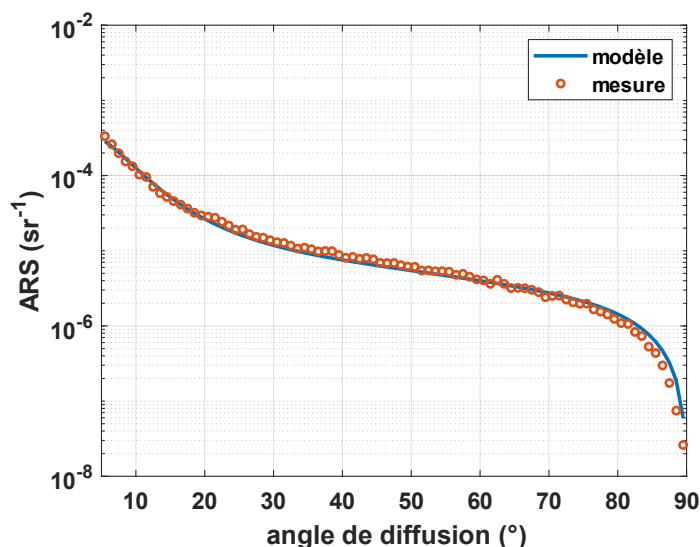


Figure 2.70 Mesure d'ARS sur un substrat de SiC à 800 nm.

### 2.7.2. Réseau de diffraction convexe

Les réseaux de diffraction constituent une famille essentielle de composants optiques pour les applications qui nécessitent de décomposer les contributions spectrales de la lumière. Une mesure de diffusion a été réalisée sur un réseau de diffraction convexe blazé à 580 nm, développé par le Laboratoire d'Astrophysique de Marseille (LAM, UMR 7326). Ce composant fait partie d'un instrument appelé BATMAN mis au point pour le télescope italien d'observation de l'univers : le *Telescopio Nazionale Galileo*. Le réseau est intégré dans un bras de l'instrument qui comporte un spectrographe et opère dans le domaine visible. La diffusion lumineuse de ce composant est source de lumière parasite, d'où la nécessité de quantifier la diffusion pour ensuite essayer de la réduire.

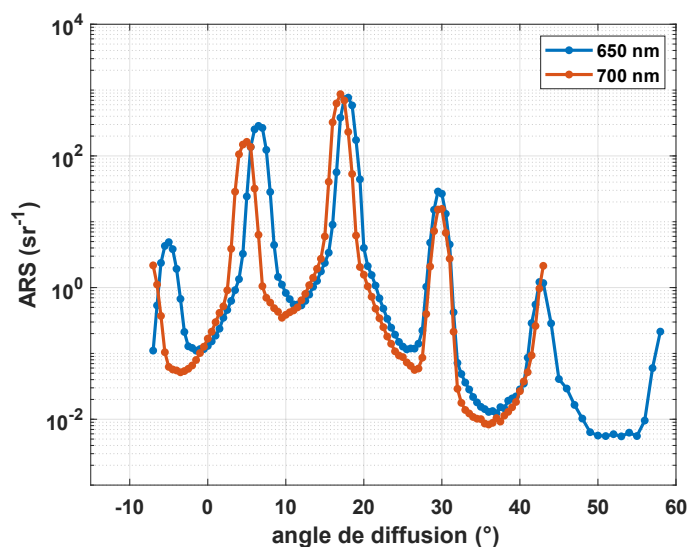


Figure 2.71 Mesures d'ARS sur un réseau de diffraction convexe blazé à 580 nm [36].



Des mesures de diffusion ont été réalisées pour deux longueurs d'onde différentes (650 nm et 700 nm). Les résultats en Figure 2.71 montrent clairement les ordres de diffraction et la diffusion entre ces derniers. L'ordre 0 est à  $30^\circ$ , les ordres 1 à 3 sont observés pour des angles de diffusion inférieurs à  $30^\circ$ , tandis que l'ordre  $-1$  est mesuré un peu au-dessus de  $40^\circ$ . L'intensité de l'ordre 1 est la plus grande, ce qui était prévu par la conception du composant. Le décalage des ordres dépend également de la longueur d'onde. Les mesures permettent d'évaluer les niveaux de diffusion entre les différents ordres de diffraction, limiter cette diffusion permettrait d'améliorer les performances de l'instrument BATMAN [36]. Notons toutefois que la forme convexe du réseau et la taille du faisceau d'illumination limitent légèrement la résolution angulaire effective de SALSA pour cette mesure.

## 2.8. Conclusion et perspectives pour la métrologie

La métrologie de la diffusion des couches minces optiques fait l'objet d'études approfondies depuis plusieurs décennies pour améliorer la compréhension de ces phénomènes. Les composants les plus complexes présentent des comportements spectraux et angulaires extrêmement fins et difficiles à caractériser. Le diffusomètre SALSA développé par l'équipe CONCEPT de l'Institut Fresnel contourne un certain nombre de limitations des systèmes usuellement employés pour ce type de mesure. Le recours à une source de type laser à supercontinuum permet de générer un signal lumineux puissant et de très large spectre. Des systèmes de filtrage avancés garantissent une résolution spectrale inférieure à 1 nm. L'utilisation de caméras scientifiques à bas bruit assure la grande sensibilité de la mesure. Enfin, la stabilité mécanique du montage et la mise en mouvement du détecteur sont indispensables à l'excellente résolution angulaire de l'instrument, de l'ordre de  $0,5^\circ$ . L'étendue spectrale de SALSA est certes limitée par celle de la source, mais surtout par la sensibilité des détecteurs utilisés. SALSA atteint toutefois des seuils de détection encore inédits pour ce type d'instrument : jusqu'à une densité optique de valeur 13 mesurée en transmission spéculaire et un niveau seuil de diffusion mesuré proche de  $10^{-8} sr^{-1}$ . Ces performances placent SALSA jusqu'à 6 décades au-delà de l'état de l'art pour la détection des faibles flux. La précision et la répétabilité des acquisitions ont également été évaluées et présentent d'excellent résultats. Une précision autour du pourcent pour les faibles flux et une répétabilité meilleure que 3% et 5%, respectivement pour les mesures de transmittance et de diffusion. L'extension du fonctionnement de SALSA au proche infrarouge a permis de conserver les mêmes performances sur un spectre plus large. Il s'agit désormais du seul instrument au monde présentant de telles capacités de mesure sur une gamme aussi étendue.

Les perspectives pour SALSA sont nombreuses. Le prochain développement envisagé serait d'ajouter un polariseur en aval du collimateur réflectif d'émission et un analyseur en amont du collimateur réflectif de reprise. En effet, le comportement spectral et angulaire de la lumière diffusée par les composants couches minces optiques dépend beaucoup de la polarisation de la lumière incidente, y compris pour un éclairage en

incidence normale. La prise en compte de cette propriété d'illumination permettrait une caractérisation encore plus fine et offrirait des possibilités supplémentaires pour un couplage des études expérimentales et théoriques. Par ailleurs, il serait possible de dissocier les longueurs d'onde d'éclairement et de mesure pour permettre une étude fine des propriétés de diffusion inélastique de composants ou matériaux optiques.

## Chapitre 3. Outils d'intelligence artificielle pour la synthèse de filtres interférentiels sous contrainte de la diffusion lumineuse

### 3.1. La synthèse des filtres interférentiels

#### 3.1.1. Présentation du problème et historique

La *synthèse* de filtres interférentiels désigne la démarche de conception d'un empilement de couches minces optiques qui répond à une contrainte imposée sur sa réponse spectrale. Le terme *design* est également employé pour cette démarche. La détermination de la réponse spectrale spéculaire d'un empilement de couches minces diélectriques donné, est possible en utilisant des calculs analytiques comme la méthode des admittances complexes développée au Chapitre 1. Nous appellerons ce calcul *résolution directe*. Il est relativement facile à implémenter et s'exécute rapidement sur un processeur classique. En revanche, la *synthèse* se rapporte à la résolution du *problème inverse* et elle est beaucoup plus difficile à appréhender. Il s'agit de proposer un empilement de couches minces optiques qui satisfasse au mieux une contrainte imposée sur sa réponse spectrale mais aussi sur sa constitution : nombre de couches, nature des matériaux, épaisseurs, etc. Il n'existe pas de solution analytique à ce problème, il peut même exister plusieurs solutions satisfaisantes et très différentes. La résolution de ce *problème inverse* est évoquée dès 1958 par Baumeister [37] qui propose une méthode par relaxation pour optimiser des empilements multicouches. Mais, au milieu des années 1980 la première méthode de résolution robuste, appelée méthode des aiguilles (ou algorithme *needle*) est proposée par Tikhonravov [1]. Cette méthode est encore aujourd'hui l'une des plus répandues pour la *synthèse* de filtres couches minces optiques puisqu'elle permet de synthétiser n'importe quelle fonction optique, même les plus complexes. Une des difficultés posées par la *synthèse* est de trouver la meilleure solution sans connaître a priori la forme de celle-ci. Des structures aux propriétés bien connues sont généralement utilisées comme solution initiale, comme une cavité Fabry-Perot pour réaliser un filtre passe-bande. Le terme de *refinement* est employé lorsque la résolution s'appuie sur une solution initiale convenable et que le processus d'optimisation de cette solution est uniquement local, dans un espace de solution voisin.

La *synthèse* des composants interférentiels s'appuie presque exclusivement sur les propriétés spéculaires en transmission et en réflexion. À ce jour, aucune méthode ne tient compte de la réponse spectrale en diffusion comme contrainte du problème. Les phénomènes de diffusion des composants interférentiels sont généralement considérés comme un effet secondaire et sont exclus du processus de design à cause de leur

complexité. Nous pouvons toutefois évoquer une méthode de contrôle de la diffusion sur des miroirs par des couches anti-diffusantes obliques qui créent des interférences destructives pour les champs diffusés [38,39]. Néanmoins, cette approche est uniquement valable pour des miroirs.

Le calcul numérique direct de la réponse spectrale diffuse d'une structure couches minces est désormais possible grâce aux récents travaux théoriques et numériques conduits dans l'équipe CONCEPT et présentés au Chapitre 1. L'implémentation de ce calcul est plus complexe que celui d'une réponse spectrale spéculaire (en transmission ou en réflexion). Pour une structure donnée, le nombre d'opérations calculatoires à réaliser est largement plus grand dans le cas de la diffusion tel qu'illustré à la Figure 3.1 sur la base des développements présentés au paragraphe 1.6. Toutefois, la disponibilité d'une méthode de calcul rapide et fiable des fonctions de diffusion nous autorise maintenant à envisager la résolution du *problème inverse*, c'est-à-dire la prise en compte d'une contrainte sur la lumière diffusée lors de la *synthèse* de composants couches minces.

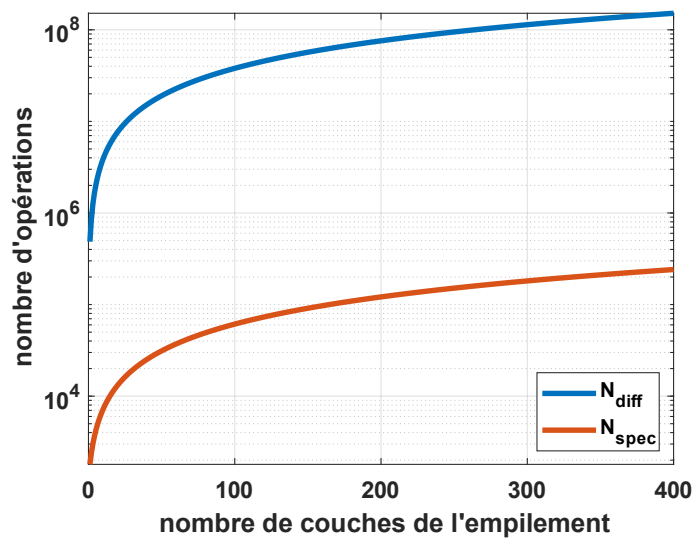


Figure 3.1 Nombre d'opérations numériques nécessaires pour le calcul direct de la réponse spectrale spéculaire ( $N_{\text{spec}}$ ) ou diffuse ( $N_{\text{diff}}$ ) en fonction du nombre de couches de l'empilement, pour 1 angle d'incidence, 90 angles de diffusion et 400 longueurs d'onde.

Pour rappel, la fonction *ARS* (*Angle Resolved Scattering*) est une fonction de diffusion angulairement et spectralement définie. Le *TIS* (*Total Integrated Scattering*) est une intégration angulaire de l'ARS :

$$TIS(\lambda) = 2\pi \int_{\theta>0}^{\pi/2} ARS(\lambda, \theta) \sin \theta d\theta \quad (3.1)$$

Par la suite, le terme de *problème direct* fera référence à l'estimation de la réponse spectrale d'une structure multicouche connue, tandis que la dénomination *problème inverse* signifiera la détermination d'une structure multicouche à partir d'une réponse spectrale choisie. Dans tous les exemples développés ci-après et pour assurer des

comparaisons raisonnables des résultats, certains paramètres des empilements sont toujours identiques. Nous considérons des empilements de couches diélectriques sur un substrat de silice (indice de réfraction du substrat fixé à  $n_{substrat} = 1,5$ ). Les couches sont constituées en alternance de deux matériaux : le dioxyde de silicium  $\text{SiO}_2$  (indice bas  $n_{low} = 1,45$ ) et le pentoxyde de niobium  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  (indice haut  $n_{high} = 2,15$ ). La dépendance spectrale des indices optiques est parfois prise en compte, selon l'approche utilisée. L'empilement est toujours placé dans l'air (indice de l'air  $n_{air} = 1$ ) et sous un angle d'incidence variable mais généralement fixé à  $5^\circ$ . Les matériaux sont tous considérés non absorbants. L'indice de réfraction de la première couche est parfois fixé, ce qui a pour effet d'imposer les indices pour toutes les autres couches. Les épaisseurs varient généralement entre plusieurs dizaines et la centaine de nanomètres, cet intervalle sera précisé lorsque cela sera nécessaire. Le nombre de couches varie et sera précisé pour chaque implémentation.

### 3.1.2. Résolution par la méthode simple *needle*

La méthode des aiguilles (ou *needle*) a été spécifiquement développée pour la synthèse de filtres couches minces optiques. Il s'agit d'une méthode d'optimisation non locale. La première version de cet algorithme a été présentée par Tikhonravov et de nombreuses publications ont été consacrées à ce sujet. [1,40,41]

La synthèse de composants couches minces se présente comme un problème d'optimisation. Toute méthode d'optimisation étant susceptible de converger localement, la convergence vers un optimum local convenable ou bien vers l'optimum global est une tâche difficile. La convergence de la méthode des aiguilles est facilitée lorsque l'algorithme dispose d'un bon design de départ, ce qui n'est malheureusement pas toujours le cas. L'algorithme utilise une fonction de mérite qui évalue la correspondance de la réponse spectrale d'un empilement avec une réponse cible (ou contrainte) imposée. Plus la fonction de mérite est faible, meilleure sera la correspondance entre la solution et la contrainte. La fonction de mérite est généralement présentée sous la forme suivante :

$$MF = \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \frac{t(\lambda_j) - \hat{t}_j}{\Delta t_j} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

avec  $t(\lambda_j)$  la transmission du filtre étudié à la longueur d'onde  $\lambda_j$ ,  $\hat{t}_j$  la transmittance de la fonction cible en cette même longueur d'onde,  $\Delta t_j$  la tolérance acceptée sur la distance entre la valeur réelle et la valeur cible et  $N$  le nombre d'échantillons pour lesquels est calculée la fonction de mérite  $MF$ .

Le design de départ est constitué soit d'un empilement qui possède des caractéristiques intéressantes pour le problème à résoudre, soit d'une monocouche. L'algorithme tente alors de diminuer la valeur de la fonction de mérite en insérant des couches puis en ajustant leur épaisseur. Le choix des emplacements d'insertion des

nouvelles couches s'appuie sur l'étude d'une fonction de perturbation  $P$ . Les minima de cette fonction désignent les positions d'insertion qui promettent la plus forte décroissance de la fonction de mérite. Les épaisseurs et les matériaux utilisés sont ensuite ajustés selon ce critère. L'algorithme s'arrête lorsqu'il n'existe plus de point d'insertion ou lorsque les épaisseurs des couches insérées sont trop faibles. La détermination des emplacements d'insertion utilise un algorithme qui calcule les variations de la fonction de mérite en fonction des positions d'insertion d'une nouvelle couche [1]. Sans pouvoir justifier théoriquement que la solution finale est globalement optimale, cette méthode de type simplex offre toutefois des résultats très satisfaisants pour toutes les classes de fonctions optiques, même dans les cas les plus complexes. Elle n'est pas non plus limitée par le nombre de couches de l'empilement.

Malgré les très bons résultats de la méthode *needle*, des réserves sont émises sur sa convergence. En effet, c'est un algorithme dit *glouton* (*greedy algorithm* en anglais), ce qui signifie qu'à chaque itération, le processus choisit la solution qui entraîne la meilleure décroissance de la fonction de mérite. Ce choix n'est pas forcément le meilleur puisqu'il peut arriver que la décroissance cumulée sur plusieurs itérations soit relativement faible : la convergence est ainsi ralentie. Pour illustration, un algorithme *glouton* bien connu est la méthode de la plus grande pente (*steepest-descent* en anglais). Il choisit d'optimiser son ou ses paramètres en suivant la direction du gradient le plus élevé, ce qui le rend assez lent à converger et risque de le conduire à un optimum local. Les algorithmes *gloutons* ont une vision à court terme alors que de meilleures solutions doivent parfois être envisagées à long terme. À une itération donnée, il se peut qu'une action qui semble moins intéressante à court-terme (faible décroissance de la fonction de mérite) puisse conduire à un état qui offrira une décroissance plus importante de la fonction de mérite. La convergence de *needle* n'est donc pas globale, des ajustements manuels des paramètres du problème et des solutions sont généralement nécessaires. Une nouvelle implémentation de l'algorithme a été proposée en 2020 par Trubetskov et cherche à dépasser cette limitation en utilisant une nouvelle manière de choisir les emplacements d'insertion. Cette méthode, intitulée *deep search* par l'auteur, détermine les choix de l'algorithme pour assurer la décroissance de la fonction de mérite la plus importante possible à long terme. Cette approche évite donc les travers des algorithmes *gloutons*.

### 3.1.3. Vers un contrôle de la réponse diffuse

La non-globalité de l'algorithme *needle* est l'une des raisons ayant favorisé l'émergence de techniques alternatives pour la synthèse des couches minces optiques. Nous citerons la méthode *flip-flop* [42], le recuit simulé [43], l'optimisation par essaim particulaire [44], les algorithmes génétiques [45,46] et évolutionnaires [47–49] ou encore le *machine learning* et *deep learning* [50,51]. Toutes ces approches cherchent à résoudre le problème inverse pour contrôler les réponses spéculaires des composants interférentiels. Nous nous sommes intéressés à certaines de ces méthodes dans le but de pouvoir ensuite les étendre au contrôle des réponses diffuses. L'algorithme *needle* ayant été développé spécifiquement pour le design sous contrainte des réponses spéculaires, il ne peut pas

être facilement étendu au cas de la diffusion. Deux approches seront étudiées par la suite : un algorithme évolutionnaire et des réseaux de neurones artificiels.

Le paragraphe 3.2 introduit les principaux outils d'optimisation utilisés. L'application de ces techniques pour la résolution du problème inverse est ensuite illustrée dans les paragraphes 3.3, 3.4 et 3.5.

## 3.2. Présentation des outils d'optimisation

### 3.2.1. Notions sur les algorithmes évolutionnaires

#### 3.2.1.1. Introduction sur les algorithmes évolutionnaires

Les algorithmes évolutionnaires (ou encore algorithmes évolutionnistes) s'inspirent de la théorie de l'évolution biologique dans le but de résoudre divers problèmes. Un ensemble d'individus, solutions du problème, évoluent dans un environnement. Des processus de comparaison, sélection et reproduction assurent la survie des meilleurs d'entre eux. Ces algorithmes sont stochastiques car ils utilisent des processus aléatoires à chaque itération et n'ont pas besoin du gradient de la fonction de mérite pour guider leur évolution. Enfin, ils sont bien adaptés pour la résolution de problèmes multicritères. Tandis que certains algorithmes ne fournissent qu'une seule solution, l'approche évolutionniste en présente plusieurs. Aussi, l'initialisation aléatoire de la population dans l'espace de recherche limite le risque de convergence vers un minimum local [52]. Les algorithmes évolutionnaires font partie de la famille des métaheuristiques : ils utilisent des processus stochastiques et convergent vers un optimum global.

L'utilisation d'un algorithme évolutionnaire pour la synthèse permet d'optimiser les épaisseurs d'un empilement pour un nombre de couches donné, tandis que l'algorithme de *needle* optimise les épaisseurs de l'empilement et le nombre de couches. Les algorithmes évolutionnistes devraient donc permettre d'approcher l'optimum global pour un type de structure donné. Les algorithmes génétiques constituent une catégorie d'algorithmes évolutionnaires bien connue dont l'implémentation a déjà été proposée pour la synthèse de couches minces optiques [45,46]. Mais c'est une autre implémentation qui a été utilisée ici : il s'agit de l'algorithme à évolution différentielle ou DE (pour *differential evolution*). Le principe général est similaire à celui des algorithmes génétiques, la différence essentielle réside dans la manière d'encoder et de manipuler les informations qui décrivent le système étudié.

#### 3.2.1.2. Algorithme à évolution différentielle DE

L'implémentation choisie pour la résolution du problème inverse est celle de l'algorithme DE (*differential evolution*) [47,49] dont un pseudo-code est donné au Tableau 3.1. Il utilise une population de  $NP$  individus, tous solutions du problème à résoudre et représentés sous forme de vecteurs. Cette population se transforme au cours d'une succession de générations. Pour chacune d'elle les individus sont mutés puis croisés. Les individus générés remplacent leurs parents s'ils sont plus performants. Au fil des

générations, les individus sont ainsi de plus en plus performants et les croisements entre eux garantissent la diffusion des meilleures caractéristiques au sein de la population. La complexité de cet algorithme est proportionnelle à celle de la fonction de résolution du problème direct puisque les solutions sont évaluées par une fonction de mérite à chaque itération. Autrement dit, son implémentation et son exécution sont facilitées par la rapidité du calcul de la réponse spectrale.

```

Tirer aléatoirement la population  $x_1, x_2, \dots, x_{NP}$  dans l'espace des solutions
while il reste des itérations do
  Trouver best, le meilleur individu de la population
  for  $x$ , individu de la population
    Tirer aléatoirement dans la population deux individus  $a$  et  $b$ , différents de  $x$ 
    Calculer le vecteur mutant  $y$  :
      
$$y = x + f1(a - b) + f2(best - x)$$


    Calculer le vecteur d'essai  $z$  :
    Tirer aléatoirement  $c$  dans  $[[1, \dots, d]]$ , avec  $d$  la dimension des individus
    for  $k$  dans  $[[1, \dots, d]]$ 
      if  $k = c$  ou avec une probabilité de 1/2
         $z_k \leftarrow y_k$ 
      else
         $z_k \leftarrow x_k$ 
      end if
    end for

    if  $z$  a un coût inférieur à celui de  $x$ 
      Remplacer  $x$  par  $z$  dans la population
    end if

  end for
end while

```

Tableau 3.1 Pseudo-code de l'algorithme d'évolution différentielle

La population de  $NP$  individus est d'abord initialisée aléatoirement. Les individus sont des vecteurs d'une dimension  $d$ . Le coût d'une solution est la valeur de la fonction de mérite (ou fonction de coût) pour cette solution. La fonction de coût évalue la performance de chaque individu au regard d'une contrainte à respecter. La forme de cette fonction varie selon le problème à résoudre. Dans tous les cas, plus le coût d'une solution est faible, meilleur est l'accord entre cette solution et la contrainte. Des étapes de mutation, croisement et repopulation se succèdent ensuite à chaque génération.

La mutation consiste en la génération d'un individu mutant  $y$  pour chacun des individus  $x$ . Le mutant est obtenu par combinaison linéaire de  $x$  avec deux autres



individus,  $a$  et  $b$ , tirés au hasard (et différents de  $x$ ) et du meilleur individu de la population, noté  $best$ . Plusieurs formules peuvent décrire  $y$ , celle retenue ici est :

$$y = x + f1(a - b) + f2(x - best) \quad (3.3)$$

avec  $f1$  et  $f2$ , deux hyperparamètres. Un troisième individu  $z$ , appelé individu *test*, est généré par croisement de  $x$  et de  $y$ . Un nombre entier  $k$  est tiré aléatoirement entre 1 et  $d$ . Il correspond à l'indice pour lequel le vecteur  $z$  égale le vecteur  $y$ , tel que :

$$z(k) = y(k) \quad (3.4)$$

Les autres éléments de  $z$  sont tirés aléatoirement dans  $x$  ou  $y$ , avec une probabilité de  $1/2$  pour chacun. De cette façon, le vecteur test  $z$  possède au moins une caractéristique de  $y$  et est différent de  $x$ .

La dernière étape est la repopulation, le coût de l'individu de test  $z$  est comparé à celui de  $x$ . Si le coût de  $z$  est inférieur à celui de  $x$ , alors  $z$  remplace  $x$  dans la population. Sinon,  $z$  est écarté. Une fois ces trois opérations réalisées sur tous les individus, la génération se termine et une autre lui succède. Il n'y a pas de critère de convergence pour cet algorithme mais un nombre maximal d'itérations fixé. Si un optimum est atteint la meilleure solution sera de toute façon conservée dans les itérations suivantes puisque qu'elle ne sera pas remplacée par ses descendants. Les valeurs prises par les éléments de  $z$  sont contenues entre des bornes inférieures et supérieures fixées au préalable pour contenir les solutions dans un espace restreint.

## 3.2.2. Notions sur l'apprentissage automatique

### 3.2.2.1. Définitions

L'apprentissage automatique, appelé aussi couramment *machine learning*, est un champ de l'intelligence artificielle (IA). Le terme désigne un ensemble de techniques mathématiques et statistiques visant à donner à un ordinateur la capacité d'apprendre à résoudre des tâches pour lesquelles il n'est pas explicitement préparé. Le *machine learning* s'est beaucoup développé au cours des deux dernières décennies en raison de l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs et de la disponibilité de grandes quantités de données exploitables, nécessaires pour l'apprentissage. Le *machine learning* trouve aujourd'hui d'innombrables champs d'application et se décline généralement en trois grandes catégories : l'apprentissage supervisé, l'apprentissage non supervisé et l'apprentissage par renforcement.

L'apprentissage supervisé utilise des exemples annotés et entraîne un programme pour prédire les annotations de ces exemples.

L'apprentissage non supervisé utilise lui aussi des exemples mais non annotés. Il s'agit plutôt de découvrir une structuration sous-jacente des données, sans qu'une étiquette particulière ne leur ait été attribuée.

Enfin, l'apprentissage par renforcement est un peu différent puisqu'il n'utilise pas d'exemples prédéfinis. À partir d'expériences dans un environnement donné, un agent

autonome apprend à réaliser des actions pour changer d'état et maximiser une récompense au cours du temps. La principale difficulté de l'apprentissage par renforcement réside dans la conception d'une fonction de récompense adaptée au problème et qui guide l'agent dans son exploration de l'espace des solutions. En revanche, l'agent cherche à optimiser sa récompense sur le long terme : l'apprentissage ne guide donc pas ses choix uniquement sur le gain à court terme et peut ainsi échapper aux *optima* locaux.

Les travaux présentés par la suite utilisent uniquement des méthodes qui relèvent de l'apprentissage supervisé, c'est pourquoi seule cette catégorie sera détaillée. Une quantité importante de données annotées (ou étiquetées) qui décrivent le problème étudié est alors nécessaire. Ces données sont représentées par des *exemples*. Chaque *exemple* comporte deux informations : une donnée d'entrée  $x$  et une étiquette associée  $y$ . L'ensemble des  $m$  *exemples* constitue le jeu de données :

$$\left( (x^{(1)}, y^{(1)}); \dots; (x^{(m)}, y^{(m)}) \right) \quad (3.5)$$

À chaque entrée  $x^{(i)}$  est associée une étiquette  $y^{(i)}$ . Il n'y a pas de règle absolue sur le nombre d'*exemples* nécessaire pour l'entraînement d'un algorithme d'apprentissage mais celui-ci est globalement proportionnel à la complexité du problème à résoudre, de quelques milliers à un million d'*exemples*.

Un algorithme d'apprentissage supervisé peut principalement réaliser deux types d'opérations : une classification ou une régression. Dans le cas d'un modèle de classification (appelé aussi régression logistique), le programme apprend à classer les *exemples* dans des catégories définies par leur étiquette. Pour les modèles de régression (appelés aussi régression linéaire), le programme utilise les *exemples* pour approcher une fonction à valeur continue qui décrit la relation entre les données d'entrée et leur étiquette respective. Dans les deux cas, l'apprentissage vise à réduire les erreurs commises entre les prédictions et les étiquettes. Un programme correctement entraîné est capable de prédire convenablement les *exemples* utilisés pour son apprentissage mais également de généraliser à des *exemples* inconnus. La synthèse de structures couches minces optiques sera abordée avec un modèle de régression linéaire puisque les valeurs des réponses spectrales et les caractéristiques des empilements évoluent continûment.

### 3.2.2.2. Hypothèse et fonction de coût

L'apprentissage implique la détermination des paramètres  $w$  d'une fonction *hypothèse*, notée  $h_w$ . Cette fonction *hypothèse* est l'expression du modèle que nous cherchons à décrire. L'optimisation sur  $w$  minimise l'erreur entre la valeur de l'*hypothèse* en  $x^{(i)}$  et l'étiquette de données  $y^{(i)}$ . L'accord entre ces deux grandeurs est mesuré par une fonction de coût  $J$ . Dans le cas d'une régression linéaire, celle-ci est souvent une fonction d'erreur quadratique moyenne (*MSE*, pour *mean squared error*), de la forme :

$$J(w) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \quad (3.6)$$

avec  $h_w(x^{(i)})$  la valeur de la fonction  $h_w$  pour le  $i$ -ième *exemple* et  $y^{(i)}$ , l'étiquette de données associée. L'optimisation des paramètres  $w$  est déterminée par la minimisation de la fonction de coût  $J$  :

$$\min_w J(w) = \min_w \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \quad (3.7)$$

La forme de l'hypothèse  $h_w$  est préalablement choisie selon la relation à décrire entre les données d'entrée et les étiquettes, mais aussi selon l'importance de chaque composant de  $x$  dans le modèle. La donnée d'entrée  $x$  est un vecteur à  $n$  éléments aussi appelés *caractéristiques*. Bien que le modèle soit appelé *régression linéaire*, l'hypothèse  $h_w$  n'est pas nécessairement une fonction linéaire : elle peut très bien être polynomiale d'un degré supérieur à deux. Le terme de *régression linéaire* s'oppose à celui de *régression logistique* qui désigne les modèles de classification.

L'entraînement d'un algorithme d'apprentissage consiste à ajuster les paramètres de la fonction *hypothèse* pour minimiser la fonction de coût, c'est-à-dire effectuer les meilleures prédictions possibles. Un programme correctement entraîné doit aussi être capable de généraliser son comportement à des *exemples* jamais rencontrés.

### 3.2.2.3. Minimisation de la fonction de coût

La minimisation de la fonction de coût  $J$  fait appel à une fonction d'optimisation. La descente du gradient (ou *gradient descent* en anglais) est une fonction canoniquement utilisée en *machine learning*. Elle met à jour les valeurs des paramètres  $w$  en utilisant  $J$ , sa dérivée (ou gradient)  $\partial J / \partial w$  et un taux d'apprentissage  $\alpha$ .

$$w_j := w_j - \alpha \frac{\delta}{\delta w_j} J(w) \quad (3.8)$$

$$w_j := w_j - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)}) x^{(i)} \quad (3.9)$$

Cette opération est répétée jusqu'à la convergence, c'est-à-dire lorsque  $J$  atteint une valeur minimale. Dans le cas simple où l'hypothèse est un polynôme de premier degré, la fonction de coût est convexe et l'optimisation converge nécessairement vers un minimum global. Si la valeur du taux d'apprentissage  $\alpha$  est trop faible, la convergence est très lente car les valeurs des paramètres ne sont modifiées que très lentement. À l'inverse, si elle est trop forte, l'algorithme risque de ne pas converger et de manquer le minimum de  $J$ . La descente du gradient n'est qu'une fonction d'optimisation parmi d'autres, elle n'est pas la plus performante mais reste simple à comprendre et à implémenter. Elle présente néanmoins un hyperparamètre  $\alpha$  dont il faut ajuster la valeur.

Une distinction importante est à établir entre les termes *paramètres* et *hyperparamètres*. Les *paramètres* sont les grandeurs qui définissent le modèle, comme les grandeurs  $w$ , tandis que les *hyperparamètres* sont les grandeurs contrôlant le processus d'apprentissage, comme le taux d'apprentissage  $\alpha$  de la descente du gradient ou encore le nombre  $m$  d'exemples.

### 3.2.2.4. Mise à l'échelle des variables

Dans le cas d'un problème à plusieurs variables, la dimension de  $x$  est supérieure à 2 et chacune de ses caractéristiques peut prendre des valeurs sur des intervalles distincts. Chaque élément du vecteur  $x$  est associé à une caractéristique de la donnée et donc à une variable du problème. Une opération de normalisation des données favorise la convergence de l'algorithme en évitant qu'un paramètre particulier impose la valeur de l'*hypothèse*. La mise à l'échelle rapproche toutes les valeurs prises par les variables au même ordre de grandeur, par exemple entre  $-1$  et  $1$  ou entre  $0$  et  $1$ . Cette opération peut prendre la forme d'une normalisation ou d'une standardisation des données :

- Normalisation :  $x := \frac{x - \min x}{\max x - \min x}$ , avec  $\min x$  et  $\max x$  les valeurs minimale et maximale de  $x$  sur ses caractéristiques respectives ;
- Standardisation :  $x := \frac{x - \mu}{\sigma}$ , avec  $\mu$  la moyenne et  $\sigma$  l'écart-type de  $x$  sur ses caractéristiques respectives.

### 3.2.2.5. Surapprentissage et régularisation

Les algorithmes d'apprentissage automatique rencontrent parfois des problèmes liés au surapprentissage lorsque l'optimisation des paramètres de l'*hypothèse* conduit à une excellente minimisation de la fonction de coût mais une très mauvaise généralisation à des *exemples* inconnus. À l'inverse, le modèle peut aussi souffrir de sous-apprentissage si l'entraînement est trop restreint ou si l'*hypothèse* est simpliste. Dans ce cas, les prédictions sont pauvrement conformes aux étiquettes de données. Un apprentissage équilibré demeure la meilleure situation : le modèle ne souffre ni de surapprentissage, ni de sous-apprentissage.

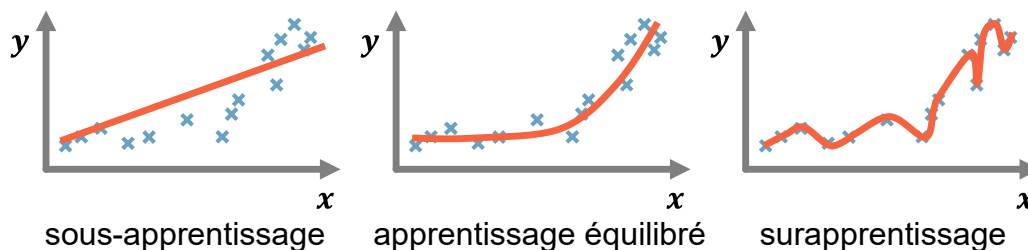


Figure 3.2 Illustration de modèles en sous-apprentissage, en apprentissage équilibré et en surapprentissage. Chaque croix bleue est décrite par une donnée  $x$  et une étiquette  $y$ . Le modèle doit représenter au mieux le comportement général du nuage de points.

Plusieurs approches permettent de s'opposer au surapprentissage :

- la réduction du nombre de caractéristiques de chaque *exemple*, par un choix manuel ou par des fonctions de sélection ;
- la régularisation, en conservant l'ensemble des caractéristiques de  $x$  mais en réduisant l'amplitude et les valeurs des paramètres  $w$ . Cette technique fonctionne bien lorsque le problème comporte de nombreux paramètres et que tous contribuent assez équitablement à la prédiction du résultat.

Dans le cas d'une régression linéaire, l'implémentation d'une régularisation dite  $\mathcal{L}_2$  transforme la fonction de coût en ajoutant un terme de somme des carrés des paramètres  $w$ , pondéré par un hyperparamètre  $\lambda$  :

$$J(w) = \frac{1}{2m} \left[ \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda \sum_{j=1}^n w_j^2 \right] \quad (3.10)$$

Sous cette forme, l'optimisation impose à la fois de réduire l'erreur commise entre les prédictions et les étiquettes de données, mais également que le poids de chaque paramètre de l'*hypothèse* conserve une valeur faible. Sans régularisation, un paramètre  $w_j$  pourrait prendre une valeur très grande et imposer complètement la prédiction. La régularisation assure que chaque caractéristique de la donnée d'entrée contribue de manière égale à la prédiction.

### 3.2.3. Notions sur l'apprentissage profond et les réseaux de neurones

#### 3.2.3.1. Introduction à l'apprentissage profond

L'apprentissage automatique présenté jusqu'à présent utilise des fonctions *hypothèses* pour lesquelles les caractéristiques des données d'entrée et leur contribution dans le modèle sont connues. La forme de l'*hypothèse* est préalablement déterminée, les illustrations développées jusqu'ici s'apparentent à des ajustements de fonctions par la méthode des moindres carrés. L'apprentissage profond, aussi appelé *deep learning*, est une déclinaison du *machine learning* [53–55]. Il est invoqué lorsque le problème étudié est trop complexe à approcher par une fonction définie manuellement. Le terme fait référence à l'utilisation de réseaux de neurones artificiels profonds, aussi appelés *deep neural networks* (DNN). Par concision, les termes *réseau* et *réseau de neurones* désigneront un *réseau de neurones artificiels profonds*.

Contrairement au *machine learning*, il n'est pas nécessaire d'indiquer au programme la forme de l'*hypothèse*. Le programme va identifier lui-même les caractéristiques saillantes des données et comprendre leur influence respective sur le problème à résoudre. L'intérêt suscité par le *deep learning* a très vite dépassé le cadre des mathématiques et les domaines d'applications sont maintenant très variés : reconnaissance d'images, reconnaissance vocale, traitement automatique des langues, conduite de véhicule autonome, etc. [53] Plusieurs raisons justifient l'intérêt du *deep learning* pour résoudre des problèmes du champ de la physique. La première est que n'importe quelle fonction peut être approchée par un réseau de neurones [54]. Deuxièmement, un réseau convenablement entraîné

s'exécute généralement beaucoup plus rapidement que les calculs analytiques grâce à la vectorisation de l'implémentation. Faire une prédiction avec un réseau de neurones revient globalement à réaliser des additions et multiplications de matrices, y compris pour des problèmes non-linéaires complexes. Cependant, il ne faut pas négliger le fait que les apprentissages requièrent des quantités importantes de données et qu'ils ne fournissent que des estimations. Les modèles analytiques, s'ils existent, seront toujours plus précis que les réseaux de neurones.

### 3.2.3.2. Neurones et réseaux de neurones

La notion de neurone est ici inspirée du fonctionnement des neurones biologiques, bien que l'analogie ne soit que superficielle car les processus d'apprentissage ne sont pas comparables. Chaque neurone biologique possède des dendrites par lesquelles il reçoit des informations de multiples autres neurones. Ces nombreuses informations sont traitées et déclenchent l'émission d'une unique information, transmise à d'autres neurones par l'axone.

De la même manière, un réseau de neurones artificiels est un ensemble de neurones (ou unités) liés entre eux par une organisation définie. Les architectures possibles sont très diverses mais reposent souvent sur le même principe : une couche d'entrée, une ou plusieurs couches cachées et une couche de sortie. Le nombre d'unités par couche, le nombre de couches, les connexions entre les neurones et leur organisation permettent de créer une infinité d'architectures. Le choix d'un réseau adapté au problème à résoudre s'avère difficile et il n'existe pas de méthode générale pour déterminer cette architecture. Les réseaux de neurones profonds possèdent de nombreuses couches cachées, de quelques-unes à plusieurs centaines. Sur la Figure 3.3, les liaisons entre les unités représentent les connexions entre les neurones et le partage d'information entre les couches du réseau. Nous utiliserons ici des réseaux de neurones à propagation avant dans lesquels l'information circule toujours de l'entrée vers la sortie : il n'y a ni boucles ni cycles dans le réseau.

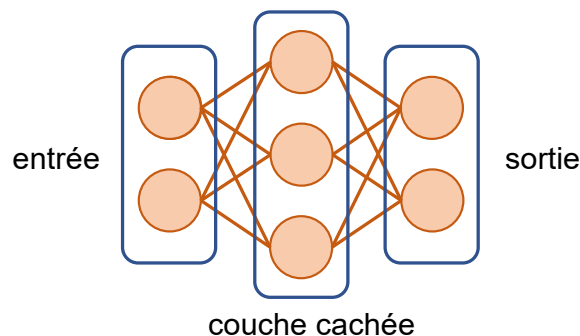


Figure 3.3 Illustration d'un réseau de neurones à couches entièrement connectées. Il comporte une couche d'entrée à 2 unités, une couche cachée à 3 unités et une couche de sortie à 2 unités.

### 3.2.3.3. Propagation avant par couches entièrement connectées

Les couches entièrement connectées constituent l'architecture la plus simple des réseaux à propagation avant. Tous les neurones d'une couche sont connectés à toutes les

unités de la couche précédente et de la couche suivante. Chaque unité indiquée  $i$  d'une couche d'indice  $j$  possède une valeur d'activation  $a_i^{(j)}$  calculée de la manière suivante :

$$a_i^{(j)} = g \left( \sum_{k=1}^p W_{ik}^{(j)} a_k^{(j-1)} + b_i^{(j)} \right) \quad (3.11)$$

avec  $W^{(j)}$  la matrice des paramètres (ou poids) décrivant le passage de la couche  $(j - 1)$  à la couche  $j$ ,  $a_k^{(j-1)}$  la valeur d'activation du  $k$ -ième neurone de la couche  $(j - 1)$ ,  $p$  le nombre d'unités de la couche  $(j - 1)$  et  $b_i^{(j)}$  la valeur de biais. Le vecteur de biais  $b^{(j)}$  de la couche  $j$  ajuste les valeurs d'activation des unités de la couche  $j$  et évite la propagation de zéros dans le réseau : c'est un paramètre d'apprentissage tout comme la matrice des poids  $W^{(j)}$ . La fonction  $g$  est appelée *fonction d'activation*, c'est une fonction non-linéaire pouvant prendre différentes formes. La non-linéarité de cette fonction d'activation assure la non-linéarité du réseau et permet d'approcher n'importe quelle fonction, linéaire ou non [54]. La capacité d'apprentissage des réseaux de neurones repose en grande partie sur l'utilisation de fonctions d'activation non-linéaires. Les fonctions d'activation *ReLU* (*Rectified Linear Unit*), *leakyReLU*, *tanh* ou encore *softplus* seront utilisées plus loin et possèdent les expressions suivantes :

- $g(x) = \max(0, x)$ , fonction *ReLU* définie sur  $\mathbb{R}$  et à valeur dans  $\mathbb{R}^+$  ;
- $g(x) = \max(c * x, x)$ , fonction *leakyReLU* définie sur  $\mathbb{R}$  et à valeur dans  $\mathbb{R}$ , avec la constante  $c < 1$  ;
- $g(x) = \tanh(x)$ , pour la fonction *tanh*, définie sur  $\mathbb{R}$  et à valeur dans  $[-1, 1]$  ;
- $g(x) = \ln(1 + \exp(x))$ , pour la fonction *softplus* définie sur  $\mathbb{R}$  et à valeur dans  $\mathbb{R}^+$ .

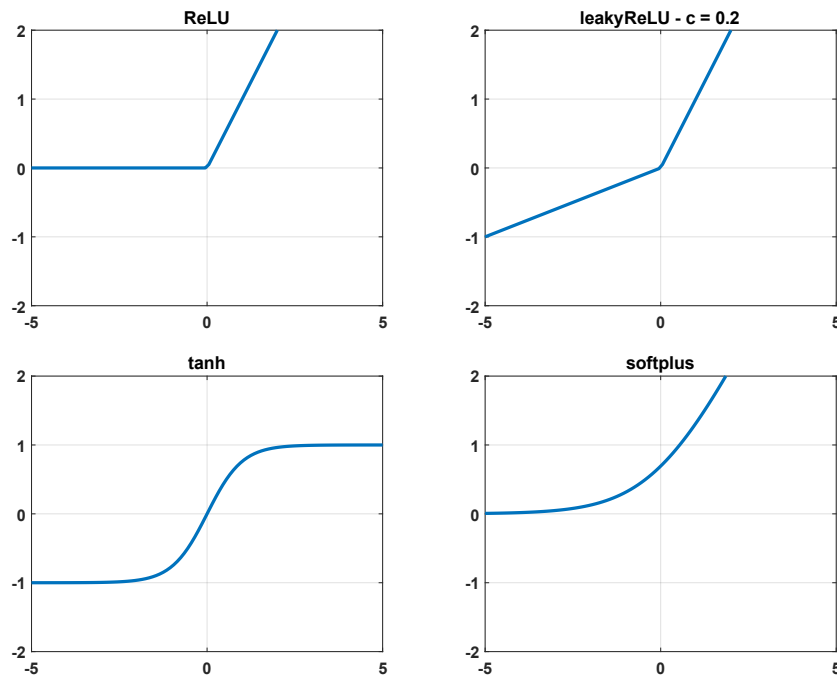


Figure 3.4 Fonctions d'activation ReLU, leakyReLU (avec  $c = 0,2$ ), tanh et softplus.

La propagation avant est la propagation de l'information dans le réseau de l'entrée vers la sortie par une succession de calculs des unités d'activation de chaque couche du réseau. Ce calcul est aisément vectorisé et ainsi, rapidement exécuté car il ne s'agit que de multiplications de matrices et d'applications de fonctions d'activation relativement simples. Enfin, il est important de distinguer les paramètres  $W$  (poids) et  $b$  (biais) propres au réseau, et les valeurs d'activation des neurones qui dépendent des valeurs des unités des couches précédentes et par conséquent des valeurs des données d'entrée. Les couches entièrement connectées ne sont pas la seule architecture possible : nous utiliserons également des couches de convolution qui seront introduites au paragraphe 3.2.4.

### 3.2.3.4. Fonction de coût, rétropropagation et calcul de gradient

Pour un modèle de régression linéaire, la fonction de coût est la même que celle présentée dans la partie consacrée à l'apprentissage automatique (3.2.2.2) :

$$J = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (3.12)$$

avec  $\hat{y}^{(i)}$  la prédiction du réseau pour l'entrée  $x^{(i)}$ . Lorsque que la fonction de coût est évaluée en un seul exemple  $(x^{(i)}, y^{(i)})$ , elle prend l'appellation de *fonction de perte* et se note :

$$\mathcal{L}(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) = (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (3.13)$$

Les termes *fonction de coût* et *fonction de perte* sont parfois utilisés de manière interchangeable. Pour les problèmes complexes et à plusieurs dimensions, la *fonction de perte* n'est jamais convexe : il se peut donc que l'algorithme converge vers un minimum local mais cela est généralement suffisant. En effet, pour un problème complexe, des études théoriques et expérimentales ont montré que la fonction de perte possède de nombreux *optima* locaux mais qui correspondent presque tous à des valeurs équivalentes. [53]

L'apprentissage par un réseau de neurones profond consiste à optimiser ces paramètres (poids et biais de chaque couche) afin de minimiser la fonction de perte. Les fonctions d'optimisation utilisent le gradient de la fonction de perte selon les paramètres du réseau. Pour un *exemple*  $(x, y)$  donné et fixé, la prédiction prend la forme suivante pour un réseau de couches complètement connectées :

$$\hat{y} = g^{(L)}(W^{(L)} g^{(L-1)}(W^{(L-1)} \dots g^{(1)}(W^{(1)} x + b^{(1)}) \dots + b^{(L-1)}) + b^{(L)}) \quad (3.14)$$

avec  $L$  le nombre de couches du réseau et  $g^{(i)}$ ,  $W^{(i)}$  et  $b^{(i)}$  respectivement la fonction d'activation, les poids et le vecteur de biais de la couche indiquée  $i$ . La *fonction de perte* s'écrit :

$$\mathcal{L}(y, \hat{y}) = \mathcal{L}\left(y, g^{(L)}\left(W^{(L)} g^{(L-1)}\left(W^{(L-1)} \dots g^{(1)}\left(W^{(1)} x \dots\right)\right)\right)\right) \quad (3.15)$$



$\mathcal{L}$  est une combinaison de compositions de fonctions et de multiplications de matrices. La seule condition sur la nature de  $\mathcal{L}$  est qu'elle soit facile à évaluer et dérivable. Cela ne signifie pas pour autant que la dérivation en chacun des paramètres du réseau soit facile à calculer. Pour simplifier la notation, nous n'écrivons pas les unités de biais  $b$  pouvant être incluses dans les matrices  $W$  avec un poids de valeur 1. L'entrée  $x$  subit une suite de multiplications de matrices et de fonctions d'activation. Nous noterons  $z^{(j)} = W^{(j)}a^{(j-1)}$ , une grandeur évaluée lors de la propagation avant qui vérifie également :  $a^{(j)} = g^{(j)}(z^{(j)})$ . Les valeurs d'activation  $a^{(j)}$  et les dérivées  $(g^{(j)})'$  sont enregistrées lors de la propagation avant. La différenciation de la fonction de perte totale en chacun des paramètres du réseau n'est pas aisée sous cette forme-là.

Une méthode qui pourrait être envisagée pour calculer le gradient de  $\mathcal{L}$  serait une différenciation par éléments finis. Les variations en sortie de chaque couche sont évaluées numériquement en fonction de légères variations de l'entrée. La différenciation d'une fonction  $f$  en  $x$  par cette méthode utilise la formule suivante, avec  $h \ll 1$  :

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (3.16)$$

Il faut ensuite répéter cette opération pour chacun des paramètres du réseau, soit plusieurs milliers de fois. Cette approche n'est pas retenue car elle est trop gourmande en calcul et elle demeure imprécise.

Une approche spécifique est utilisée pour les réseaux de neurones profonds : la *rétropropagation*. Elle évalue numériquement et exactement les gradients de la fonction de perte en fonction des paramètres de chaque couche du réseau et pour un *exemple* donné. La dérivation en chaîne de  $\mathcal{L}$  en fonction de l'entrée  $x$  donne la relation :

$$\frac{d\mathcal{L}}{dx} = \frac{d\mathcal{L}}{da^{(L)}} \cdot \frac{da^{(L)}}{dz^{(L)}} \cdot \frac{dz^{(L)}}{da^{(L-1)}} \cdots \frac{da^{(1)}}{dz^{(1)}} \cdot \frac{dz^{(1)}}{dx} \quad (3.17)$$

Ces termes sont respectivement les dérivées de la fonction de perte, des fonctions d'activation et les matrices des poids :

$$\frac{d\mathcal{L}}{dx} = \frac{d\mathcal{L}}{da^{(L)}} \cdot (g^{(L)})' \cdot W^{(L)} \cdot (g^{(L-1)})' \cdot W^{(L-1)} \cdots (g^{(1)})' \cdot W^{(1)} \quad (3.18)$$

Le gradient  $\nabla$  est réécrit comme la transposée des dérivées de la sortie en fonction de l'entrée, l'ordre des multiplications est inversé en notation matricielle pour faire propager le gradient en sens inverse :

$$\nabla_x \mathcal{L} = (W^{(1)})^T \cdot (g^{(1)})' \cdots (W^{(L)})^T \cdot (g^{(L)})' \cdot \nabla_{a^{(L)}} \mathcal{L} \quad (3.19)$$

Pour une couche  $j$  donnée, l'erreur commise en  $j$  est décrite par la quantité :

$$\delta^{(j)} = (g^{(j)})' \cdot (W^{(j+1)})^T \cdot (g^{(j+1)})' \cdots (W^{(L)})^T \cdot (g^{(L)})' \cdot \nabla_{a^{(L)}} \mathcal{L} \quad (3.20)$$

$\delta^{(j)}$  est un vecteur comptant autant d'éléments que le nombre d'unités de la couche  $j$  et s'interprète comme le coût de la prédiction attribuable à chacun de ses composants. Le gradient selon les poids de la couche  $j$  est :

$$\nabla_{W^{(j)}} \mathcal{L} = \delta^{(j)} (a^{(j-1)})^T \quad (3.21)$$

La matrice des poids  $W^{(j)}$  relie les couches  $j-1$  et  $j$ . L'erreur est calculée par récurrence pour les différentes couches du réseau :

$$\delta^{(j-1)} = (g^{(j-1)})' \cdot (W^{(j)})^T \cdot \delta^{(j)} \quad (3.22)$$

Ainsi, le gradient de la *fonction de perte* pour les paramètres du réseau est calculé exactement pour chacune des couches. Cette méthode de récurrence diminue le nombre de multiplications de matrices et réduit ainsi le nombre d'opérations. Les gradients de la *fonction de perte* sont évalués pour chaque exemple  $(x, y)$ . Intuitivement, la quantité  $\delta^{(L)}$  correspond à l'erreur commise entre la prédiction  $a^{(L)}$  (égale à  $\hat{y}$ ) et l'étiquette de données  $y$ . Dans le cas où  $\mathcal{L}$  est une fonction d'erreur quadratique moyenne et  $g^{(L)}$  une fonction d'activation ReLU, nous avons :

$$\delta^{(L)} = (g^{(L)})' \cdot \nabla_{a^{(L)}} \mathcal{L} = (g^{(L)})' \cdot \nabla_{a^{(L)}} \left( \frac{1}{2} (y - a^{(L)})^2 \right) = (y - a^{(L)}) \quad (3.23)$$

La grandeur  $\delta^{(L)}$  est donc bien l'erreur commise par la prédiction en comparaison avec l'étiquette. La rétropropagation de l'erreur permet ainsi de calculer le gradient de la fonction de perte.

Les environnements de développement (MATLAB par exemple) [55,56] bénéficient de fonctions de différenciation automatiques. Ils utilisent les règles de dérivation des calculs symboliques pour déterminer le gradient à des valeurs numériques particulières. Cette différenciation automatique est plus précise et plus rapide qu'une différenciation numérique classique par éléments finis. Le calcul optimisé réduit le nombre d'opérations mathématiques et ne nécessite pas de représentation symbolique de tout le réseau.

### 3.2.3.5. Entraînement d'un réseau de neurones

L'apprentissage d'un réseau de neurones commence par l'initialisation des matrices de poids  $W$  et des vecteurs de biais  $b$ . L'initialisation de ces paramètres a fait l'objet d'études approfondies, une méthode d'initialisation de  $W$  très répandue est la méthode Glorot [57]. Elle consiste à échantillonner les valeurs des éléments de  $W$  dans une distribution normale d'écart-type :

$$\sigma = \sqrt{2 / (\epsilon_{in} + \epsilon_{out})} \quad (3.24)$$

avec  $\epsilon_{in}$  le nombre d'unités de la couche précédente et  $\epsilon_{out}$  le nombre d'unités de la couche suivante. Les vecteurs de biais  $b$  sont généralement initialisés à 0. Ensuite, chaque itération de l'algorithme consiste en une propagation avant puis une rétropropagation de

l'erreur. La propagation évalue les valeurs des prédictions et la valeur de la fonction de coût  $J$ . La rétropropagation détermine le gradient. Enfin, une fonction d'optimisation utilise les valeurs de la fonction de coût et du gradient pour ajuster les paramètres du réseau et minimiser  $J$ . Ces opérations sont répétées pour  $N$  itérations.

La « durée » d'apprentissage est évaluée en *epoch*. Le réseau est entraîné pour une *epoch* lorsqu'il a rencontré une fois tous les *exemples* du jeu de données. Le nombre d'*epochs* est différent du nombre d'itérations  $N$  de l'algorithme d'apprentissage. L'algorithme « apprend » à chaque itération mais le coût en calcul est d'autant plus important que le nombre d'*exemples* utilisés est grand. Pour réduire le coût en calcul et accélérer l'apprentissage, le jeu de données est divisé en petits lots (*mini-batches* en anglais), de quelques dizaines à plusieurs centaines d'unités. Le recours aux *mini-batches* accélère l'apprentissage puisque l'algorithme n'a plus besoin d'examiner tous les *exemples* avant de procéder à l'optimisation de ses paramètres. Plusieurs itérations sur autant de *mini-batches* sont nécessaires pour compléter une *epoch*.

Différentes fonctions d'optimisation sont possibles et présentent des performances variables selon les problèmes. La descente du gradient est une fonction courante mais elle n'est pas la plus performante car le taux d'apprentissage est constant et identique pour tous les paramètres. D'autres fonctions d'optimisation plus complexes telles que *SGDM* (*Stochastic Gradient Descent with Momentum*), *RMS Prop* (*Root Mean Square Propagation*) ou encore *Adam* (*adaptive moment estimation*) ajustent l'apprentissage selon la dynamique des gradients. Elles présentent généralement de meilleures performances que la descente du gradient. Les principaux résultats présentés par la suite utilisent la fonction Adam [58] avec ses hyperparamètres pris à leurs valeurs courantes : taux d'apprentissage  $\alpha = 0,01$ , facteur de décroissance du gradient  $\beta_1 = 0,9$ , facteur de décroissance du gradient au carré  $\beta_2 = 0,999$  et constante de non-division par zéro  $\epsilon = 10^{-8}$ .

### 3.2.3.6. Division des jeux de données

La performance d'un réseau de neurones n'est pas évidente à mesurer. La fonction de coût calculée sur les *exemples* du jeu de données d'entraînement, notée  $J_{train}$ , montre l'accord entre la prédiction et les étiquettes de données. Mais, à ce stade, il n'y a aucune certitude sur la capacité du réseau à généraliser ses estimations à des *exemples* qu'il n'a jamais rencontrés. C'est pourquoi il est nécessaire de disposer d'un second jeu de données appelé *jeu de données de validation*. Le calcul de la fonction de coût sur ce dernier, notée  $J_{val}$ , mesure l'aptitude du réseau à généraliser ses prédictions à d'autres *exemples*.

Les réseaux de neurones et leurs méthodes d'apprentissage possèdent de nombreux hyperparamètres : le nombre  $m$  d'*exemples*, le nombre de couches, le nombre d'unités par couche, le taux  $\lambda$  de régularisation, la fonction d'activation, etc. La modification des valeurs de ces hyperparamètres est justifiée par l'évolution de la valeur de  $J_{val}$ . En effet, l'ajustement ne doit pas renforcer que l'apprentissage mais aussi améliorer la capacité de généralisation du modèle. Cependant, l'optimisation des hyperparamètres par évaluation

de  $J_{val}$  peut entraîner un surapprentissage sur le set de validation. Il est alors parfois nécessaire de disposer d'un troisième jeu de données différent des deux premiers : le *jeu de données de test*. La valeur de la fonction de coût sur celui-ci est notée  $J_{test}$ . La valeur de  $J_{train}$  est normalement inférieure à  $J_{val}$  et  $J_{test}$  puisque le réseau doit être plus performant sur le jeu d'entraînement. La faible valeur de  $J_{train}$  garantit la performance de l'apprentissage sur le jeu d'entraînement. La proximité des valeurs de  $J_{val}$  et  $J_{test}$  assure une généralisation correcte du modèle à des exemples inconnus.

Le jeu de données initial est ainsi divisé en trois ensembles. La répartition n'est pas équilibrée puisque les jeux de validation et de test ne sont utilisés que pour qualifier le modèle. Il est toutefois important que les données des trois jeux soient issues de la même distribution. La répartition de tous les *exemples* disponibles suit généralement le schéma suivant :

- 80% des *exemples* dans le jeu d'entraînement ;
- 10% des *exemples* dans le jeu de validation ;
- 10% des *exemples* dans le jeu de test.

Lorsque le développement du modèle ne fait pas l'objet d'un ajustement avancé des hyperparamètres, les valeurs de  $J_{val}$  et  $J_{test}$  sont très proches. Une seule des deux grandeurs sera parfois conservée. Nous ferons l'économie du jeu de test, bien qu'en toute rigueur il resterait nécessaire pour valider les performances du modèle.

### 3.2.3.7. Biais et variance

La progression de l'entraînement est suivie en observant les valeurs  $J_{train}$  et  $J_{val}$  au fil des itérations et des *epochs*. Le surapprentissage et le sous-apprentissage sont étendus aux notions de variance et de biais. Lorsque  $J_{train}$  est faible et  $J_{val}$  élevée, les prédictions sont bonnes sur le jeu d'entraînement mais pas sur le jeu de validation : le système est en situation de variance et il y a un surapprentissage. Mais lorsque  $J_{train}$  et  $J_{val}$  sont toutes deux élevées, les prédictions ne sont bonnes ni sur le jeu d'entraînement, ni sur le jeu de validation : le système est alors en situation de biais et il y a un sous-apprentissage. Le bon modèle se trouve entre ces deux cas : c'est un compromis équilibré des valeurs de  $J_{train}$  et  $J_{val}$  proches entre elles et faibles toutes les deux.

La comparaison des valeurs de  $J_{train}$  et de  $J_{val}$  se fait tout au long de l'entraînement. Cependant, si les grandeurs s'éloignent trop et convergent vers des valeurs différentes, il est parfois nécessaire d'arrêter l'apprentissage prématurément. Pour un entraînement qui se déroule correctement, le modèle est d'abord en situation de *biais* puisqu'il n'a pas encore appris et que ses prédictions sont mauvaises. Il quitte ensuite cette situation de *biais*, mais si le nombre d'*epochs* est important, il y a un risque que le modèle passe en situation de *variance*, l'écart entre  $J_{train}$  et  $J_{val}$  se creuse et  $J_{val}$  augmente éventuellement. Un modèle non adapté peut aussi rester en situation de *biais* tout au long de son apprentissage.

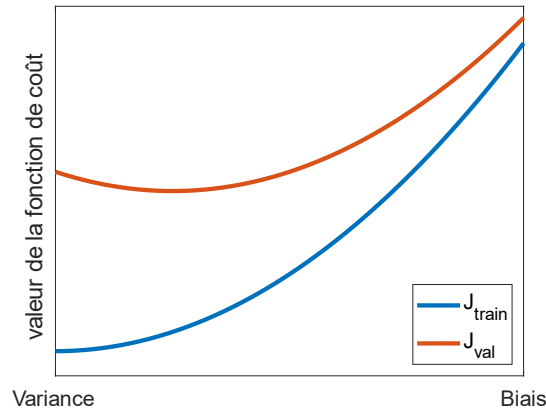


Figure 3.5 Illustration des situations de biais de variance par observation des valeurs de la fonction de coût.

Pour des problèmes complexes avec de multiples paramètres et variables, les réseaux de neurones peuvent offrir une très bonne généralisation, sans que leur apprentissage n'ait couvert entièrement l'espace des possibles. Seulement quelques dizaines de milliers d'exemples sont parfois suffisants pour couvrir un espace de plusieurs millions de possibilités. Toutefois, face à l'augmentation de la dimensionnalité, l'entraînement devient de plus en plus complexe et le réseau peine à généraliser. Ce phénomène a été nommé *fléau de la dimension*. En pratique, la performance d'un réseau de neurones sera d'autant meilleure que le problème sera simple. Pour des problèmes complexes, la performance atteinte en pratique est parfois assez faible. Il ne faut donc pas s'attendre à ce que les réseaux de neurones puissent résoudre tous les problèmes comme cela sera illustré par la suite pour le design des couches minces optiques. La compréhension du problème et du fonctionnement des réseaux de neurones est primordiale pour un apprentissage performant.

### 3.2.3.8. Régularisation

La méthode de régularisation présentée au paragraphe 3.2.2.5 dans le cas de l'apprentissage automatique fonctionne aussi pour l'entraînement des réseaux de neurones artificiels. La régularisation permet de limiter la variance et le surapprentissage. Elle force les paramètres du réseau à conserver des valeurs faibles et à répartir l'information sur plusieurs neurones. Sans régularisation, un neurone particulier pourrait prendre des valeurs d'activation très élevées et ainsi imposer les valeurs d'activation des neurones auxquels il est connecté. La régularisation  $\mathcal{L}_2$  consiste à ajouter un terme proportionnel à la norme 2 des paramètres du réseau. La fonction de coût d'un réseau défini par des paramètres  $W$  et  $b$ , sur  $m$  exemples et avec une régularisation  $\mathcal{L}_2$  est de la forme :

$$J(W, b) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathcal{L}(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2m} \|W\|_2^2 \quad (3.25)$$

avec  $\mathcal{L}$  la fonction de perte,  $\lambda$  le taux de régularisation et  $\|W\|_2^2 = \sum_{i,j,l} (W_{i,j}^{(l)})^2$ , la somme des carrés de tous les paramètres de poids du réseau.

Il existe d'autres techniques de régularisation, comme la méthode *dropout*. Celle-ci est très différente de la régularisation  $\mathcal{L}_2$  puisque il ne s'agit pas de modifier la fonction de coût mais directement la structure du réseau. La méthode s'applique séparément aux différentes couches en inhibant aléatoirement des neurones. Cette opération nécessite un hyperparamètre noté  $p$ , un réel compris entre 0 et 1. Pendant l'entraînement du réseau et lors de la propagation avant à travers une couche de neurones régularisée par *dropout*, un tirage aléatoire est réalisé pour chaque entrée. Si le tirage est inférieur à  $p$ , la valeur de l'entrée est annulée, sinon elle est conservée. Le *dropout* élimine aléatoirement des entrées de la couche à chaque propagation avant. À long terme, le réseau est obligé de répartir l'information sur plusieurs neurones. La transformation du réseau opère comme une simplification du modèle, ce qui limite le surapprentissage. De la même façon que la régularisation  $\mathcal{L}_2$ , les poids des liaisons entre les neurones conservent des valeurs faibles. La régularisation *dropout* est uniquement appliquée lors de l'entraînement du réseau. Une fois l'apprentissage terminé, tous les neurones sont utilisés pour les prédictions.

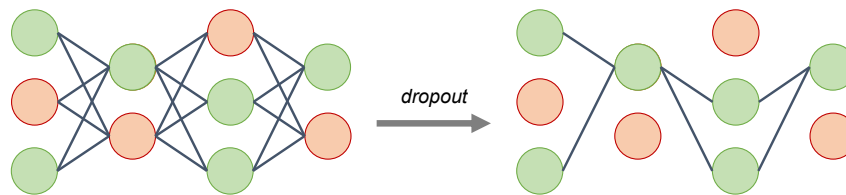


Figure 3.6 Régularisation dropout : les unités de chaque couche sont aléatoirement neutralisées lors de la propagation avant. Ici, les nœuds verts sont conservés, les nœuds orange sont inhibés.

### 3.2.4. Notions sur les réseaux de neurones à convolution

#### 3.2.4.1. Introduction aux réseaux de neurones à convolution

Introduisons un autre type de réseau à propagation avant : les réseaux de neurones à convolution (CNN pour *Convolutional Neural Network*). Le motif de connexion entre les neurones utilise des opérations de convolution. Le fonctionnement de ces réseaux s'inspire du traitement des informations visuelles par les êtres vivants. Face à une grande quantité d'informations, un réseau de neurones à convolution prétraite des petites quantités d'informations avant de les combiner. Ces réseaux trouvent de très nombreuses applications, notamment dans la reconnaissance d'image [53]. Lorsque le modèle travaille avec des données de grande taille (des images par exemple), le nombre d'unités d'entrée, de neurones et de connexions est très conséquent. Les réseaux de neurones à convolution permettent de réduire le nombre de connexions entre les couches du réseau et par conséquent le nombre de paramètres à ajuster. Les réseaux à couches entièrement connectées ne peuvent travailler que sur des données à 1 dimension, tandis que les CNN peuvent directement traiter des données en 2, voire 3 dimensions.

Mis à part les différences d'architecture, les modalités d'entraînement des couches de neurones à convolution sont identiques à celles des couches entièrement connectées. Tout ce qui a été présenté au sujet des réseaux de neurones artificiels profonds (paragraphe 3.2.3) reste valable pour les CNN.

### 3.2.4.2. Couche de convolution

Une couche de convolution est constituée d'un ou de plusieurs filtres qui sont convolués avec les données d'entrée. Un filtre est aussi appelé *noyau* de convolution (*filter* ou *kernel* en anglais).

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ \hline x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ \hline x_{31} & x_{32} & x_{33} \\ \hline \end{array} * \begin{array}{|c|c|c|} \hline f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ \hline f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ \hline f_{31} & f_{32} & f_{33} \\ \hline \end{array} = \sum_{i,j} x_{ij} \times f_{ij}$$

Figure 3.7 Convolution d'une matrice  $x$  par un noyau  $f$  de même taille.

Dans le cas de données d'entrée à 2 dimensions, la convolution d'une matrice par un *noyau* de même taille correspond à la somme totale des multiplications terme à terme des deux matrices. Le résultat de cette opération est un scalaire.

Lorsque la matrice de données  $x$  est plus grande que le *noyau  $f$ , le filtre est appliqué successivement sur différentes régions de  $x$ . Le résultat de cette opération est une matrice de dimension inférieure à  $x$ . Le *noyau* de convolution définit le *champ récepteur*, c'est-à-dire la zone qui concerne la valeur d'activation du neurone.*

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ \hline x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ \hline x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ \hline x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \\ \hline \end{array} * \begin{array}{|c|c|c|} \hline f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ \hline f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ \hline f_{31} & f_{32} & f_{33} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline y_{11} & y_{12} \\ \hline y_{21} & y_{22} \\ \hline \end{array}$$

Figure 3.8 Convolution d'une matrice  $x$  par un filtre  $f$  de taille plus petite, déplacé d'un pas de 1 dans les deux directions. La matrice obtenue est de taille 2x2.

Selon les dimensions de la matrice de données et du *noyau*, le *noyau* peut être déplacé d'une ou plusieurs unités dans les deux directions de la matrice. Le déplacement du *noyau* est défini par son *pas* de déplacement. Plus le *pas* est petit, plus les champs récepteurs se chevauchent.

Lors de l'entraînement d'une couche de convolution, les paramètres de la couche sont les valeurs qui définissent le *noyau*  $f$ . Ce dernier va apprendre par lui-même à détecter certaines caractéristiques dans les données d'entrée. Pour mener une analyse plus

poussée, une *profondeur* est ajoutée à la couche de convolution. Cette *profondeur* correspond à une multitude de *noyaux* appliqués sur le même champ récepteur. Chaque *noyau* de la *profondeur* possède ses propres paramètres. Les noyaux observent alors le même *champ récepteur* mais ils en extraient des informations différentes.

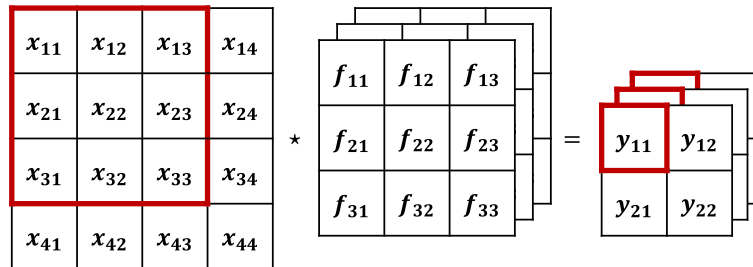


Figure 3.9 La *profondeur* permet d'effectuer plusieurs convolutions sur un même champ récepteur.

Pour une matrice de données de dimensions  $n \times n$  convoluée par un noyau de dimensions  $f \times f \times n_c$ , avec  $n_c$  sa *profondeur*, et  $p$  son *pas*, la taille des données de sortie est :  $\left\lfloor 1 + \frac{n-f+1}{s} \right\rfloor \times \left\lfloor 1 + \frac{n-f+1}{s} \right\rfloor \times n_c$ .

La dimension des *noyaux* de convolution, de leur *profondeur* ou de leur *pas*, sont des hyperparamètres à ajuster en fonction du modèle. Les couches de convolution sont généralement transformées par une fonction d'activation non-linéaire comme cela a été présenté au paragraphe 3.2.3.3, comme l'activation ReLU.

### 3.2.4.3. Couche de *pooling*

Le *pooling* est une technique de sous-échantillonnage de l'image. De la même manière que pour une couche de convolution, la matrice d'entrée est « scannée » par des filtres. Les couches de *pooling* utilisées seront des couches *max-pooling*. Dans ce cas, seule la valeur maximale observée dans le champ récepteur est conservée. Le *max-pooling* conserve uniquement les informations ayant la plus grande valeur et réduit la dimension des données à traiter.

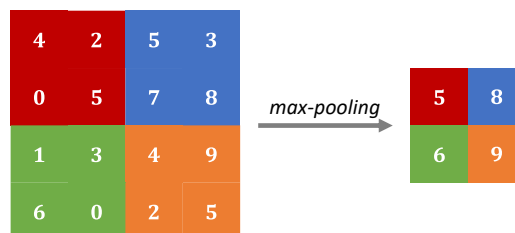


Figure 3.10 Illustration d'une couche *max-pooling* sur une matrice  $4 \times 4$  avec un filtre  $2 \times 2$  et un pas de 2.

Une partie de l'information est perdue lors de cette opération mais le gain en puissance de calcul est important puisque la taille des données est réduite par le *pooling*. Les réseaux de neurones à convolution et les opérations de *pooling* montrent de bonnes performances pour le traitement de données de grande taille. Ils utilisent le fait que de nombreux signaux physiques possèdent une hiérarchie : les caractéristiques générales d'un signal



sont des compositions de caractéristiques particulières. Les CNN cherchent à identifier ces caractéristiques particulières pour comprendre le signal dans sa globalité. [53]

### 3.3. Résolution de problème inverse par algorithme évolutionnaire

#### 3.3.1. Résolution par un algorithme DE

##### 3.3.1.1. Introduction à la résolution du problème inverse par algorithme DE

L'implémentation utilisée ici est présentée dans les travaux de Barry *et al.* [47]. La population est composée de  $NP = 30$  individus. Chaque individu est un vecteur qui représente les épaisseurs et éventuellement les indices optiques de chaque élément de l'empilement étudié.

La population est initialisée aléatoirement par un processus latin hypercube pour assurer une répartition équitable des valeurs initialisées dans l'espace des solutions. Ce processus correspond à une initialisation uniforme tout en assurant une répartition égale dans chaque sous-espace des solutions. Les épaisseurs initiales varient entre une borne inférieure et une borne supérieure. Les indices de réfraction sont soit initialisés à des valeurs fixes, ce qui aide l'algorithme à converger plus rapidement, soit initialisés continûment dans un intervalle, l'algorithme choisit alors lui-même l'indice de la première couche. L'initialisation et les itérations étant stochastiques, chaque exécution converge vers une solution différente. Il est alors nécessaire d'exécuter l'algorithme plusieurs fois et de comparer les différentes solutions proposées. Le programme se comporte plutôt bien pour des empilements jusqu'à 20 couches et pour des fonctions de coût relativement simples. Dès que le nombre de couches est trop grand ou que la fonction de coût n'est pas adaptée au problème, les solutions proposées ne sont plus satisfaisantes.

Avant d'adresser des problèmes contraints par la réponse en diffusion, nous allons tester les algorithmes proposés sur la synthèse de couches minces optiques sous contrainte de la réponse spéculaire. Deux classes de problèmes ont été étudiées : la réponse en réflexion d'un miroir de type Bragg (une seule longueur d'onde à réfléchir) et la transmission d'un filtre de type Fabry-Perot (une bande passante étroite entourée de deux bandes de réjection).

##### 3.3.1.2. Miroir de Bragg

La configuration la plus simple est celle d'un miroir. La seule contrainte imposée à l'algorithme est de minimiser la fonction de coût suivante :

$$cost = 1 - r(\lambda_0) \quad (3.26)$$

avec  $r(\lambda_0)$  la valeur de la réflexion spectrale de l'empilement pour la longueur d'onde  $\lambda_0$ . L'optimisation utilise uniquement la valeur de réflexion en une seule longueur d'onde. Pour ce type d'empilement, la structure attendue est celle d'un miroir de Bragg, c'est-à-dire un empilement de couches quart d'ondes.

**(a) Empilement de 11 couches minces**

Dans une première implémentation, le nombre de couches minces de l'empilement est fixé à 11 unités et la longueur d'onde de travail est elle aussi déterminée ( $\lambda_0 = 600 \text{ nm}$ ). Les épaisseurs de l'empilement sont initialisées entre 60 et 120 nm. Les indices de réfraction sont initialisés aléatoirement entre 1,45 et 2,15. L'algorithme est exécuté pour 512 itérations. Chaque individu est la concaténation des valeurs des épaisseurs et des indices de chaque couche, soit 22 éléments au total. À la fin de l'exécution, le meilleur individu présente les caractéristiques de la Figure 3.11. Les indices des couches alternent sur les *extrema* de l'intervalle accessible, en commençant par l'indice haut. Les épaisseurs des couches sont elles aussi régulières et proportionnelles à  $\lambda/4$ .

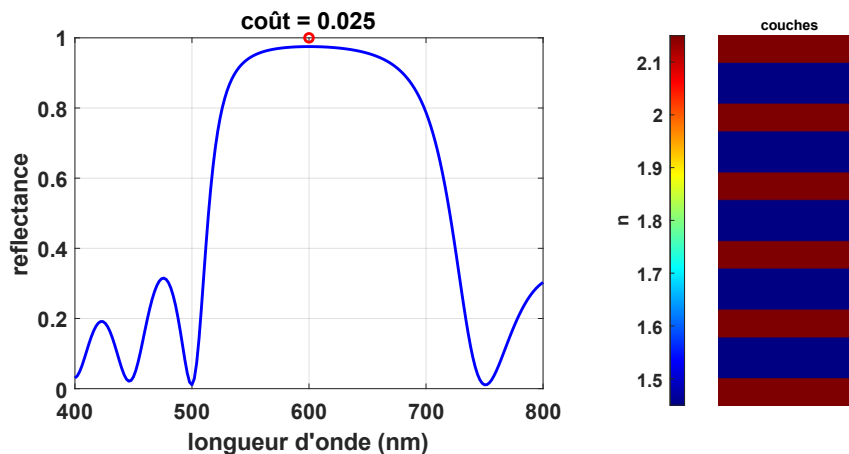


Figure 3.11 Optimisation DE d'un empilement de 11 couches après 512 itérations. La contrainte est de maximiser la réflexion à 600 nm. À droite, les épaisseurs des couches sont proportionnelles à celles de la solution et la couleur indique leur indice optique.

Une autre exécution du code, initialisée dans les mêmes conditions mais arrêtée au bout de 128 itérations présente de moins bons résultats (voir Figure 3.12). Le nombre d'itérations n'est pas suffisant pour disposer d'une réponse convenable.

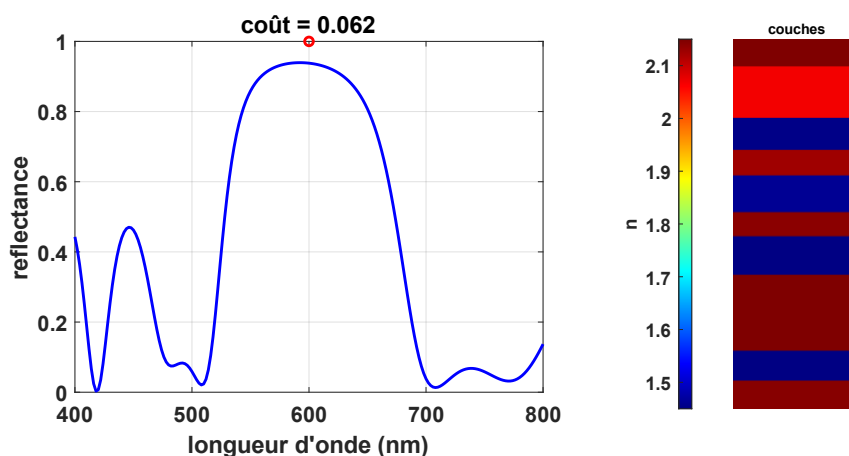


Figure 3.12 Optimisation DE d'un empilement de 11 couches après 128 itérations. Les épaisseurs des couches ne sont pas régulières.

L'observation des épaisseurs et des indices de réfraction finaux montre que les indices n'ont pas encore atteint les extrema de l'intervalle et que l'alternance des épaisseurs n'est

pas régulière. L'algorithme DE permet donc de retrouver la solution analytique optimale connue pour cette contrainte et qui est celle des miroirs de Bragg.

### (b) Empilement de 17 couches minces

En reprenant le même paramétrage, le nombre de couches minces est maintenant étendu à 17 unités, pour 1024 itérations. Les résultats obtenus sont similaires. Il faut toutefois noter que toutes les exécutions de l'algorithme ne convergent pas toujours vers la même solution, comme le montrent les figures ci-dessous. L'algorithme est exécuté deux fois dans la même configuration. La Figure 3.13 et la Figure 3.14 présentent les résultats de deux exécutions : *exe#1* et *exe#2*. Les deux répondent au critère cible avec la même précision, pour un coût d'environ  $5.10^{-3}$ .

La première (*exe#1*) montre une structure plutôt régulière pour les épaisseurs et pour l'alternance des indices. Nous remarquons toutefois des irrégularités dans les indices pour deux couples de couches (4-5) et (10-11). Pour chaque couple, la somme des épaisseurs est de l'ordre de l'épaisseur quart d'onde. L'empilement obtenu correspond bien à un miroir de Bragg mais de 15 couches plutôt que 17 comme attendu. En revanche, la seconde exécution présentée (*exe#2*) aboutit à une structure dont le spectre est beaucoup moins régulier, l'alternance des indices n'est pas respectée pour les couches (9-10) et (15-16). Les épaisseurs cumulées pour les deux disparités identifiées sont bien proportionnelles à  $\lambda/4$  mais pour des multiples supérieurs. La valeur de la fonction de coût n'est pas pénalisée avec cette solution car la seule contrainte est de maximiser la réflexion à 600 nm. Ainsi, la solution exposée respecte bien cette unique contrainte. Nous pouvons toutefois conclure que l'algorithme DE rencontre des difficultés à résoudre le problème inverse posé sous cette forme et avec autant de couches.

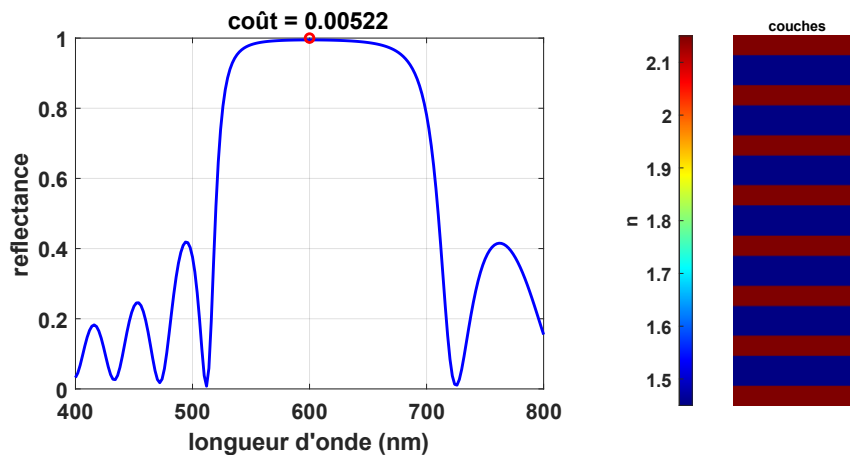


Figure 3.13 Optimisation DE d'un empilement de 17 couches, *exe#1*, après 1024 itérations

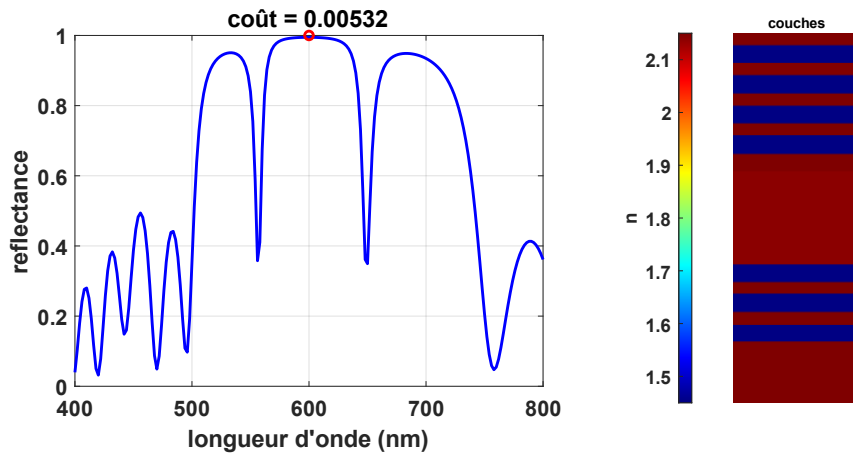


Figure 3.14 Optimisation DE d'un empilement de 17 couches, exe#2, après 1024 itérations.

Il est également intéressant de noter la ressemblance de tous les individus à l'issue de l'exécution de l'algorithme DE. La Figure 3.15 présente les trois meilleurs individus respectifs des exécutions *exe#1* et *exe#2*. Dans le premier cas, les variations entre les meilleures solutions obtenues sont si minimes qu'elles en sont invisibles à cette échelle de représentation. Dans le second cas, les réponses spectrales possèdent des similitudes malgré des différences visibles. L'algorithme DE converge vers un optimum local et ne propose que des solutions très similaires et proches de cet optimum, du moins dans cette implémentation très basique et en ayant recours à des fonctions de coût également très simples.

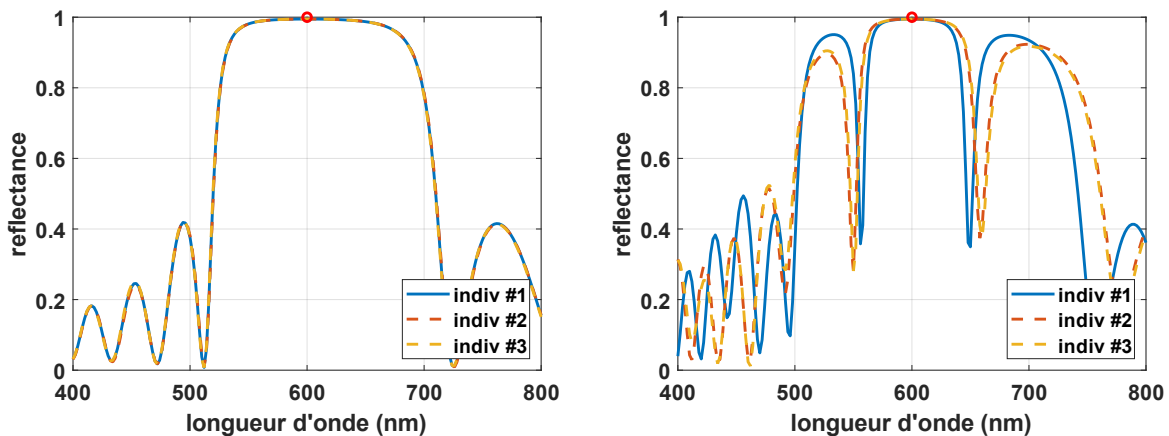


Figure 3.15 Trois meilleurs individus obtenus par les exécutions *exe#1* (gauche) et *exe#2* (droite). Pour *exe#1*, ils sont indiscernables. Pour *exe#2*, ils se ressemblent mais présentent quelques disparités.

### 3.3.1.3. Filtre passe-bande

Les filtres passe-bande sont plus complexes que les miroirs de Bragg. Les designs généralement utilisés pour cette fonction sont divers ; une solution classique est le modèle de la cavité Fabry-Perot. La structure comporte deux miroirs de Bragg autour d'une couche plus épaisse appelée cavité (ou *spacer*). Son épaisseur est généralement un multiple de la longueur d'onde de centrage du filtre. Mais il existe d'autres manières d'obtenir un passe-bande : en empilant un filtre passe-haut et un passe-bas, par exemple. Pour résoudre ce problème, nous travaillons avec des empilements de 15 couches.

L'alternance et les valeurs des indices de réfraction sont fixées pour faciliter la convergence ; la première couche (en interface avec le superstrat) est d'indice haut. La fonction de coût est ajustée pour prendre en compte des contraintes supplémentaires.

Une manière simpliste d'envisager la fonction de coût pour cette nouvelle configuration serait de modifier légèrement celle utilisée pour les miroirs de Bragg mais en minimisant cette fois-ci la réflexion à la longueur d'onde de centrage du filtre. La fonction de coût serait alors de la forme :

$$cost = 1 - t(\lambda_0) \quad (3.27)$$

Sous cette forme-là, la structure obtenue ressemble plutôt à un antireflet pour la longueur d'onde  $\lambda_0$  et ne favorise pas la présence de bandes de réjection de part et d'autre de la bande passante. Il est alors nécessaire d'ajouter des contraintes concernant la forme de la réponse spectrale attendue et d'utiliser un gabarit. La similitude entre la réponse spectrale et ce gabarit est évaluée par une fonction de coût de moindres carrés :

$$cost = \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \frac{t(\lambda_j) - \hat{t}_j}{\Delta t_j} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.28)$$

avec  $t(\lambda_j)$  la transmission de l'empilement à la longueur d'onde  $\lambda_j$ ,  $\hat{t}_j$  la valeur de transmission cible à la même longueur d'onde,  $\Delta t_j$  la tolérance admise sur la distance entre la valeur réelle de la transmission et la valeur cible et  $N$  le nombre de points pour lesquels est calculée la fonction de coût.

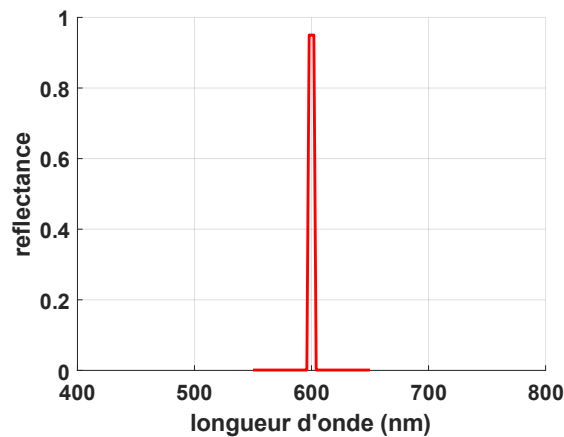


Figure 3.16 Fonction cible pour la synthèse d'un filtre passe-bande centré à 600 nm.

Dans le cas d'un filtre passe-bande centré à 600 nm, dont la bande passante est de 5 nm (largeur à mi-hauteur) et les bandes de réjection sont de 50 nm chacune, le gabarit de la fonction cible est présenté dans la Figure 3.16. La bande passante ( $t = 0,95$ ) est étroite et centrée à 600 nm, encadrée par deux plages de réjection ( $t = 0,01$ ). La contrainte est un peu simpliste, mais pour un nombre de couches si faible il n'est pas envisageable de synthétiser une fonction de passe-bande plus complexe.

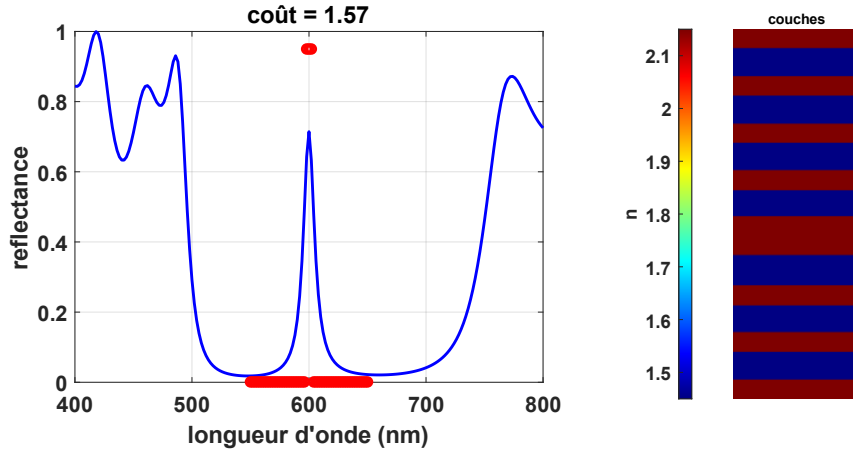


Figure 3.17 Optimisation DE pour un filtre passe-bande centré à 600 nm après 1024 itérations. Le gabarit de contrainte est représenté par les cercles rouges.

L'exécution de l'algorithme DE dans cette configuration donne des résultats prometteurs. Les solutions proposées présentent bien un pic de transmission autour de la longueur d'onde de centrage du filtre (cf. Figure 3.17). Toutefois, la valeur de transmission dans la bande passante est bien inférieure à la valeur attendue, tandis que les réjections sont plutôt bonnes. Cela résulte du fait que la fonction de coût traite tous les points du gabarit de la même manière et ce, avec la même pondération. L'algorithme préfère ainsi minimiser la distance entre les nombreux points des zones de réjection, au détriment de la justesse des quelques points échantillonnés dans la bande passante.

La fonction de coût est alors modifiée par l'ajout d'un facteur de pondération  $w_j$  qui dépend du point échantillonné, c'est-à-dire si ce point est dans la bande passante du gabarit ou non. De cette façon, l'ensemble des points de la bande passante a le même poids que l'ensemble des points des bandes de réjection. Le vecteur de pondération  $w$  est défini par :

$$w_j = \begin{cases} \frac{\frac{N}{2}}{\text{longueur}(\text{bande passante})}, & \text{si } j / \hat{\tau}_j \in \text{bande passante} \\ \frac{\frac{N}{2}}{N - \text{longueur}(\text{bande passante})}, & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.29)$$

$N$  est un nombre impair, égal au nombre de points échantillonnés dans le gabarit.  $\text{longueur}(\text{bande passante})$  correspond au nombre de points échantillonnés dans la bande passante. La somme des facteurs de pondération  $w_j$  est bien égale à 1.

$$\sum_{j=1}^N w_j = 1 \quad (3.30)$$

La forme corrigée de la fonction de coût est la suivante :

$$cost = \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \frac{t(\lambda_j) - \hat{t}_j}{\Delta t_j} \right)^2 w_j \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.31)$$

La modification de la fonction de coût permet une prise en compte plus équilibrée de la contrainte sur la réponse spectrale de la solution. L'algorithme cherche un compromis équilibré entre la valeur de transmission dans la bande passante et dans les zones de réjection. Cette modification équivaut à augmenter la densité d'échantillonnage des points dans la bande passante de la fonction cible [1]. Les valeurs des épaisseurs obtenues à la Figure 3.18 n'indiquent pas de manière évidente la présence d'une cavité dans l'empilement. Une certaine régularité des couches est tout de même observée.

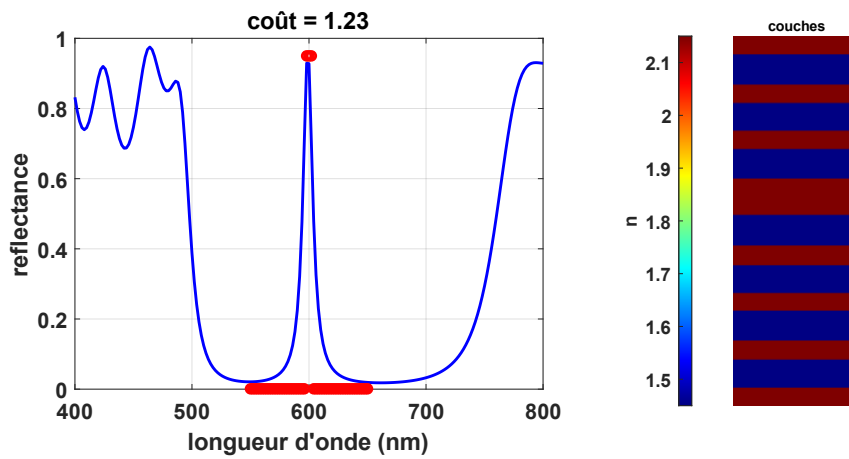


Figure 3.18 Optimisation par algorithme DE pour un filtre passe-bande centré à 600 nm après 1024 itérations, utilisation de la fonction de coût pondérée.

L'application d'un algorithme DE pour la synthèse d'un filtre passe-bande simple ne converge pas vers une solution conventionnelle. Les structures étudiées sont relativement simples mais l'algorithme montre ses limites lorsque le nombre de couches augmente ou lorsque la fonction de coût devient plus complexe. Malgré les résultats encourageants, cette approche ne sera pas développée davantage.

### 3.3.2. Variants et synthèse

L'implémentation de l'algorithme DE présentée possède de nombreux variants car il existe diverses manières de générer l'individu mutant  $y$ . D'autres variants sont un peu plus complexes comme la *Island Based Differential Evolution* [59] utilisant plusieurs populations distinctes par analogie à un archipel abritant plusieurs îles. Chaque population évolue séparément et des migrations ponctuelles assurent une diffusion des meilleures caractéristiques entre les populations. Le fait d'échanger les meilleurs individus évite de rester bloqué à des *optima* locaux et permet de couvrir plus largement l'espace des solutions.

L'algorithme *deep neural network surrogated differential evolution* [48] (évolution différentielle assistée par réseau de neurones profond) utilise une évolution différentielle

classique mais assistée par un réseau de neurones *prédicteur* entraîné à résoudre le problème direct. Le recours à ce réseau de neurones diminue la complexité de l'algorithme en évitant de faire appel à une fonction analytique et permet aussi de multiplier les étapes de mutation et de recombinaison sans sacrifier le temps d'exécution. La fonction de calcul exacte du problème direct est tout de même appelée régulièrement afin de s'assurer de la validité des solutions générées.

Enfin, plusieurs études ont été menées sur la synthèse de filtres couches minces par d'autres procédés stochastiques : l'algorithme génétique [45,46] (GA, *genetic algorithm*), l'optimisation par essaim particulaire (PSO, *particle swarm optimization*) [44] ou encore par recuit simulé [43]. Comme nous avons pu l'observer, ces processus stochastiques sont assez performants pour des problèmes parcimonieux, c'est-à-dire avec peu de variables [60]. Contrairement aux méthodes qui utilisent les gradients, ils sont peu enclins à rester bloqués à des *optima* locaux puisque les modifications des solutions intermédiaires sont aléatoires. En revanche, une évaluation exacte des solutions intermédiaires est nécessaire à chaque itération et la complexité de l'algorithme est directement liée à la complexité du calcul de ces solutions. À l'inverse, les méthodes qui utilisent les gradients (par exemple, les réseaux de neurones) peuvent manier un plus grand nombre de variables mais présentent un risque plus élevé de converger vers un *optimum* local. L'algorithme à évolution différentielle a été écarté pour le cas du design sous contrainte de la diffusion car le coût du calcul et le nombre de variables à manipuler sont trop élevés. En outre, les résultats obtenus sur des cas complexes ont permis de montrer les limites de cette approche.

### 3.4. Design de couches minces par réseaux de neurones artificiels

#### 3.4.1. Problème one-to-many

Par leur faculté à approcher n'importe quelle fonction, les réseaux de neurones artificiels se prêtent bien à la résolution de problème inverse. Nous proposons leur utilisation pour la synthèse de couches minces optiques sous contrainte de la réponse spéculaire ou diffuse. Dans les deux cas, cette résolution fait face au problème *one-to-many* : pour *une* réponse spectrale donnée, il existe de *nombreuses* solutions possibles. Ceci rend difficile, voire impossible, l'entraînement de réseaux de neurones directement sur le problème inverse car ils sont généralement déterministes. Pour une entrée donnée ils ne fournissent qu'une seule sortie. La prédiction immédiate d'une structure couches minces (en sortie d'un réseau) à partir d'une réponse spectrale (en entrée) ne pourra en conséquence jamais être pleinement satisfaisante.

Pour illustration et par souci de compréhension, nous pouvons nous ramener à un problème à une seule dimension comme illustré à la Figure 3.19. Nous disposons de structures couches minces  $x_j$ , auxquelles sont associées des réponses spectrales  $y_k$ . Dans le cas du problème direct, pour une structure multicouche donnée, il n'y a qu'une seule et unique réponse spectrale. Il est alors possible de décrire une relation (polynomiale, par



exemple) entre ces deux grandeurs. En revanche, dans le cas du problème inverse, nous disposons de plusieurs structures différentes pour une réponse spectrale donnée. Cette fois-ci il est impossible de trouver une relation pour relier complètement ces deux grandeurs. Aucune régression polynomiale ne pourra décrire entièrement la relation. De la même manière, un réseau de neurones artificiels peut décrire des relations complexes et non-linéaires mais toujours à valeur continue. L'entraînement de manière directe sur le problème inverse est donc impossible.

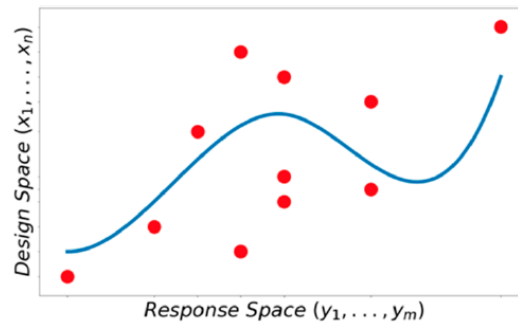


Figure 3.19 Illustration du problème one-to-many et de l'impossibilité de trouver une fonction qui permette de relier parfaitement les réponses spectrales  $y_i$  et les designs  $x_i$  puisque pour une réponse spectrale, il existe plusieurs designs possibles [51].

La résolution du problème direct se fait en deux temps. Il nous faut d'abord disposer d'une fonction de prédiction  $F_{direct}$ , capable de calculer la réponse spectrale d'une structure couches minces donnée. Cette fonction a pour entrée les caractéristiques de la structure étudiée : épaisseurs des couches, indices optiques des matériaux et angle d'incidence. Elle possède également des paramètres : les longueurs d'onde d'échantillonnage du spectre et la polarisation incidente.

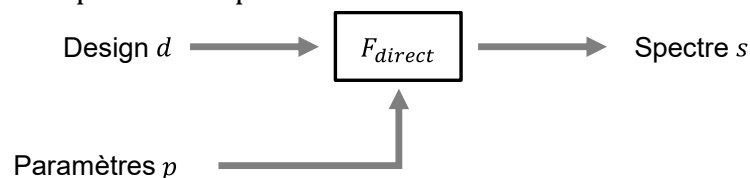


Figure 3.20 La fonction de prédiction  $F_{direct}$  prend en entrée le design  $d$  et des paramètres  $p$ , elle donne en sortie la réponse spectrale  $s$ .

Dans un second temps, nous utilisons  $F_{direct}$  à l'intérieur d'une fonction d'optimisation  $F_{inv}$  pour la résolution du problème inverse. La fonction  $F_{direct}$  est appelée régulièrement pour évaluer les solutions intermédiaires du processus et les comparer à une réponse cible  $\hat{s}$ . Beaucoup de méthodes d'optimisation et de synthèse reposent sur ce même schéma. Le recours à des réseaux de neurones peut s'avérer efficace si le calcul analytique de  $F_{direct}$  est complexe ou impossible. Ainsi, nous pouvons entraîner un réseau *prédicteur* qui reproduit le comportement de  $F_{direct}$  tout en s'exécutant beaucoup plus rapidement. Le processus d'apprentissage demande beaucoup de puissance de calcul, mais effectuer une prédiction avec un réseau entraîné nécessite très peu de ressources. La performance de la résolution inverse dépend évidemment de la résolution du problème direct. Si  $F_{direct}$

livre des évaluations imprécises ou erronées, la résolution inverse ne peut pas être correcte. En conséquence, il est primordial que les prédictions de  $F_{direct}$  soient les plus justes et précises possible.

```

Initialiser les variables  $d$  et paramètres  $p$ 
Calculer la solution initiale  $s = F_{direct}(d, p)$ 
Comparer  $s$  et  $\hat{s}$ 
while  $s \neq \hat{s}$  do
  Modifier  $d$ 
   $s = F_{direct}(d, p)$ 
  Comparer  $s$  et  $\hat{s}$ 
end while

```

Tableau 3.2 Pseudo-code d'une fonction de résolution de problème inverse  $F_{inv}$ .

Les récentes études sur le design des couches minces se sont essentiellement intéressées aux propriétés spéculaires (transmission et réflexion) et non aux propriétés en diffusion. Le problème de la diffusion étant plus complexe à aborder, nous avons d'abord étudié le design sous contrainte des propriétés spéculaires avant de l'étendre à la contrainte en diffusion. Les méthodes sont identiques dans les deux cas mais un réseau entraîné pour une configuration donnée ne peut évidemment résoudre que cette configuration.

### 3.4.2. Résolution du problème direct

#### 3.4.2.1. Sans solution initiale

La résolution du problème direct est assurée par l'entraînement d'un réseau de neurones *prédicteur*. Pour rappel, le problème est le suivant : calculer la réponse spectrale  $y$  associée à une structure multicouche  $X$  donnée. Les réponses spectrales sont échantillonnées sur un intervalle et un nombre de points définis au préalable. Les autres paramètres du problème sont fixés : nombre de couches, longueurs d'onde d'échantillonnage et angle d'incidence.

Un jeu de données d'*exemples* est généré pour l'entraînement du *prédicteur*, chaque *exemple*  $(X^{(i)}, y^{(i)})$  comporte un vecteur d'entrée représentant la structure couches minces et un vecteur de sortie décrivant la réponse spectrale. Le jeu d'*exemples* est divisé en deux : 80% sont utilisés pour l'entraînement et 20% pour la validation. Les vecteurs  $X^{(i)}$  sont générés aléatoirement et les réponses spectrales respectives sont calculées numériquement. Cette résolution est sans solution initiale puisque les épaisseurs des couches varient toutes dans le même intervalle et que les fonctions optiques générées n'ont pas de forme particulière.

Le *prédicteur* est un réseau de neurones à couches entièrement connectées dont le nombre de couches et les dimensions varient selon les cas. La fonction de coût utilisée est une fonction de régression classique d'erreur quadratique moyenne *MSE*. Les données

d'entrée  $X$  sont standardisées, tandis que les étiquettes de données  $y$  sont soumises à un opérateur logarithmique :

$$y := -\log_{10}(y) \quad (3.32)$$

Les réponses spectrales sont comprises entre 0 et 1, mais leurs valeurs sont si faibles qu'il est difficile de les différencier sur une échelle linéaire. Aussi, la réponse est également extrêmement sensible aux variations légères de la structure couches minces : une variation de quelques pourcents sur quelques couches peut avoir des effets considérables sur le spectre. L'opération logarithmique linéarise les valeurs de la réponse spectrale et les rend moins sensibles aux erreurs. Dans le cas de la transmittance, les étiquettes de données  $y$  sont finalement comprises entre 0 (pour une réponse spectrale  $T = 1$ ) et quelques unités (par exemple 5 pour  $T = 10^{-5}$ ). Cette transformation de la réponse spectrale revient à raisonner en unité de densité optique et non plus en transmittance ou en réflectance.

#### 3.4.2.2. Avec solution initiale

Dans le cas d'une résolution sans solution initiale, l'apprentissage du réseau *prédicteur* utilise des *exemples* pour lesquels les valeurs des épaisseurs des couches minces varient toutes dans le même intervalle. Comme cela sera illustré dans le paragraphe 3.4.4, la variabilité des épaisseurs est limitée à quelques dizaines de nanomètres pour garantir la convergence de l'entraînement du *prédicteur*. Ainsi, les prédictions sont plutôt bonnes mais les fonctions optiques obtenues sont relativement simples et le nombre de couches des empilements étudiés est faible. Cette configuration n'est pas représentative des défis complexes auxquels fait face le design de nos jours. Les structures les plus complexes comportent plusieurs dizaines de couches et des épaisseurs variant entre quelques nanomètres et le micromètre. Il est donc nécessaire de relâcher cette double contrainte afin d'espérer développer une méthode de résolution utile et compétitive avec les outils de modélisation actuels. Nous avons opté pour une autre approche consistant à optimiser une solution initiale dans le but de contrôler sa réponse spectrale. L'apprentissage par le réseau *prédicteur* se fait non plus sur les valeurs exactes des épaisseurs de couches de la structure mais sur la variation de ces valeurs par rapport à la solution initiale. Cette approche a été utilisée au paragraphe 3.4.5 pour le contrôle de la réponse spéculaire et diffuse d'un empilement complexe.

### 3.4.3. Résolution du problème inverse

#### 3.4.3.1. Optimisation par algorithme à points intérieurs

Dans une étude sur la diffusion lumineuse des nanoparticules multicouches, Peurifoy *et al.* [61] proposent d'utiliser un réseau *prédicteur* préalablement entraîné et représenté par une fonction de prédiction notée  $h_W$ . Pour une réponse spectrale cible  $y$  choisie, un algorithme à points intérieurs minimise la différence entre la prédiction et la cible :

$$\min_x (h_W(x) - y) \quad (3.33)$$

L'optimisation converge vers une valeur  $x_{sol}$  qui décrit une structure dont la réponse spectrale est proche de la cible. Bien que rapide, l'optimisation ne converge pas toujours vers les mêmes solutions et dépend de la valeur d'initialisation. La solution proposée est ensuite calculée exactement pour s'assurer de la justesse du *prédicteur*.

Cette technique est proposée pour l'étude de la diffusion par des nanoparticules. Nous remarquons que dans le cas d'application aux propriétés spéculaires des couches minces, elle ne présente que peu d'intérêt puisqu'elle s'appuie sur un réseau *prédicteur* uniquement pour estimer rapidement une solution. Or, ceci peut tout à fait être réalisé numériquement par une fonction analytique, pour un coût en calcul raisonnable et une plus grande précision. De plus, la méthode classique *needle* est beaucoup plus performante pour le design dans ce cas puisqu'elle optimise à la fois le nombre de couches et les épaisseurs sans limitations sur les valeurs choisies.

### 3.4.3.2. Méthode du tandem

Une seconde approche a été proposée par Liu *et al* [50]. Elle nécessite aussi de disposer d'un réseau prédicteur déjà entraîné à la résolution du problème direct. Les paramètres de ce réseau sont figés et un second réseau est accolé en amont. Ce dernier, appelé *réseau tandem*, est entraîné mais seuls les paramètres de la partie en amont sont ajustés. L'entraînement utilise uniquement des réponses spectrales et consiste à reproduire une sortie identique à l'entrée. Une fois l'entraînement du *tandem* terminé, les deux sous-réseaux sont séparés. La partie en amont du *tandem* peut alors être utilisée pour la résolution du problème inverse puisqu'elle prend en entrée des réponses spectrales et estime les épaisseurs d'un empilement de couches minces en sortie. Cette configuration contourne partiellement le problème *one-to-many* car le réseau *prédicteur* se forge sa propre représentation du problème direct et le *tandem* n'est pas directement confronté à des associations *d'exemples* contradictoires. D'autre part, la remontée du gradient à travers le *tandem* permet de bénéficier de la dynamique du réseau, contrairement au cas précédent où le réseau était utilisé uniquement en propagation directe. L'entraînement du tandem demeure néanmoins complexe et les solutions obtenues par cette méthode sont malheureusement uniques.

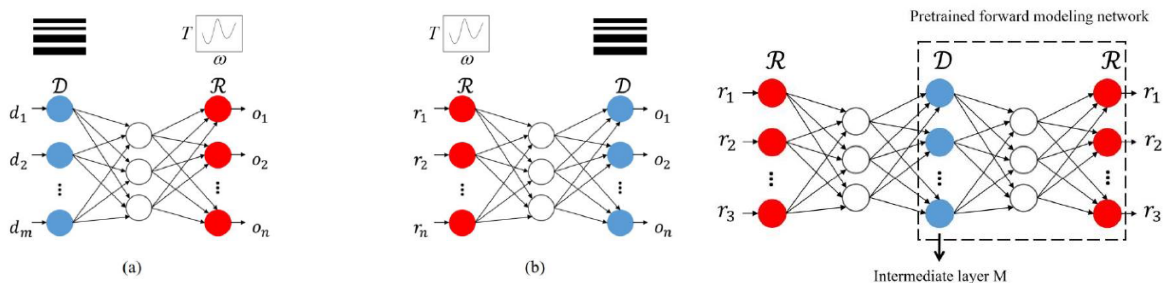


Figure 3.21 Illustration du réseau tandem. Gauche : résolution du problème direct. Centre : résolution du problème inverse. Droite : formation du réseau tandem, la partie droite est un réseau figé et pré-entraîné à résoudre le problème direct, l'entraînement ne modifie que les paramètres du sous-réseau de gauche. [50]

En complément, Qiu *et. al.* [62] proposent un réseau *tandem* qui prend en compte à la fois les épaisseurs et les indices des couches de la structure. Ce réseau lie un modèle de régression (pour les épaisseurs des couches) et un modèle de classification (pour le type de matériau utilisé). Les matériaux possibles sont encodés dans des vecteurs *one-hot* (ou 1 parmi  $n$ ). Cette représentation consiste à décrire  $p$  états dans un vecteur à  $p$  éléments dont un seul prend la valeur 1 et les autres sont à 0. Elle présente l'avantage d'identifier la nature d'un matériau et de pouvoir y associer un indice optique quelconque et même dispersif. Ainsi, si nous disposons de 4 matériaux, la représentation du second matériau en encodage *one-hot* est la suivante :

$$n_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

La fonction de coût et l'entraînement du *réseau tandem* doivent être adaptés et prendre en compte cette particularité. Le modèle obtenu est à la fois un modèle de régression, les spectres et les épaisseurs étant à valeurs continues, et de classification par l'encodage des matériaux en vecteurs *one-hot*. Les implémentations de réseaux *tandem* ne sont pas entièrement satisfaisantes puisque leurs prédictions ne sont pas améliorables facilement. Il n'y a pas de boucle de retour entre la sortie et l'entrée.

### 3.4.3.3. Méthode générative prédicteur/designer

La méthode du *réseau tandem* précédemment présentée n'est pas très satisfaisante car une fois le tandem entraîné, les prédictions sont uniques et sans possibilité de les améliorer en cours d'optimisation. En ce sens, la méthode par optimisation à points intérieurs possède une boucle de retour qui permet d'affiner au mieux la solution en fonction de sa réponse effective. Une méthode générative est présentée par Chen et Gu [60]. Elle bénéficie des avantages respectifs des deux approches précédentes. L'implémentation utilisée dans le cadre de ce travail reprend les principes énoncés par les auteurs.

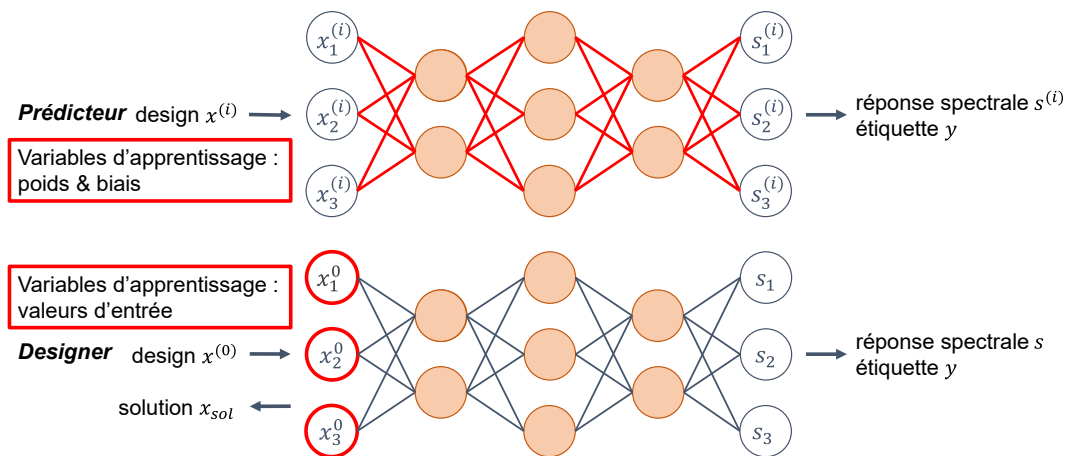


Figure 3.22 Illustration de la méthode générative prédicteur/designer

Nous utilisons un réseau *prédicteur* préalablement entraîné. Ses paramètres sont ensuite copiés et figés afin de former un réseau *designer*. L'entraînement du *designer* ne se fait que sur un unique exemple : une entrée aléatoirement générée et une réponse spectrale cible choisie en sortie. Seules les valeurs d'entrée sont modifiées lors de l'apprentissage. Ainsi, ce modèle génératif reprend le schéma d'optimisation de la méthode des points intérieurs mais en bénéficiant cette fois de la remontée du gradient par le réseau de neurones. L'optimisation de la solution se résume à l'entraînement du réseau *designer*. À l'issue d'un certain nombre d'itérations, la solution obtenue est calculée analytiquement pour vérifier la précision de la prédiction [63]. Cette technique a montré de très bons résultats dans plusieurs configurations présentées dans les parties suivantes (3.4.4 et 3.4.5.).

Dire que l'apprentissage du réseau *designer* modifie uniquement les valeurs d'entrées serait un raccourci qui occulterait quelques détails techniques que nous avons dû contourner. Toutes les implémentations proposées ont été réalisées avec le logiciel MATLAB 2020b, avec des fonctions élaborées manuellement ou en utilisant la *toolbox deep learning*. L'entraînement d'un réseau *designer*, en modifiant uniquement les valeurs d'entrée est impossible avec les fonctions de base de la *toolbox deep learning*. Le problème a été évité en ajoutant une couche cachée entre l'entrée et la première couche cachée du réseau *prédicteur*. Cette nouvelle couche compte autant d'éléments que la couche d'entrée, sa matrice des poids est une matrice identité et seul le vecteur de biais est modifié par l'entraînement. La génération du vecteur d'entrée du *designer* est faite suivant une initialisation de type Glorot (cf. 3.2.3.5) [57] qui est également l'initialisation par défaut utilisée par MATLAB. La Figure 3.23 synthétise l'implémentation de l'apprentissage sur les variables d'entrée du problème.

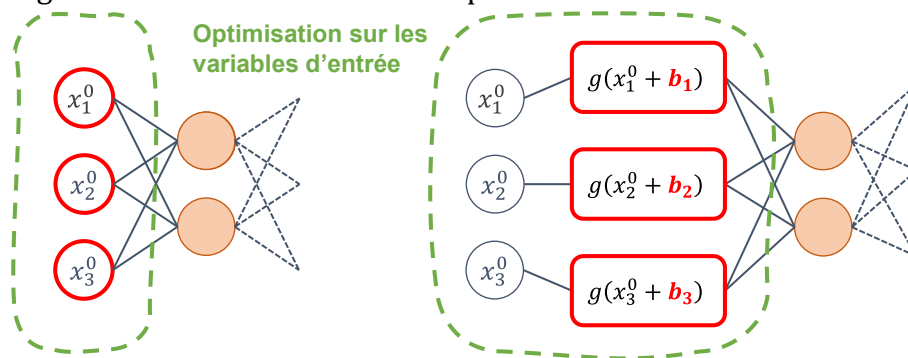


Figure 3.23 Implémentation de l'optimisation des variables d'entrées sur MATLAB, l'apprentissage modifie uniquement le vecteur de biais  $b$ .

### 3.4.4. Application : design sous contrainte de la réponse en transmission

#### 3.4.4.1. Contrôle des épaisseurs

Dans cette première implémentation nous considérons des structures de 11 couches minces optiques. Les indices optiques sont fixés, la couche supérieure en interface avec le superstrat est d'indice optique haut. Les matériaux utilisés sont d'indices 1,45 et 2,15,

déposés sur un substrat d'indice 1,5 et placés dans l'air (indice 1). Les milieux sont considérés non dispersifs et non absorbants. L'architecture du réseau *prédicteur* comporte 5 couches entièrement connectées avec respectivement 500, 500, 500, 201 et 201 neurones, séparées par des couches d'activation ReLU. Une régularisation  $\mathcal{L}_2$  avec un coefficient de 0,03 est appliquée. Un jeu de 75 000 exemples est généré pour l'entraînement du *prédicteur*. La structure est décrite par un vecteur  $X$  de 11 éléments qui correspondent respectivement aux épaisseurs des 11 couches minces optiques dont les valeurs sont comprises entre 60 et 120 nm. L'intervalle de variation des épaisseurs est volontairement restreint pour contenir la taille du problème mais correspond tout de même à des valeurs plausibles pour des filtres opérant dans le visible. À chacune de ces structures est associée une réponse spectrale échantillonnée régulièrement sur 201 points entre 400 nm et 800 nm et désignée par un vecteur  $y$ . Les valeurs de la fonction de coût obtenues à l'issue de l'entraînement (1947 *epochs*) sont les suivantes :

$J_{train}$	0,064
$J_{val}$	0,067

Tableau 3.3 Valeurs des fonctions de coût à l'issue de l'entraînement du réseau prédicteur.

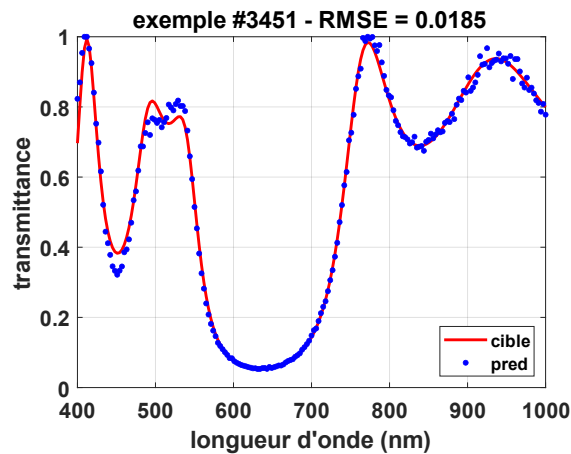


Figure 3.24 Exemples #3451 du jeu de validation, la prédiction du réseau est correcte.

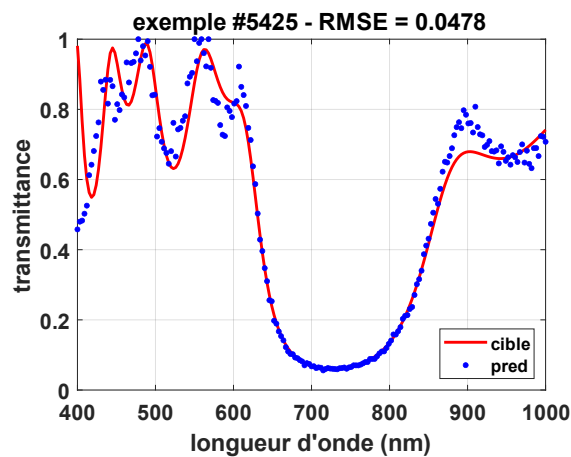


Figure 3.25 Exemple #5425 du jeu de validation, présence d'erreurs de prédiction.

Les prédictions réalisées sur des *exemples* du jeu de validation sont généralement en accord avec les étiquettes de données attendues (cf. Figure 3.24). Toutefois, des désaccords apparaissent parfois, notamment lorsque les variations spectrales sont très rapides (cf. Figure 3.25). La nature des empilements et les épaisseurs utilisées génèrent principalement des structures ressemblant à des miroirs dans le spectre visible, ce qui explique la présence d'un creux dans les transmittances observées.

Une fois le *prédicteur* entraîné, nous utilisons la méthode des points intérieurs pour minimiser la différence entre une réponse spectrale cible et les prédictions du réseau. La structure couches minces minimisant cette différence constitue la solution de notre problème. Les réponses spectrales cibles sont tirées parmi les exemples du jeu de validation. L'optimisation converge parfois vers des *optima* locaux, une nouvelle exécution permet généralement de converger vers une solution plus satisfaisante.

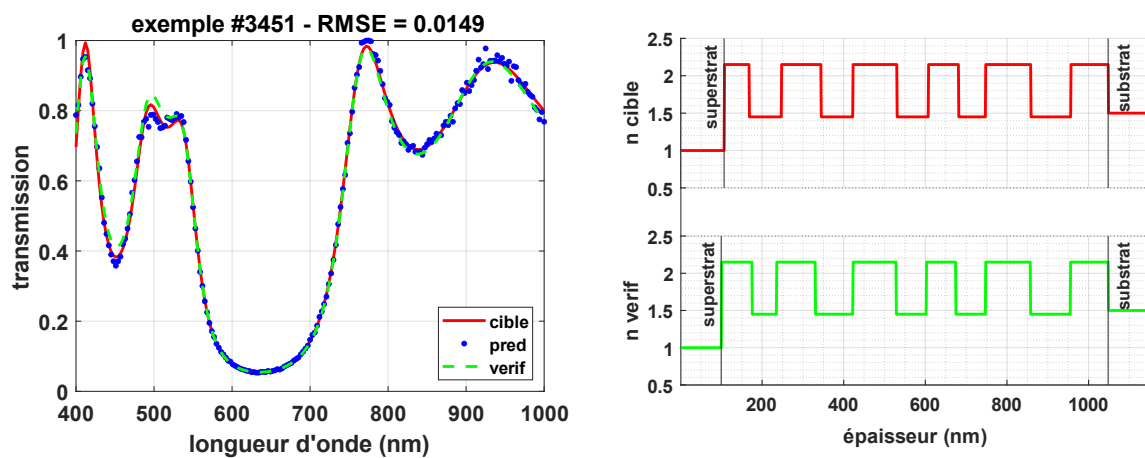


Figure 3.26 Résolution du problème inverse par optimisation à points intérieurs sur l'exemple #3451. Comparaison de la réponse cible, de la prédiction de la solution par le prédicteur et de la réponse vérifiée par calcul analytique exact.

La Figure 3.26 présente le résultat d'une résolution de problème inverse sur un exemple du jeu de validation. La courbe rouge est la réponse spectrale cible pour laquelle le programme doit proposer un empilement. Les points bleus représentent la prédiction de la solution finale donnée par le réseau *prédicteur*. La courbe verte est une donnée de vérification, elle présente la réponse spectrale de la solution finale calculée par une méthode exacte. La comparaison des points bleus et de la courbe verte montre que l'estimation fournie par le réseau de neurones est en accord avec la réponse exacte. La comparaison entre la courbe verte et la courbe rouge met en valeur la qualité de la résolution du problème inverse. Plus ces deux courbes sont proches, plus la solution proposée est en accord avec la contrainte.

Dans un second temps, des contraintes sont introduites manuellement. Pour faciliter la résolution et assurer la pertinence des solutions du problème inverse, il est préférable que les contraintes aient elles aussi une forme de miroir, c'est-à-dire qu'elles présentent un creux dans la transmission comme illustré Figure 3.27.



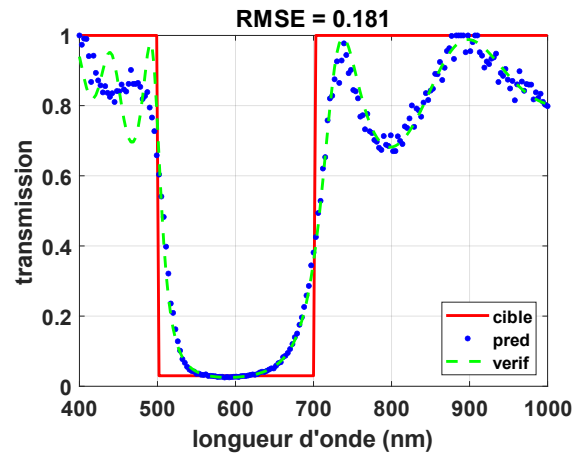


Figure 3.27 Résolution du problème inverse par optimisation à points intérieurs avec une contrainte imposée manuellement.

Des tentatives d'utilisation de contraintes différentes (filtre passe-haut, passe-bas ou passe-bande) sont infructueuses puisque le réseau *prédicteur* n'a jamais rencontré ces cas lors de son apprentissage. Il ne pourra donc pas être utilisé correctement pour résoudre ce type de problème.

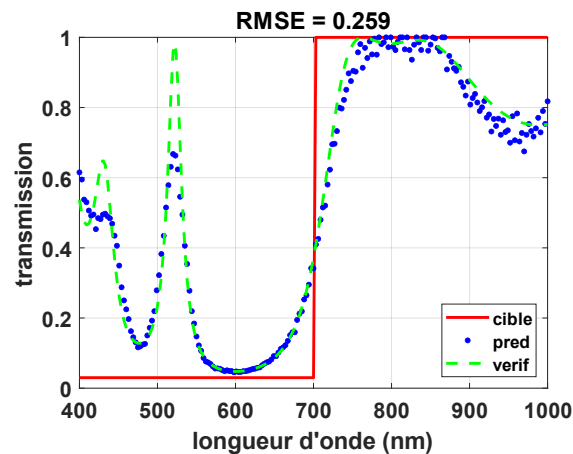


Figure 3.28 Résolution non satisfaisante du problème inverse par optimisation à points intérieurs avec une contrainte imposée manuellement : un filtre passe-haut.

Ce dernier cas illustre bien la difficulté de mettre au point une méthode robuste pour le design de couches minces, puisqu'il faut disposer de fonctions optiques très variées pour l'entraînement du réseau *prédicteur*. Mais cela implique de relâcher la contrainte sur la variabilité des épaisseurs des couches minces. En d'autres termes, il faudrait entraîner le réseau sur des exemples dans lesquels les épaisseurs varient entre quelques dizaines et plusieurs centaines de nanomètres. Nos tentatives d'apprentissage dans ces conditions n'ont pas été concluantes. Les erreurs commises par le réseau sont croissantes avec la taille de la variabilité des épaisseurs. Les implémentations présentées dans la littérature témoignent également de l'importante complexité pour s'affranchir de ce problème. En effet, la réponse spectrale est extrêmement sensible aux épaisseurs des couches minces : une erreur de quelques pourcents sur les épaisseurs peut conduire à un spectre tout à fait différent

### 3.4.4.2. Contrôle des épaisseurs et des indices optiques

L'ajustement des épaisseurs est certainement l'opération la plus critique dans la synthèse d'un empilement. Toutefois, dans le cas précédent, les indices optiques et leur alternance étaient fixés et identiques pour tous les exemples, ce qui est quelque peu limitant. Une seconde implémentation prend maintenant en compte à la fois les épaisseurs de la structure mais aussi les indices optiques. Ces derniers sont toujours alternés mais cette fois-ci la première couche peut posséder l'un des deux indices (haut ou bas) puis les indices suivants respectent l'alternance. Une troisième grandeur est aussi considérée : le produit entre l'épaisseur d'une couche et son indice optique. Les réseaux de neurones ne connaissent aucune notion de physique mais puisque cette grandeur est importante dans le calcul analytique, il paraît intéressant de la soumettre au réseau [64]. Pour une structure à  $N$  couches le vecteur  $X^{(i)}$  est le suivant :

$$X^{(i)} = \begin{pmatrix} e_1 \\ \dots \\ e_N \\ n_1 \\ \dots \\ n_N \\ e_1 * n_1 \\ \dots \\ e_N * n_N \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

avec  $e_i$  l'épaisseur de la couche  $i$ ,  $n_i$  l'indice de la couche  $i$  et  $e_i * n_i$  le produit des deux.

#### (a) Empilement de 11 couches minces

Reprenons la configuration du paragraphe précédent (3.4.4.1). Les empilements comptent 11 couches minces et les vecteurs d'entrée possèdent maintenant 33 éléments. L'architecture du réseau *prédicteur* est identique, l'apprentissage est mené sur 1580 *epochs* et le jeu de données compte 25 000 *exemples*.

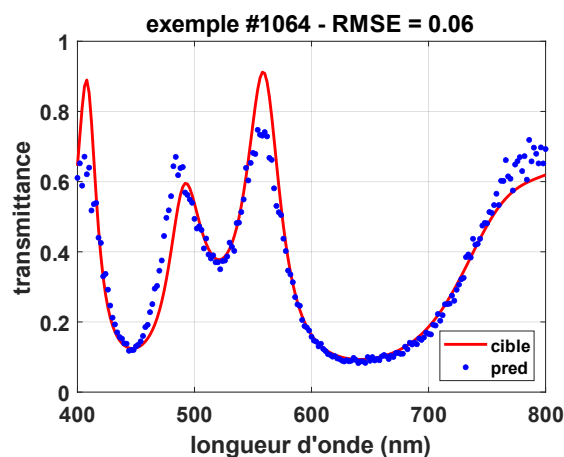


Figure 3.29 Exemple #1064 du jeu de validation. Comparaison de la réponse cible et de la prédiction.

Par comparaison avec le cas précédent, les performances ne sont pas sensiblement améliorées et sont même un peu moins bonnes. Rappelons tout de même que cette fois-

ci, l'alternance des indices optiques est différente : les fonctions optiques obtenues sont un peu plus variées.

$J_{train}$	0,092
$J_{val}$	0,111

Tableau 3.4 Valeurs des fonctions de coût à l'issue de l'entraînement du réseau prédicteur pour le contrôle des épaisseurs.

### (b) Empilement de 16 couches minces

Passons maintenant à un empilement de 16 couches minces. Les vecteurs d'entrée comptent désormais 48 éléments. Les couches cachées du réseau comportent 750, 1000, 750, 500 et 201 neurones. De même, une régularisation  $\mathcal{L}_2$  avec un coefficient de 0,03 est appliquée. Le jeu de données compte 50 000 *exemples*. Les valeurs des fonctions de coût obtenues sont plus élevées que dans le cas des 11 couches minces :

$J_{train}$	0,557
$J_{val}$	0,615

Tableau 3.5 Valeurs des fonctions de coûts à l'issue de l'entraînement du réseau prédicteur pour contrôler épaisseurs et indices.

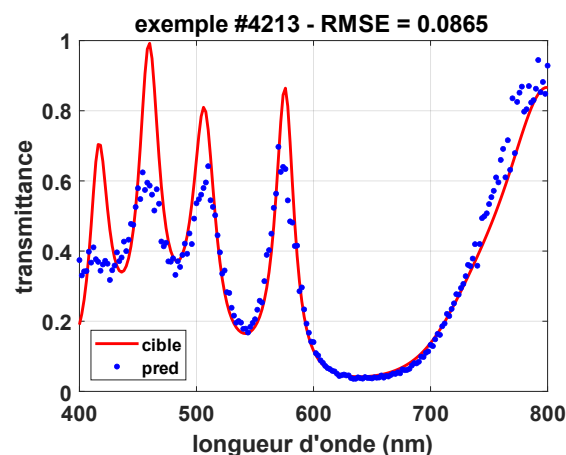


Figure 3.30 Réponse spectrale estimée par le réseau de neurones pour des exemples du jeu de validation.

Les estimations fournies par le réseau sont moins fidèles à la réponse attendue, comme l'illustre la Figure 3.30. Cela montre encore une fois la difficulté d'entraîner un réseau pour résoudre un problème direct complexe. Bien que la structure de l'empilement soit relativement simple, l'augmentation du nombre de couches s'accompagne d'une complexité grandissante de la réponse optique. Les fonctions synthétisées sont difficiles à prédire par le modèle, avec par exemple, des pics spectraux étroits et plus nombreux que dans le cas des 11 couches minces.

La résolution du problème inverse ne sera pas développée pour ces deux derniers cas. Comme évoqué plus haut, cela impliquerait de lier régression et classification dans un

modèle d'apprentissage plus complexe comme cela a déjà été proposé dans la littérature [62]. De plus, les faibles résultats obtenus uniquement pour le réseau *prédicteur* ne sont pas assez prometteurs pour relever le défi de synthétiser des fonctions optiques sans solution initiale. Nous nous limitons à présenter les entraînements des réseaux *prédicteurs*.

### 3.4.5. Application : design sous contrainte de la réponse transmise diffuse

#### 3.4.5.1. Introduction au contrôle de la transmission diffuse

Appliquons maintenant les techniques présentées précédemment au cas de la transmission diffuse. Le problème à résoudre est sensiblement identique au cas spéculaire mis à part que la réponse spectrale utilisée est maintenant la fonction *TIS* (*Total Integrated Scattering*) en transmission (cf. 3.1.1). La détermination numérique de cette propriété utilise le modèle électromagnétique développé par l'équipe CONCEPT de l'Institut Fresnel [12] et présenté au Chapitre 1. Ce modèle a été utilisé pour générer numériquement les réponses spectrales diffuses utilisées pour l'entraînement des réseaux de neurones.

Les résultats présentés ici sont plus aboutis que ceux obtenus dans le cas du contrôle simple de la réponse spéculaire. La finalité de ce travail étant de proposer un contrôle de la réponse diffuse, cette partie a été plus profondément étudiée. L'architecture des réseaux *prédicteurs* est identique mais leur implémentation et leur apprentissage ont été largement améliorés par l'utilisation des fonctions avancées de la *toolbox deep learning* du logiciel MATLAB 2020b.

#### 3.4.5.2. Contrôle des épaisseurs

Nous étudions dans ce premier cas la réponse diffuse d'empilements de 20 couches minces dont seules les épaisseurs varient, entre 60 nm et 120 nm [63]. Les autres paramètres du problème sont fixés : alternance des indices optiques dispersifs, angle d'incidence à 5°, éclairage non polarisé et intégration de la réponse diffuse dans tout le demi-espace transmis (de 0 à 90°). La réponse spectrale diffuse est échantillonnée sur 201 points entre 400 nm et 800 nm avec un pas de 2 nm. Ici encore, les réponses spectrales sont soumises à un opérateur logarithmique  $y := -\log_{10}(y)$ . Le jeu de données est constitué de 50 000 *exemples*, les empilements sont générés aléatoirement par échantillonnage d'une loi uniforme sur l'intervalle [60 nm ; 120 nm]. La couche supérieure, en interface avec le superstrat, est toujours d'indice optique bas. Les deux matériaux utilisés sont le Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (indice optique haut) et le SiO<sub>2</sub> (indice optique bas). La dispersion des indices est prise en compte dans le calcul. Les réponses spectrales respectives sont calculées numériquement par un calcul parallélisé sur un processeur à 24 cœurs. Le calcul complet dure environ 4 heures. Comme évoqué au paragraphe 1.6, le calcul numérique de la réponse diffuse implique un nombre d'opérations beaucoup plus important que la détermination de la réponse spéculaire. La génération des exemples est ainsi plus longue, d'où l'utilité de distribuer l'opération sur plusieurs cœurs de calcul.

Le réseau *prédicteur* possède 5 couches entièrement connectées avec respectivement 500, 500, 500, 201 et 201 unités. Une régularisation  $\mathcal{L}_2$  est appliquée, avec un coefficient de 0,003. Un entraînement de 128 *epochs* avec des *mini-batches* de 256 éléments et la fonction d'optimisation Adam, est réalisé pendant environ 40 minutes. Les valeurs de la fonction de coût à la fin de l'apprentissage sont données au Tableau 3.6. Les prédictions faites par le *prédicteur* entraîné montrent un bon accord avec les valeurs cibles, comme illustré dans la Figure 3.31.

$J_{train}$	0,401
$J_{val}$	0,589

Tableau 3.6 Valeurs des fonctions de coût à l'issue de l'entraînement du réseau *prédicteur* pour le contrôle des épaisseurs en lumière diffuse.

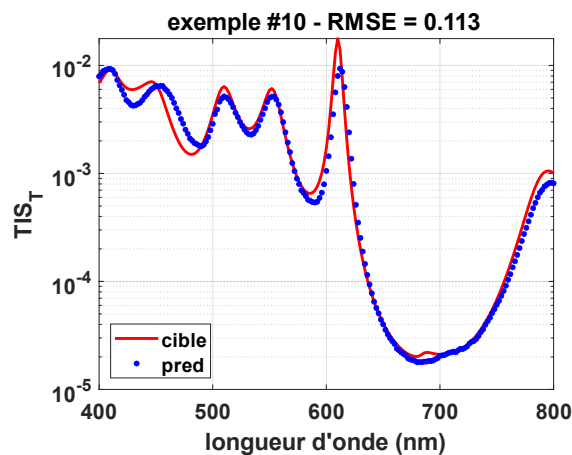


Figure 3.31 Prédiction du réseau *prédicteur* entraîné, sur l'exemple #10 du jeu de validation.

Une fois cette étape réalisée, nous pouvons constituer le réseau *designer* pour synthétiser des empilements couches minces. Rappelons qu'il est une copie du *prédicteur*, dont les poids et biais des couches cachées sont fixés, seules les données d'entrée sont modifiées lors de l'entraînement. Nous reprenons le même exemple du jeu de données de validation (exemple#10) pour le design. L'entraînement du *designer* converge à chaque fois vers une solution dont l'erreur vis-à-vis de la valeur cible est minimisée. Toutefois, une vérification par un calcul exact s'impose et montre généralement un léger décalage avec la réponse spectrale. Le *designer* croit fournir une réponse spectrale adaptée à la cible mais en réalité sa prédiction est parfois entachée d'une faible erreur constante sur tout le spectre. Celle-ci pourrait être corrigée par un entraînement approfondi du *prédicteur* et par conséquent du *designer*. Dans les faits, ce décalage spectral se corrige aisément en multipliant toutes les épaisseurs de la solution  $x_{sol}$  par un coefficient constant de correction  $\alpha_{corr}$  proche de 1. Le choix de  $\alpha_{corr}$  pourrait faire l'objet d'une optimisation numérique mais un ajustement manuel est suffisant. En résumé, la démarche d'optimisation par le *designer* est la suivante :

1. Choisir une réponse spectrale cible  $y_{cible}$  et initialiser aléatoirement le vecteur d'entrée  $x_0$  par une initialisation de type Glorot ;

2. Entraîner le *designer* sur ce seul exemple  $(x_0, y_{cible})$ , obtenir  $x_{sol}$  une solution du problème inverse, c'est-à-dire un empilement de couches minces qui possède une réponse spectrale proche de la réponse cible ;
3. Vérifier la réponse spectrale exacte *verif* associée à la solution  $x_{sol}$  par un calcul analytique ;
4. Corriger l'éventuel décalage spectral de *verif* par rapport à  $y_{cible}$ , en multipliant  $x_{sol}$  par un coefficient de correction constant  $\alpha_{corr}$  proche de 1. La grandeur  $x_{sol}\alpha_{corr}$  est solution du problème inverse.

Les courbes présentées Figure 3.32 à Figure 3.35 illustrent ce processus.

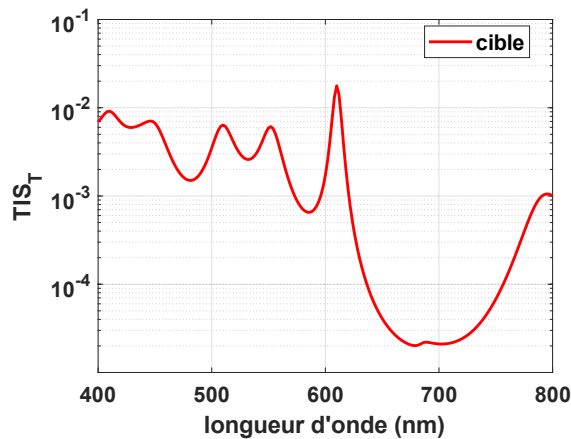


Figure 3.32 Réponse spectrale cible choisie pour l'entraînement du designer (exemple #10).

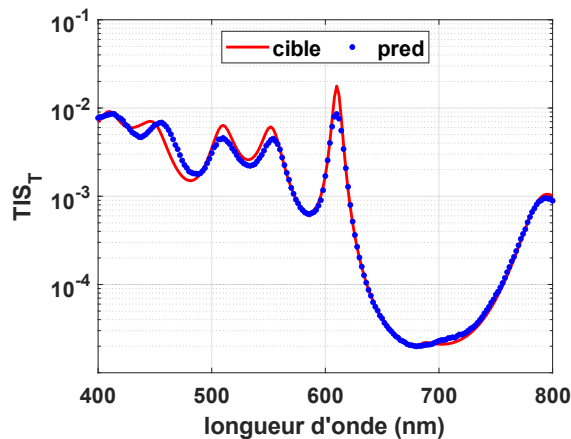


Figure 3.33 Entraînement du designer et prédiction de la réponse spectrale de  $x_{sol}$ .

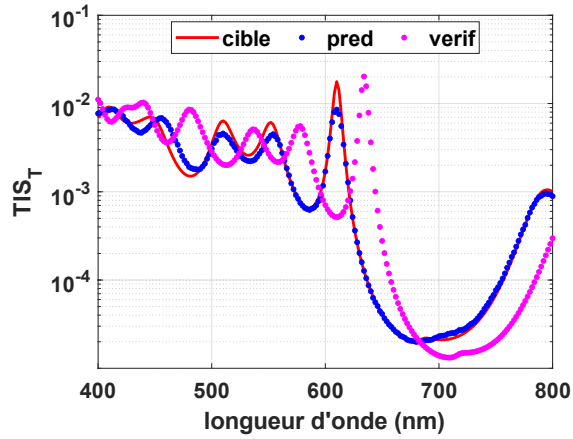


Figure 3.34 Vérification de la solution par un calcul exact. Un décalage spectral constant apparaît entre la cible et la vérification.

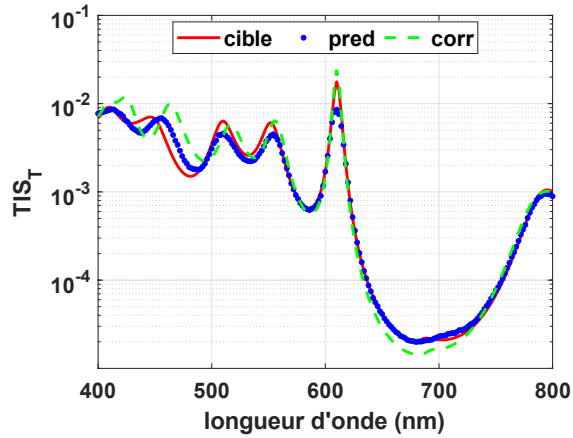


Figure 3.35 Correction du décalage spectral par ajustement d'un facteur constant  $\alpha_{corr}=0,96$ . L'accord entre la réponse corrigée et la cible est excellent.

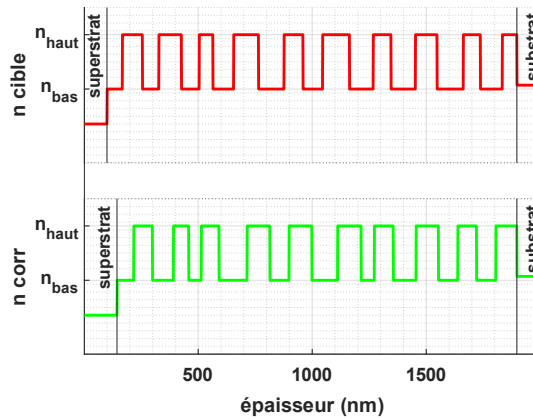


Figure 3.36 Profils des indices dans l'empilement multicouches cible et corrigé.

Sur l'exemple utilisé en Figure 3.35, la valeur de correction est  $\alpha_{corr} = 0,96$ , ce qui signifie que le *designer* a commis une erreur constante de 4% dans l'évaluation de la réponse spectrale de sa solution finale et donc sur les valeurs des épaisseurs des 20 couches constitutives de la solution du problème  $x_{sol}$ .

Cette première implémentation de synthèse *ex nihilo* sous contrôle de la réponse diffuse montre des résultats prometteurs. Mais une fois de plus, les paramètres et variables du problème sont fortement contraints. Dans ces conditions (peu de couches et faible variabilité des épaisseurs), il n'est pas envisageable de synthétiser des fonctions optiques complexes. De plus, nous n'avons pas considéré dans ce cas précis la réponse spéculaire qui reste la propriété principale à contrôler lors du design. Enfin, les propriétés de diffusion des filtres interférentiels sont exaltées et plus facilement contrôlables pour des empilements complexes (avec plusieurs dizaines de couches). Dans le cas d'empilements simples, les réponses en diffusion ressemblent généralement fortement aux réponses spéculaires. Une seconde implémentation est proposée dans le paragraphe suivant (3.4.5.3) : elle surmonte certaines des limitations exposées et s'attaque à la résolution de problèmes représentatifs des défis actuels posés par le design des couches minces optiques en utilisant une solution initiale.

### 3.4.5.3. Contrôle à partir d'une solution initiale

Pour contourner quelques limitations exposées dans le paragraphe précédent, nous considérons maintenant une structure Fabry-Perot de 60 couches comportant 6 cavités [63]. Le modèle de cavité Fabry-Perot est assez répandu car il est à la base de la grande majorité des filtres passe-bande. Cette structure est considérée comme complexe : les épaisseurs des 60 couches varient entre une centaine de nanomètres et plus d'un micron, les niveaux de transmission dans les bandes de réjection sont très faibles ( $< 10^{-6}$ ) et les pentes de bords de bandes sont raides. La comparaison des niveaux de transmission et de diffusion en Figure 3.37 montre que la diffusion est toujours inférieure et négligeable devant la transmission, sauf dans les deux bandes de réjection. Pour ces longueurs d'onde, la diffusion est plus importante de plusieurs décades, ce qui peut sévèrement affecter les performances du filtre en conditions d'utilisation réelles.

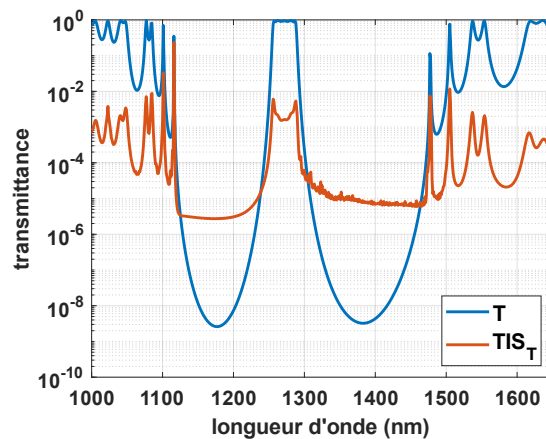


Figure 3.37 Réponses spéculaire et diffuse en transmission du filtre Fabry-Perot.



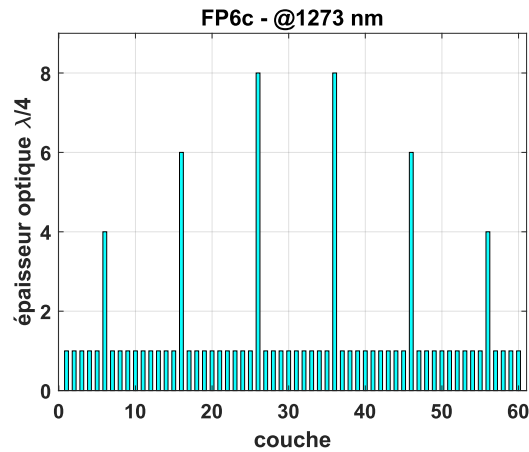


Figure 3.38 Épaisseur optique quart d'onde à 1273 nm, les épaisseurs quart d'onde constituent des miroirs de Bragg et les épaisseurs multiples de  $\lambda/4$  sont les cavités Fabry-Perot.

L'objectif fixé est de diminuer la réponse diffuse transmise dans les deux bandes de réjection à un niveau de  $10^{-6}$ . L'empilement de couches minces présenté à la Figure 3.37 sera appelé *solution initiale* car cette structure va être modifiée pour contrôler sa réponse diffuse. Ses épaisseurs optiques quart d'onde sont présentées en Figure 3.38.

Le contrôle de la diffusion impacte nécessairement la réponse spéculaire puisque ces deux grandeurs sont intrinsèquement liées. Une simple optimisation de la réponse diffuse ne suffit plus et nous prenons en compte également la réponse transmise spéculaire dans la bande passante de façon à conserver la fonction optique principale du composant. La méthode et la démarche employées sont les mêmes qu'au paragraphe précédent (3.4.5.2). Toutefois, l'optimisation ne porte plus sur les valeurs absolues des épaisseurs mais sur des variations par rapport à la *solution initiale*.

Un jeu de données de 75 000 *exemples* est généré numériquement : chaque exemple présente un vecteur de variation d'épaisseur  $X$  et une réponse spectrale associée  $y$ . Les vecteurs de variation d'épaisseur  $X$  comptent 60 éléments dont les valeurs sont comprises entre  $-25$  nm et  $+25$  nm. Elles représentent les variations respectives de chaque couche de l'empilement. Les réponses spectrales  $y$  sont la concaténation de la réponse diffuse transmise et de la réponse spéculaire transmise. La réponse diffuse est échantillonnée sur 182 points, entre 1116 nm et 1478 nm par pas de 2 nm : cette bande spectrale englobe les deux bandes de réjection et la bande passante. La réponse spéculaire transmise est échantillonnée sur 161 points, entre 1256 nm et 1288 nm, par pas de 0,2 nm : cette bande spectrale comporte uniquement la partie de la bande passante supérieure à 0,9. La constitution de ce vecteur  $y$  garantit la prise en compte des deux réponses d'intérêt (diffuse et spéculaire), de manière assez équitable et surtout sur les bandes spectrales d'intérêt. La génération des 75 000 *exemples* est distribuée sur un processeur à 24 cœurs et dure environ 18 heures. Le jeu de données est divisé entre un jeu d'entraînement (80%) et un jeu de validation (20%).

Un réseau *prédicteur* est entraîné à prédire les réponses spectrales des empilements modifiés. L'apprentissage est réalisé pour 128 *epochs* pendant environ 40 minutes. L'architecture du réseau compte 6 couches cachées entièrement connectées avec respectivement 750, 750, 750, 500, 500 et 343 neurones chacune. Des couches d'activation leakyReLU (coefficient 0,01) séparent toutes les couches. La fonction de coût est une fonction d'erreur quadratique moyenne (*MSE*). Une régularisation  $\mathcal{L}_2$  de coefficient 0,003 est appliquée, les *exemples* sont répartis en *mini-batches* de 256 éléments et la fonction d'optimisation choisie est Adam. Les données d'entrée  $X$  sont standardisées et les valeurs de sortie  $y$  sont soumises à l'opérateur logarithmique  $-\log_{10}(y)$ . Les valeurs des fonctions de coût mesurées à la fin de l'entraînement sont présentées au Tableau 3.7.

$J_{train}$	3,47
$J_{val}$	3,59

Tableau 3.7 Valeurs des fonctions de coût à l'issue de l'entraînement du réseau *prédicteur*.

Une fois l'apprentissage du *prédicteur* terminé, nous pouvons passer à l'entraînement du *designer* sur un seul *exemple*. La contrainte formulée est d'abaisser les niveaux de diffusion à  $10^{-6}$  dans les deux bandes de réjection de la réponse diffuse, tout en conservant un niveau de transmission maximal dans la bande passante de la réponse transmise. Pour exprimer cette contrainte, nous utilisons la *solution initiale* et la transformons par les opérations suivantes : le niveau de diffusion dans la bande de réjection *gauche* [1120 ; 1225 nm] est divisé par 10 (diminution d'une décade) et par 15 (diminution d'une décade et demie) dans la bande de réjection *droite* [1300 ; 1470 nm], le niveau de transmission dans la bande passante est le même que celui de la *solution initiale*.

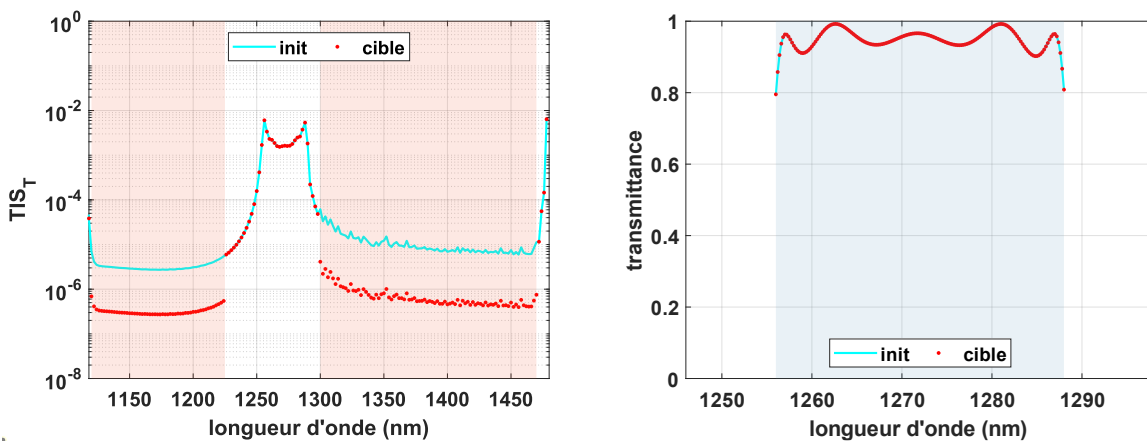


Figure 3.39 Solution initiale et réponse cible en diffusion et en transmission. Les plages spectrales d'optimisation sont repérées respectivement par les couleurs orange et bleue.

L'entraînement du *designer* est réalisé sur 4096 *epochs* et la solution obtenue est vérifiée par un calcul analytique exact illustré en Figure 3.40. Ici encore, un décalage spectral est observé puis corrigé par un coefficient correcteur  $\alpha_{corr} = 0.9925$ , soit une erreur de 0,75% en décalage spectral.

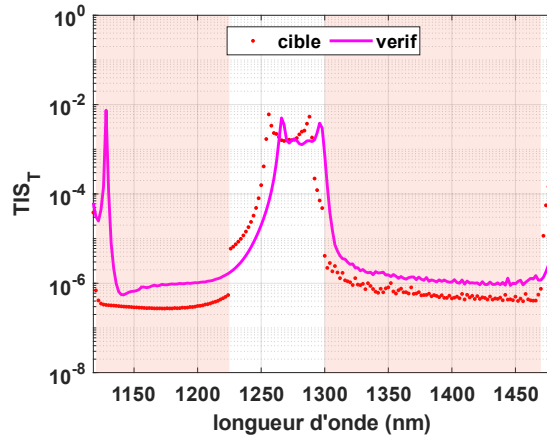


Figure 3.40 Décalage spectral observé entre la cible et la réponse vérifiée verif.

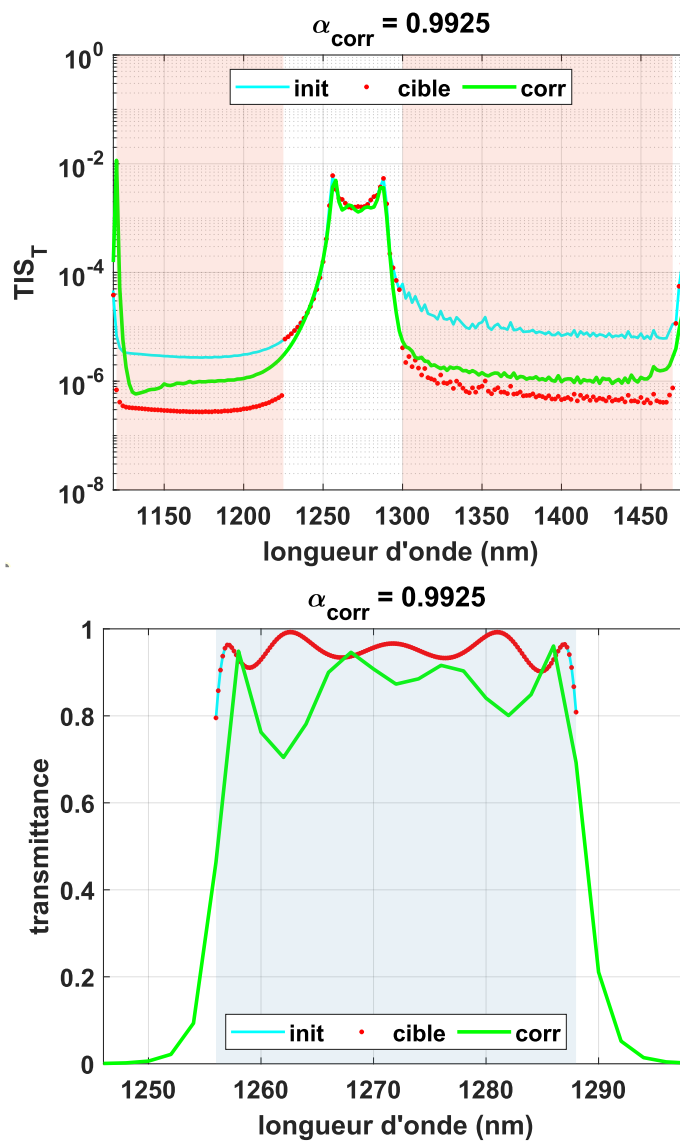


Figure 3.41 La solution corrigée corr présente bien une diminution de la diffusion jusqu'à  $10^{-6}$  dans les deux bandes de réjection (haut). La réponse spéculaire (bas) montre de légères oscillations dans la bande passante mais reste à des niveaux supérieurs à 0,7.

La solution finale corrigée, que l'on appellera *solution corrigée*, en Figure 3.41 présente un abaissement de la diffusion à  $10^{-6}$  dans les deux bandes de réjection. De légères oscillations apparaissent dans la transmission de la bande passante mais le niveau reste tout de même au-dessus de 0,7. Le compromis atteint est équilibré entre un contrôle strict de la diffusion et une transmission relativement haute dans la bande passante.

Il est également intéressant de remarquer que le réseau *designer* ne commet pas seulement une erreur de décalage spectral mais également une erreur sur les niveaux de diffusion des solutions intermédiaires ou finales. Toutefois, la *solution corrigée* satisfait la contrainte initiale de diminuer la diffusion à  $10^{-6}$  dans les bandes de réjection en conservant une transmission la plus haute possible. Rappelons que les propriétés spéculaires et diffuses sont intimement liées et qu'il est difficilement concevable de contrôler l'une indépendamment de l'autre.

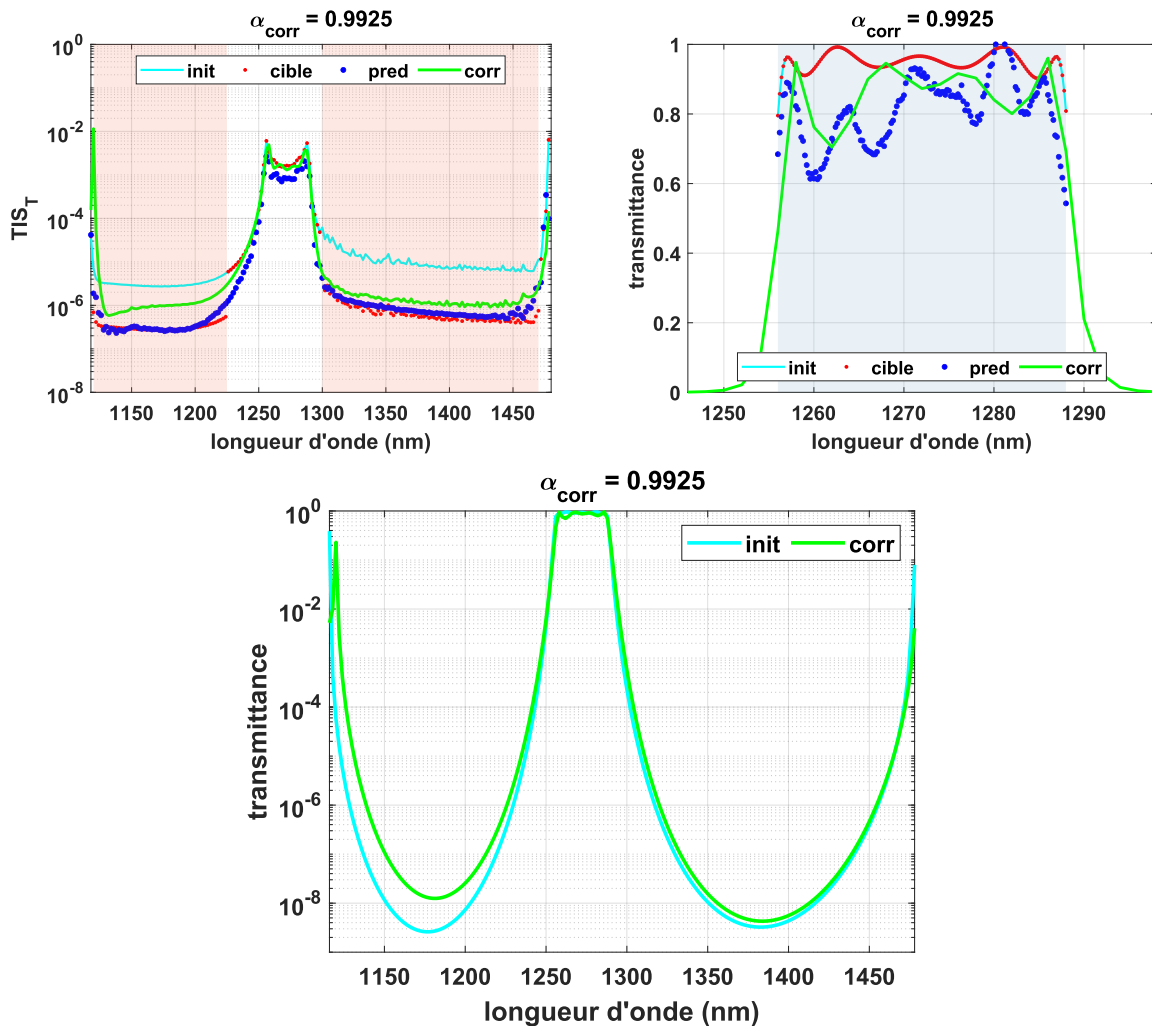


Figure 3.42 La prédiction *pred* du designer est légèrement différente de la solution corrigée *verif*. La transmittance de la solution *corr* possède des niveaux de réjection de l'ordre de  $10^{-8}$ .

Nous vérifions dans un dernier temps en Figure 3.42 que la réponse spectrale spéculaire dans les deux bandes de réjection est toujours conforme à un filtre Fabry-Perot sélectif. Le diagramme des épaisseurs quart d'onde en Figure 3.43 montre que la structure

générale des cavités Fabry-Perot est conservée, ce qui était prévisible puisque les épaisseurs de chaque couche n'ont pas beaucoup varié. En revanche, la régularité des épaisseurs quart d'onde n'est pas entretenue : le modèle d'optimisation converge plutôt vers des solutions désordonnées qui ne sont pas utilisées habituellement.

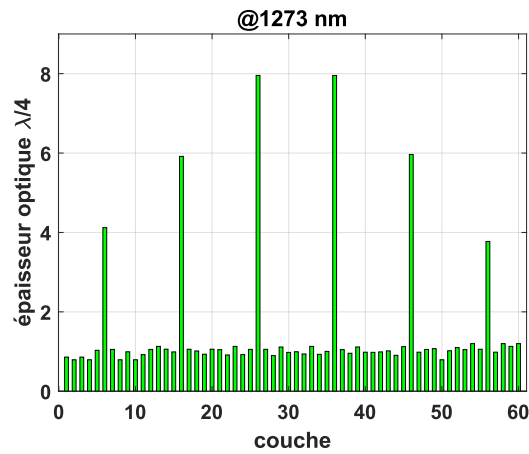


Figure 3.43 Épaisseur optique quart d'onde de la solution corrigée.

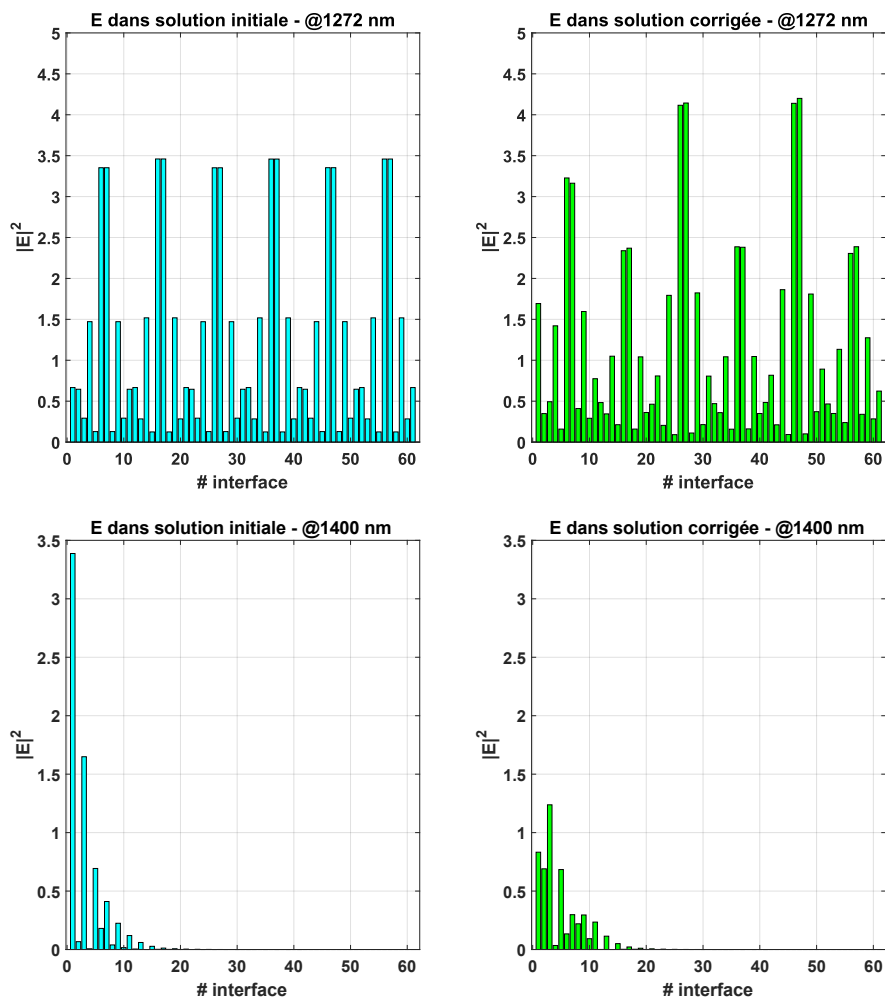


Figure 3.44 Champ électrique aux interfaces dans la solution initiale et la solution corrigée, à 1272 nm (haut) et 1400 nm (bas).

Le modèle de la diffusion présenté au Chapitre 1 met en évidence un lien de causalité entre l'intensité du champ électrique aux interfaces et la diffusion. En d'autres termes, la présence d'un champ fort à une interface donnée exalte d'autant plus la diffusion. Il est donc intéressant de comparer pour différentes longueurs d'onde l'intensité de ce champ dans l'empilement, tel qu'illustré en Figure 3.44. Dans la bande passante (à 1272 nm), le champ électrique traverse le composant et présente une régularité qui rappelle celle observée pour les épaisseurs des couches. D'une certaine manière, la *solution corrigée* conserve cette régularité. L'intensité des champs est semblable dans les deux cas, ce qui se vérifie également dans les niveaux de diffusion. Cependant, à 1400 nm dans la bande de réjection *droite* du composant, l'intensité du champ électrique aux interfaces est plus faible pour la *solution corrigée* que pour la *solution initiale*. Cela est aussi confirmé par la baisse de la diffusion autour de la longueur d'onde 1400 nm pour la *solution corrigée*.

Enfin, nous mentionnerons des tentatives de *refinement* de la *solution corrigée* à l'aide du logiciel de *design* de couches minces optiques Optilayer. L'objectif est d'essayer de corriger les oscillations dans la réponse spéculaire en transmission par une modification légère de la structure de l'empilement (modification des épaisseurs et ajout ou retrait de couches). Les oscillations dans la bande passante sont généralement associées à un désaccord des cavités résonnantes du Fabry-Perot. Ces tentatives sont restées vaines puisque la solution n'est pas « conventionnelle », les méthodes de *refinement* classiques n'ont rien donné.

L'optimisation d'un empilement complexe présentée ici montre bien la possibilité de contrôler la réponse diffuse d'un composant dans une certaine mesure. La réponse spéculaire étant la propriété d'intérêt principal d'un multicouche, le choix de l'optimisation locale s'avère intéressant et le compromis entre contrôle de la réponse diffuse et maintien d'une réponse spéculaire satisfaisante est globalement atteint. Cette implémentation est un premier pas vers un contrôle généralisé des propriétés diffuses des structures couches minces. Nous nous sommes limités à une seule fonction de filtrage et les investigations doivent être poursuivies pour mieux comprendre le contrôle de la diffusion. Enfin, ces optimisations ne sont pour le moment que des simulations numériques, la fabrication de ces composants devra aussi être étudiée à l'avenir pour garantir la faisabilité de ces solutions.

### **3.4.6. Application : ajustement du design avec des données expérimentales**

Malgré la qualité des processus de dépôt de couches minces et la fiabilité du contrôle des épaisseurs, de légers défauts de fabrication peuvent persister. Ces écarts portent surtout sur les épaisseurs des couches et génèrent des variations dans la réponse spectrale. Ces variations s'observent par exemple sur la mesure expérimentale de la transmission spéculaire du filtre F2 présentée au paragraphe 2.4.3 et illustrée en Figure 3.45.

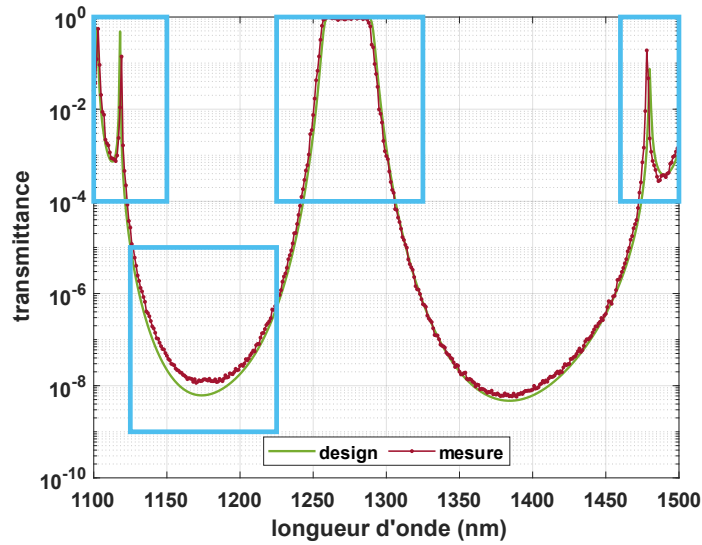


Figure 3.45 Comparaison du design et de la mesure du filtre F2 entre 1100 et 1500 nm. Identification de disparités qui indiquent de légères variations dans la fabrication.

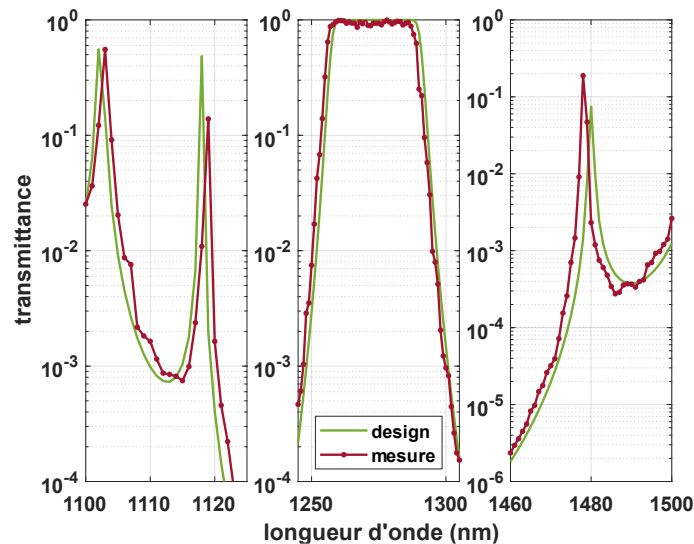


Figure 3.46 Détail de la comparaison sur trois zones identifiées sur la Figure 3.45.

En comparant la transmittance mesurée autour de la bande passante avec le design, nous observons un décalage spectral de l'ordre d'un nanomètre. Les pics spectraux en bords de bande de réjection à 1118 nm et 1480 nm sont également décalés d'environ 1 nm. Enfin, la bande de réjection entre 1118 nm et 1260 nm est plus profonde sur le design que sur la mesure. Ces légères écarts entre le modèle et la mesure sont présentés en Figure 3.45 et Figure 3.46.

Nous proposons d'utiliser le modèle de design *prédicteur/designer* pour compenser les écarts entre design et mesure, et identifier une structure corrigée dans une démarche de rétro-ingénierie. Un jeu de données d'entraînement de 80 000 exemples est généré en faisant varier aléatoirement les épaisseurs de chacune des couches d'une valeur comprise

entre  $-15$  nm et  $+15$  nm. La réponse spectrale est échantillonnée sur 401 points entre 1100 et 1500 nm, sur le domaine d'intérêt du filtre.

Le réseau *prédicteur* est entraîné sur 128 *epochs* pour déterminer la réponse spectrale d'une structure donnée. Il possède la même architecture que celui utilisé pour le contrôle de la diffusion du filtre passe-bande Fabry-Perot (paragraphe 3.4.5.3).

Le réseau *designer* est lui aussi identique au cas précédent, la réponse spectrale cible utilisée correspond aux points de mesure expérimentaux. La solution obtenue à l'issue de cet ajustement des épaisseurs est légèrement décalée avec le design initial, elle est nommée *opt1*. L'accord avec la mesure n'est pas parfait. Cette différence provient à la fois du processus d'optimisation mais aussi des données expérimentales qui présentent une légère incertitude. De plus, le programme modifie toutes les couches minces en même temps alors qu'une connaissance fine du problème et des techniques de rétro-ingénierie devrait permettre de cibler les paramètres à modifier.

Cette démarche de rétro-ingénierie est généralement développée grâce à un logiciel de synthèse de composants couches minces optiques, tel que OptiLayer. La solution obtenue avec ce dernier est notée *opt2*. Les deux solutions *opt1* et *opt2* sont présentées en Figure 3.47 et Figure 3.48. Les résultats obtenus par les deux méthodes sont différents. L'analyse sur une large bande spectrale en Figure 3.47 montre que les deux solutions sont globalement assez proches de la mesure. Toutefois, une analyse plus fine sur trois zones d'intérêt présentée en Figure 3.48 montre que les structures optimisées ne correspondent pas parfaitement à la mesure. Ces résultats soulignent la difficulté d'ajuster le modèle aux données expérimentales.

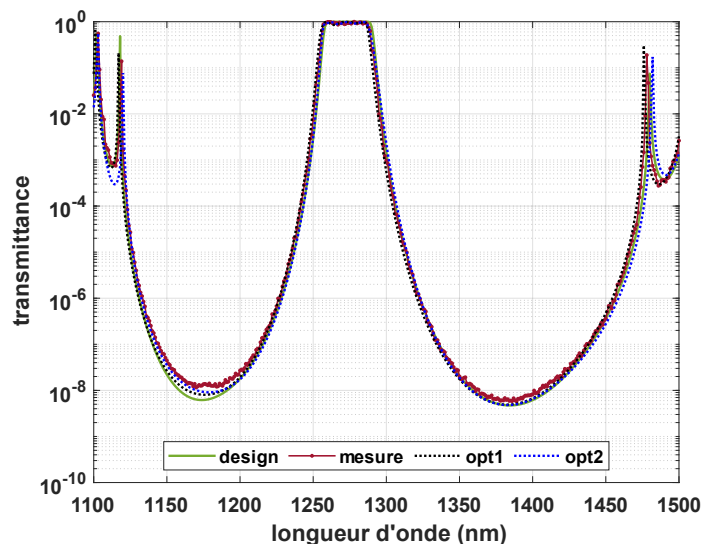


Figure 3.47 Comparaison du design et de la mesure et de la solution optimisée par réseau de neurones (*opt1*) et par le logiciel OptiLayer (*opt2*). Les deux solutions sont très similaires.

Ces opérations de rétro-ingénierie montrent que de légers ajustements de la structure peuvent expliquer les disparités entre la mesure et le modèle. Un lissage des données mesurées pourrait également améliorer le traitement. L'extension de cette démarche de rétro-ingénierie à la diffusion est susceptible de faciliter l'ajustement du modèle.



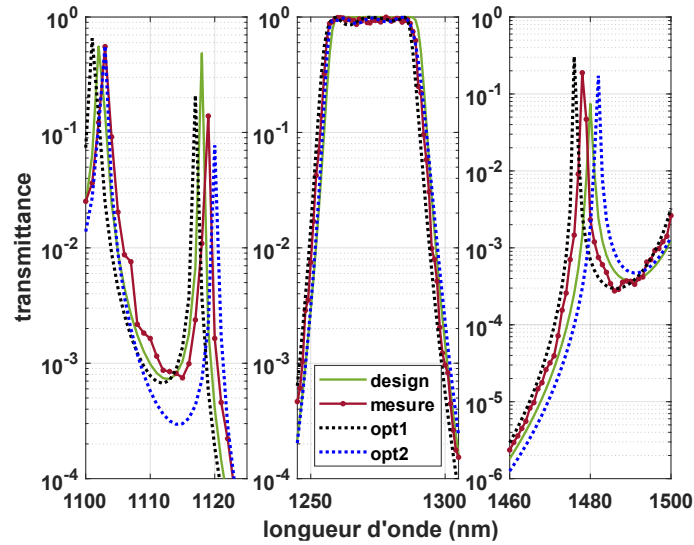


Figure 3.48 Détail de la comparaison entre design, mesure et les solutions optimisées opt1 et opt2 sur le filtre F2. Des disparités apparaissent sur ces zones spécifiques.

## 3.5. Au-delà des modèles déterministes

### 3.5.1. Autres apprentissages

Les réseaux de neurones présentés dans les paragraphes précédents sont déterministes : pour un problème donné, ils fournissent une unique réponse. Plusieurs exécutions d'une résolution de problème inverse peuvent éventuellement converger vers différentes solutions à cause de leur initialisation aléatoire, mais ces solutions se ressemblent beaucoup. Un réseau de neurones entraîné fait toujours la même prédiction pour une entrée donnée. Si cette prédiction est mauvaise, seule une poursuite de l'apprentissage ou une modification du modèle permettent de corriger l'erreur. Il serait intéressant de contourner ce déterminisme et de disposer non plus d'une seule solution mais d'un ensemble de solutions à explorer. C'est aussi ce même déterminisme qui est à l'origine du problème *one-to-many*. Plusieurs alternatives ont été proposées face à cet obstacle.

Certains problèmes très simples ont été résolus par « force brute » avec la *Fast Forward Dictionary Search* (FFDS) [64]. Cette approche utilise la rapidité de calcul des réseaux de neurones pour prédire toutes les solutions possibles et les stocker dans un dictionnaire. La résolution du problème inverse pour une contrainte donnée se résume ensuite à chercher la meilleure solution dans ce dictionnaire. Cette méthode a été appliquée pour optimiser des métasurfaces décrites par seulement 8 paramètres qui peuvent prendre chacun 13 valeurs discrètes. L'espace des solutions compte  $13^8$  éléments. La taille de l'espace des solutions pour un empilement de 60 couches minces optiques, dont les épaisseurs varient dans un intervalle de 50 nm (par pas de 1 nm), est de  $50^{60}$ . Cette dimension est beaucoup trop importante pour envisager une telle résolution.

Des implémentations d'apprentissage par renforcement (*reinforcement learning*) ont aussi été proposées sur des problèmes simples de photonique [65,66]. Mais ces programmes sont plus complexes à entraîner et leurs performances restent limitées.

D'autres modèles d'apprentissage tels que les (*conditional*) *Variational Autoencoders* (cVAE et VAE) [67,68] ou (*conditional*) *Generative Adversarial Networks* (cGAN et GAN) [69,70] ont été proposés pour la synthèse de structures photoniques. Ces modèles contournent les limitations des méthodes déterministes. Un VAE est constitué de deux réseaux de neurones : un *encodeur* et un *décodeur*. L'*encodeur* permet de transposer la donnée d'entrée dans un *espace latent*. L'*espace latent* est un espace multi-dimensionnel abstrait. Il constitue une représentation du problème différente de celle perçue par l'utilisateur du programme, ce qui permet de trouver des relations imperceptibles entre les données. Le *décodeur* échantillonne l'*espace latent* pour prédire une sortie de la même forme que la donnée d'entrée du VAE. Ces modèles ont plutôt été appliqués au design de métamatériaux ou de métasurfaces. Ces dernières sont généralement décrites par des matrices de 0 et de 1, où la valeur indique l'absence ou la présence de matière pour une épaisseur constante sur toute la surface. Cette représentation constitue un problème de classification alors que la synthèse de couches minces optiques est un problème de régression, puisque les paramètres prennent des valeurs continues.

### 3.5.2. Mixture density network

#### 3.5.2.1. Introduction au mixture density network

Une méthode prometteuse pour les couches minces optiques est une implémentation d'un *mixture density network* (MDN), proposée par Unni *et al.* [51]. Contrairement à un réseau de neurones classique, un MDN ne fournit pas une unique réponse mais une distribution de probabilité décrite par K fonctions gaussiennes (avec  $K > 1$ ), chacune est définie par 3 paramètres : une moyenne  $\mu$ , un écart-type  $\sigma$  et une probabilité  $\pi$ . De cette manière, la prédiction d'un MDN n'est pas une réponse unique mais un ensemble de solutions.

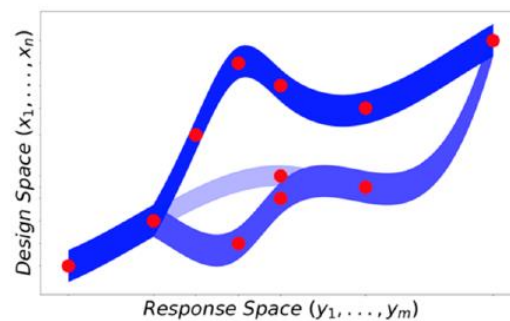


Figure 3.49 Le MDN ne prédit pas une réponse unique mais une distribution de probabilités. Pour une réponse spectrale donnée, il est capable d'identifier plusieurs solutions possibles. [51]

Appliquée au design des couches minces, cette approche contourne le problème *one-to-many* puisqu'elle peut prendre en compte plusieurs designs pour une seule réponse

spectrale. Chaque design sera décrit par une distribution gaussienne différente. Le modèle peut alors être entraîné de manière directe sur la résolution du problème inverse : pour une réponse spectrale en entrée, le réseau prédit un ensemble de solutions possibles. Cet ensemble est ensuite échantillonné pour identifier la meilleure solution.

Le modèle est entraîné avec des exemples similaires à ceux utilisés dans le paragraphe 3.4. Cependant, lors de l'apprentissage, les données d'entrée sont maintenant les réponses spectrales et les données de sortie sont les épaisseurs des couches minces. Le réseau ne prédit pas des valeurs exactes des épaisseurs mais des distributions de probabilités. [71,72]

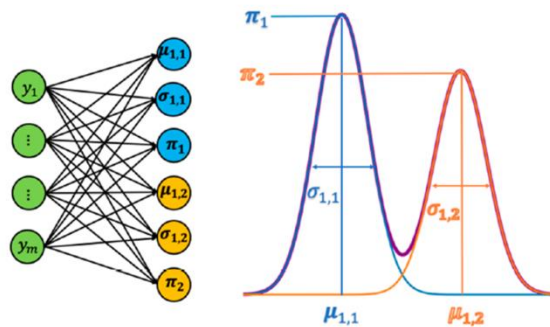


Figure 3.50 Illustration de la prédiction par un MDN. Les paramètres de sortie définissent ici deux distributions gaussiennes. [51]

Pour un empilement de  $p$  couches minces, une prédiction du MDN fournit les paramètres d'une mixture de  $K$  fonctions gaussiennes  $(\mu_k, \sigma_k, \pi_k)$ . Le vecteur  $\mu_k$  possède  $p$  éléments et représente les valeurs moyennes des  $p$  couches pour la  $k$ -ième distribution. Le paramètre  $\sigma_k$  symbolise l'écart-type de la  $k$ -ième distribution gaussienne. Par souci de simplification, ce paramètre est constant pour toutes les couches de l'empilement. Enfin, la grandeur  $\pi_k$  définit la probabilité associée à la  $k$ -ième distribution. Les valeurs de  $\pi_k$  sont telles que  $\sum_k \pi_k = 1$ , la somme des probabilités de chacune des  $K$  solutions est égale à 1.

Contrairement à un réseau de neurones classique, la fonction de perte n'est plus une fonction MSE mais une fonction de *log-vraisemblance négative*. Pour un exemple  $(x, y)$ , elle est de la forme :

$$\mathcal{L}(x, y, \omega) = -\frac{1}{P} \sum_{i=1}^P \log \left( \sum_{k=1}^K \pi_k(x, \omega) \mathcal{N}(y_i | \mu_{k,i}(x, \omega), \sigma_k(x_i, \omega)) \right) \quad (3.36)$$

avec  $\omega$  les paramètres du modèle,  $P$  le nombre d'éléments de la réponse cible  $y$ ,  $K$  le nombre de distributions,  $\pi_k$  la probabilité de la  $k$ -ième distribution,  $\mathcal{N}$  la loi de distribution normale,  $y_i$  le  $i$ -ième élément de la donnée  $y$ ,  $\mu_{k,i}$  la valeur moyenne de la  $k$ -ième distribution pour le  $i$ -ième élément de la réponse et  $\sigma_k$  l'écart-type de la  $k$ -ième distribution. Rappelons que la loi normale est de la forme suivante :

$$\mathcal{N}(y_i | \mu_{k,i}, \sigma_k) = \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{y_i - \mu_{k,i}}{\sigma_k} \right)^2} \quad (3.37)$$

Les valeurs prises par  $\pi_k$ ,  $\sigma_k$  et  $\mu_{k,i}$  dépendent des paramètres  $\omega$  du réseau (et donc de l'entraînement du réseau), ainsi que des valeurs du vecteur d'entrée  $x$ . L'apprentissage du modèle consiste à minimiser la fonction de coût et à ajuster les paramètres des lois normales de chacune des distributions.

### 3.5.2.2. Application : design sous contrainte de la transmission spéculaire

Nous considérons le cas d'empilements de 11 couches minces de  $\text{SiO}_2$  et  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  sur un substrat en silice. Les épaisseurs des couches varient entre 30 et 200 nm. La réponse spectrale en transmission spéculaire est échantillonnée sur 301 points, de 400 nm à 1000 nm par pas de 2 nm. L'éclairement est en lumière non polarisée. Un jeu de données de 150 000 exemples est généré aléatoirement pour l'entraînement et la validation du modèle. Le modèle choisi comporte 10 distributions gaussiennes ( $K=10$ ) et l'architecture est présentée en Figure 3.51.

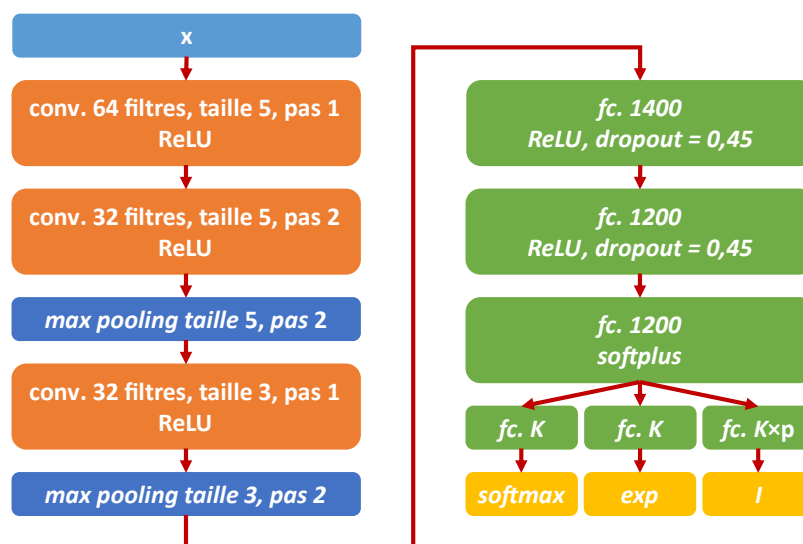


Figure 3.51 Architecture du réseau MDN. Les couches de convolution sont notées conv., les couches entièrement connectées sont notées fc (pour fully connected). Les dimensions des couches sont indiquées pour chacune d'elles.  $K$  est le nombre de distributions et  $p$  est le nombre de couches dans l'empilement couches minces. Softmax, exp et  $l$  sont les fonctions d'activation des couches de sortie.

Le réseau possède 3 couches de convolution, séparées par des activations ReLU et des couches de *max-pooling*, puis 3 couches entièrement connectées séparées par des activations ReLU et régularisation *dropout*. La dernière activation est une fonction *softplus*. La sortie du réseau est divisée en trois branches et des activations différentes sont appliquées pour les trois paramètres qui définissent les distributions gaussiennes. La somme des probabilités devant être égale à 1, une couche *softmax* permet d'activer les valeurs de  $\pi_k$ . L'activation *softmax* normalise les valeurs des unités de la couche concernée pour que la somme de tous les éléments soit égale à 1. L'écart-type d'une

distribution étant toujours positif, une fonction exponentielle ( $g(x) = \exp(x)$ ) est choisie pour activer les valeurs de  $\sigma_k$ . Enfin les valeurs des moyennes  $\mu_{k,i}$  pouvant être positives ou négatives selon la normalisation appliquée, l'activation choisie est l'identité I ( $g(x) = x$ ). L'entraînement utilise la fonction d'optimisation Adam avec ses hyperparamètres par défaut, pour 256 *epochs* et des *mini-batches* de 256 éléments. Les réponses spectrales en entrée sont transformées par une fonction logarithme  $-\log_{10}(X)$ , tandis que les données de sortie sont normalisées par l'opération :

$$y := \frac{y - \min(y)}{\max(y - \min(y))} \quad (3.38)$$

Ainsi, les épaisseurs des couches sont normalisées entre 0 et 1. La fonction de coût prend les valeurs suivantes à la fin de l'apprentissage :

$J_{train}$	-0,742
$J_{val}$	-0,595

Tableau 3.8 Valeurs de la fonction de coût sur le jeu de données d'entraînement et le jeu de validation.

À l'issue de l'entraînement, le réseau est utilisé pour faire des prédictions sur le jeu de données de validation. Pour une réponse spectrale donnée, il prédit les paramètres des 10 distributions gaussiennes. L'espace des solutions est ainsi restreint autour de quelques valeurs particulières, sans fournir immédiatement une solution. Un traitement a posteriori est nécessaire pour échantillonner cet espace et identifier la meilleure solution. À titre d'illustration, la Figure 3.52 présente les 10 distributions gaussiennes obtenues pour la couche #3 de l'empilement de l'exemple #250 du jeu de validation. Les distributions sont centrées sur différentes valeurs et avec des écarts-types différents. La valeur la plus probable est identifiée avec la gaussienne la plus haute.

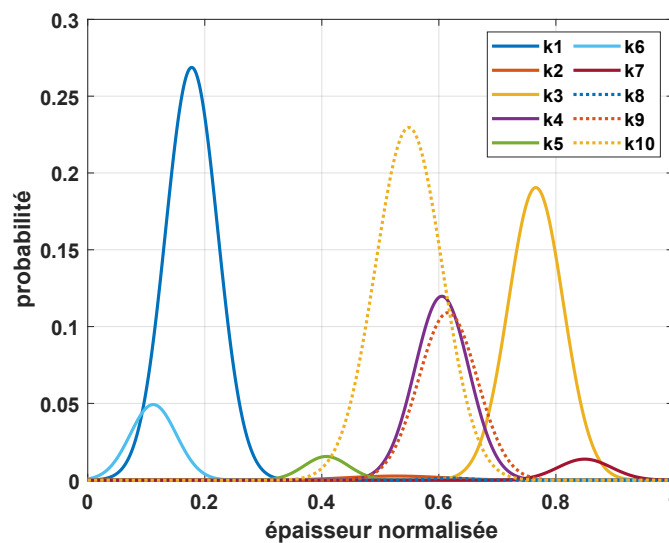


Figure 3.52 Prédictions des  $K=10$  distributions gaussiennes pour la couche #3 de l'exemple #250 du jeu de validation.

### 3.5.2.3. Post-traitement

Un traitement a posteriori est nécessaire pour échantillonner les distributions de probabilité. Une solution envisageable serait de choisir pour chacune des couches de l'empilement, la valeur d'épaisseur la plus probable. La réponse spectrale de la structure obtenue se calcule très facilement de manière analytique. Toutefois, la réponse spectrale synthétisée est très différente de la réponse spectrale cible, comme montré en Figure 3.53.

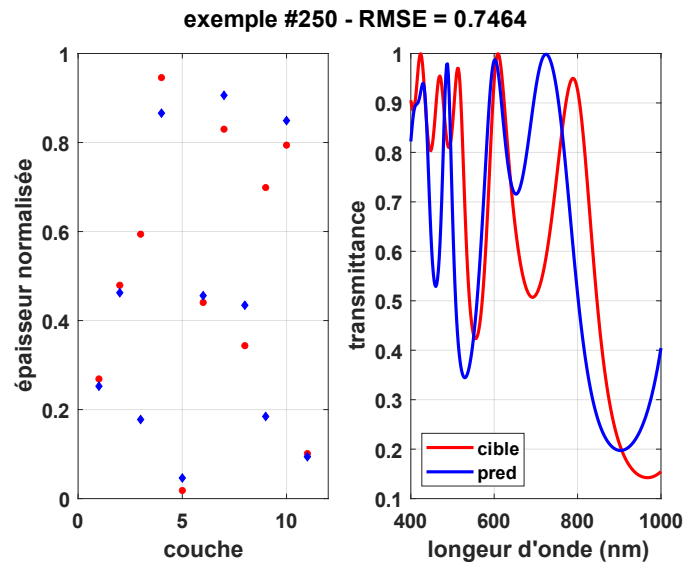


Figure 3.53 Échantillonnage de la valeur d'épaisseur la plus probable pour chacune des 11 couches de l'empilement et pour l'exemple #250 du jeu de validation. Les points rouges sont les valeurs cibles et les diamants bleus sont les valeurs prédites. La réponse spectrale en transmission est très différente de la réponse cible.

Il est ainsi nécessaire d'établir un échantillonnage plus performant des distributions gaussiennes pour trouver une solution satisfaisante. Unni et ses collaborateurs [51] proposent une approche de post-traitement pour améliorer une solution  $x_0$  qui représente les valeurs des  $p$  couches de l'empilement.

1. La solution  $x_0$  est initialisée en prenant la valeur d'épaisseur la plus probable pour chacune des couches ;
2. Tous les éléments de  $x_0$  sont fixés sauf un. La distribution associée à cette variable est échantillonnée sur  $N_p$  points et donne ainsi  $N_p$  solutions. Leur coût respectif est évalué en calculant la RMSE de la réponse spectrale de la solution avec la cible. Si l'une des solutions possède un coût inférieur à la solution initiale, la valeur d'épaisseur de la couche concernée est mise à jour ;
3. L'opération est répétée pour une autre couche de l'empilement. Toutes les couches sont optimisées les unes après les autres dans un ordre aléatoire ;
4. Les opérations 2. et 3. sont réalisées pour un nombre d'itérations  $N_{it}$ .

Le nombre d'échantillons  $N_p$  est fixé à 50, tandis que l'algorithme est répété pour  $N_{it}=100$  itérations. Ces valeurs sont choisies de manière assez empirique et garantissent une convergence convenable de l'algorithme. L'exécution dure environ 75 s. Les valeurs finales des épaisseurs ne sont pas nécessairement exactement concordantes avec les

valeurs de la cible, en revanche la réponse spectrale est très proche de la cible. L'amélioration de la solution est visible sur la réponse spectrale et se mesure à la diminution significative de la valeur de la RMSE. Par exemple, pour l'exemple #250, la solution initiale présente une RMSE de 0,7464 (voir Figure 3.53), tandis que la valeur finale est de 0,1089 (voir Figure 3.54).

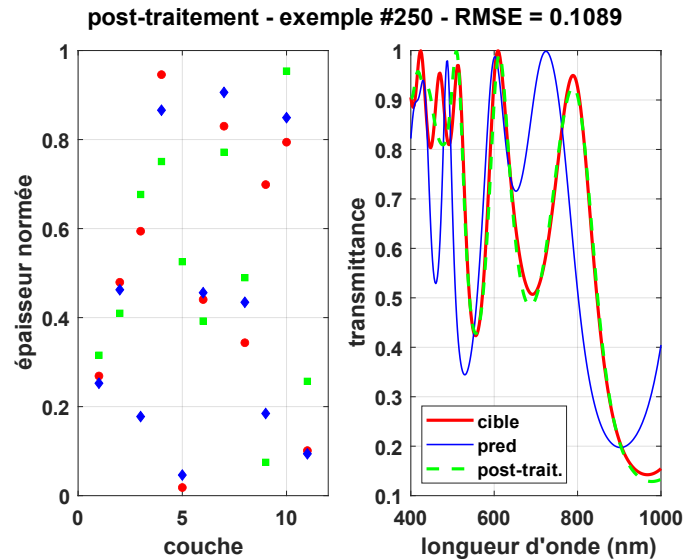


Figure 3.54 Résultat de l'algorithme de post-traitement de la solution sur l'exemple #250. La solution finale obtenue (carrés verts à gauche et courbe verte à droite) est beaucoup plus proche de la cible que la première prédiction.

Cette méthode de post-traitement permet donc d'identifier rapidement une solution convenable dans la distribution de probabilité donnée par le MDN. La détermination du design d'un composant sous contrainte de sa réponse spectrale spéculaire est ainsi immédiate avec ce type de réseau. Contrairement aux approches présentées au paragraphe 3.4, un seul réseau de neurones est utilisé. La variabilité des épaisseurs des couches optiques considérées est également beaucoup plus importante. Dans cette implémentation, les épaisseurs varient entre 30 et 200 nm, alors qu'elles variaient entre 60 et 120 nm avec l'approche *prédicteur/designer*. Cet intervalle spectral plus large permet de synthétiser des fonctions optiques plus diverses.

L'approche non déterministe par un *mixture density network* est très prometteuse sur ce problème simple de design sous contrainte de la réponse spéculaire. Une extension du modèle à la prise en compte de la diffusion est envisagée. L'utilisation de l'algorithme de post-traitement sera cependant plus complexe puisque le calcul des réponses diffuses est beaucoup plus coûteux. Pour des valeurs  $N_p=50$  et  $N_{it}=100$ , l'algorithme calculerait 5 000 réponses spectrales diffuses, ce qui demande plusieurs dizaines de minutes d'exécution. Enfin, la méthode choisie pour le post-traitement en elle-même est assez simpliste puisqu'elle optimise les paramètres du problème indépendamment les uns des autres. Il serait possible d'utiliser un second réseau de neurones pour échantillonner les prédictions du MDN et pour prédire les réponses spectrales associées de manière plus rapide que le calcul numérique. C'est en substance ce que proposent les *Variational*

*AutoEncoders* (VAE). Mais ce dernier modèle n'a, à notre connaissance, pas été appliqué à des problèmes de régression. De manière générale, les modèles génératifs constituent une solution envisageable pour améliorer la synthèse de composants interférentiels sous contrainte de la diffusion.

### **3.6. Conclusion et perspectives sur la synthèse sous contrainte de la diffusion**

Les méthodes numériques d'optimisation habituellement utilisées pour la synthèse des couches minces ne considèrent que les réponses spéculaires. Une approche courante repose sur l'algorithme de *needle*. Toutefois, les réponses en diffusion étant beaucoup plus complexes à déterminer, cette méthode classique ne peut pas les contrôler. L'essor de l'intelligence artificielle et des réseaux de neurones artificiels profonds a montré l'intérêt de ces algorithmes d'apprentissage pour résoudre de nombreux problèmes physiques. Nous avons utilisé cette approche pour synthétiser des structures simples et optimiser une structure beaucoup plus complexe.

Les réseaux de neurones artificiels profonds constituent un ensemble d'outils qui permettent de résoudre des problèmes très complexes. Il est toutefois important de souligner qu'ils ne constituent pas une solution à tous les problèmes et qu'ils peuvent également être moins performants que les approches analytiques lorsqu'elles existent. Les travaux présentés dans ce chapitre sont un premier pas vers un contrôle complet de la diffusion par les composants interférentiels. Les perspectives d'amélioration sont nombreuses, notamment en implémentant de nouveaux modèles d'apprentissage non déterministes. Une réflexion sur la définition des problèmes à résoudre et sur le choix des paramètres à optimiser est également nécessaire.



## Conclusion et perspectives générales

Les travaux développés dans le cadre de cette thèse s'inscrivent dans une recherche avancée sur la compréhension des phénomènes de diffusion par les filtres interférentiels. Ils s'appuient sur la grande expérience de l'Institut Fresnel sur cette thématique. L'appréhension complète de la diffusion lumineuse utilise principalement trois approches : la modélisation, la métrologie et la synthèse.

Nous avons présenté un modèle électromagnétique de la diffusion pour la détermination numérique de la réponse diffuse d'un composant en considérant ses propriétés structurales, ses propriétés de rugosité et les conditions d'illumination. Ce modèle est désormais complet et validé.

Un banc de métrologie optique, appelé SALSA, a été développé pour caractériser expérimentalement la lumière diffusée. SALSA atteint des performances inégalées pour la détection des faibles flux optiques sur une très large bande spectrale de fonctionnement, étendue jusqu'à 1700 nm. Les performances qui avaient été obtenues dans le visible ont été conservées et étendues au proche infrarouge. L'instrument peut mesurer jusqu'à  $10^{-8} sr^{-1}$  en diffusion et une densité optique de 13 en transmittance, soit plusieurs décades au-delà de l'état de l'art. Les résolutions spectrale et angulaire sont très fines. Enfin, la précision et la répétabilité des mesures sont de quelques pourcents. La caractérisation complète d'un filtre passe-bande complexe illustre parfaitement ses performances sur tout son spectre de fonctionnement, à la fois pour les propriétés spéculaires comme pour les propriétés diffuses. Ces données expérimentales sont en parfait accord avec le modèle électromagnétique.

Une nouvelle méthode de synthèse des composants couches minces optiques propose d'utiliser des réseaux de neurones artificiels profonds pour contrôler les propriétés diffuses des composants. Les résultats obtenus par ces optimisations numériques sont inédits puisque cette problématique du contrôle de la diffusion n'avait été abordée que pour des configurations relativement simples et très spécifiques. La réduction de la diffusion d'un composant passe-bande sur deux intervalles de longueurs d'onde illustre la puissance de la méthode employée.

La compréhension globale des phénomènes de diffusion a été améliorée grâce aux avancées réalisées sur ces trois approches. Des perspectives sont envisagées pour approfondir la métrologie et la synthèse.

Pour la métrologie, l'ajout de polariseurs en émission et en réception permettrait une caractérisation plus fine des composants puisque le modèle montre d'importantes

différences selon les états de polarisation. SALSA pourrait également être utilisé pour d'autres mesures comme la fluorescence ou la diffusion inélastique des matériaux. À plus long terme, une extension de sa gamme spectrale au moyen infrarouge pourrait également offrir de nouvelles perspectives pour la métrologie des couches minces optiques.

Le nouvel axe de recherche initié pour le contrôle des réponses diffuses a prouvé l'intérêt du *deep learning* et des algorithmes d'apprentissage. Les résultats initient un premier pas vers un contrôle de la diffusion. Les perspectives sont nombreuses sur ce dernier point afin de développer une démarche robuste et générale de synthèse de composants couches minces optiques. Des améliorations pourraient être apportées en ayant recours à de nouveaux modèles d'apprentissage pour dépasser le caractère déterministe des implémentations les plus simples. Une réflexion sur le choix des paramètres à ajuster serait également utile et nécessaire.

## Références

1. A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, and G. W. DeBell, "Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings," *Appl. Opt.* **35**, 5493–5508 (1996).
2. H. A. Macleod, *Thin-Film Optical Filters*, 4th Edition (CRC, 2010).
3. J. M. Elson and J. M. Bennett, "Relation between the angular dependence of scattering and the statistical properties of optical surfaces," *J. Opt. Soc. Am.* **69**, 31 (1979).
4. C. Amra, "First-order vector theory of bulk scattering in optical multilayers," *J. Opt. Soc. Am. A* **10**, 365 (1993).
5. C. Amra, C. Grèzes-Besset, and L. Bruel, "Comparison of surface and bulk scattering in optical multilayers," *Appl. Opt.* **32**, 5492 (1993).
6. C. Amra, "From light scattering to the microstructure of thin-film multilayers," *Appl. Opt.* **32**, 5481 (1993).
7. A. Duparré and S. Kassam, "Relation between light scattering and the microstructure of optical thin films," *Appl. Opt.* **32**, 5475 (1993).
8. C. Amra, "Light scattering from multilayer optics I Tools of investigation," *J. Opt. Soc. Am. A* **11**, 197 (1994).
9. H. E. Bennett and J. O. Porteus, "Relation Between Surface Roughness and Specular Reflectance at Normal Incidence," *J. Opt. Soc. Am.* **51**, 123–129 (1961).
10. H. Davies, "The reflection of electromagnetic waves from a rough surface," *Proc. IEE - Part IV Inst. Monogr.* **101**, 209–214 (1954).
11. M. Zerrad, S. Liukaityte, M. Lequime, and C. Amra, "Light scattered by optical coatings: numerical predictions and comparison to experiment for a global analysis," *Appl. Opt.* **55**, 9680–9687 (2016).
12. C. Amra, M. Lequime, and M. Zerrad, *Electromagnetic Optics of Thin-Film Coatings: Light Scattering, Giant Field Enhancement, and Planar Microcavities* (Cambridge University, 2020).
13. F. E. Nicodemus, J. C. Richmond, J. J. Hsia, I. W. Ginsberg, and T. Limperis, *Geometrical Considerations and Nomenclature for Reflectance*, 0 ed. (National Bureau of Standards, 1977).
14. F. E. Nicodemus, "Directional Reflectance and Emissivity of an Opaque Surface," *Appl. Opt.* **4**, 767–775 (1965).
15. "Microcarb," [https://microcarb.cnes.fr/fr/MICROCARB/Fr/GP\\_mission.htm](https://microcarb.cnes.fr/fr/MICROCARB/Fr/GP_mission.htm).
16. F. Pasternak, P. Bernard, L. Georges, and V. Pascal, "The microcarb instrument," in *International Conference on Space Optics — ICSO 2016* (International Society for Optics and Photonics, 2017), Vol. 10562, p. 105621P.
17. J. M. Elson, "Diffraction and diffuse scattering from dielectric multilayers," *J. Opt. Soc. Am.* **69**, 48 (1979).
18. P. Bousquet, F. Flory, and P. Roche, "Scattering from multilayer thin films: theory and experiment," *J. Opt. Soc. Am.* **71**, 1115 (1981).
19. S. Liukaityte, M. Lequime, M. Zerrad, T. Begou, and C. Amra, "Broadband spectral transmittance measurements of complex thin-film filters with optical densities of up to 12," *Opt. Lett.* **40**, 3225–3228 (2015).

20. S. Liukaityte, "Nouvelle métrologie large bande à grande dynamique pour la mesure des flux transmis, réfléchis et diffusés par des filtres optiques à hautes performances," Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université (2016).
21. M. Lequime, M. Zerrad, and C. Amra, "Breakthrough spectrophotometric instrument for the ultra-fine characterization of the spectral transmittance of thin-film optical filters," *Opt. Express* **26**, 34236 (2018).
22. M. Fouchier, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Wide-range wavelength and angle resolved light scattering measurement setup," *Opt. Lett.* **45**, 2506–2509 (2020).
23. A. Johansen, A. Czajkowski, N. Cooper, M. Scobey, P. Egerton, and R. Fortenberry, "A new spectral analysis system designed to measure high-performance optical filters," Alluxa White Pap. 10 (2017).
24. P. Prabhat and T. Erdogan, *Measurement of Optical Filter Spectra*, Semrock Technical Note Series (Semrock Inc., n.d.).
25. S. Schröder, D. Unglaub, M. Trost, X. Cheng, J. Zhang, and A. Duparré, "Spectral angle resolved scattering of thin film coatings," *Appl. Opt.* **53**, A35–A41 (2014).
26. C. Amra, D. Torricini, and P. Roche, "Multiwavelength (0.45–10.6  $\mu\text{m}$ ) angle-resolved scatterometer or how to extend the optical window," *Appl. Opt.* **32**, 5462–5474 (1993).
27. S. G. Kaplan, L. M. Hanssen, A. L. Migdall, and G. Lefever-Button, "Characterization of high-OD ultrathin infrared neutral density filters," in R. V. Datla and L. M. Hanssen, eds. (1998), pp. 56–63.
28. C. Araujo-Hauck, S. Fischer, H. Bartko, S. Gillessen, C. Straubmeier, M. Wiest, S. Yazici, F. Eisenhauer, G. S. Perrin, W. Brandner, K. Perraut, A. Amorim, and A. Eckart, "GRAVITY spectrometer: metrology laser blocking strategy at OD=12," in *Optical and Infrared Interferometry II* (International Society for Optics and Photonics, 2010), Vol. 7734, p. 77342Z.
29. S. Schröder, T. Herffurth, H. Blaschke, and A. Duparré, "Angle-resolved scattering: an effective method for characterizing thin-film coatings," *Appl. Opt.* **50**, C164 (2011).
30. N. Riviere, R. Ceolato, and L. Hespel, "Multispectral polarized BRDF: design of a highly resolved reflectometer and development of a data inversion method," *Opt. Appl.* **XLII**, 16 (2012).
31. R. Ceolato, N. Riviere, and L. Hespel, "Reflectances from a supercontinuum laser-based instrument: hyperspectral, polarimetric and angular measurements," *Opt. Express* **20**, 29413 (2012).
32. J. C. Boyce, "The Spectra of Xenon in the Extreme Ultraviolet," *Phys. Rev.* **49**, 730–732 (1936).
33. W. D. Bare and J. N. Demas, "Monochromator Wavelength Calibration Standards Extending into the Near-Infrared Using Second- and Third-Order Emission Lines from Mercury Vapor Lamps," *J. Fluoresc.* **10**, 8 (2000).
34. A. Johansen, A. Czajkowski, M. Scobey, P. Egerton, and R. Fortenberry, "Thin-film interference filters for Lidar," Alluxa White Pap. 12 (2017).
35. S. Wang, M. Zhan, G. Wang, H. Xuan, W. Zhang, C. Liu, C. Xu, Y. Liu, Z. Wei, and X. Chen, "4H-SiC: a new nonlinear material for midinfrared lasers," *Laser Photonics Rev.* **7**, 831–838 (2013).
36. F. Zamkotsian, I. Zhurminsky, P. Lanzoni, N. Tchoubaklian, F. Lütolf, M. Schnieper, C. Schneider, S. Fricke, M. Fouchier, M. Zerrad, C. Amra, V. Costes, and J. Loesel, "Blazed gratings on convex substrates for high throughput spectrographs for Earth and Universe observation," in *International Conference on Space Optics — ICSO 2020* (International Society for Optics and Photonics, 2021), Vol. 11852, p. 118520N.

37. P. Baumeister, "Design of Multilayer Filters by Successive Approximations," *JOSA* **48**, 955–958 (1958).
38. C. Amra, G. Albrand, and P. Roche, "Theory and application of antiscattering single layers: antiscattering antireflection coatings," *Appl. Opt.* **25**, 2695 (1986).
39. J. Zhang, H. Wu, I. V. Kozhevnikov, S. Shi, X. Cheng, and Z. Wang, "Interference suppression of light backscattering through oblique deposition of a layered reflecting coating: bi-layer on a substrate," *Opt. Express* **27**, 15262–15282 (2019).
40. A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, and G. W. DeBell, "Optical coating design approaches based on the needle optimization technique," *Appl. Opt.* **46**, 704 (2007).
41. B. T. Sullivan and J. A. Dobrowolski, "Implementation of a numerical needle method for thin-film design," *Appl. Opt.* **35**, 5484–5492 (1996).
42. W. H. Southwell, "Flip-flop coating synthesis revisited," *Appl. Opt.* **53**, A179–A185 (2014).
43. C. P. Chang and Y. H. Lee, "Optimization of a thin-film multilayer design by use of the generalized simulated-annealing method," *Opt. Lett.* **15**, 595–597 (1990).
44. R. I. Rabaday and A. Ababneh, "Global optimal design of optical multilayer thin-film filters using particle swarm optimization," *Optik* **125**, 548–553 (2014).
45. S. Martin, J. Rivory, and M. Schoenauer, "Synthesis of optical multilayer systems using genetic algorithms," *Appl. Opt.* **34**, 2247–2254 (1995).
46. C. You, C. T. Matyas, Y. Huang, J. P. Dowling, and G. Veronis, "Optimized Multilayer Structures With Ultrabroadband Near-Perfect Absorption," *IEEE Photonics J.* **12**, 1–10 (2020).
47. M. A. Barry, V. Berthier, B. D. Wilts, M.-C. Cambourieux, P. Bennet, R. Pollès, O. Teytaud, E. Centeno, N. Biais, and A. Moreau, "Evolutionary algorithms converge towards evolved biological photonic structures," *Sci. Rep.* **10**, 12024 (2020).
48. R. S. Hegde, "Accelerating optics design optimizations with deep learning," *Opt. Eng.* **58**, 065103 (2019).
49. P. Bennet, P. Juillet, S. Ibrahim, V. Berthier, M. A. Barry, F. Réveret, A. Bousquet, O. Teytaud, E. Centeno, and A. Moreau, "Analysis and fabrication of antireflective coating for photovoltaics based on a photonic-crystal concept and generated by evolutionary optimization," *Phys. Rev. B* **103**, 125135 (2021).
50. D. Liu, Y. Tan, E. Khoram, and Z. Yu, "Training Deep Neural Networks for the Inverse Design of Nanophotonic Structures," *ACS Photonics* **5**, 1365–1369 (2018).
51. R. Unni, K. Yao, and Y. Zheng, "Deep Convolutional Mixture Density Network for Inverse Design of Layered Photonic Structures," *ACS Photonics* **7**, 2703–2712 (2020).
52. S. Doncieux, "Algorithmes évolutionnistes: de l'optimisation de paramètres à la conception complète d'un système de contrôle," in *2èmes Journées MicroDrones (ENSICA/SupAero, 2002)*.
53. Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, "Deep learning," *Nature* **521**, 436–444 (2015).
54. M. A. Nielsen, "Neural Networks and Deep Learning," (2015).
55. I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*, MIT Press (2016).
56. "Automatic Differentiation Background - MATLAB & Simulink - MathWorks France," <https://fr.mathworks.com/help/deeplearning/ug/deep-learning-with-automatic-differentiation-in-matlab.html>.
57. X. Glorot and Y. Bengio, "Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks," in *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (JMLR Workshop and Conference Proceedings, 2010)*, pp. 249–256.

58. D. P. Kingma and J. Ba, "Adam: A Method for Stochastic Optimization," ArXiv14126980 Cs (2017).
59. A. Skakovski and P. Jędrzejowicz, "An island-based differential evolution algorithm with the multi-size populations," *Expert Syst. Appl.* **126**, 308–320 (2019).
60. C.-T. Chen and G. X. Gu, "Generative Deep Neural Networks for Inverse Materials Design Using Backpropagation and Active Learning," *Adv. Sci.* **7**, 1902607 (2020).
61. J. Peurifoy, Y. Shen, L. Jing, Y. Yang, F. Cano-Renteria, B. G. DeLacy, J. D. Joannopoulos, M. Tegmark, and M. Soljačić, "Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks," *Sci. Adv.* **4**, eaar4206 (2018).
62. C. Qiu, X. Wu, Z. Luo, H. Yang, G. Wang, N. Liu, and B. Huang, "Simultaneous inverse design continuous and discrete parameters of nanophotonic structures via back-propagation inverse neural network," *Opt. Commun.* **483**, 126641 (2021).
63. M. Fouchier, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Design of multilayer optical thin-films based on light scattering properties and using deep neural networks," *Opt. Express* **29**, 32627–32638 (2021).
64. C. C. Nadell, B. Huang, J. M. Malof, and W. J. Padilla, "Deep learning for accelerated all-dielectric metasurface design," *Opt. Express* **27**, 27523–27535 (2019).
65. I. Sajedian, T. Badloe, and J. Rho, "Finding the best design parameters for optical nanostructures using reinforcement learning," ArXiv181010964 Phys. (2018).
66. A. Jiang, O. Yoshie, and L. Chen, "A new multilayer optical film optimal method based on deep q-learning," ArXiv181202873 Cs Stat (2018).
67. Z. Liu, L. Raju, D. Zhu, and W. Cai, "A Hybrid Strategy for the Discovery and Design of Photonic Structures," *IEEE J. Emerg. Sel. Top. Circuits Syst.* **10**, 126–135 (2020).
68. W. Ma, F. Cheng, Y. Xu, Q. Wen, and Y. Liu, "Probabilistic Representation and Inverse Design of Metamaterials Based on a Deep Generative Model with Semi-Supervised Learning Strategy," *Adv. Mater.* **31**, 1901111 (2019).
69. S. So and J. Rho, "Designing nanophotonic structures using conditional deep convolutional generative adversarial networks," *Nanophotonics* **8**, 1255–1261 (2019).
70. Z. Liu, D. Zhu, S. P. Rodrigues, K.-T. Lee, and W. Cai, "Generative Model for the Inverse Design of Metasurfaces," *Nano Lett.* **18**, 6570–6576 (2018).
71. C. M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Information Science and Statistics (Springer, 2006).
72. M. Dusenberry, *Dusenberrymw/Mixture-Density-Networks* (2017).

## Liste de publications et participation aux conférences

### 1) Liste des publications réalisées dans le cadre du projet de thèse :

1. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Wide-range wavelength and angle resolved light scattering measurement setup," *Opt. Lett.* 45, 2506–2509 (2020)
2. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Design of multilayer optical thin-films based on light scattering properties and using deep neural networks," *Opt. Express* 29, 32627–32638 (2021)

### 2) Participation aux conférences au cours de la période de thèse :

1. M. Zerrad, M. Lequime, **M. Fouchier**, C. Amra. Accurate metrology of scattered light. IS&T Color Imaging Conference, Material appearance Workshop, Oct 2019, Paris, France. [*Poster*]
2. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Breakthrough instrument for a wide range, spectrally and angularly resolved light scattering measurement," in *Frontiers in Optics / Laser Science* (2020), Paper FTh2A.5 (Optical Society of America, 2020), p. FTh2A.5. [*Présentation*]
3. F. Zamkotsian, I. Zhurminsky, P. Lanzoni, N. Tchoubaklian, F. Lütolf, M. Schnieper, C. Schneider, S. Fricke, **M. Fouchier**, M. Zerrad, C. Amra, V. Costes, and J. Loesel, "Blazed gratings on convex substrates for high throughput spectrographs for Earth and Universe observation," in *International Conference on Space Optics — ICSO 2020* (SPIE, 2021), Vol. 11852, p. 118520N. [*Présentation par F. Zamkotsian*]
4. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "A breakthrough instrument for wide-range wavelength and angle resolved light scattering measurements of high performances optical coatings," in *International Conference on Space Optics — ICSO 2020* (SPIE, 2021), Vol. 11852, pp. 555–564. [*Présentation*]
5. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, C. Amra. Instrument spectralement et angulairement résolu pour la métrologie de la lumière diffusée par les filtres interférentiels complexes. *Optique Dijon 2021* [*Poster*]
6. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Spectrally and angularly resolved instrument for light scattering metrology of optical thin-film filters," in *Advances in Optical Thin Films VII* (SPIE, 2021), Vol. 11872, p. 118720T. [*Présentation*]
7. **M. Fouchier**, M. Zerrad, M. Lequime, and C. Amra, "Design of complex optical thin-films based on light scattering properties and using deep neural networks," in *Advances in Optical Thin Films VII* (SPIE, 2021), Vol. 11872, p. 1187205. [*Présentation*]

## Abstract

The development of optical interference filters for multispectral imagers has revealed new problems specific to these thin film components. The numerous physical interfaces between their inner layers generate light scattering which can alter the use of the filter. It is therefore essential to understand and control this phenomenon. Three tools have been developed for that purpose: modeling, metrology, and synthesis.

An electromagnetic model has been implemented by the CONCEPT group of the Fresnel Institute. It considers the structural features of the multilayer and the roughness of each interface.

The metrology relies on the development of SALSA (Spectral and Angular Light Scattering characterization Apparatus), a scatterometer which operated on wavelengths between 400 and 1000 nm. As part of this thesis, the spectral range has been extended to 1700 nm with the same performances than those in the visible spectrum. SALSA measures down to  $10^{-8}$  sr<sup>-1</sup> for scattered light and up to 13 optical densities in specular, which is around 6 orders of magnitude better than the state of the art. Experimental results have been compared to the model and reach an excellent agreement.

The implementation of the electromagnetic model paves the way for the synthesis of interference filters based on scattering properties. Until now, no method controls both specular and scattering spectral responses. We propose a model based on deep neural networks to solve this inverse problem. The first results show the ability to control and reduce the scattering of an interference filter of one decade on a specific spectral band.

Keywords: light scattering, metrology, optical thin films, interference filters, deep neural networks, electromagnetism



## Résumé

Le développement des filtres interférentiels pour les imageurs multispectraux a mis en évidence de nouvelles problématiques propres à ces composants couches minces. Les interfaces séparant leurs couches constitutives génèrent de la diffusion lumineuse qui peut perturber leur utilisation, il est primordial de comprendre et maîtriser ce phénomène. Trois approches ont été développées : la modélisation, la métrologie et la synthèse.

Un modèle électromagnétique de la diffusion a été mis au point par l'équipe CONCEPT de l'Institut Fresnel. Il prend en compte les caractéristiques structurelles de l'empilement et la rugosité de chaque interface.

La métrologie repose sur le développement de SALS (*Spectral and Angular Light Scattering characterization Apparatus*), un diffusomètre qui opérait initialement sur des longueurs d'onde comprises entre 400 et 1000 nm. Dans le cadre de cette thèse, son fonctionnement a été étendu jusqu'à 1700 nm, tout en conservant les performances acquises sur le spectre visible. SALS mesure jusqu'à  $10^{-8}$  sr<sup>-1</sup> en diffusion et 13 densités optiques en spéculaire, soit environ 6 ordres de grandeur de mieux que l'état de l'art. La comparaison des résultats expérimentaux avec le modèle est excellente.

Enfin, le modèle électromagnétique ouvre la voie à la synthèse de composants sous contrôle des propriétés de diffusion. Aucune méthode ne permet de contrôler à la fois les réponses spéculaires et les réponses diffuses. Nous proposons une optimisation par réseaux de neurones artificiels profonds pour résoudre ce problème inverse. Les premiers résultats montrent la possibilité de réduire la diffusion d'un composant complexe d'une décade sur une gamme spectrale choisie.

Mots clés : diffusion lumineuse, métrologie, instrumentation optique, couches minces optiques, filtres interférentiels, réseaux de neurones profonds, électromagnétisme