

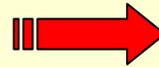
Jérémie DREVILLON

**DESIGN AB-INITIO DE MATÉRIAUX MICRO ET
NANOSTRUCTURÉS POUR L'ÉMISSION THERMIQUE
COHÉRENTE EN CHAMP LOINTAIN ET EN CHAMP
PROCHE**

~~➤ Approche radiométrique~~

- Notion de corps noir et de luminance
- + hypothèse de l'optique géométrique

Aux échelles



sublongueur d'onde

➤ Approche électromagnétique

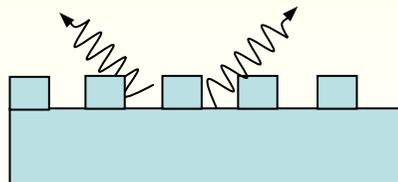
- Équations de Maxwell

➤ Conception de sources thermiques cohérentes

Application : Nouvelles technologies de conversion d'énergie, refroidissement des composés électroniques, ...

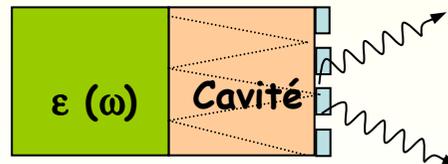
Les réseaux de surface

Greffet et al. Nature 416 (2002)



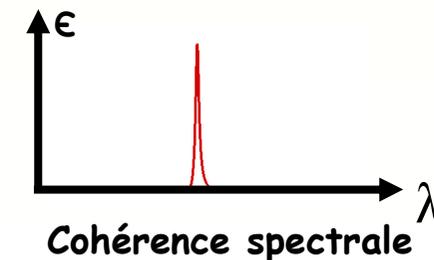
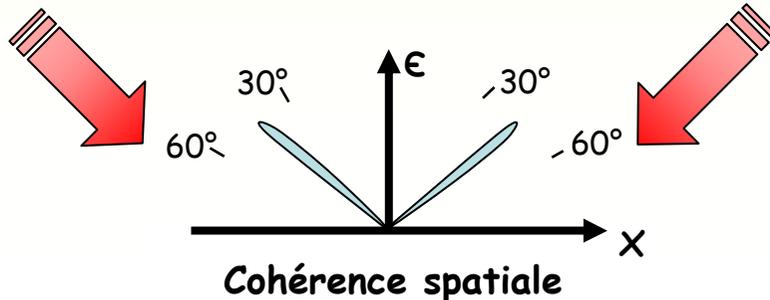
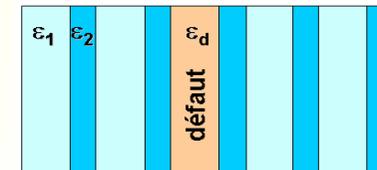
Les structures hybrides

Joulain & Loizeau, JQRST (2007)



Les cristaux photoniques

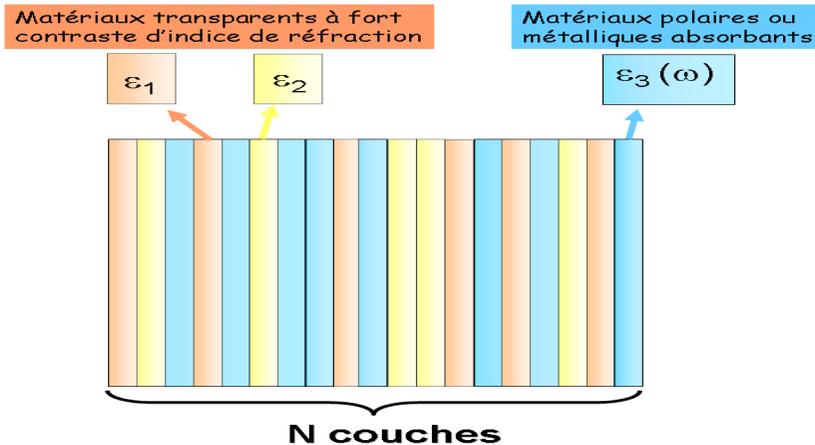
Ben Abdallah & Ni, J. Appl. Phys. (2005)



➤ Objectif

Identifier des structures ad-hoc de matériaux pour obtenir des sources thermiques cohérentes

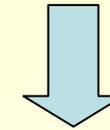
Répondre à des critères d'émissivité ET de réflectivité spécifiques pour les 2 états de polarisation de la lumière



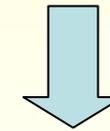
Unique paramètre d'entrée : permittivité diélectrique des matériaux

Principe de la méthode d'optimisation

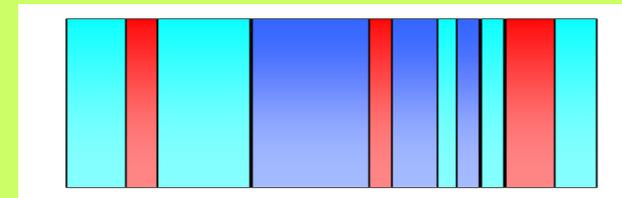
Entrée $\epsilon_{cible}(\lambda, \theta), r_{cible}(\lambda, \theta)$



Processus d'optimisation



Sortie structure optimale

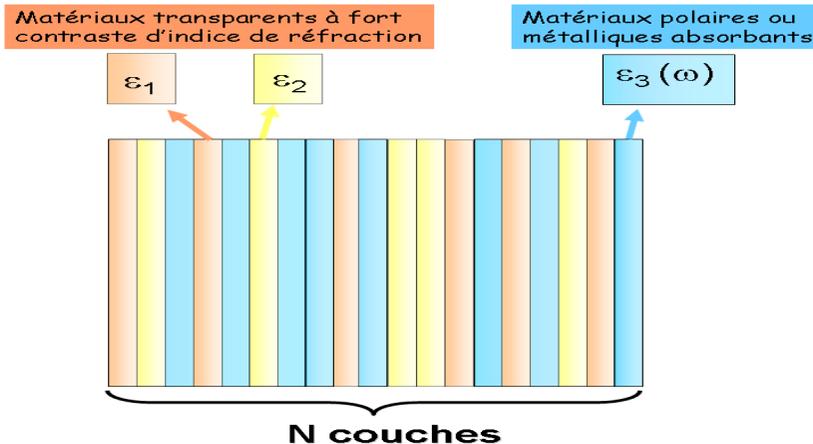


$\epsilon_{calc} \rightarrow \epsilon_{cible}(\lambda, \theta)$ $r_{calc} \rightarrow r_{cible}(\lambda, \theta)$

➤ Objectif

Identifier des structures ad-hoc de matériaux pour obtenir des sources thermiques cohérentes

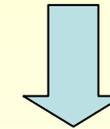
Répondre à des critères d'émissivité ET de réflectivité spécifiques pour les 2 états de polarisation de la lumière



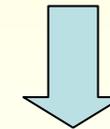
Unique paramètre d'entrée : permittivité diélectrique des matériaux

Principe de la méthode d'optimisation

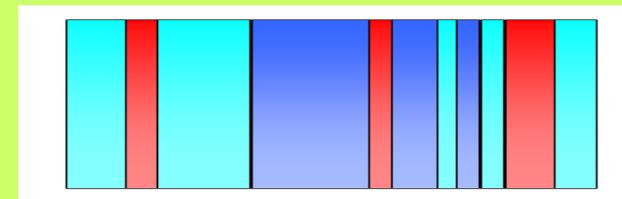
Entrée $\epsilon_{cible}(\lambda, \theta), r_{cible}(\lambda, \theta)$



Algorithme génétique



Sortie structure optimale

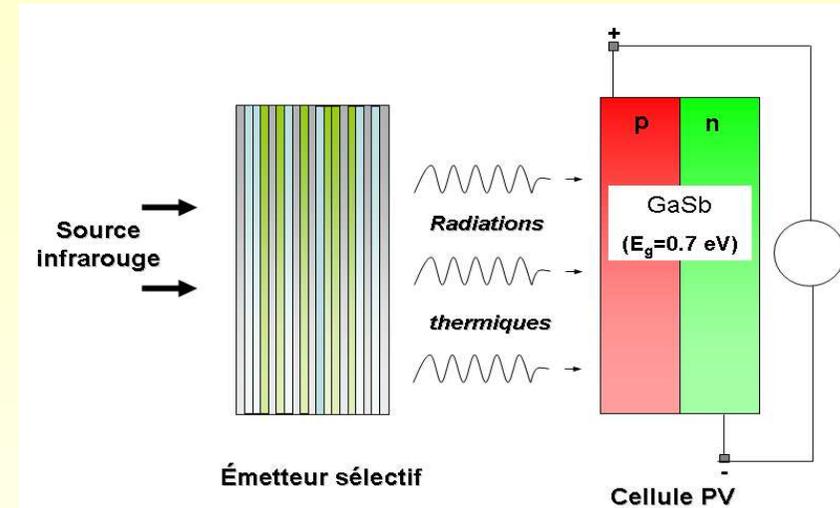


$$J = \|A_{cible} - A_{calc_j}\|^2 \longrightarrow \text{minimum}$$

Fonction fitness

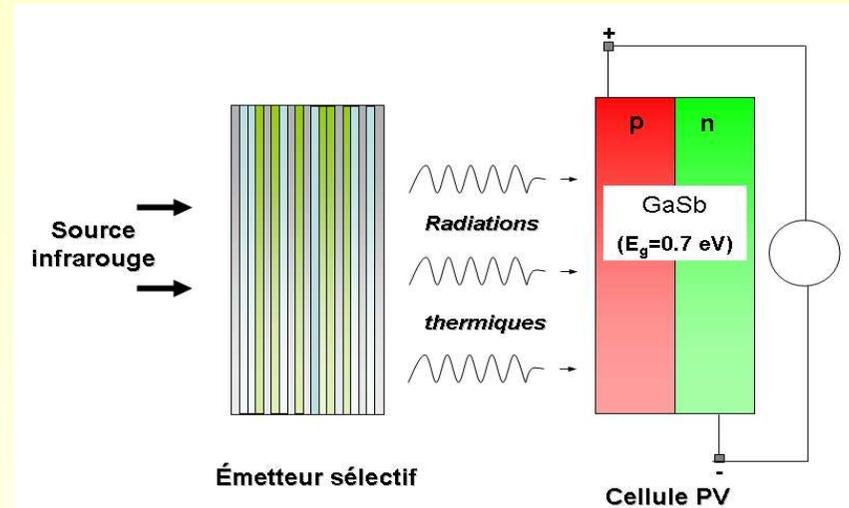
➤ Application

- Concevoir une source thermique cohérente dans le **proche infrarouge** en vue d'une application comme **émetteur sélectif** dans un système de conversion **thermophotovoltaïque**



➤ Application

- Concevoir une source thermique cohérente dans le **proche infrarouge** en vue d'une application comme **émetteur sélectif** dans un système de conversion **thermophotovoltaïque**



- Espace de recherche : $[\lambda_{\min}=1.3 \mu\text{m}, \lambda_{\max}=1.7 \mu\text{m}]$, $[\theta_1=0^\circ, \theta_2=90^\circ]$
- Structure composée de 50 couches élémentaires d'épaisseur $h=50 \text{ nm}$ et constituée de 3 matériaux : Ag, Si, SiO_2

$$\epsilon_{Ag} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}$$

Modèle de Drude

- Définition de la fitness

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

↑
↑

Cibles indépendantes de la polarisation

↓
polarisation

➤ Définition des propriétés radiatives cibles

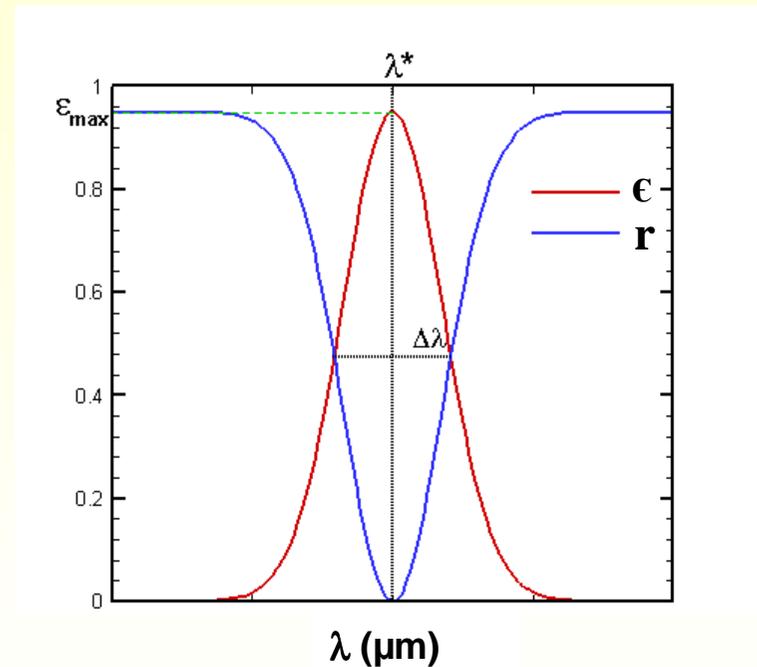
- Émissivité cible

$$\epsilon_{cible} = \epsilon_{max} \exp \left[-Q^2 \ln 16 (\lambda - \lambda^*(\theta))^2 / \lambda^{*2}(\theta) \right]$$

Facteur de qualité

$$Q = \frac{\lambda^*}{\Delta\lambda}$$

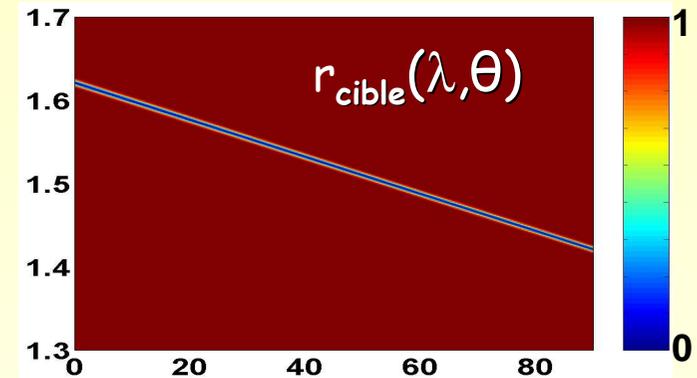
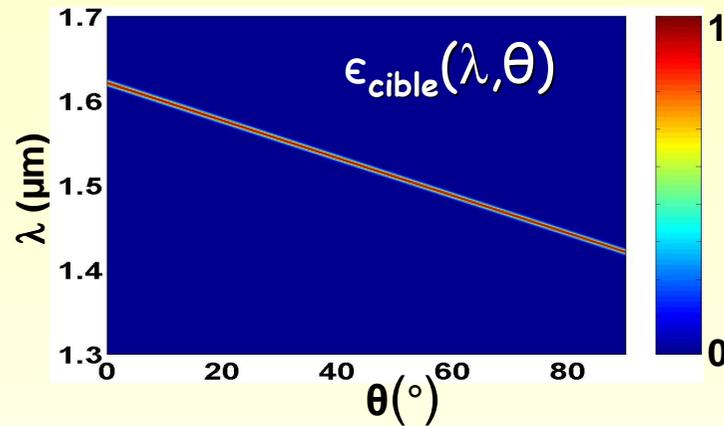
lié au degré de cohérence spectrale d'une source thermique



- Réflectivité cible

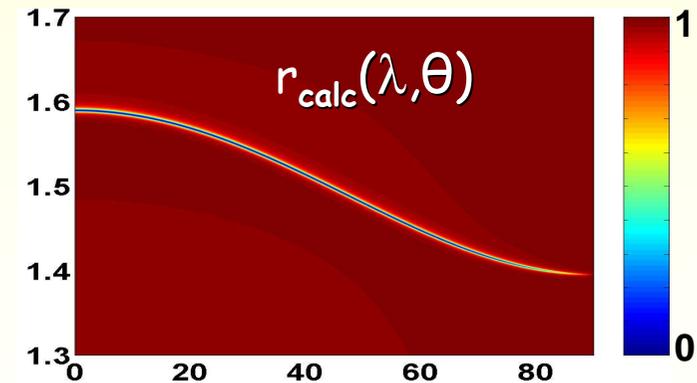
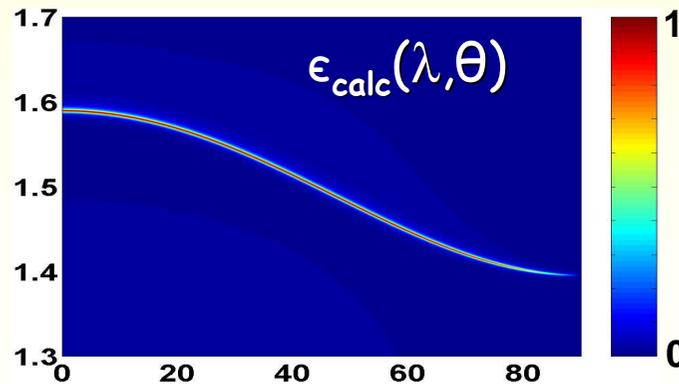
$$r_{cible} = 1 - \epsilon_{cible} - t_{cible} \quad \text{avec } t_{cible} \ll 1$$

Propriétés radiatives cibles

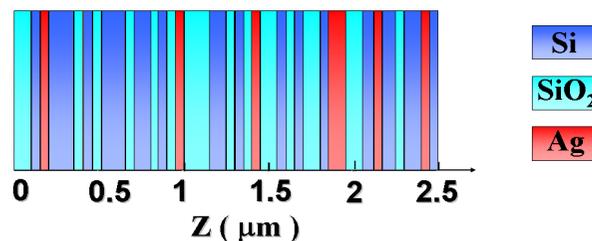


Optimisation sur 100 générations par AG

Propriétés radiatives obtenues

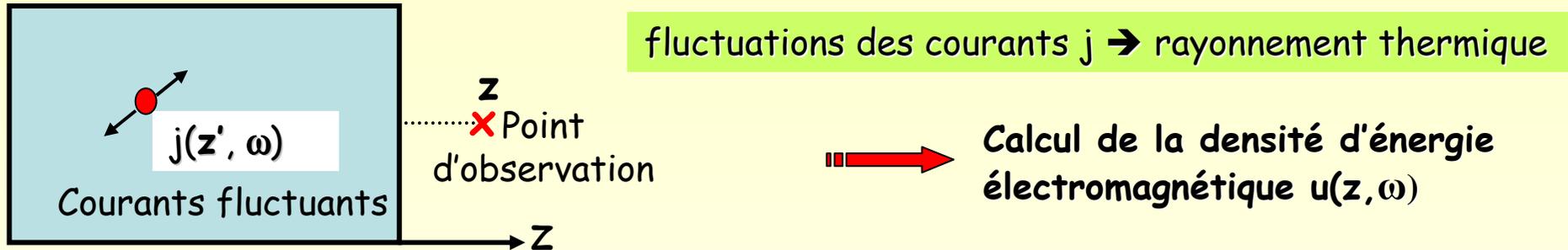


Structure finale



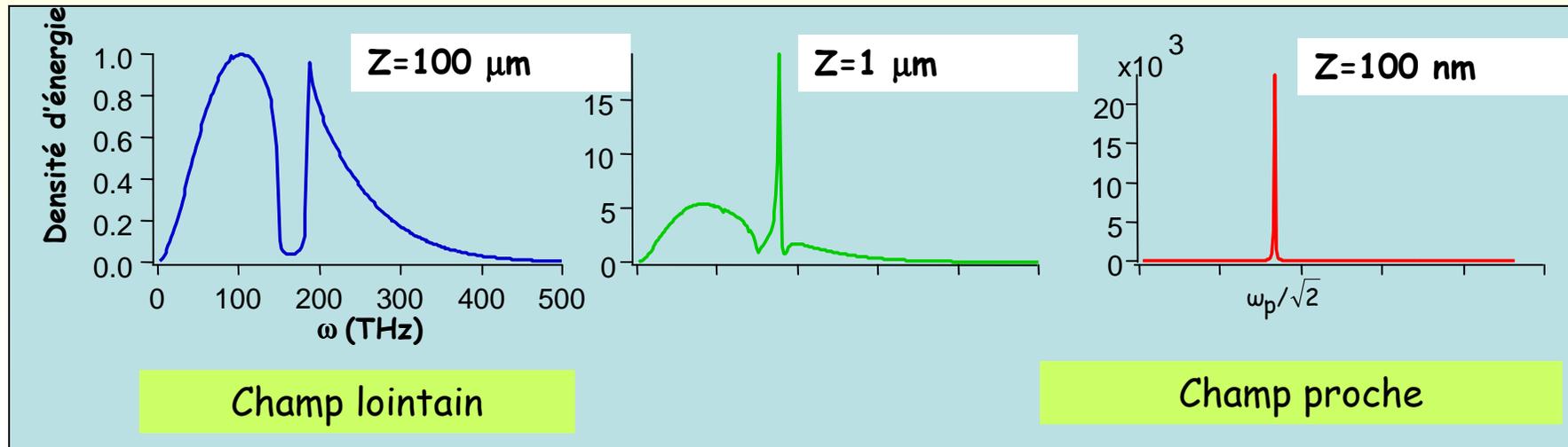
Conception de plusieurs sources thermiques cohérentes dans l'infrarouge

➤ Modélisation du rayonnement thermique en champ proche



➤ Densité d'énergie au dessus d'un matériau massif (SiC, T=300 K)

Shchegrov et al., Phys. Rev. Lett. 85 (2000)

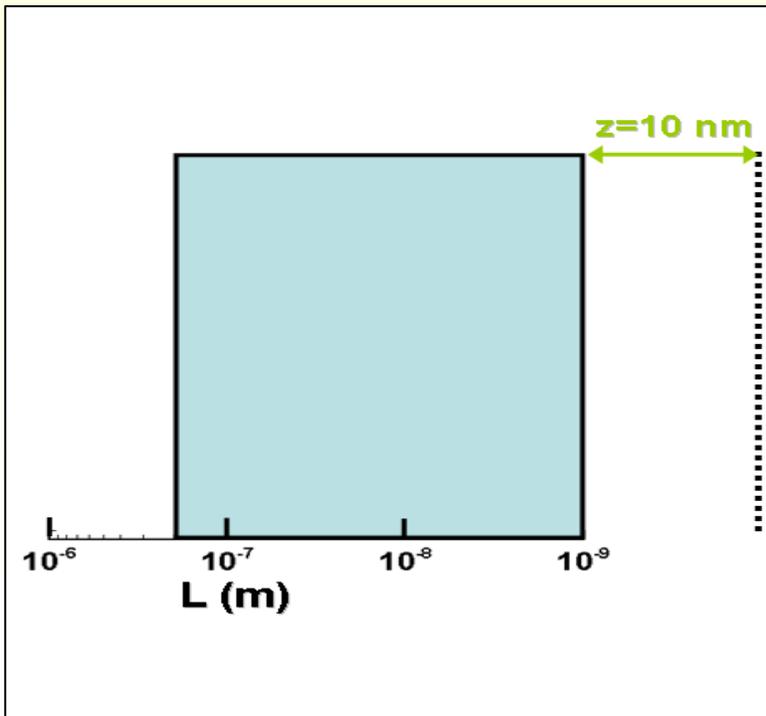


➡ Qu'en est il pour un matériau borné ?

➤ Densité d'états ρ au dessus d'un film d'aluminium $u(\mathbf{r}, \omega) = \rho(\mathbf{r}, \omega)\Theta(\omega, T)$

$$\rho(z, \omega) = \frac{\omega^2}{\pi c^3} \left\{ \int_0^{\omega/c} \frac{k_{//} dk_{//}}{k_0 |\gamma|} \frac{2 + (k_{//} / k_0)^2 [\text{Re}(r^s \exp[2i\gamma(z-L)]) + \text{Re}(r^p \exp[2i\gamma(z-L)])]}{2} \right\} \rightarrow \text{Contribution propagative}$$

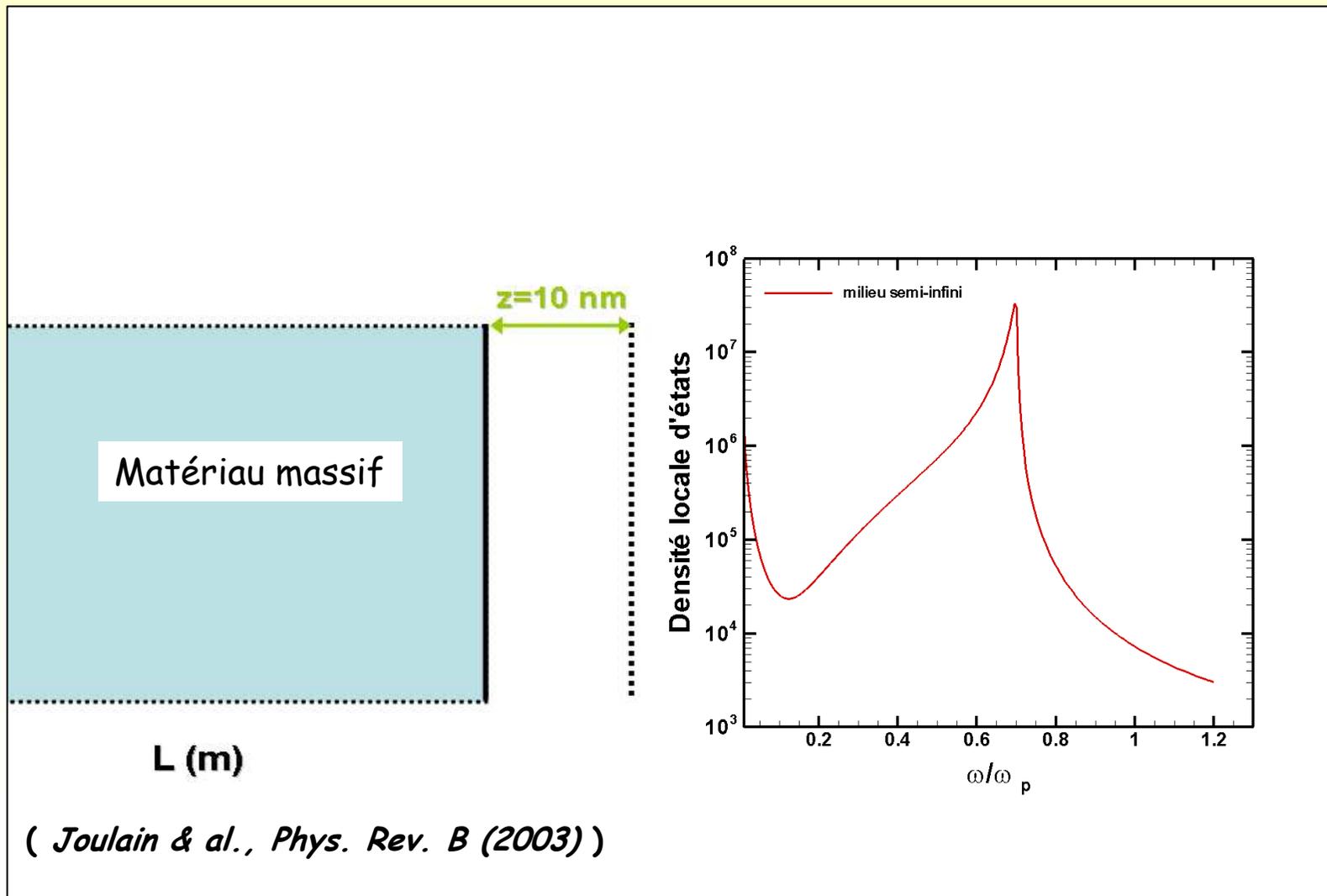
$$\left\{ \int_{\omega/c}^{\infty} \frac{4k_{//}^3 dk_{//}}{k_0^3 |\gamma|} \frac{\text{Im}(r^s) + \text{Im}(r^p)}{2} \exp[2 \text{Im}(\gamma)(z-L)] \right\} \rightarrow \text{Contribution évanescence}$$



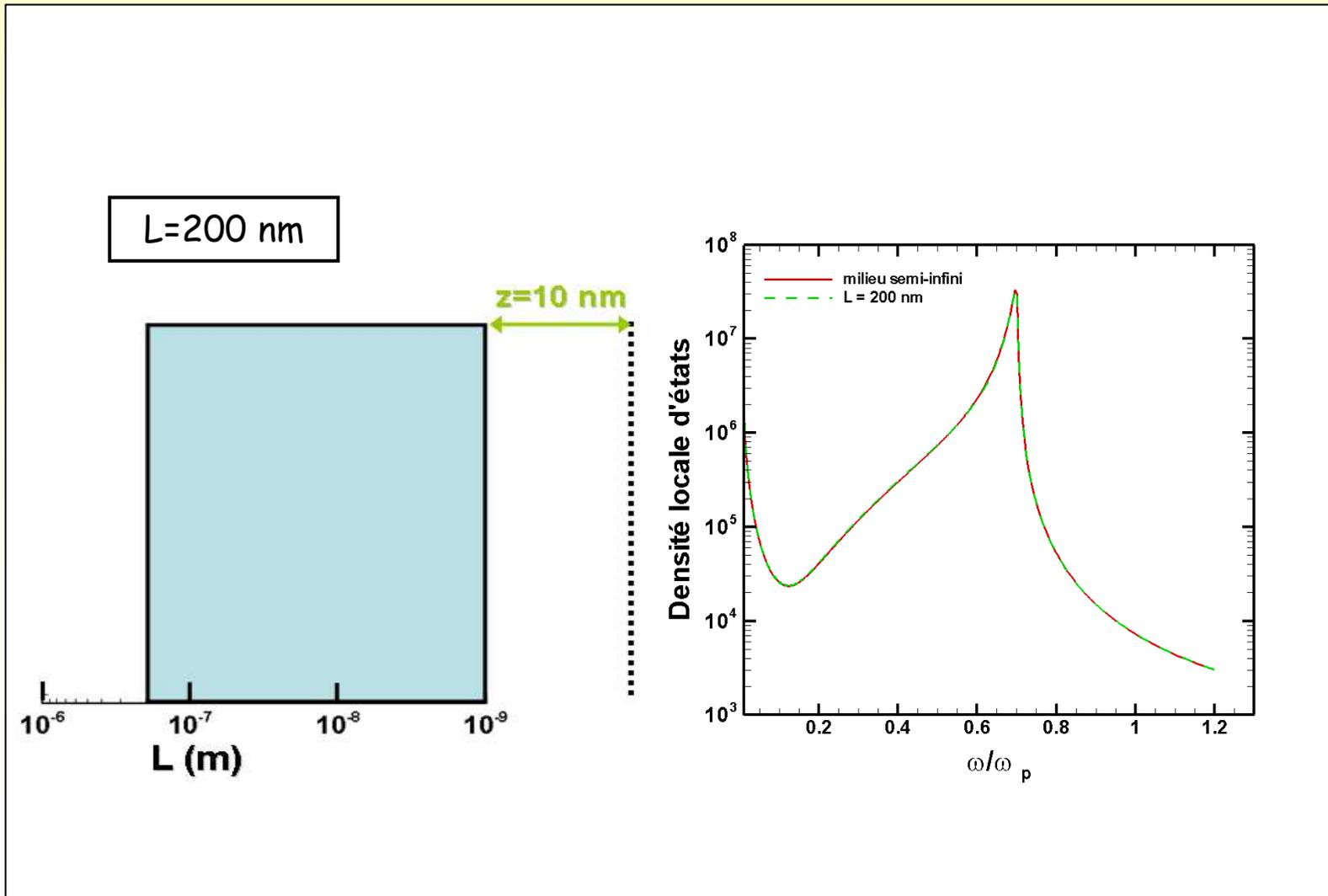
En champ proche :
Modes évanescents \gg modes propagatifs

Calcul de la densité d'états des modes évanescents pour différentes épaisseurs de films

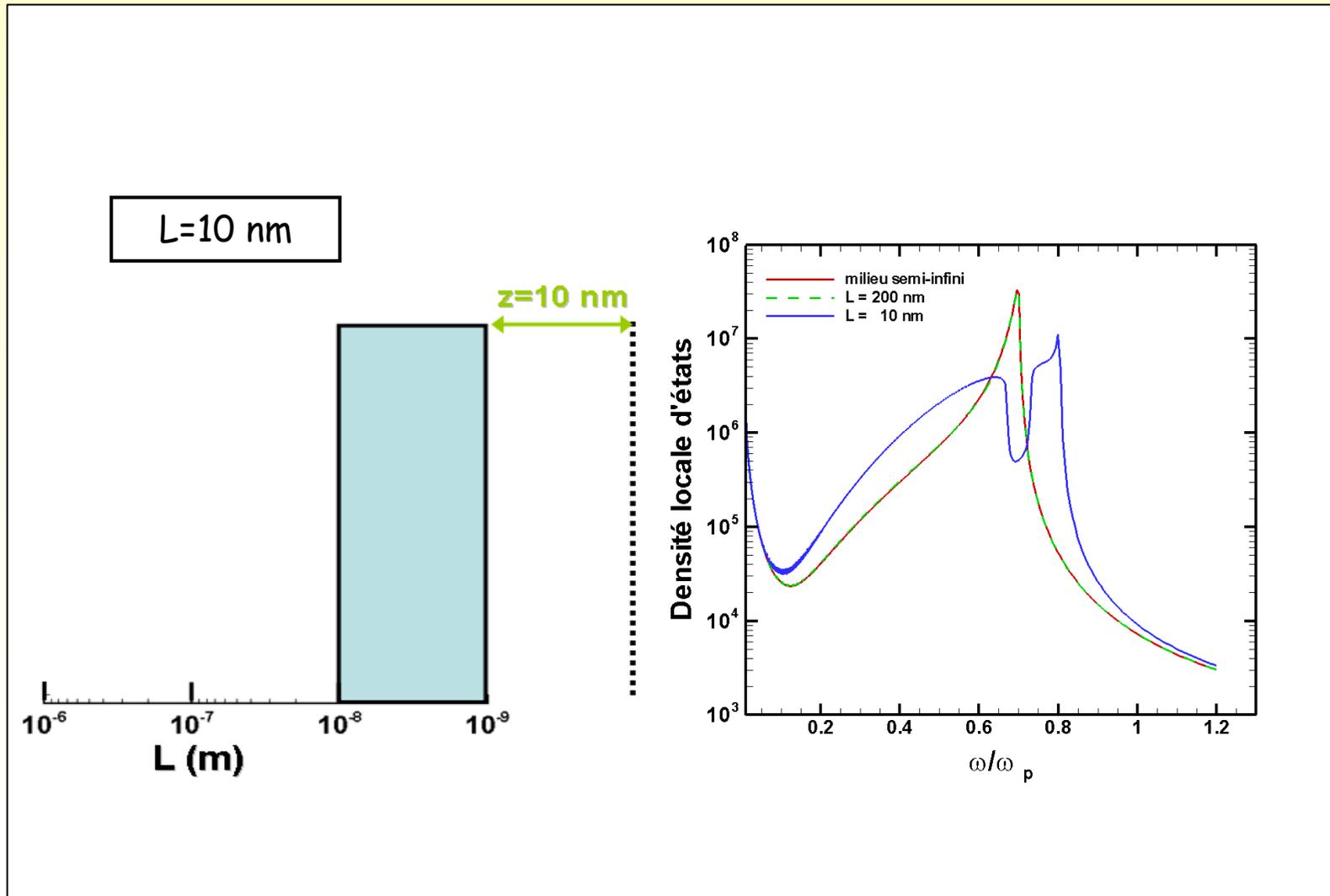
➤ Densité locale d'états au dessus d'un film d'aluminium



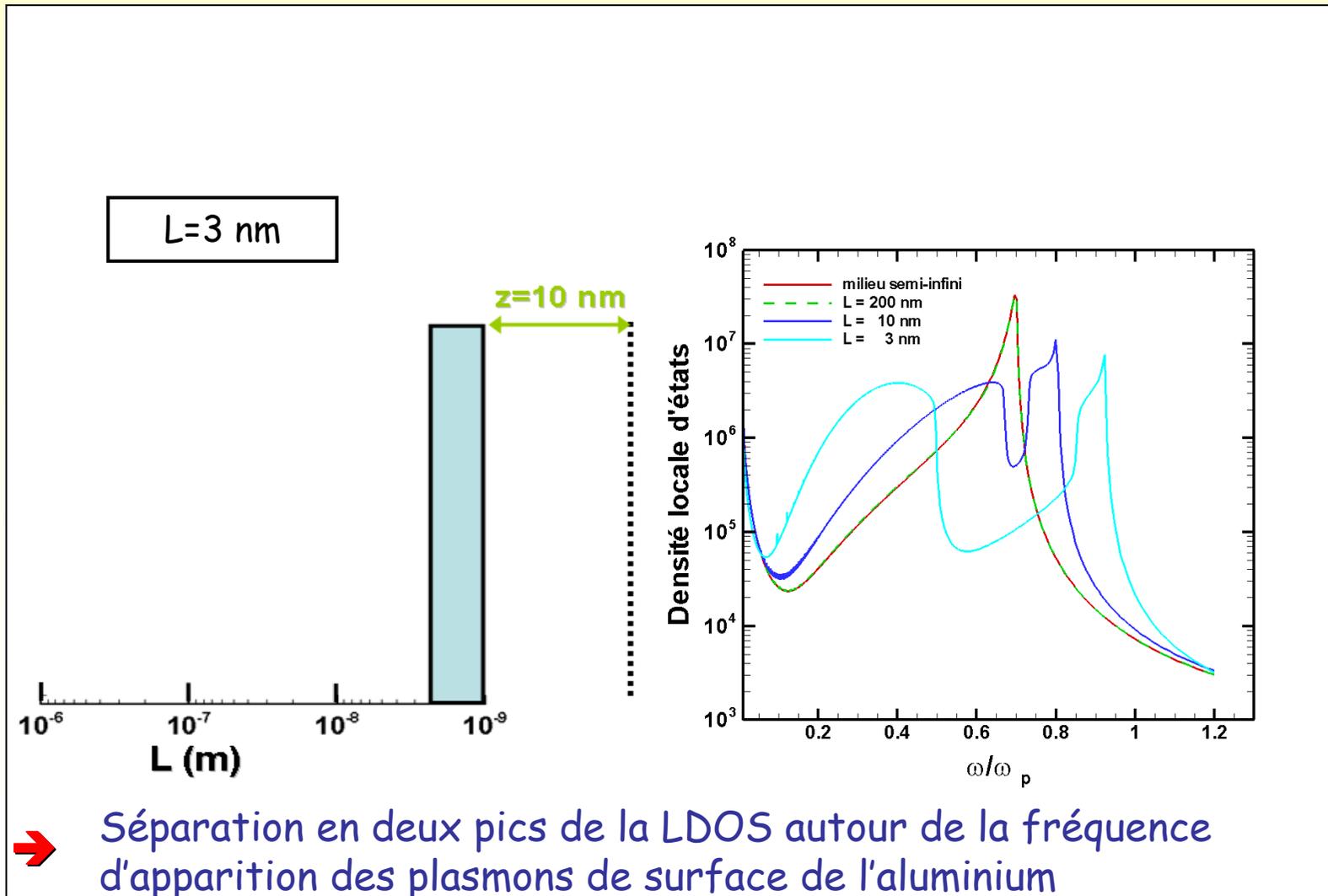
➤ Densité locale d'états au dessus d'un film d'aluminium

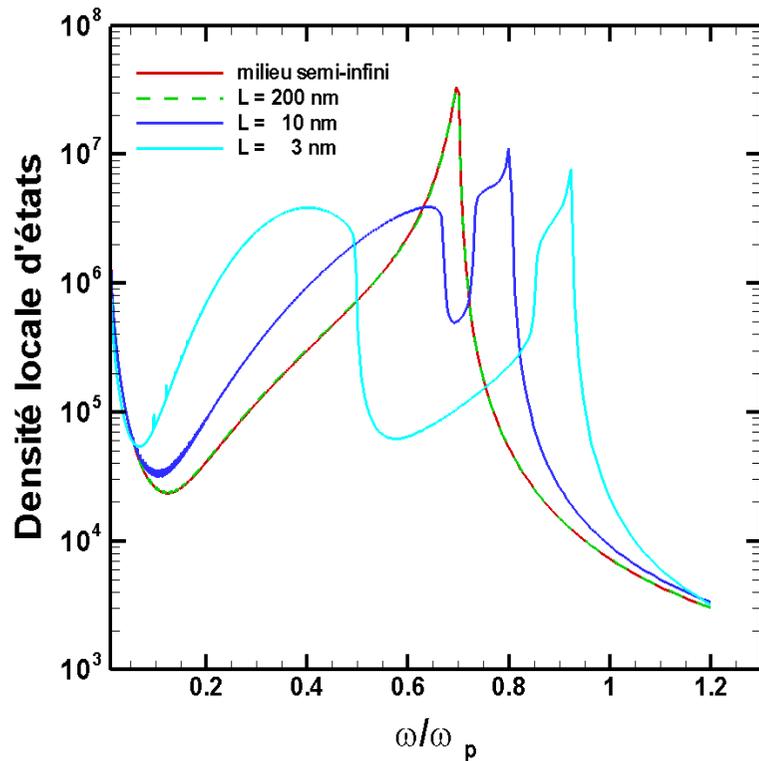


➤ Densité locale d'états au dessus d'un film d'aluminium



➤ Densité locale d'états au dessus d'un film d'aluminium





- Pour $L \leq \lambda_{\text{Caractéristique}}$: séparation de la densité d'états en deux pics

➡ Due à l'hybridation des modes de surfaces supportés par les films minces

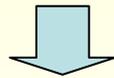
- Comportement thermique potentiellement intéressant pour le design d'émetteurs nanostructurés en champ proche

➤ Densité locale d'états au dessus d'une structure multicouche

$$\rho(\mathbf{r}_3, \omega) = \frac{\omega^2}{\pi c^3} \left\{ \int_{\omega/c}^{\infty} \frac{4k_{||}^3 dk_{||}}{k_0^3 |\gamma_3|} \frac{\text{Im}(r^s) + \text{Im}(r^p)}{2} \exp[2 \text{Im}(\gamma_3)(z_3 - L)] \right\} \Rightarrow \text{Calcul du coefficient de réflexion de la structure}$$

En entrée

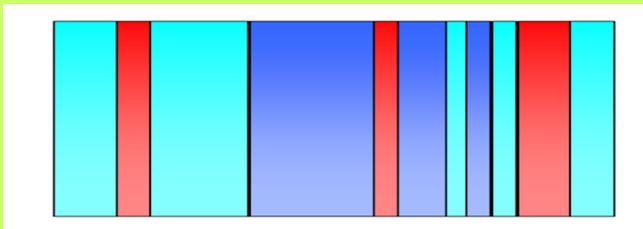
ρ_{cible}



Algorithme génétique

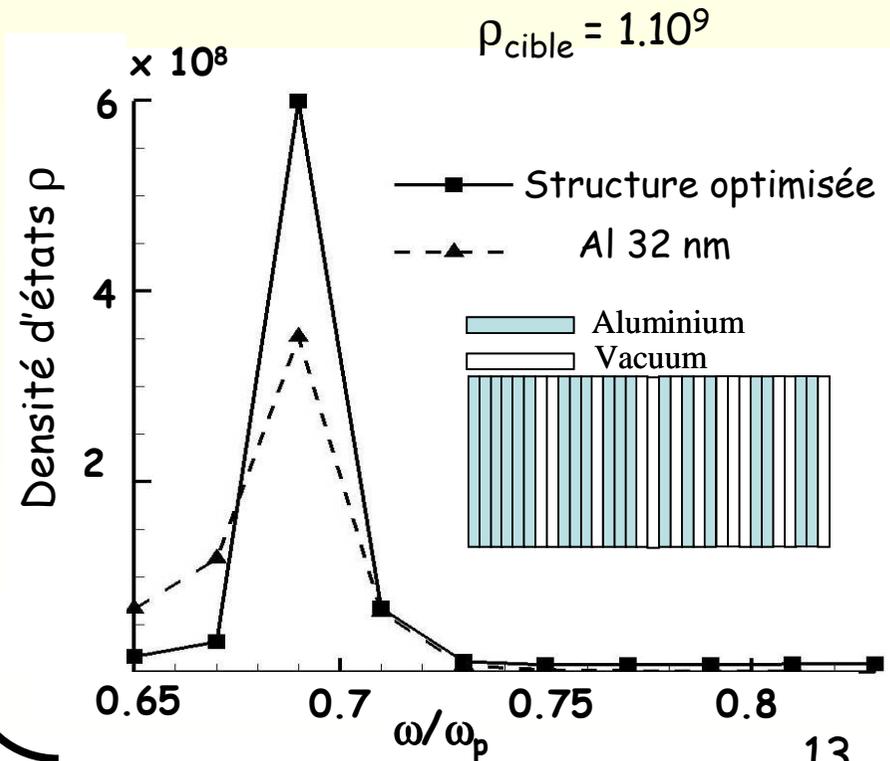


Sortie structure optimale



$\rho_{calc} \rightarrow \rho_{cible}$

Résultats



Conclusions

- En champ lointain : développement d'une **méthode rationnelle** pour le **design inverse** de matériaux nanostructurés à émission thermique cohérente
 - Combinaison de la théorie des matrices de transfert et d'un procédé d'évolution par algorithme génétique
 - Conception de sources thermiques partiellement cohérente dans l'infrarouge

- En champ proche : Calcul de la densité d'énergie au dessus d'un film et de structures multicouches dans le cadre de l'électrodynamique fluctuacionnelle
 - Séparation de la LDOS en deux pics lorsque l'épaisseur du film diminue et devient comparable ou plus petite que la longueur d'onde caractéristique
 - Hybridation des modes de surfaces supportés par les films minces responsable de cette modification de la LDOS
 - Premiers résultats prometteurs pour la conception par design ab-initio de sources thermiques cohérentes à haute densité d'énergie

Annexes

1^{ère} étape

- Génération aléatoire d'une population

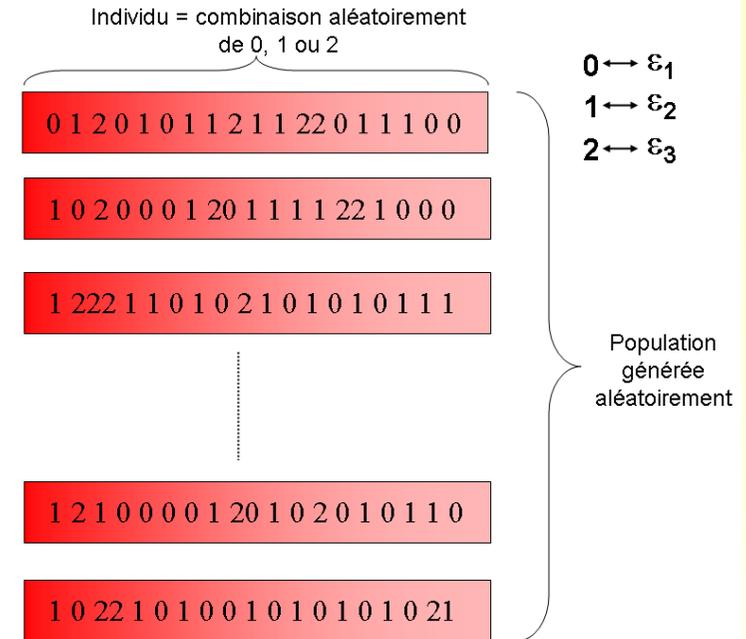
2^{ème} étape

- Evaluation des propriétés radiatives $A_{\text{calc}}(\lambda, \theta)$
- Calcul de " l'éloignement " à la cible

⇒ Définition d'un critère J à optimiser (fonction fitness)

$$J = \|A_{\text{cible}} - A_{\text{calc}_j}\|^2 \longrightarrow \min$$

Calcul A_{calc_j}  Résolution du problème direct



Annexes

➤ Résolution du problème direct

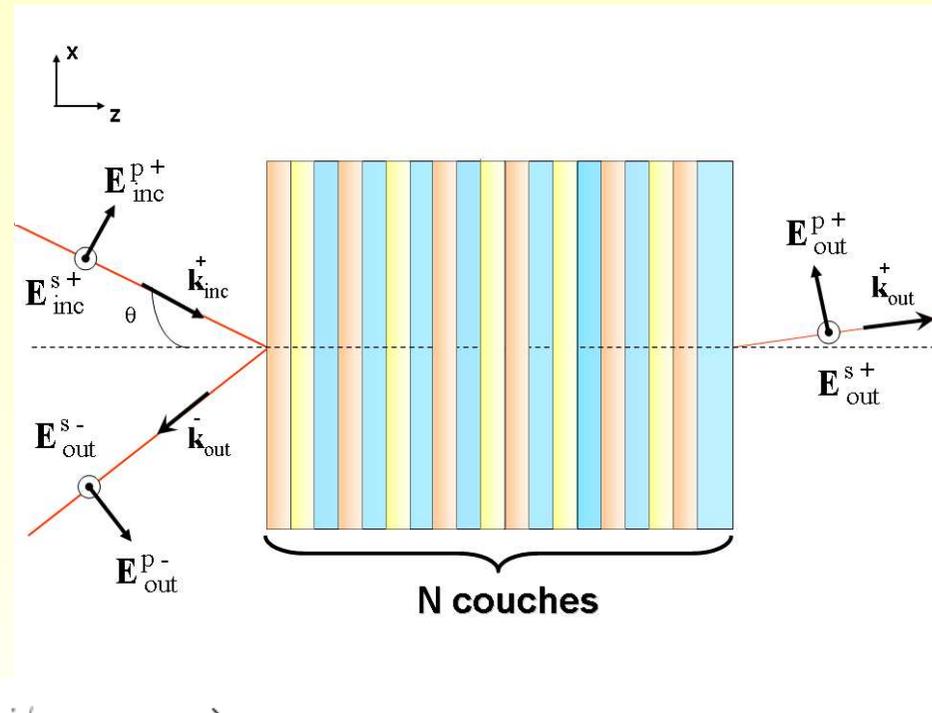
- Calcul des propriétés radiatives des structures par la méthode des matrices de transfert

$$\begin{pmatrix} E_{inc}^+ \\ E_{out}^- \end{pmatrix} = \mathfrak{S}^N \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathfrak{S}^N = \left(\prod_{j=0}^{N-1} T_{j,j+1} T_{j+1}^{pro} \right) T_{N,N+1}$$

Avec :

$$T_{i,j} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix} \quad T_j^{pro} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_j} \end{pmatrix}$$



Réflectivité

$$r(\lambda, \theta) = \frac{E_{out}^-}{E_{inc}^+} = \frac{\mathfrak{S}_{21}^N}{\mathfrak{S}_{11}^N}$$

Transmittivité

$$t(\lambda, \theta) = \frac{E_{out}^+}{E_{inc}^+} = (\mathfrak{S}_{11}^N)^{-1}$$

Émissivité

$$\epsilon(\lambda, \theta) = 1 - r(\lambda, \theta) - t(\lambda, \theta)$$

Lois de Kirchhoff

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha(\lambda, \theta) + r(\lambda, \theta) + t(\lambda, \theta) = 1 \\ \alpha(\lambda, \theta) = \epsilon(\lambda, \theta) \end{array} \right\}$$

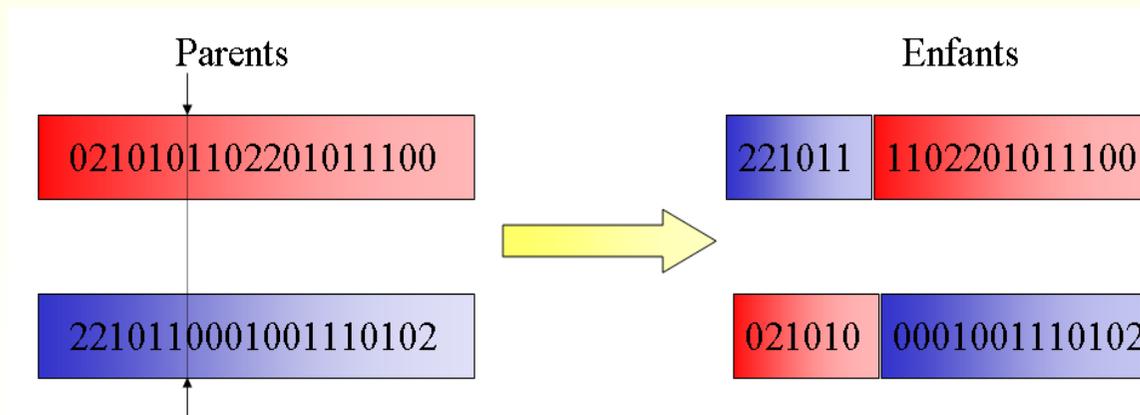
Annexes

3^{ème} étape

- Sélection d'un individu basée sur la valeur de sa fitness (classement des individus en fonction de leur fitness)
- Choix d'un pourcentage d'individus retenus parmi la population courante

4^{ème} étape

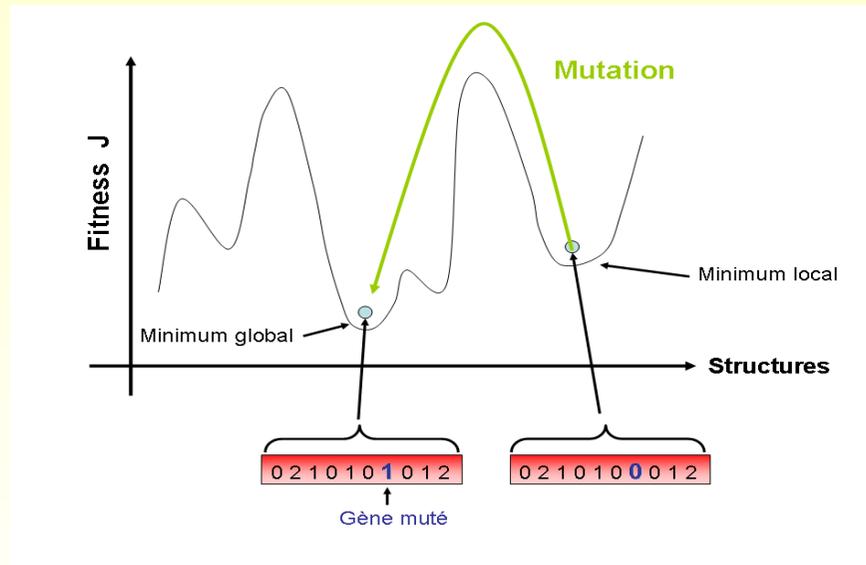
- Croisement : génération des *enfants*



Annexes

Dernière étape : mutation

- Remplacement de gènes par d'autres choisis aléatoirement



⇒ Évite la convergence vers un minimum local

- Taux de mutation p_m :

Définit la probabilité pour un gène d'être modifié

Annexes

Application : thermophotovoltaïque en champ proche

Photovoltaïque



$T = 6000\text{K}$

Cellule PV

$T = 300\text{K}$

Thermophotovoltaïque

Source thermique

$T = 2000\text{K}$

Cellule TPV

$T = 300\text{K}$

Thermophotovoltaïque
champ proche

Source thermique

$T = 2000\text{K}$

$d \ll \lambda_{\text{rad}}$

Cellule TPV

$T = 300\text{K}$

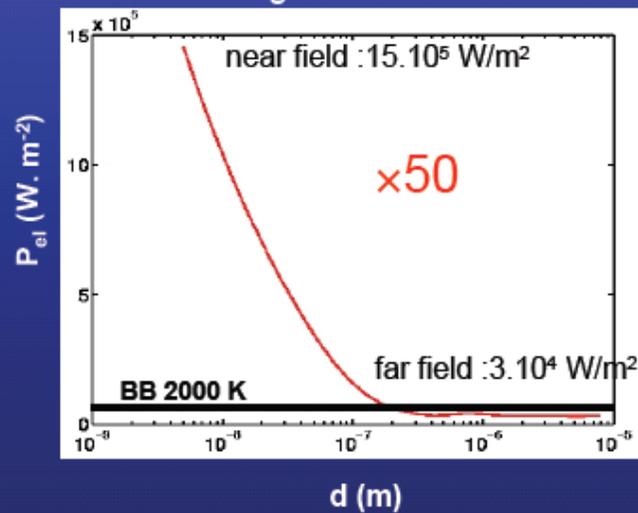
Puissance électrique délivrée

T = 2000 K

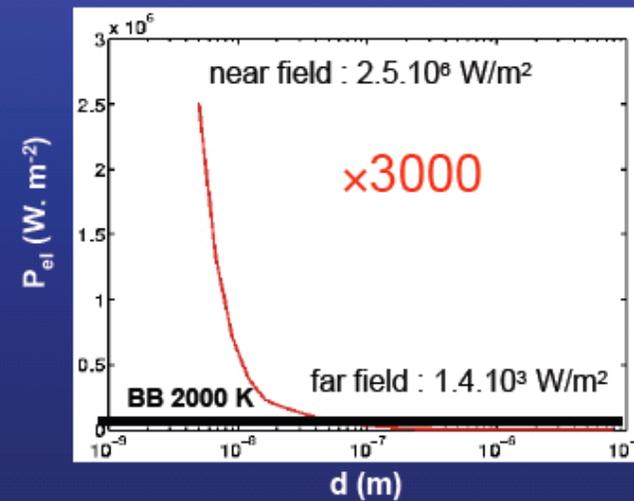
d

Cellule TPV (T = 300K)

tungsten source



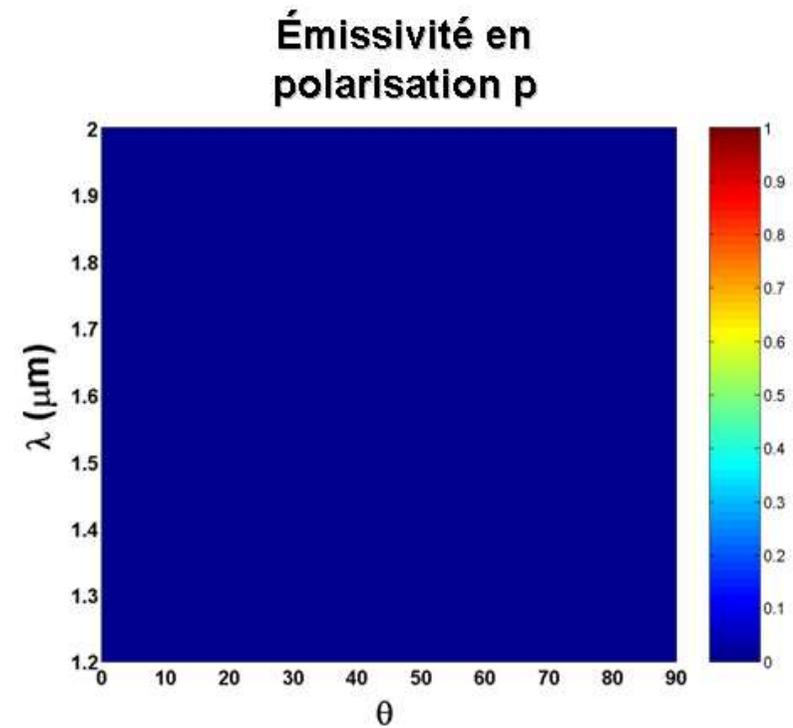
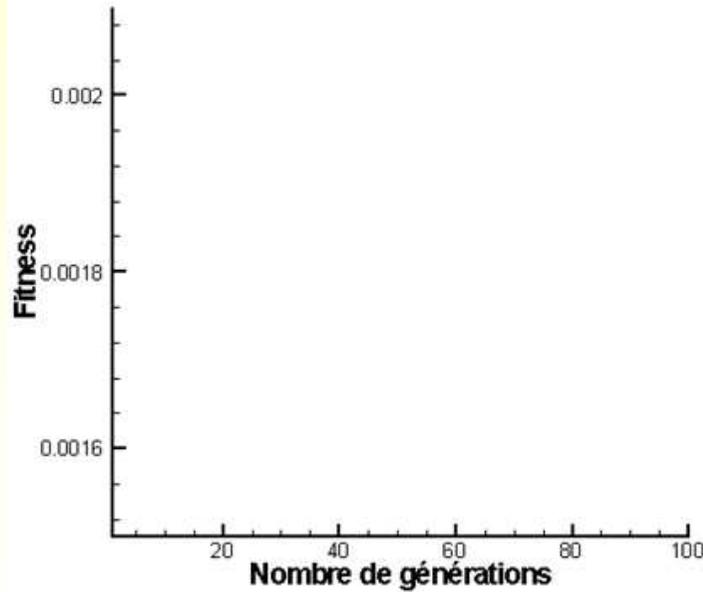
quasi-monochromatic source



Laroche, Carminati, Greffet, J. Appl. Phys. **100**, 063704 (2006)

Annexes

1^{ère} Génération

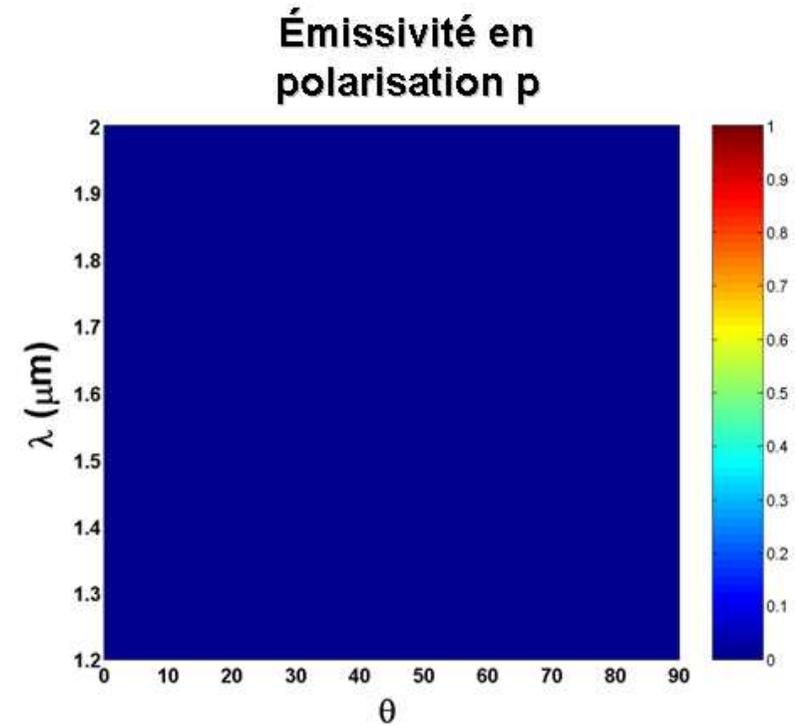
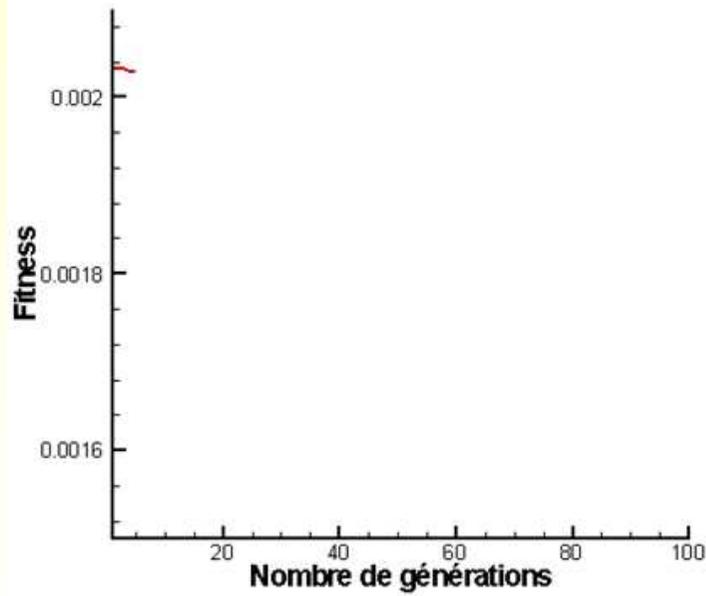


22101211001120020011111020111210222021012212020201

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

5^{ème} Génération

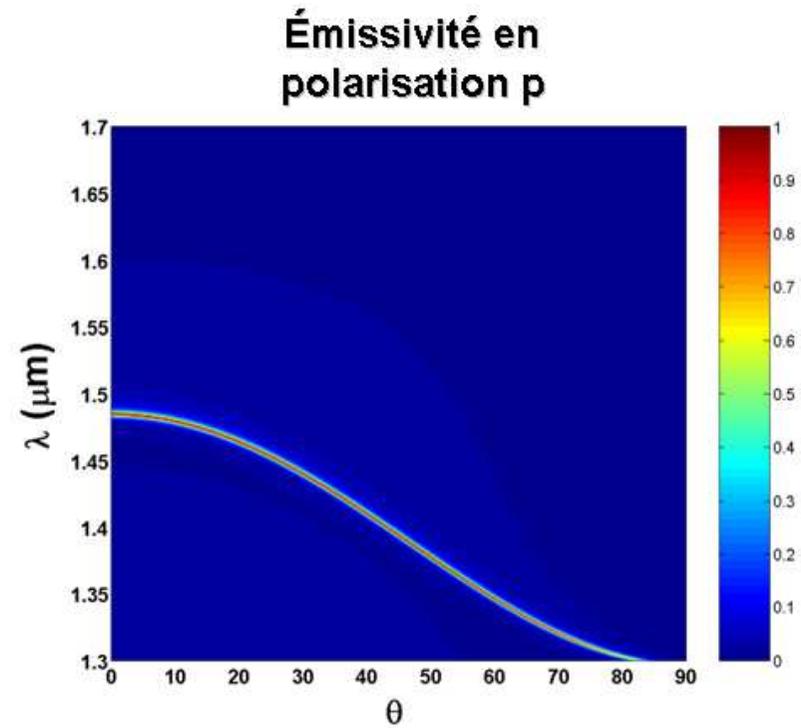
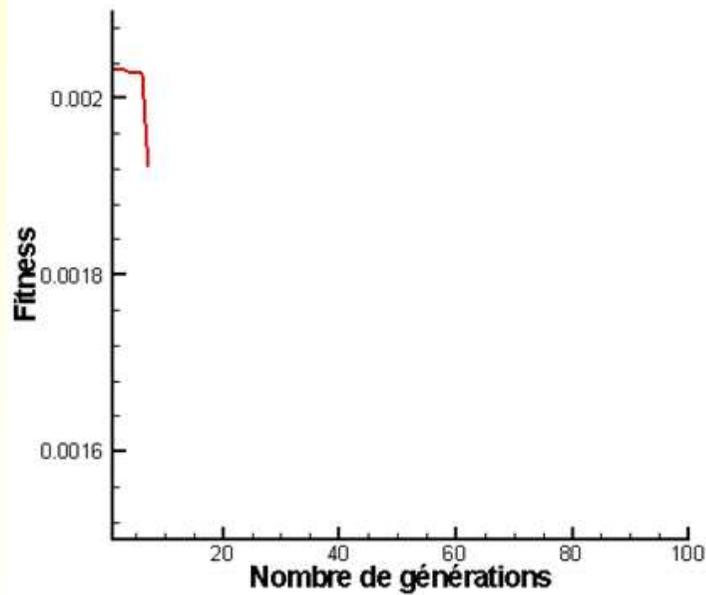


22101222011021122101000200110210222221012212020212

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

7^{ème} Génération

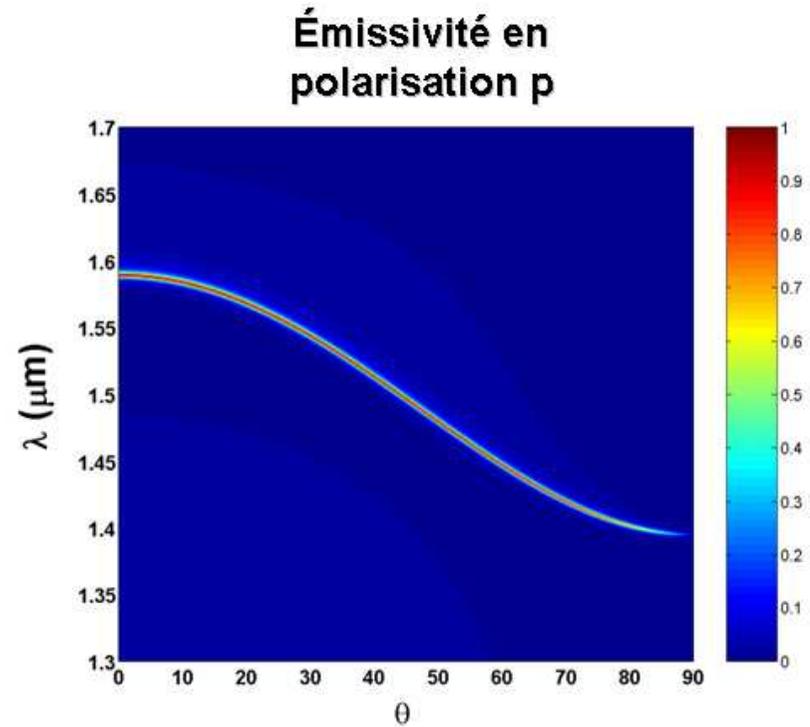
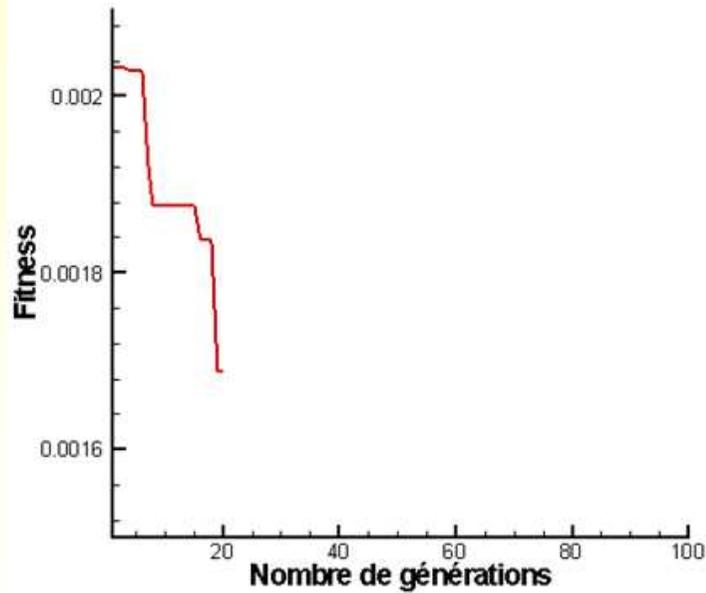


22010002020002022021221211101200121002022011102002

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

20^{ème} Génération

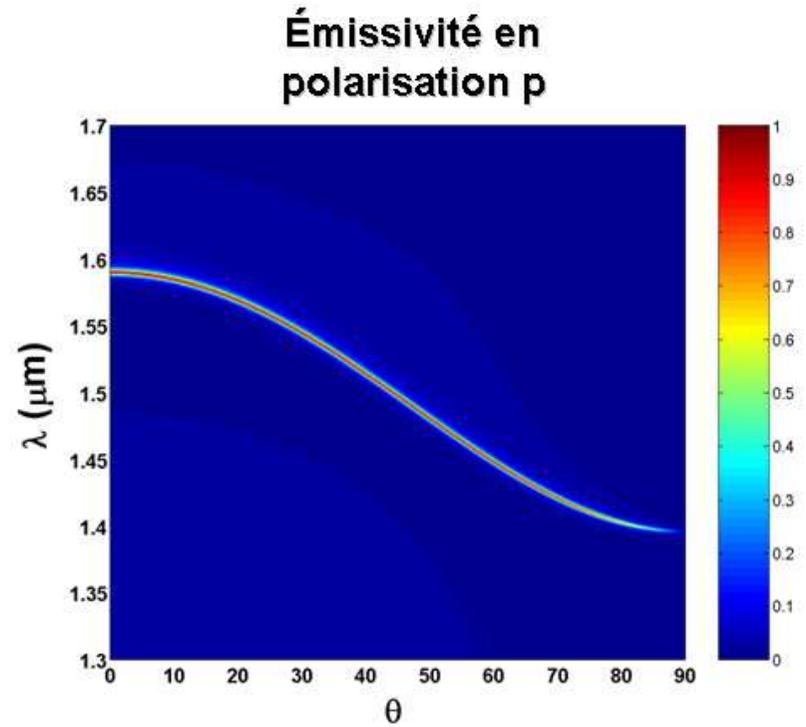
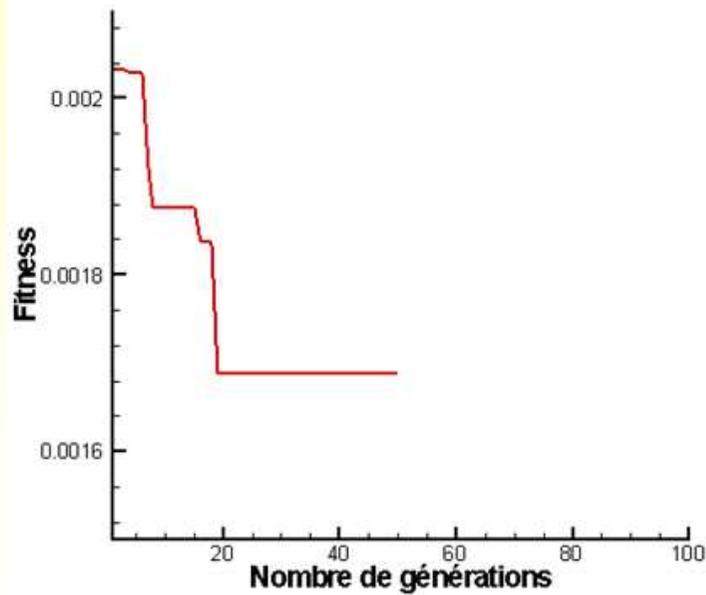


22010002020002002021121011212211120111020200222112

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

50^{ème} Génération

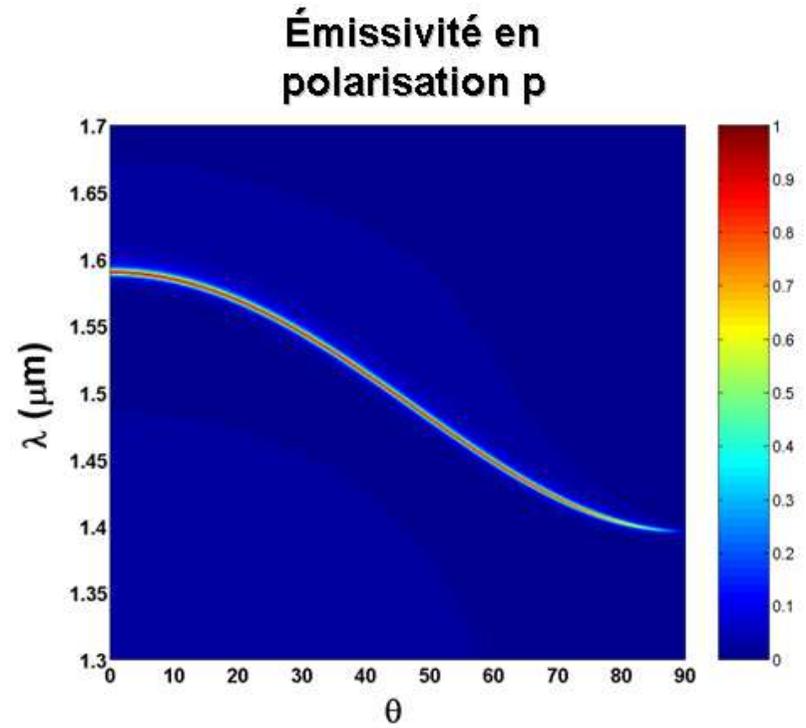
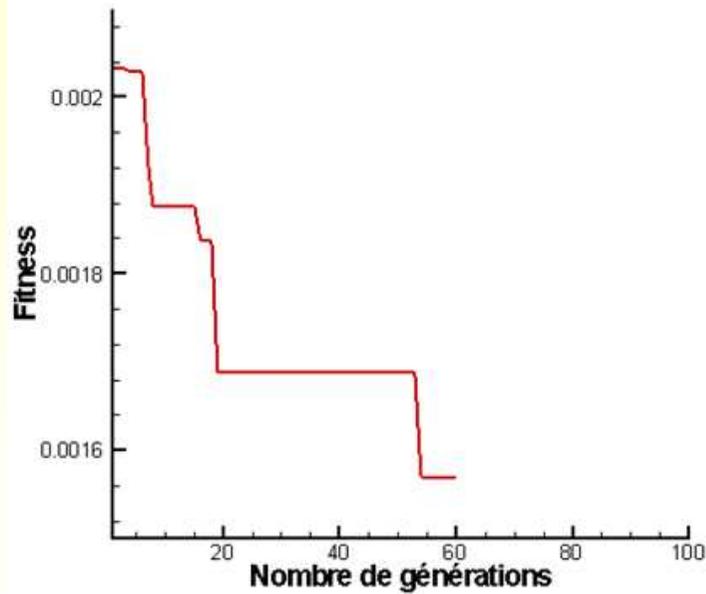


22010002020002002021121011112202120111000200212112

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

60^{ème} Génération

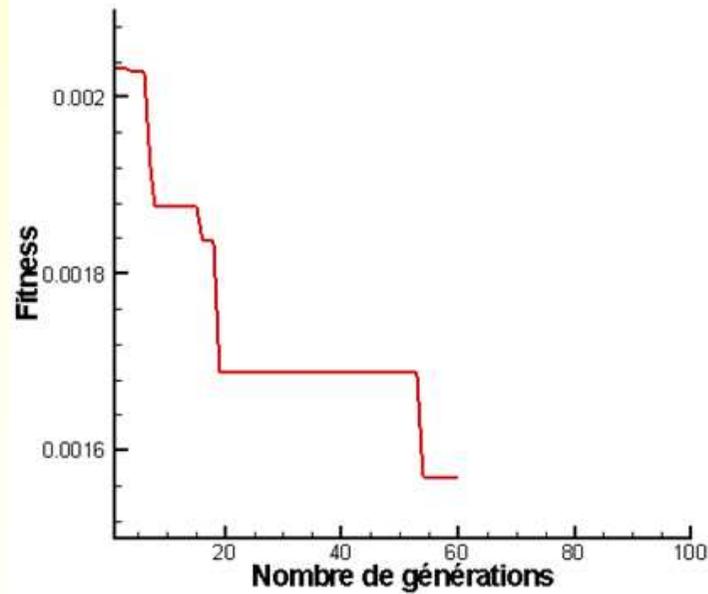


22010002020002002021022011112202120111000200212112

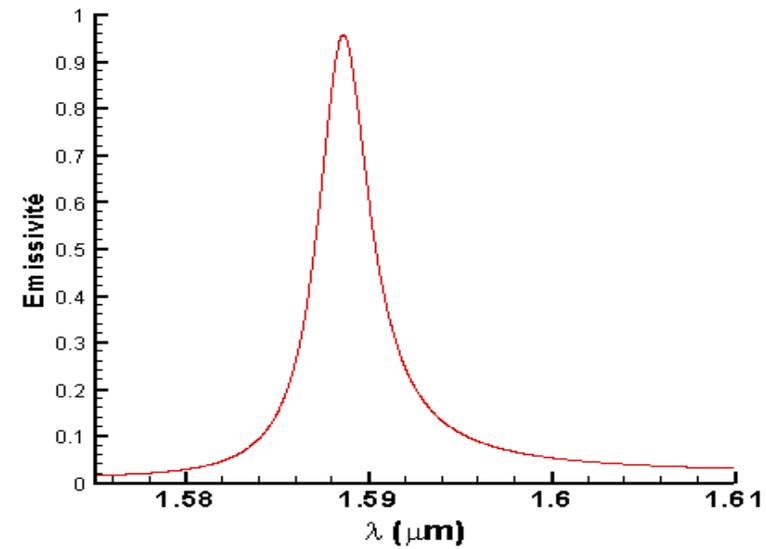
0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

60^{ème} Génération



Émissivité en polarisation p ($\theta=0^\circ$)

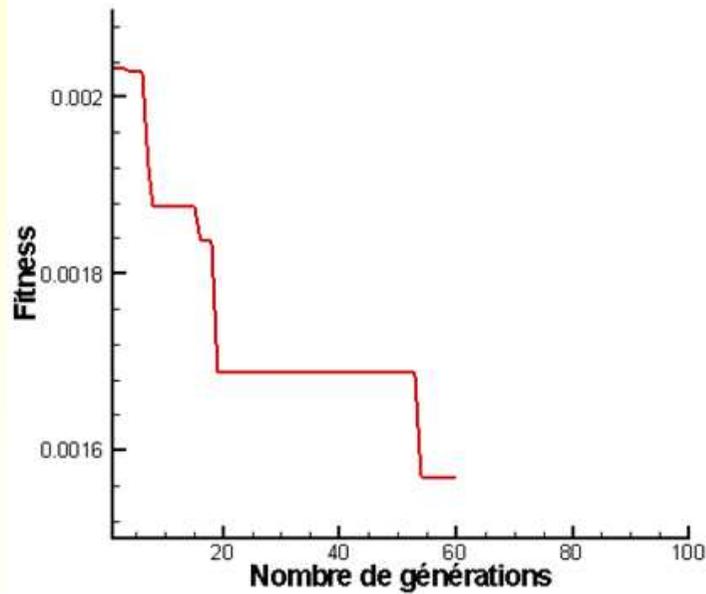


22010002020002002021022011112202120111000200212112

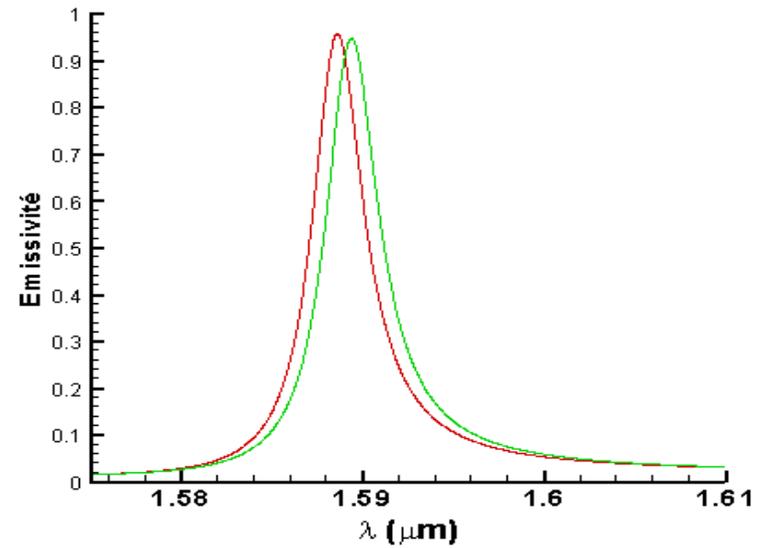
0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

60^{ème} Génération



Émissivité en polarisation p ($\theta=0^\circ$)

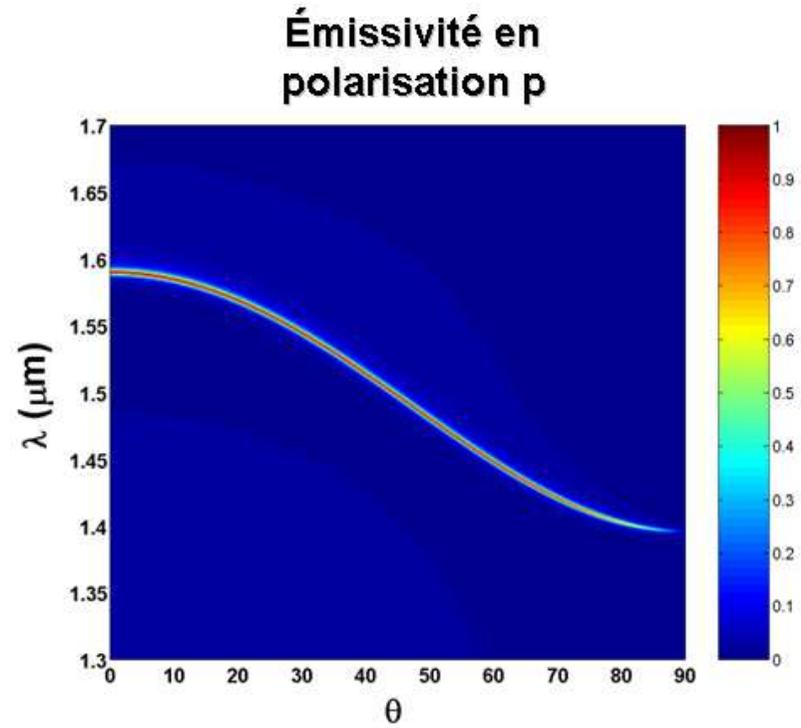
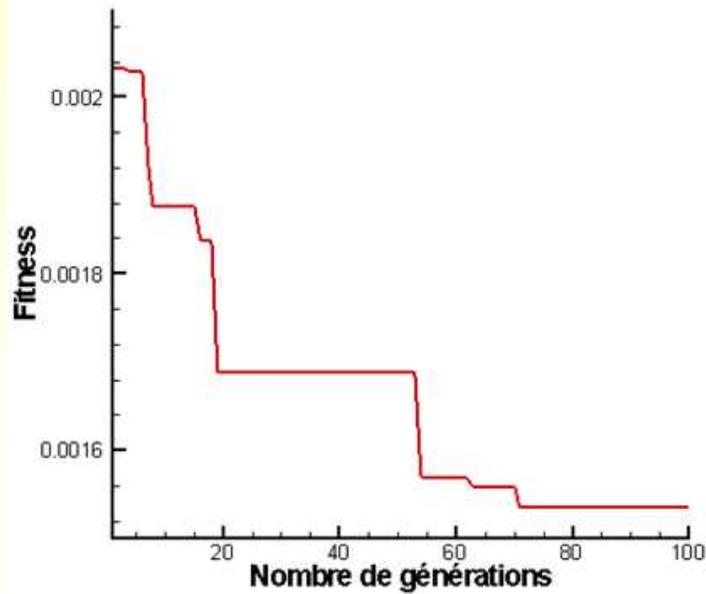


22010002020002002021022011112202120111000200212112

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

100^{ème} Génération

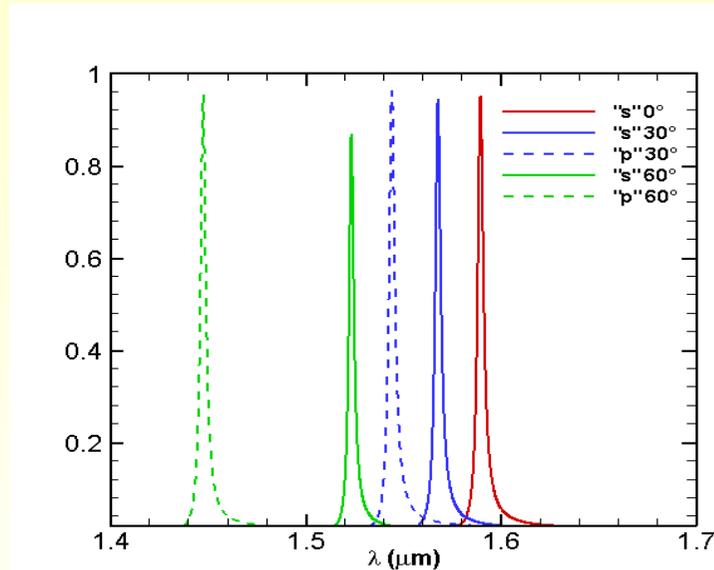


22010002020002002021222002021220202201122010020010

0=Si 1=Ag 2=SiO₂

Annexes

➤ Cohérence spectrale de la source



Spectre d'émission pour différents angles

Facteur de qualité

θ	Q_s	Q_p
0°	436	436
30°	460	430
60°	500	480



L'optimisation n'est pas faite sur Q

Facteur de qualité d'une structure multicouche émettant dans le proche infrarouge

Lee & Zhang, J. Appl. Phys (2006)

θ	Q_s
0°	99
30°	124
60°	208

Annexes

➤ Densité locale d'énergie électromagnétique

$$u_e(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle \quad \text{et} \quad u_m(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \langle \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle$$

- Fonction d'autocorrélation du champ électrique

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)^* \rangle = (\omega \mu_0)^2 \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \sum_{l,m,n=x,y,z} G_{l,m}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) G_{l,n}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega)^* \langle \mathbf{j}_m(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}'', \omega)^* \rangle$$

- Fonction de corrélation des courants fluctuants dans un milieu homogène

$$\langle \mathbf{j}_m(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}'', \omega)^* \rangle = -2 \frac{\omega \varepsilon_0}{\pi} \varepsilon''(\mathbf{r}') \Theta(T, \omega) \delta_{m,n} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \quad \text{théorème de fluctuation-dissipation [Callen (1951)]}$$

Absorption \leftarrow

$$\Theta(T, \omega) = \frac{\hbar \omega}{\exp(\frac{\hbar \omega}{k_B T}) - 1}$$

- Développement de Weyl du tenseur de Green

$$\overline{\overline{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \overline{\overline{g}}(z, z', \mathbf{K}, \omega) e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}'')}$$

$$\Rightarrow u_e(\mathbf{r}, \omega) = -2 \frac{\omega^3}{\pi c^4} \Theta(T, \omega) \int K \frac{dK}{(2\pi)} \int dz' \varepsilon''(z') g_{l,m}^E(z, z', K, \omega) g_{l,m}^E(z, z', K, \omega)^*$$

Annexes

➤ Origine physique de ce comportement singulier

- Etude de l'intégrand de la LDOS des modes évanescents en polarisation p

$$G_p(\omega, k_{//}) = \frac{k_{//}^3}{k_0^3 |\gamma_3|} \exp[2 \operatorname{Im}(\gamma_3)(L - z_3)] \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{1 - r_{12}^p \exp(-i\gamma_2 L)} + \frac{1}{1 + r_{12}^p \exp(-i\gamma_2 L)} \right\}$$

➔ Apparition de 2 pôles : divergence du coefficient de réflexion du film

➔ Ces pôles correspondent aux modes de surface du film

- Etude des relations de dispersion des modes de surface

$$\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2 = \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{u + \varepsilon_1} \sqrt{u + (\omega_p/c)^2} \coth[\sqrt{u + (\omega_p/c)^2} L/2]}$$

$$\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2 = \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{u + \varepsilon_1} \sqrt{u + (\omega_p/c)^2} \tanh[\sqrt{u + (\omega_p/c)^2} L/2]}$$

avec $u = k_{//}^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$

➤ Origine physique de ce comportement singulier

