

Diffraction d'une onde électromagnétique au sein d'un milieu bidimensionnel

Khalis ATTOU
Pierre AUNAY
Antoine CHARVIN
Tristan GONINET
Lucas JASPARD
Lidia LAPPO
Morgane LENDRIN

22 mai 2023

Introduction

Ce projet vise à créer une application web permettant de simuler la diffraction d'ondes électromagnétiques à travers une couche de graphène supposée sans épaisseur.

1 Diffraction et projet

La diffraction est un phénomène physique concernant le comportement des ondes dans un milieu.

En effet, la propagation d'une onde peut être perturbée¹ par un obstacle ou un trou.

Cette perturbation entraîne une modification de certains paramètres physiques mesurables expérimentalement.

Par exemple, lors du passage entre 2 milieux (liquides, gazeux, ou solides) d'indices de réfraction n différents, la lumière est émise dans le milieu 2 avec un angle différent de celui avec le lequel elle est arrivée dans le milieu 1.

De même, lorsqu'une onde lumineuse est émise sur un matériau, celui-ci peut la dévier, la transmettre, la réfléchir ou encore l'absorber (ainsi que toute combinaison de ces effets).

Les rayons transmis ou réfléchis ne sont pas tous visibles à cause des interférences (que nous verrons plus loin dans la dépendance exponentielle), le but est donc de récupérer les indices pour lesquels ces rayons sont visibles, ainsi que les coefficients correspondants.

Une fois que nous avons les rayons et leurs directions d'émission, nous voulons également obtenir leur intensité en fonction de la longueur d'onde d'observation λ (c'est-à-dire la couleur).

1. ici, le terme "perturbée" est utilisé dans le sens physique, il fait donc référence à une modification

En effet, la transmission/réflexion ou absorption d'un matériau dépendent de ses propriétés physiques et sont liées de manière simple :

$$A = 1 - \sum_n (|T_n|^2 + |R_n|^2)$$

Les objets physiques que nous connaissons combinent ces actions et transmettent une partie du rayonnement. Ici nous voulons savoir ce qui est transmis, ce qui est réfléchi et avoir la possibilité de tracer un spectre d'absorption, c'est-à-dire ce qui est absorbé en fonction de λ .

Nous voulons également pouvoir tracer une carte des champs, ce qui consiste à parcourir l'image pixel par pixel et mesurer l'intensité du champ à chaque fois, nous permettant ainsi d'obtenir une image avec un dégradé de couleur, chaque couleur correspondant à une intensité de champ. L'obtention de ces informations nécessite la simulation numérique.

La diffraction peut être simulée de différentes manières. Ici, nous avons choisi d'utiliser la méthode appelée "Fourier Modal Method" (*FMM*), qui consiste à développer les champs électromagnétiques sur les bases des transformations de Fourier.

Nous devons donc trouver les ondes transmises et réfléchies. Pour cela, nous partons des équations de Maxwell.

2 Maxwell

Les équations locales de Maxwell sont données par :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \end{cases} \text{ avec } \vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \text{ et } \vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$$

μ_0 et ϵ_0 correspondent respectivement à la perméabilité magnétique et à la permittivité diélectrique du vide.

Les quantités vectorielles \vec{H} et \vec{D} sont utilisées pour les équations locales de Maxwell dans le vide. Les champs électriques et magnétiques (\vec{E} et \vec{B}) correspondent aux champs dans le vide couplés à ceux de la source dans le milieu considéré. Il faut alors prendre en compte la perméabilité et la permittivité du milieu, donnés par μ_r et ϵ_r .

Nous avons alors :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \wedge \vec{E} &= -\mu_0 \mu_r \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \\ \vec{\nabla} \wedge \vec{H} &= \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned} \quad (1)$$

Pour se placer dans les bases de Fourier, nous utilisons les équations de Maxwell harmoniques, ce qui consiste à prendre une forme exponentielle pour chaque grandeur vectorielle vue précédemment. Nous avons alors :

$$\begin{cases} \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \\ \vec{D}(\vec{r}, t) = \vec{D}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \\ \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \\ \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \end{cases}$$

Dans une base de Fourier, les dérivées temporelles ont donc un facteur $-i\omega$ et nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \wedge \vec{E} &= i\omega \mu_0 \mu_r \vec{B}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \\ \vec{\nabla} \wedge \vec{H} &= -i\omega \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (2)$$

Développons maintenant ces équations.

Pour le champ électrique, nous avons :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = i\omega\mu_0\mu_r \vec{H} \implies \begin{matrix} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} & = & i\omega\mu_0\mu_r H_x \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} & = & i\omega\mu_0\mu_r H_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} & = & i\omega\mu_0\mu_r H_z \end{matrix}$$

Pour le champ magnétique, nous obtenons :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r \vec{E} \implies \begin{matrix} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} & = & -i\omega\epsilon_0\epsilon_r E_x \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} & = & -i\omega\epsilon_0\epsilon_r E_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} & = & -i\omega\epsilon_0\epsilon_r E_z \end{matrix}$$

En isolant les composantes y de chaque champ, nous obtenons les composantes dites transverses, ce qui correspond aux 2 types de polarisation, c'est-à-dire la tendance à orienter les ondes selon une direction privilégiée.

La polarisation est souvent notée par une lettre, s ou p , s pour la transverse électrique et p la transverse magnétique.

De plus, le problème physique considéré ici présente une invariance selon \vec{u}_y . Toutes les dérivées par rapport à y sont donc nulles.

Nous obtenons alors 2 sous-systèmes, un pour chaque type de polarisation, donnés par :

| TE | TM |
|--|---|
| $-\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu_0\mu_r H_x$ | $-\frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r E_x$ |
| $\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r E_y$ | $\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu_0\mu_r H_y$ |
| $\frac{\partial E_y}{\partial x} = i\omega\mu_0\mu_r H_z$ | $\frac{\partial H_y}{\partial x} = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r E_z$ |

Nous pouvons maintenant obtenir la relation de dispersion pour chacune de ces ondes.

2.1 Relation de dispersion

En coordonnées cartésiennes, la propagation d'une onde électrique est donnée par l'équation de d'Alembert :

$$\Delta \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Cette forme d'équation est valable pour toutes les ondes électromagnétiques, nous avons donc la même pour \vec{H} .

Nous cherchons ici les modes propres de cette équation. Ces solution sont données par l'équation de Helmholtz :

$$\nabla^2 A(\vec{r}) = -\frac{\omega^2}{c^2} A(\vec{r}) \quad (3)$$

Pour l'équation de propagation, nous allons noter l'onde considérée $u(\vec{r})$ afin de simplifier la notation et d'écrire une seule fois les équations.

Nous avons :

$$\frac{\partial^2 u(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u(x,y,z)}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} u(x,y,z) = 0$$

Or, notre système contient une invariance selon y , le deuxième terme est donc nul et $u(x,y,z)$ devient $u(x,z)$.

De plus, nous considérons des milieux linéaires, homogènes et isotropes. Un milieu homogène présente les mêmes propriétés en tout point. La linéarité indique que le milieu considéré possède des ϵ_r et μ_r constants : ils ne dépendent des champs électrique et magnétique appliqués.

L'isotropie nous indique que les propriétés physique du milieu ne dépendent pas de la direction considérée.

Dans notre cas, l'équation de Helmholtz s'écrit donc :

$$\frac{\partial^2 u(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, z)}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r \mu_r u(x, z) = 0 \quad (4)$$

Nous cherchons alors les solutions sous la forme d'ondes planes :

$$u(x, z) = u_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\implies u(x, z) = u_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

$$\implies u(x, z) = u_0 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)}$$

L'équation 4 s'écrit à présent :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 u_0 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_0 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)}}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r \mu_r u_0 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} = 0 \\ \implies & u_0 \alpha^2 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} + u_0 \gamma^2 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r \mu_r u_0 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} = 0 \\ \implies & u_0 e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} \left(\alpha^2 + \gamma^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r \mu_r \right) = 0 \end{aligned}$$

L'équation de dispersion s'écrit alors :

$$\boxed{\alpha^2 + \gamma^2 = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r \mu_r} \quad (5)$$

Cette relation couplée aux caractéristiques quasi-périodiques de notre problème nous permet de déduire que la solution recherchée est périodique à une exponentielle près. Ces solutions sont appelées solutions pseudo-périodique.

2.2 Théorème de Floquet-Bloch

Les solutions pseudo-périodiques sont données par le théorème de Floquet-Bloch par :

$$u(x + d, z) = u(x, z) e^{i\alpha d} \quad (6)$$

et peuvent être développées en séries de Fourier généralisées :

$$u(x, z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n(z) e^{i\alpha_n x} \quad \text{avec} \quad \alpha_n = \alpha_0 + n \frac{2\pi}{d} \quad (7)$$

appelées développement de Rayleigh.

En utilisant ce développement dans les milieux d'entrée *in* (noté *i*) et de sortie *out* (noté *o*), nous obtenons :

$$u_i(x, z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (I_n e^{i\gamma_{i,n} z} + R_n e^{-i\gamma_{i,n} z}) \quad (8)$$

$$u_o(x, z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (T_n e^{i\gamma_{o,n} z} + I'_n e^{-i\gamma_{o,n} z}) \quad (9)$$

avec α et γ des constantes ; k le vecteur d'onde ; $n_{i/o}$ l'indice de réfraction et l'ensemble des T_n et R_n les coefficients des matrices de transmission et de réflexion, donnés par :

$$\begin{cases} \gamma_{i/o,n} = \sqrt{k_{i/o,n}^2 - \alpha_n^2} \\ k_{i/o} = k_0 n_{i/o}, \quad k_0 = \frac{\omega}{c}; \\ \alpha_n = \alpha_0 \frac{2\pi}{d}, \quad \alpha_0 = k_i \sin(\theta) \end{cases}$$

Connaissant à présent tous les paramètres géométriques ainsi que I et I' , nous devons calculer les matrices \mathbf{R} et \mathbf{T} .

Pour cela, nous utilisons les conditions aux limites.

2.3 Conditions aux limites

Il faut distinguer les 2 types de polarisation de manière à séparer les champs et prendre en compte la conductivité du graphène σ_g .

2.3.1 Transversale électrique

Les conditions aux limites consistent à dire que $E_i(x, 0) = E_o(x, 0)$ (donc le champ électrique du milieu incident est le même que celui du milieu sortant en $z = 0$, c'est-à-dire sur le graphène). Nous avons donc, pour la transversale électrique $E_y(x, z)$:

$$E_{yi}(x, 0) = E_{yo}(x, 0) \quad (10)$$

$$H_{xo}(x, 0) - H_{xi}(x, 0) = \sigma(x)E_y(x, 0) \quad (11)$$

En injectant l'équation 10 dans l'équation 9, nous obtenons :

$$u_i(x, 0) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (I_n e^{i\gamma_i 0} + R_n e^{i\gamma_i 0})$$

et

$$u_o(x, 0) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (T_n e^{i\gamma_i 0} + I'_n e^{i\gamma_i 0})$$

Nous avons donc :

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (I_n e^{i\gamma_i 0} + R_n e^{i\gamma_i 0}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (T_n e^{i\gamma_i 0} + I'_n e^{i\gamma_i 0})$$

et obtenons finalement :

$$\boxed{I_n + R_n = T_n + I'_n \quad \forall n \in \mathbb{Z}} \quad (12)$$

En utilisant :

$$-\frac{\partial E_y(x, z)}{\partial z} = i\omega\mu_0\mu_r H_x$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} H_{x,o} &= -\frac{1}{i\omega\mu_0\mu_r} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (i\gamma_{o,n} T_n - i\gamma_{o,n} I'_n) \\ &= \frac{i^2}{i\omega\mu_0\mu_r} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (i\gamma_{o,n} T_n - i\gamma_{o,n} I'_n) \\ &= \frac{i}{\omega\mu_0\mu_r} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (i\gamma_{o,n} T_n - i\gamma_{o,n} I'_n) \end{aligned}$$

Or $\epsilon_0\mu_0 c^2 = 1 \implies c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} \implies c = z_0\epsilon_0$ et $w = k_0 c$ donc $\omega = k_0 z_0 \epsilon_0$, nous avons alors :

$$H_{x,o} = \frac{i}{k_0 z_0 \epsilon_0 \mu_0 \mu_r} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (i\gamma_{o,n} T_n - i\gamma_{o,n} I'_n)$$

En prenant $\gamma'_{o,n} = \frac{\gamma_{o,n}}{\mu_r}$, nous obtenons finalement :

$$H_{x,o} = \frac{i}{k_0 z_0 \epsilon_0 \mu_0} \sum_{n \in \mathbb{Z}} i \gamma'_{o,n} e^{i \alpha_n x} (T_n - I'_n) \quad (13)$$

et

$$H_{x,i} = \frac{i}{k_0 z_0 \epsilon_0 \mu_0} \sum_{n \in \mathbb{Z}} i \gamma'_{i,n} e^{i \alpha_n x} (I_n - R_n) \quad (14)$$

En utilisant l'équation 11, nous obtenons :

$$\frac{i}{k_0 z_0 \epsilon_0 \mu_0} \sum_{n \in \mathbb{Z}} i \gamma'_{o,n} e^{i \alpha_n x} (T_n - I'_n) - \frac{i}{k_0 z_0 \epsilon_0 \mu_0} \sum_{n \in \mathbb{Z}} i \gamma'_{i,n} e^{i \alpha_n x} (I_n - R_n) = \sigma(x) \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i \alpha_n x} (T_n + I'_n)$$

Ce qui nous conduit à :

$$\boxed{-\gamma'_{o,n} (T_n - I'_n) + \gamma'_{i,n} (I_n - R_n) = k_0 z_0 \epsilon_0 \mu_0 \sum_{\{p,n\} \in \mathbb{Z}^{\neq}} \sigma_{n-p} (T_n + I'_n)} \quad (15)$$

2.3.2 Transversale magnétique

Grâce aux équations suivantes :

$$E_{x,i}(x, 0) = E_{x,o}(x, 0) \quad (16)$$

$$H_{y,o}(x, 0) - H_{y,i}(x, 0) = -\sigma(x) E_y(x, 0) \quad (17)$$

avec H_y donné par :

$$\frac{\partial H_y(x, z)}{\partial z} = i \omega \epsilon_0 \epsilon_r E_x(x, z)$$

en utilisant la même méthode que précédemment et en posant $\gamma' = \frac{\gamma}{\epsilon_r}$, nous obtenons :

$$\gamma_{i,n} (I_n - R_n) = \gamma_{o,n} (Y_n - I'_n) \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (18)$$

soit, en notation matricielle :

$$\gamma_i (\mathbf{I} - \mathbf{R}) = \gamma_o (\mathbf{T} - \mathbf{I}') \quad (19)$$

Finalement, nous obtenons :

$$\boxed{(T_n + I'_n) - (I_n + R_n) = -\frac{z_0}{k_0} \sum_{\{n,p\} \in \mathbb{Z}^{\neq}} \sigma_{n-p} \gamma'_{o,n} (T_n - I'_n)} \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (20)$$

3 Conductivité

Selon les propriétés physiques d'un matériau, il peut plus ou moins laisser passer l'électricité ou la chaleur. Cette capacité à être conducteur ou non est une propriété intrinsèque du matériau et est appelé conductivité. Elle dépend de plusieurs paramètres, dont la température.

Pour le graphène, la conductivité totale est donnée par la somme de la conductivité des bandes de graphène ainsi que celle de la zone "vide" entre les bandes :

$$\sigma_g = \sigma_{intra} + \sigma_{inter}$$

Avec :

$$\sigma_{intra} = \frac{2ie^2k_BT}{\pi\hbar^2(\omega + i\gamma)} \ln \left(2\cosh \left(\frac{\mu_c}{2k_BT} \right) \right) \quad (21)$$

et

$$\sigma_{inter} = \frac{e^2}{4\hbar} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\hbar(\omega + i\gamma) - 2\mu_c}{2k_BT} \right) - \frac{i}{2\pi} \ln \left(\frac{[\hbar(\omega + i\gamma) + 2\mu_c]^2}{[\hbar(\omega + i\gamma) - 2\mu_c]^2 + (2k_BT)^2} \right) \right] \quad (22)$$

avec :

- e la charge de l'électron ;
- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ avec h la constante de Planck ;
- μ_c le potentiel chimique, qui caractérise la manière dont varie l'énergie du système en fonction du nombre de particules ;
- k_B la constante de Boltzman ;
- T la température ;
- γ le facteur d'amortissement ($\hbar\gamma = 0.658meV$), qui représente la décroissance temporelle des oscillations.

Conclusion

Ce projet nous permet donc de simuler le phénomène de diffraction à l'aide de la *FMM*. Nous pouvons ainsi obtenir plusieurs grandeurs, telles que les vecteurs transmis T_n et réfléchis R_n , qui nous permettent de déduire toutes les autres grandeurs utiles au tracé de graphiques (λ , ω , l'absorption A) ou de cartes de champs (\vec{E} et \vec{B}).

Nous pourrions également retourner des tableaux de valeurs selon les souhaits de l'expérimentateur.