

## Sur l'étude numérique de réseaux de diffraction constitués de matériaux anisotropes

Gérard TAYEB

**Résumé** — Une précédente Note [1] a été consacrée à l'analyse théorique du problème de la diffraction par un réseau tracé sur support anisotrope. On a ramené le problème à la résolution d'un système d'équations intégrales. Nous présentons ici quelques détails sur l'étude numérique et des résultats que l'on compare à ceux obtenus au moyen d'une autre méthode dans laquelle le problème est ramené à l'intégration d'un système différentiel ([2], [3]).

### On the numerical study of diffraction gratings made with anisotropic media

**Abstract** — A previous paper [1] has been devoted to the theoretical analysis of the diffraction by a grating ruled on an anisotropic substrate. The problem has been solved using integral equations. We present here some explanations on the numerical study and some results which are compared to those given by another method in which the problem is solved through the integration of a differential system ([2], [3]).

Les notations sont les mêmes que dans notre première Note [1] à laquelle il faut donc se reporter, notamment pour connaître les définitions de l'inconnue  $F$ , des opérateurs  $S_1$  et  $S_2$ , et de certains espaces fonctionnels (tels que  $\mathcal{V}_1^-$ ). Le réseau est décrit par une interface  $y=f(x)$  et on s'intéresse au cas particulier où la matrice de permittivité relative  $[\varepsilon_2]$  du substrat (éventuellement complexe), est diagonale dans le repère  $Oxyz$  utilisé pour décrire le réseau. Le champ incident est une onde plane se propageant dans le superstrat isotrope et telle que son vecteur d'onde n'ait pas de composante selon l'axe  $Oz$  parallèle aux sillons. Notant que  $F^{\text{inc}}$  qui représente le champ incident appartient à  $\mathcal{V}_1^-$ , on tire des propriétés (8) et (9) de [1]:  $[S_1 F = F - 2F^{\text{inc}}$  et  $S_2 F = -F]$ . Ceci représente 8 équations intégrales couplées, parmi lesquelles, comme nous l'avons expliqué [1], il suffit d'en retenir 4 qui se trouvent être celles qui ont les noyaux les moins singuliers.

1. CONSÉQUENCES DE LA FORME PARTICULIÈRE ADOPTÉE POUR LA PERMITTIVITÉ DU SUBSTRAT. — Compte tenu de la forme diagonale de  $[\varepsilon_2]$ , une nouvelle simplification apparaît: les 4 équations intégrales retenues se scindent en 2 systèmes de 2 équations indépendants. Avec les notations de [1], on peut dire que l'un (soit  $S_1$ ) ne fait intervenir que les composantes 1 et 4 de  $F$  et  $F^{\text{inc}}$ . L'autre ( $S_2$ ) ne fait intervenir que leurs composantes 2 et 3. Ceci résulte d'ailleurs de considérations élémentaires: si on explicite dans un tel milieu anisotrope les deux équations de Maxwell  $\text{rot } \mathbf{E} = i\omega\mu_0 \mathbf{H}$  et  $\text{rot } \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon_0[\varepsilon_2] \mathbf{E}$ , on constate que les 6 équations obtenues se scindent en 2 systèmes de 3 équations aux dérivées partielles. Chacun de ces systèmes ne contient que 3 composantes de champ:  $(E_z, H_x, H_y)$  ou  $(H_z, E_x, E_y)$ . On peut évidemment scinder le champ incident en 2 parties: l'une (dite de polarisation  $E//$ ) à ses composantes  $H_z^{\text{inc}}$ ,  $E_x^{\text{inc}}$ ,  $E_y^{\text{inc}}$  nulles et l'autre (polarisation  $H//$ ) à ses composantes  $E_z^{\text{inc}}$ ,  $H_x^{\text{inc}}$ ,  $H_y^{\text{inc}}$  nulles. Les problèmes associés à une onde incidente  $E//$  et à une onde incidente  $H//$  sont donc indépendants. En d'autres termes, si l'onde incidente est polarisée  $E//$  (resp.  $H//$ ), le champ total sera partout polarisé  $E//$  (resp.  $H//$ ). Ces deux cas sont respectivement attachés aux systèmes  $S_1$  et  $S_2$ .

Il faut aussi noter que dans le cas de polarisation  $E//$ , le réseau se comporte exactement comme si le substrat était isotrope, de permittivité  $\varepsilon_z$ . En  $H//$ , mais cette fois uniquement si les permittivités  $\varepsilon_x$  et  $\varepsilon_y$  ont une valeur commune  $\varepsilon$ , le problème est identique à celui d'un réseau isotrope de permittivité  $\varepsilon$ . On retiendra donc que le cas d'un milieu uniaxe disposé

Note présentée par André LICHNEROWICZ.

TABLEAU I

Profil sinusoïdal (*sinusoidal profile*);  $h=0,2 \mu\text{m}$  ( $h/d=0,4$ ).

Ordre	NF = 3, ND = 15, NSOM = 10		NF = 5, ND = 25, NSOM = 20		NF = 12, ND = 45, NSOM = 30	
	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises
-2		0,008 2		0,007 8		0,007 8
-1	0,091 4	0,260 8	0,092 3	0,253 0	0,092 3	0,253 0
0	0,000 3	0,218 5	0,000 3	0,223 0	0,000 3	0,223 1
1		0,427 5		0,423 8		0,423 5
		Somme des efficacités : 1,006 7 T = 1 s	Somme des efficacités : 1,000 2 T = 3 s		Somme des efficacités : 1,000 0 T = 11 s	

TABLEAU II

Profil sinusoïdal (*sinusoidal profile*);  $h=0,1 \mu\text{m}$  ( $h/d=0,2$ ).

Ordre	Méthode intégrale NF = 3, ND = 15, NSOM = 20		Méthode différentielle NF = 7, 90 pas d'intégration	
	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises
-2		0,001 9		0,001 5
-1	0,069 5	0,057 1	0,069 5	0,057 3
0	0,073 6	0,628 8	0,073 0	0,635 7
1		0,169 1		0,163 0
		Somme des efficacités : 1,0000	Somme des efficacités : 1,0000	

de telle sorte que son axe optique soit parallèle aux sillons du réseau peut se traiter au moyen de programmes conçus pour des milieux isotropes. Dans la suite, supposant  $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y$ , nous ne nous intéresserons donc qu'au cas de polarisation H//, pour lequel un nouveau programme a été réalisé.

2. RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS INTÉGRALES OBTENUES. — Dans le cas H//, le système à résoudre peut s'écrire :

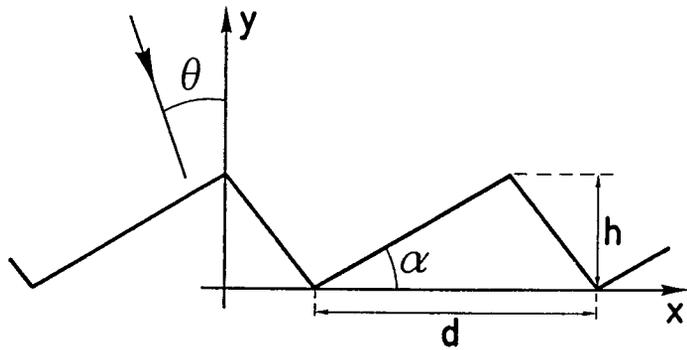
$$i = 1, 2; \quad \sum_{q=2,3} \int_0^d N_{3q}^i(x, x') F_q(x') \sqrt{1+f'(x')^2} dx' = \lambda_i F_3(x) + \mu_i F_3^{\text{inc}}(x),$$

où l'indice  $i$  est relatif au milieu ( $N_{3q}^1$  fait intervenir la permittivité  $\varepsilon_1$  et  $N_{3q}^2$  les permittivités de  $[\varepsilon_2]$ ; ces noyaux sont explicités en appendice), et où  $\lambda_1 = 1$ ,  $\lambda_2 = -1$ ,  $\mu_1 = -2$ ,  $\mu_2 = 0$ . Si nous écrivons ces relations sous la forme :

$$\sum_{q=2,3} \int_0^d \left\{ \frac{N_{3q}^i(x, x')}{\exp(i\alpha_0(x-x'))} \right\} \left\{ \frac{F_q(x') \sqrt{1+f'(x')^2}}{\exp(i\alpha_0 x')} \right\} dx' = \lambda_i \left\{ \frac{F_3(x)}{\exp(i\alpha_0 x)} \right\} + \mu_i \left\{ \frac{F_3^{\text{inc}}(x)}{\exp(i\alpha_0 x)} \right\}$$

nous faisons apparaître entre accolades des fonctions (ou distributions) périodiques par rapport à  $x$  et  $x'$ . Nous pouvons les représenter par leurs séries de Fourier (une double série pour les distributions des 2 variables  $x$  et  $x'$ ). Nous calculons les coefficients de Fourier des accolades contenant  $F_3^{\text{inc}}$  et  $N_{3q}^i$  par transformée de Fourier discrète. En fait, les noyaux  $N_{32}^i$  sont singuliers et il faut préalablement leur retrancher un noyau adéquat présentant le même type de singularité et dont les coefficients de Fourier s'obtiennent analytiquement. Nous obtenons alors (l'intégration se fait de façon élémentaire dès que les accolades sont remplacées par leurs séries de Fourier) un système linéaire dont la

$h=0,2 \mu\text{m}$ ;  $\alpha=30^\circ$ ;  $d=0,5 \mu\text{m}$ .



résolution donne les coefficients de Fourier relatifs au champ total sur le profil. On s'intéresse généralement aux efficacités dans les différents ordres réfléchis et transmis. Elles peuvent être calculées aisément au moyen des formules de Kirchhoff-Helmholtz généralisées (équations (5, 5') de la note [1]) par intégration sur le profil d'une expression liée au champ total.

*Remarque.* — Nous avons supposé que le profil du réseau est de classe  $C^2$ , et de fait l'écriture du programme nécessite la connaissance de  $f''(x)$ . Si cette condition n'est pas satisfaite (réseau échellette par exemple), nous remplaçons  $f$  par la fonction obtenue en sommant les  $N$  premiers termes de sa série de Fourier. Les tests numériques effectués montrent une rapide convergence de la solution lorsque  $N$  croît (tableau III).

3. RÉSULTATS NUMÉRIQUES. CRITÈRES DE VALIDITÉ. — Nous avons traité le cas d'un substrat ayant la propriété d'avoir 3 permittivités nettement distinctes :  $\epsilon_x=6,31$ ,  $\epsilon_y=6,81$ ,  $\epsilon_z=7,34$ , qui d'après [4] correspondent à la lithargite; il s'agit donc d'un exemple très académique... Le superstrat est vide ( $\epsilon_1=1$ ). Le réseau est éclairé par une onde incidente (longueur d'onde  $\lambda=0,6 \mu\text{m}$ ) de polarisation H// sous l'incidence  $\theta=20^\circ$ . Le pas du réseau est  $d=0,5 \mu\text{m}$ ; la profondeur des sillons, notée  $h$ , est la différence  $\max(f(x))-\min(f(x))$ . Dans ces conditions, on obtient 2 ordres réfléchis : les ordres  $-1$  et  $0$  qui se propagent sous les angles  $-59,09$  et  $20^\circ$  (donnés par la classique « formule des réseaux »), et quatre ordres transmis ( $-2, -1, 0$  et  $1$ ). Pour ceux-ci les vecteurs d'onde font avec la normale au plan moyen du réseau les angles respectifs  $\theta_{-2}=-53,11^\circ$ ,  $\theta_{-1}=-19,88^\circ$ ,  $\theta_0=7,82^\circ$  et  $\theta_1=37,27^\circ$  (on montre en effet que  $\theta_n=\text{Arctg}(\alpha_n/\beta_n)$ ;  $\alpha_n$  et  $\beta_n$  sont définis en appendice) tandis que les vecteurs de Poynting font avec cette normale les angles  $-50,99, -18,53, 7,25$  et  $35,19^\circ$ . On notera que les ordres transmis se propagent dans des directions différentes de celles que l'on obtiendrait dans le cas de polarisation E// (qui seraient données par la « formule des réseaux » compte tenu des résultats du premier paragraphe).

TABLEAU III  
NF=12; ND=45; NSOM=30.

Ordre	N=3		N=5		N=10	
	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises	Efficacités réfléchies	Efficacités transmises
-2.....		0,0119		0,0126		0,0128
-1.....	0,1226	0,1339	0,1167	0,1363	0,1166	0,1365
0.....	0,0126	0,4782	0,0142	0,4766	0,0143	0,4758
1.....		0,2408		0,2436		0,2439

Soient : NSOM le nombre de termes retenus pour la sommation des séries donnant les noyaux (la sommation est effectuée de  $-NSOM$  à  $+NSOM$ ),

NF le nombre de coefficients de Fourier retenus dans les développements des champs et des noyaux (sommation de  $-NF$  à  $+NF$ ),

ND le nombre total de points de discrétisation (par période) utilisés pour les intégrations (la transformée de Fourier discrète consiste à effectuer les intégrations par la « méthode des rectangles »).

L'expérience numérique montre (tableau I) une rapide convergence de la solution lorsque NF, ND et NSOM croissent, et aussi que le bilan énergétique permet d'estimer l'incertitude sur les efficacités calculées. Nous avons également reporté dans ce tableau le temps de calcul T sur IBM 3090.

Le tableau II donne une comparaison avec les résultats obtenus par une méthode différentielle que nous avons précédemment mise au point [2]. Comme nous l'avons déjà montré pour des milieux isotropes [5], la conservation de l'énergie est automatiquement vérifiée dans le cas de la méthode différentielle et ne constitue donc pas un critère de validité des résultats. En outre, la méthode différentielle conduit à des difficultés numériques pour des réseaux profonds. Elle possède par contre l'avantage de pouvoir traiter le cas où les matrices de permittivité sont quelconques, alors que notre programme « intégral » est pour l'instant limité à des permittivités diagonales.

Le tableau III donne les résultats obtenus avec le profil échelle schématisé figure 1. La fonction  $f$  est représentée par une série de Fourier tronquée à l'harmonique N. On notera la rapide convergence de la solution lorsque N croît.

Je tiens à remercier MM. les Professeurs R. Petit et M. Cadilhac, qui ont dirigé ce travail, pour leur précieuse contribution, ainsi que M. D. Maystre, Directeur de Recherche, qui m'a bien souvent conseillé dans le traitement numérique. Les moyens de calcul utilisés ont été attribués par le Conseil scientifique du Centre de Calcul vectoriel pour la Recherche.

#### APPENDICE

Posons  $k_0 = \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ , et pour  $n \in \mathbb{Z}$ ,  $\alpha_n = \sqrt{\epsilon_1} k_0 \sin \theta + n 2\pi/d$ ,  $\beta_n = \sqrt{(\epsilon_x/\epsilon_y)(k_0^2 \epsilon_y - \alpha_n^2)}$ , avec la détermination  $\text{Im}(\beta_n) > 0$  ou bien  $\beta_n > 0$ . En notant  $\text{sgn}(y)$  la fonction égale à  $+1$  si  $y > 0$  et à  $-1$  si  $y < 0$ , on a :

$$N_{32}^2(x, x') = \frac{1}{\omega \mu_0 d \sqrt{1 + f'(x)^2}} \sum_n \frac{\epsilon_x k_0^2}{\beta_n} e^{i\alpha_n(x-x') + i\beta_n |f(x) - f(x')|},$$

$$N_{33}^2(x, x') = \frac{-1}{d \sqrt{1 + f'(x)^2}} \sum_n \left( \frac{\epsilon_x \alpha_n f'(x')}{\epsilon_y \beta_n} + \text{sgn}(f(x') - f(x)) \right) e^{i\alpha_n(x-x') + i\beta_n |f(x) - f(x')|}$$

Les noyaux  $N_{3q}^1$  s'en déduisent en y remplaçant  $\epsilon_x$  et  $\epsilon_y$  par  $\epsilon_1$ .

Note reçue le 6 juin 1988, acceptée le 13 septembre 1988.

#### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] G. TAYEB, M. CADILHAC et R. PETIT, Sur l'étude théorique de réseaux de diffraction constitués de matériaux anisotropes, *C.R. Acad. Sci. Paris*, 307, 1988, série II, p. 711-714.
- [2] R. PETIT et G. TAYEB, About the electromagnetic theory of gratings made with anisotropic materials, *Proceedings of S.P.I.E.*, San Diego, 815, août 1987, p. 11-16.
- [3] G. TAYEB, R. PETIT et M. CADILHAC, On the theoretical and numerical study of diffraction gratings coated with anisotropic layers, *Proceedings of the 14th Congress of the I.C.O.*, Quebec, 813, août 1987, p. 407-408.
- [4] A. JENKINS et E. WHITE, *Fundamentals of optics*, McGraw-Hill Book Company, International Student Edition, 1981, p. 554.
- [15] R. PETIT et G. TAYEB, On the use of the energy balance criterion as a check of validity of computations in grating theory, *Proceedings of S.P.I.E.*, San Diego, 815, août 1987, p. 2-10.