

INSTITUT FRESNEL

PATRICK C. CHAUMET

DANIEL SENTENAC

ANNE SENTENAC

IF-DDA

**Idiot Friendly-Discrete Dipole
Approximation**

Table des matières

List of figures	v
1 Généralités	1
1.1 Introduction	1
1.2 Le principe de la méthode des dipôles couplés	1
1.3 Un mot sur les auteurs	3
1.4 Comment citer le code	3
2 Gestion des configurations	5
2.1 Introduction	5
2.2 Création et sauvegarde d'une nouvelle configuration	5
2.3 Gestion des configurations	5
3 Propriétés de l'illumination	7
3.1 Introduction	7
3.2 Le type de faisceau	7
3.2.1 Introduction	7
3.2.2 pwavelinear	8
3.2.3 pwavecircular	8
3.2.4 gwavelinear	9
3.2.5 gwavecircular	9
3.2.6 gparawavelinear	9
3.2.7 gparawavecircular	9
3.2.8 champ incident arbitraire	9
4 Définition de l'objet	11
4.1 Introduction	11
4.2 Type d'objet	11
4.2.1 Sphère	12
4.2.2 Cube	12
4.2.3 Parallélépipède	12
4.2.4 Ellipse	13
4.2.5 Plusieurs sphères	13
4.2.6 Cylindre	13
4.2.7 sphères concentriques	13
4.2.8 Objet arbitraire	13
4.3 Choisir la permittivité relative	14

4.4	Choisir la discrétisation	14
5	Etude possible avec le code	17
5.1	Introduction	17
5.2	Etude en champ lointain	17
5.3	Etude en champ proche	18
5.4	Force et couple optique	19
6	Représentation des résultats	21
6.1	Introduction	21
6.2	Sorties numériques	21
6.3	Graphiques	22
6.3.1	Plot epsilon/dipoles	22
6.3.2	Champ lointain	22
6.3.2.1	Plot Poynting	22
6.3.2.2	Plot microscopy	22
6.3.3	Etude du Champ proche	23
6.3.4	force et couple optique	23
7	Fichiers de sortie pour matlab, octave, scilab,...	25
7.1	Introduction	25
7.2	Liste de tous les fichiers de sortie	25

Table des figures

1.1	Principe de la CDM : l'objet à étudier (à gauche) est discrétisé en un ensemble de petits dipôles (à droite).	2
3.1	Définition de la direction du faisceau	8
3.2	Définition de la polarisation du faisceau.	8
4.1	Définition des angles d'Euler selon la convention $Z - X - Z$. Schéma pris sur wikipédia.	12
5.1	Schéma simplifié du microscope. Le foyer objet de la lentille objectif est à l'origine du repère. L'axe de la lentille est confondu avec l'axe z et du côté des z positifs.	18

Généralités

Sommaire

1.1	Introduction	1
1.2	Le principe de la méthode des dipôles couplés	1
1.3	Un mot sur les auteurs	3
1.4	Comment citer le code	3

1.1 Introduction

Il existe de nombreuses méthodes permettant d'étudier la diffraction d'une onde électromagnétique par un objet de forme et de permittivité relative arbitraires. Nous n'allons pas faire ici une liste exhaustive de ces méthodes, mais le lecteur intéressé peut se reporter à l'article de F. M. Kahnert qui détaille les forces et les faiblesses des méthodes les plus usuelles.¹

La méthode que nous utilisons s'appelle la méthode des dipôles couplés (CDM). Cette méthode, dite volumique car le champ diffracté est obtenu à partir d'une intégrale dont le support est le volume de l'objet considéré, a été introduite par E. M. Purcell et C. R. Pennypacker en 1973 pour étudier la diffusion de la lumière par des grains dans le milieu interstellaire.² La CDM a été par la suite étendue à des objets en présence d'un substrat plan ou dans un système multicouche, voir par exemple Ref. [3]. Nous nous sommes attachés ces dernières années, à d'une part étendre la CDM à des géométries plus complexes (réseaux avec ou sans défaut), et d'autre part à augmenter sa précision. Ces améliorations confèrent à ce chapitre un côté un peu technique, mais elles voient leurs applications dans les chapitres suivants. Mais avant d'étudier plus en détails les dernières avancées de la CDM, rappelons d'abord son principe.

1.2 Le principe de la méthode des dipôles couplés

Soit un objet de forme et de permittivité relative arbitraires dans un espace homogène, que nous supposons ici être le vide. Cet objet est soumis à une onde électromagnétique incidente de longueur d'onde λ ($k_0 = 2\pi/\lambda$). Le principe de la CDM consiste à représenter l'objet en un ensemble de N petits cubes d'arête a [par petits, nous entendons plus petits que la longueur d'onde dans l'objet : $a \ll \lambda/\sqrt{\epsilon}$ (Fig. 1.1)]. Chacun des petits cubes sous l'action de l'onde incidente va se polariser, et donc acquérir un moment dipolaire, dont la valeur va dépendre du champ incident et de son interaction avec ses voisins. Le champ

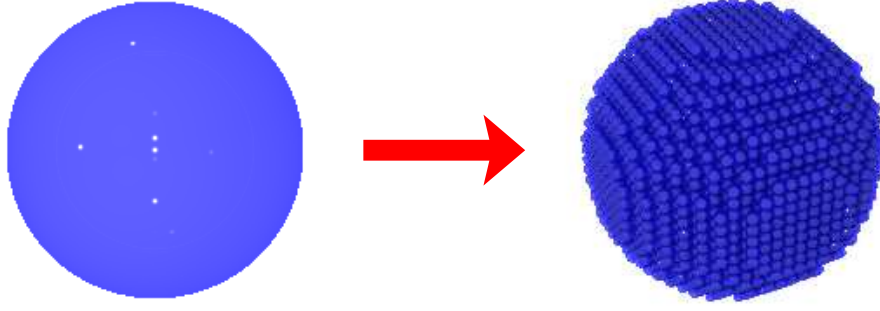


Fig. 1.1 : Principe de la CDM : l'objet à étudier (à gauche) est discrétisé en un ensemble de petits dipôles (à droite).

local à la position d'un dipôle localisé en \mathbf{r}_i , $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$, est, en l'absence de lui-même, la somme de l'onde incidente et du champ rayonné par les $N - 1$ autres dipôles :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_i) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1, i \neq j}^N \mathbf{T}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \alpha(\mathbf{r}_j) \mathbf{E}(\mathbf{r}_j). \quad (1.1)$$

\mathbf{E}_0 est le champ incident, \mathbf{T} la susceptibilité linéaire du champ en espace homogène :

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = e^{ik_0 r} \left[\left(3 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \mathbf{I} \right) \left(\frac{1}{r^3} - \frac{ik_0}{r^2} \right) + \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} \right) \frac{k_0^2}{r} \right] \quad (1.2)$$

avec \mathbf{I} la matrice unité et $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. α est la polarisabilité de chaque élément de discrétisation obtenue à partir de la relation de Claussius-Mossotti. Notons que la polarisabilité α , pour respecter le théorème optique, se doit de contenir un terme dit de réaction de rayonnement.⁴ L'Eq. (1.1) est vraie pour $i = 1, \dots, N$, et représente donc un système de $3N$ équations linéaires à résoudre, les champs locaux, $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$, étant les inconnus. Une fois le système d'équations linéaires résolu, le champ diffusé par l'objet à une position \mathbf{r} arbitraire, est obtenu en faisant la somme de tous les champs rayonnés par chacun des dipôles :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \mathbf{T}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \alpha(\mathbf{r}_j) \mathbf{E}(\mathbf{r}_j). \quad (1.3)$$

Quand l'objet est en présence d'un substrat plan, ou dans un multicouche, il suffit de remplacer \mathbf{T} , par la susceptibilité linéaire du champ du système de référence.

Nous venons de présenter la CDM telle que l'ont présentée E. M. Purcell and C. R. Pennypacker.² Notons qu'une autre méthode très proche de la CDM existe. Cette méthode, dite méthode des moments, part de l'équation intégrale de Lippman Schwinger, est, moyennant quelques hypothèses, strictement identique à la CDM. La démonstration de l'équivalence entre ces deux méthodes étant un peu technique, elle est explicitée dans la Ref.⁵.

Les avantages de la CDM sont qu'elle est applicable à des objets de forme arbitraire, inhomogène (chose difficilement réalisable dans le cas de méthode surfacique), et anisotrope (la polarisabilité associée aux éléments de discrétisation devient alors tensorielle). La

condition d'onde sortante est automatiquement satisfaite à travers la susceptibilité linéaire du champ. Notons enfin, que seul l'objet est discrétisé, contrairement aux méthodes de différences finies et éléments finis.¹

L'inconvénient majeur de la CDM consiste en une croissance rapide du temps de calcul avec l'augmentation du nombre d'éléments de discrétisation, *i.e.*, l'augmentation de la taille du système d'équations linéaires à résoudre. Il existe des moyens pour accélérer la résolution d'un système d'équations linéaires de très grande taille, telle que la méthode des gradients conjugués, mais malgré tout, des valeurs de $N > 10^6$ en espace homogène sont difficiles à traiter.

1.3 Un mot sur les auteurs

- P. C. Chaumet est professeur des universités à l'Institut Fresnel de l'Université d'Aix-Marseille et s'occupe du développement du code source fortran.
- D. Sentenac développe l'interface conviviale du code.
- A. Sentenac est directrice de recherche au CNRS et travaille à l'Institut Fresnel de l'Université d'Aix-Marseille et participe au développement du code sur ce qui est lié à la diffraction champ lointain.

1.4 Comment citer le code

- Si seuls les fonctions de base du code sont utilisées :
P. C. CHAUMET, A. SENTENAC, and A. RAHMANI,
Coupled dipole method for scatterers with large permittivity.
Phys. Rev. E **70**, 036606 (2004).
- Si le calcul des forces optiques est utilisé alors :
P.C. CHAUMET, A. RAHMANI, A. SENTENAC, and G. W. BRYANT,
Efficient computation of optical forces with the coupled dipole method.
Phys. Rev. E **72**, 046708 (2005).
- Si le calcul des couples optique est utilisé :
P. C. CHAUMET and C. BILLAUDEAU,
Coupled dipole method to compute optical torque : Application to a micropropeller.
J. Appl. Phys. **101**, 023106 (2007).
- Si le faisceau Gaussien rigoureux est utilisé :
P. C. CHAUMET,
Fully vectorial highly non paraxial beam close to the waist.
J. Opt. Soc. Am. A **23**, 3197 (2006).

Gestion des configurations

Sommaire

2.1	Introduction	5
2.2	Création et sauvegarde d'une nouvelle configuration	5
2.3	Gestion des configurations	5

2.1 Introduction

Le Code se lance par `./cdm` dans le dossier `bin` pour une configuration linux. Celui-ci a été fait pour être le plus convivial possible et nécessite donc peu d'explication pour son utilisation. Néanmoins certaines conventions ont été prises et demandent à être explicitées.

2.2 Création et sauvegarde d'une nouvelle configuration

Pour démarrer un nouveau calcul, aller sur l'onglet *calculation* et *New*. Une nouvelle configuration s'affiche avec des valeurs par défaut. Une fois la nouvelle configuration choisie pour la sauver il faut choisir de nouveau l'onglet *Calculation* et *Save*. On choisit alors le nom de la configuration et on peut ajouter une courte description du calcul fait.

Une autre manière de sauvegarder une configuration, c'est de cliquer directement sur le panneau de la configuration *Save configuration*. Il apparaît alors deux champs, un pour le nom de la configuration et le deuxième pour sa description.

2.3 Gestion des configurations

Pour gérer toutes les configurations choisies, il faut aller sur l'onglet *Calculation* et *Load*. Il apparaît alors une nouvelle fenêtre avec toutes les configurations sauveées. Pour chaque configuration il y a une courte description que l'utilisateur a rentré, la date ou le fichier configuration a été sauvé, puis les caractéristiques principales de la configuration (longueur d'onde, puissance, col du faisceau, objet, matériau, discrétisation et tolérance de la méthode itérative). Il suffit de cliquer sur une configuration et de cliquer sur *load* pour charger une configuration.

Le bouton *delete* sert à supprimer une configuration sauvegardée et le bouton *export* permet d'exporter dans un fichier (nom de la configuration.opt) toutes les caractéristiques de la configuration.

A noter qu'en double cliquant sur la ligne, on peut modifier le champ description.

Propriétés de l'illumination

Sommaire

3.1	Introduction	7
3.2	Le type de faisceau	7
3.2.1	Introduction	7
3.2.2	pwavelinear	8
3.2.3	pwavecircular	8
3.2.4	gwavelinear	9
3.2.5	gwavecircular	9
3.2.6	gparawavelinear	9
3.2.7	gparawavecircular	9
3.2.8	champ incident arbitraire	9

3.1 Introduction

Dans la section propriétés de l'illumination, le champ *Wavelength* permet de rentrer la longueur d'utilisation. Celle-ci se rentre en nanomètre. Le champ P_0 permet de rentrer la puissance du faisceau laser en Watt. Le champ W_0 en nanomètre permet de rentrer pour une onde plane le rayon du faisceau laser et pour un faisceau Gaussien la col du faisceau

3.2 Le type de faisceau

3.2.1 Introduction

Il y a six faisceau prédéfinis, leur direction de propagation est toujours définie de la même manière, avec deux angles θ et φ . Ils sont relire au vecteur de la manière suivante :

$$k_x = k_0 \sin \theta \cos \varphi \quad (3.1)$$

$$k_y = k_0 \sin \theta \sin \varphi \quad (3.2)$$

$$k_z = k_0 \cos \theta \quad (3.3)$$

où $\mathbf{k}_0 = (k_x, k_y, k_z)$ est le vecteur d'onde parallèle à la direction du faisceau incident et k_0 le nombre d'onde, voir Fig. 3.1.

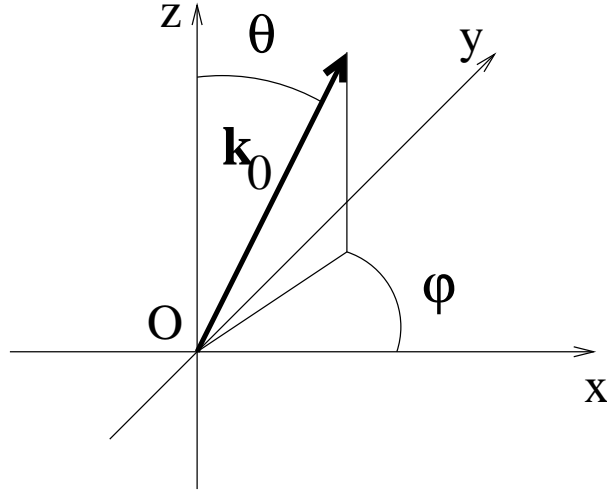


Fig. 3.1 : Définition de la direction du faisceau

Pour la polarisation on utilise le plan (x, y) comme surface de référence. Alors on peut définir une polarisation TM (p) et TE (s) comme en présence d'une surface, voir Fig. 3.2.

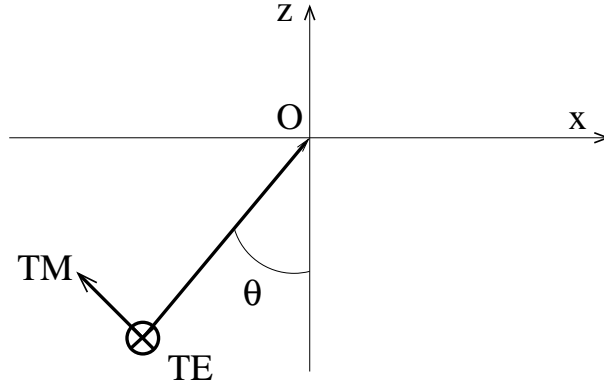


Fig. 3.2 : Définition de la polarisation du faisceau.

Le repère (x, y, z) sert de référentiel absolu par rapport auquel les différents éléments (illumination plus objets) sont repérés.

3.2.2 pwavelinear

pwavelinear est une onde plane polarisée linéairement. La première ligne est relative à θ et la deuxième à φ . La troisième ligne est liée à la polarisation, $\text{pola}=1$ en TM et $\text{pola}=0$ en TE. A noter que la polarisation n'est pas forcément purement en TE ou TM : soit $\text{pola} \in [0, 1]$ tel que $E_{\text{TM}}^2 = \text{pola}^2 E^2$ et $E_{\text{TE}}^2 = (1 - \text{pola}^2) E^2$.

A noter que la phase est prise nulle à l'origine du repère.

3.2.3 pwavecircular

pwavecircular est une onde plane polarisée circulairement. La première ligne est relative à θ et la deuxième à φ . La troisième ligne est liée à la polarisation que l'on peut choisir droite ou gauche.

A noter que la phase est prise nulle à l'origine du repère.

3.2.4 gwavelinear

gwavelinear est une onde gaussienne polarisée linéairement. La première ligne est relative à θ et la deuxième à φ . La troisième ligne est liée à la polarisation, $\text{pola}=1$ en TM et $\text{pola}=0$ en TE. A noter que la polarisation n'est pas forcément purement en TE ou TM : soit $\text{pola} \in [0\ 1]$ tel que $E_{\text{TM}}^2 = \text{pola}^2 E^2$ et $E_{\text{TE}}^2 = (1 - \text{pola}^2) E^2$.

Les trois lignes suivantes permettent de fixer la position du centre du col en nanomètres dans le repère (x, y, z) .

A noter que cette onde Gaussienne peut avoir un col très faible, car elle est calculée sans aucune approximation à travers un spectre d'onde plane.

3.2.5 gwavecircular

gwavecircular est une onde gaussienne polarisée circulairement. La première ligne est relative à θ et la deuxième à φ . La troisième ligne est liée à la polarisation que l'on peut choisir droite ou gauche.

Les trois lignes suivantes permettent de fixer la position du centre du col en nanomètres dans le repère (x, y, z) .

A noter que cette onde Gaussienne peut avoir un col très faible, car elle est calculée sans aucune approximation à travers un spectre d'onde plane.

3.2.6 gparawavelinear

gwavelinear est une onde gaussienne polarisée linéairement. La première ligne est relative à θ et la deuxième à φ . La troisième ligne est liée à la polarisation, $\text{pola}=1$ en TM et $\text{pola}=0$ en TE. A noter que la polarisation n'est pas forcément purement en TE ou TM : soit $\text{pola} \in [0\ 1]$ tel que $E_{\text{TM}}^2 = \text{pola}^2 E^2$ et $E_{\text{TE}}^2 = (1 - \text{pola}^2) E^2$.

Les trois lignes suivantes permettent de fixer la position du centre du col en nanomètres dans le repère (x, y, z) .

A noter que cette onde Gaussienne est calculée dans le cadre de l'approximation paraxiale et donc ne satisfait pas rigoureusement les équations de Maxwell.

3.2.7 gparawavecircular

gwavecircular est une onde gaussienne polarisée circulairement. La première ligne est relative à θ et la deuxième à φ . La troisième ligne est liée à la polarisation que l'on peut choisir droite ou gauche.

Les trois lignes suivantes permettent de fixer la position du centre du col en nanomètres dans le repère (x, y, z) .

A noter que cette onde Gaussienne est calculée dans le cadre de l'approximation paraxiale et donc ne satisfait pas rigoureusement les équations de Maxwell.

3.2.8 champ incident arbitraire

Dans le cas d'un champ arbitraire celui-ci est défini par l'utilisateur. C'est à dire que celui-ci doit créer lui même le champ, et il convient alors de faire ces fichiers en respectant les conventions choisies par le code.

La description de la discrétisation du champ incident est faite dans un fichier qui est demandé quand on clique sur *Props*. Par exemple pour la partie réelle de la composante x du champ il doit être construit de la manière suivante :

```
nx,ny,nz
dx,dy,dz
```

xmin,ymin,zmin

- nx est le nombre de maille suivant l'axe x
- ny est le nombre de maille suivant l'axe y
- nz est le nombre de maille suivant l'axe z
- dx est le pas suivant l'axe x
- dy est le pas suivant l'axe y
- dz est le pas suivant l'axe z
- xmin l'abscisse la plus petite
- ymin l'ordonnée la plus petite
- zmin la cote la plus petite

puis les fichiers du champ électrique sont créés de la manière suivante pour chacune des composantes du champ partie réelle et imaginaire séparées :

```
open(11, file='Exr.mat', status='new', form='formatted', access='direct', recl=22)
do k=1,nz
  do j=1,ny
    do i=1,nx
      ii=i+nx*(j-1)+nx*ny*(k-1)
      write(11,FMT='(D22.15)',rec=ii) dreal(Ex)
    enddo
  enddo
enddo
```

Attention la maille de discrétisation de l'objet doit être plus grande que la maille de discrétisation du champ.

Définition de l'objet

Sommaire

4.1	Introduction	11
4.2	Type d'objet	11
4.2.1	Sphère	12
4.2.2	Cube	12
4.2.3	Parallélépipède	12
4.2.4	Ellipse	13
4.2.5	Plusieurs sphères	13
4.2.6	Cylindre	13
4.2.7	sphères concentriques	13
4.2.8	Objet arbitraire	13
4.3	Choisir la permittivité relative	14
4.4	Choisir la discrétisation	14

4.1 Introduction

Le code propose plusieurs objets prédéfinis et nous allons dans cette section préciser comment rentrer leurs caractéristiques opto-géométriques. A noter que toutes les distances sont à entrer en nanomètre. Le code fera la conversion en mètre.

4.2 Type d'objet

La liste des objets prédéfinies est la suivante :

sphère, cube, parallélépipède, ellipsoïde, plusieurs sphères distinctes, cylindre et sphères concentriques et objet arbitraire.

Quand les objets sont en rotation par rapport aux axes du système, les angles d'Euler sont utilisés comme défini Fig. 4.1. Le centre de rotation étant le centre d'inertie de l'objet.

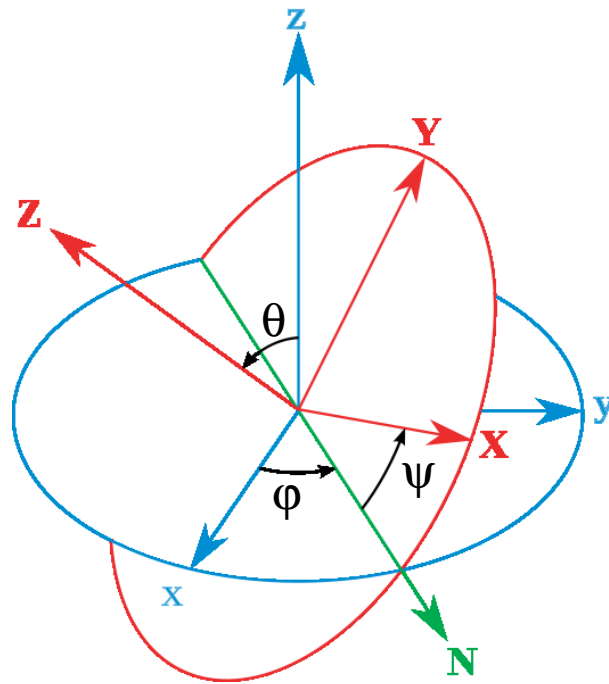


Fig. 4.1 : Définition des angles d'Euler selon la convention $Z - X - Z$. Schéma pris sur *wikipédia*.

4.2.1 Sphère

Pour la sphère il y a 4 champs à remplir :

- Le rayon de la sphère en nanomètre
- L'abscisse du centre de la sphère en nanomètre
- L'ordonnée du centre de la sphère en nanomètre
- La cote du centre de la sphère en nanomètre

4.2.2 Cube

Pour le cube il y a 4 champs à remplir :

- L'arête du cube en nanomètre
- L'abscisse du centre de la sphère en nanomètre
- L'ordonnée du centre de la sphère en nanomètre
- La cote du centre de la sphère en nanomètre

4.2.3 Parallélépipède

Pour le parallélépipède il y a 9 champs à remplir :

- L'arête du cube en nanomètre suivant l'axe x
- L'arête du cube en nanomètre suivant l'axe y
- L'arête du cube en nanomètre suivant l'axe z
- L'abscisse du centre du parallélépipède en nanomètre
- L'ordonnée du centre du parallélépipède en nanomètre
- La cote du centre du parallélépipède en nanomètre
- Premier angle d'Euler ψ par rotation autour de l'axe z
- Deuxième angle d'Euler θ par rotation autour de l'axe x
- Troisième angle d'Euler φ par rotation autour de l'axe z

4.2.4 Ellipse

Pour l'ellipse il y a 9 champs à remplir :

- Le demi axe en nanomètre suivant l'axe x
- Le demi axe en nanomètre suivant l'axe y
- Le demi axe en nanomètre suivant l'axe z
- L'abscisse du centre de l'ellipse en nanomètre
- L'ordonnée du centre de l'ellipse en nanomètre
- La cote du centre de l'ellipse en nanomètre
- Premier angle d'Euler ψ par rotation autour de l'axe z
- Deuxième angle d'Euler θ par rotation autour de l'axe x
- Troisième angle d'Euler φ par rotation autour de l'axe z

4.2.5 Plusieurs sphères

Pour de sphères multiples il convient d'abord de choisir avec la ligne du dessous *number of objects* le nombre N de sphère désiré. Après quand on clique sur *Props* il y apparaît N fenêtres que l'on remplit chacune comme pour la sphère. Attention les sphères doivent être disjointes.

4.2.6 Cylindre

Pour l'ellipse il y a 8 champs à remplir :

- Le rayon du cylindre en nanomètre
- La longueur du cylindre en nanomètre
- L'abscisse du centre du cylindre en nanomètre
- L'ordonnée du centre du cylindre en nanomètre
- La cote du centre du cylindre en nanomètre
- Premier angle d'Euler ψ par rotation autour de l'axe z
- Deuxième angle d'Euler θ par rotation autour de l'axe x
- Troisième angle d'Euler φ par rotation autour de l'axe z

4.2.7 sphères concentriques

Pour des sphères concentriques il convient d'abord de choisir avec la ligne du dessous *number of objects* le nombre N de sphères concentriques. Après quand on clique sur *Props* il y apparaît N fenêtres. La première fenêtre se remplit comme pour la sphère, et pour les fenêtres suivantes il suffit de rentrer le rayon en nanomètre. Les rayons doivent être rentrés dans l'ordre croissants.

4.2.8 Objet arbitraire

Dans le cas d'un objet arbitraire celui-ci est défini par l'utilisateur. C'est à dire que celui-ci doit créer lui même l'objet, et il convient alors de faire ce fichier d'entrée en respectant les conventions choisies par le code. *namefile* est le nom du fichier contenant l'objet arbitraire et demandé quand on choisi objet arbitraire. Celui-ci est codé en séquentiel et en ascii et est forcément décrit dans une boîte parallélépipédique.

```
open(15,file=namefile,status='old',iostat=ierror)
write(15,*) nx,ny,nz
write(15,*) aretecube
do i=1,nz
  do j=1,ny
```

```

        do k=1,nx
            write(15,*) xs(i,j,k),ys(i,j,k),zs(i,j,k)
        enddo
    enddo
enddo
do i=1,nz
    do j=1,ny
        do k=1,nx
            if objet isotrope
                write(15,*) eps(i,j,k)
            elseif objet anisotrope
                do ii=1,3
                    do jj=1,3
                        write(15,*) epsani(ii,jj,i,j,k)
                    enddo
                enddo
            endif
        enddo
    enddo
enddo
enddo

```

- nx : taille du parallélépipède suivant l'axe x .
- ny : taille du parallélépipède suivant l'axe y .
- nz : taille du parallélépipède suivant l'axe z .
- aretecube : taille de la maille de discrétisation
- x : abscisse des mailles de discrétisation suivant l'axe x .
- y : ordonnée des mailles de discrétisation suivant l'axe y .
- z : cote des mailles de discrétisation suivant l'axe z .
- eps : epsilon de l'objet si isotrope
- epsani : epsilon de l'objet si anisotrope

4.3 Choisir la permittivité relative

Quand le ou les objets sont choisis il convient alors de rentrer la permittivité relative. A part l'objet arbitraire, tous les objets définis par défaut dans le code sont considérés comme étant homogènes. Ils peuvent être isotropes ou anisotrope. On choisit donc *iso* ou *aniso* et on clique sur *Epsilon*.

- *iso* : Apparaît un tableau, où soit on rentre la permittivité relative à la main (partie réelle et partie imaginaire) ou choisi un matériau dans la base de donnée.
- *aniso* : Apparaît un tableau où on rentre la permittivité relative à la main (partie réelle et partie imaginaire) pour toutes les composantes du tenseur anisotrope.

4.4 Choisir la discrétisation

Le nombre N_c rentré dans le champ de la discrétisation correspond au nombre de couche formant l'objet dans sa plus grande direction.

Quelques exemples :

-
- Pour une ellipse de demi axe (a, b, c) , ce sera le plus grand demi axe a qui sera choisi et l'arête de discrétisation sera de $2a/N_c$.
 - Pour un cube le nombre de maille sera donc de $N = N_c^3$.

Etude possible avec le code

Sommaire

5.1	Introduction	17
5.2	Etude en champ lointain	17
5.3	Etude en champ proche	18
5.4	Force et couple optique	19

5.1 Introduction

Définir son objet avec la bonne orientation n'est pas chose facile. C'est pourquoi la première option *Only dipoles with epsilon* permet de vérifier rapidement si l'objet rentre bien celui désiré, sans qu'aucun calcul ne soit lancé. Une fois ceci fait il y a trois grands champs : l'étude en champ lointain, l'étude en champ proche et les forces optiques.

Important : Notons que dans la CDM le calcul qui prend le plus de temps est le calcul du champ local du fait de la résolution du système d'équations linéaires. Une option a été rajoutée qui consiste à relire le champ local à partir d'un fichier. Quand cette option est sélectionnée, le nom d'un fichier est demandé, soit on rentre un ancien fichier soit un nouveau nom :

- Si c'est un nouveau nom, le calcul de champ local sera effectué puis stocké ainsi que la configuration choisie.
- Si c'est un ancien nom, le champ local sera relu avec une vérification qu'entre l'écriture et la relecture la configuration n'ait pas été changée. Ceci permet de relancer des calculs très rapides pour une même configuration mais différentes études.

5.2 Etude en champ lointain

Quand l'option champ lointain est sélectionnée trois possibilités apparaissent :

- *Cross section* : Cette option permet de calculer la section efficace d'extinction, d'absorption et de diffusion par la différence des deux premières plus le facteur asymétrique.
- *Cross section+Poynting* : Cette option calcule en plus la section efficace de diffusion à partir de l'intégration du champ lointain diffracté par l'objet sur 4π stéradians, et calcule le module du vecteur de Poynting qui sera représenté en 3D. Les valeurs

$Ntheta$ et $Nphi$ permet de donner le nombre de points utilisés pour calculer la section efficace d'extinction et représenter le vecteur de Poynting. Plus l'objet est grand et plus $Ntheta$ et $Nphi$ doivent être grand ce qui conduit pour des objets de plusieurs longueurs d'onde à des calculs coûteux en temps.

Une autre solution pour aller plus vite (option quick computation) et de passer par des FFT pour le calcul du champ diffracté. Dans ce cas il convient bien sûr de discrétiser sachant la relation $\Delta x \Delta k = 2\pi/N$. Le N choisi pour l'instant est $N = 256$. Ceci convient pour des objets plus grands que la longueur d'onde. En effet $L = N\Delta x$ correspond à la taille de l'objet, soit $\Delta k = 2\pi/L$, et si la taille de l'objet est trop petite alors le Δk est trop grand est l'intégration est alors imprécise. A noter que dans ce cas vu que l'intégration se fait sur deux plans parallèle au plan (x, y) et cela ne convient donc pas si l'incident fait un angle de plus de 70 degrés avec l'axe z . La représentation 3D du vecteur de Poynting se fait comme précédemment, i.e. avec $Ntheta$ et $Nphi$ à partir d'une interpolation sur les points calculés avec la FFT.

- *Microscopy* : Cette option demande l'ouverture numérique de la lentille utilisée (forcement entre 0 et 1) puis calcul le champ diffracté par l'objet et l'image obtenue à travers le microscope à la position du foyer image avec et sans le champ incident. Par défaut les lentilles sont placées parallèlement au plan (x, y) et du côté des z positifs. Le foyer du microscope est placé à l'origine du repère (Fig. 5.1). Le grossissement du microscope est G .

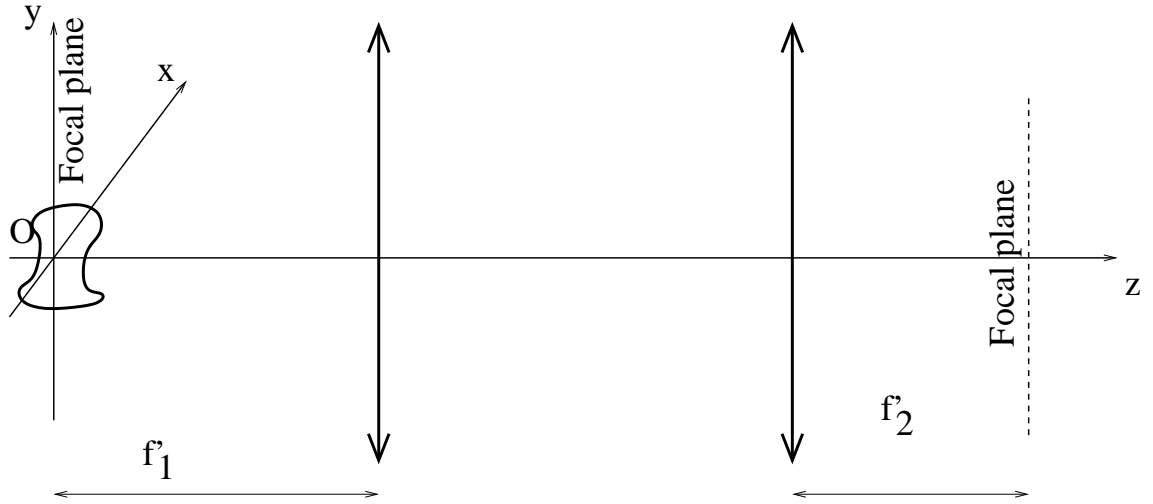


Fig. 5.1 : Schéma simplifié du microscope. Le foyer objet de la lentille objectif est à l'origine du repère. L'axe de la lentille est confondu avec l'axe z et du côté des z positifs.

Le calcul peut s'effectuer à partir de la somme du rayonnement des dipôles (très long quand l'objet a beaucoup de dipôles) ou avec des FFT (option quick computation) avec là aussi une valeur $N = 256$ par défaut. Dans ce cas $\Delta x \Delta k = 2\pi/N$ avec Δx la maille de discrétisation de l'objet qui correspond aussi à la discrétisation du plan image. Celui a donc une taille de $L = N\Delta x$.

5.3 Etude en champ proche

Quand l'option champ proche est sélectionnée deux possibilités apparaissent :

- *Local field* : Cette option permet de tracer le champ local à la position de chaque élément de discrétisation. Le champ local étant le champ à la position de chaque élément de discrétisation en l'absence de lui même.

- *Macroscopic field* : Cette option permet de tracer le champ macroscopique à la position de chaque élément de discrétisation. Le lien entre le champ local et le champ macroscopique est donné Ref. ⁵

La dernière option permet de choisir le maillage dans lequel le champ local et macroscopique sont représentés.

- *Objet* : Seul le champ dans l'objet est représenté.
- *Cube* : Le champ est représenté dans un cube contenant l'objet.
- *Wide field* : Le champ est représenté dans une boîte plus grande que l'objet. La taille de la boîte est fixée par les valeurs de N_{xm} , N_{ym} et N_{zm} .

5.4 Force et couple optique

Quand l'option force est sélectionnée quatre possibilités apparaissent :

- *Optical force* : Calcul de la force optique s'exerçant sur le ou les objets.
- *Optical force density* : Permet de tracer la densité de force optique.
- *Optical torque* : Calcul du couple optique s'exerçant sur le ou les objets. Le couple est calculé pour une origine placé au centre de gravité de l'objet.
- *Optical torque density* : Permet de tracer la densité de couple force optique.

Représentation des résultats

Sommaire

6.1	Introduction	21
6.2	Sorties numériques	21
6.3	Graphiques	22
6.3.1	Plot epsilon/dipoles	22
6.3.2	Champ lointain	22
6.3.3	Etude du Champ proche	23
6.3.4	force et couple optique	23

6.1 Introduction

Trois fenêtres permettent de gérer et représenter les résultats demandés. Celle du haut permet de générer les différentes figures, celle en bas à gauche présente les valeurs numériques demandées et celle en bas à droite est réservée aux représentations graphiques.

6.2 Sorties numériques

Tous les résultats sont donnés dans le système SI.

- *Object subunits* : Nombre d'éléments de discrétisation de l'objet étudié.
- *Mesh subunits* : Nombre d'éléments de discrétisation du parallélépipède contenant l'objet étudié.
- *Mesh size* : Taille de l'élément de discrétisation.
- $\lambda/(10n)$: Pour avoir une bonne précision, il est conseillé d'avoir une discrétisation en dessous de la valeur de $\lambda/10$ dans le matériau considéré d'indice optique n .
- k_0 : Nombre d'onde.
- *Irradiance* : Irradiance du faisceau, pour un faisceau Gaussien elle est estimée au centre du col.
- *Field modulus* : Module du champ, pour un faisceau Gaussien il est estimé au centre du col.
- *Tolerance obtained* : Tolérance obtenue pour la méthode itérative choisie. Logiquement au dessus de la valeur demandée.
- *Number of products Ax (iterations)* : Nombre de produits matrice vecteur effectué par la méthode itérative. Entre parenthèse le nombre d'itération de la méthode itérative.
- *Extinction cross section* : Valeur de la section efficace d'extinction.

- *Absorbing cross section* : Valeur de la section efficace d'absorption.
- *Scattering cross section* : Valeur de la section efficace de diffusion obtenue par = section efficace d'extinction- section efficace d'absorption.
- *Scattering cross section with integration* : Valeur de la section efficace de diffusion obtenue par intégration du champ lointain rayonné par l'objet.
- *Scattering assymetric parameter* : Facteur asymétrique.
- *Optical force x* : Force optique suivant l'axe x .
- *Optical force y* : Force optique suivant l'axe y .
- *Optical force z* : Force optique suivant l'axe z .
- *Optical force modulus* : Module de la force optique.
- *Optical torque x* : Couple optique suivant l'axe x .
- *Optical torque y* : Couple optique suivant l'axe x .
- *Optical torque z* : Couple optique suivant l'axe x .
- *Optical torque modulus* : Module du Couple optique.

6.3 Graphiques

6.3.1 Plot epsilon/dipoles

Le bouton *Plot epsilon/dipoles* permet de voir la position de chaque élément de discrétisation. La couleur de chaque point est associée à la valeur de la permittivité de la maille considérée.

6.3.2 Champ lointain

6.3.2.1 Plot Poynting

Plot Poynting : permet de tracer le module du vecteur de Poynting en 3D.

6.3.2.2 Plot microscopy

Plot microscopy : permet de tracer le champ diffracté en champ lointain par l'objet que ce soit du module du champ ou de la composante x , y ou z . Puis le champ vectoriel sur la plan image est représenté en considérant un grossissement G pour le microscope.

Le champ diffracté est représenté sur un maillage régulier en $\Delta k_x = \Delta k_y$ tel que $\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \leq k_0$ NA avec origine des phases à l'origine du repère (x, y, z) . Si le calcul est fait par rayonnement des dipôles alors l'image obtenue à pour taille $k_0 NA$ et discrétisé tel que $\Delta k_x = 2k_0 NA/N$, et si celui-ci est fait par transformée de Fourier alors la taille de l'image est fixée par la discrétisation de l'objet Δx avec la relation $\Delta x \Delta k = 2\pi/N$.

Le champ dans le plan image est calculé avec la transformée de Fourier. Nous avons donc avec le calcul par rayonnement des dipôles :

$$\Delta x \Delta k_x = \frac{2\pi}{N} \quad (6.1)$$

$$\Delta x 2k_0 NA = 2\pi \quad (6.2)$$

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2NA} \quad (6.3)$$

La taille du pixel de l'image est donc de $\lambda/(2NA)$.

Si le calcul du champ diffracté a été fait par transformée de Fourier alors la discrétisation c'est celle du maillage.

6.3.3 Etude du Champ proche

- Le premier bouton *Field* permet de choisir de représenter le champ incident, le champ local ou le champ macroscopique.
- Le bouton *Type* permet de choisir de représenter le module ou la composante x , y ou z du champ étudié.
- Le bouton *Cross section x* (y ou z) permet de choisir l'abscisse de la coupe (ordonnée ou cote). *Plot x* (y ou z) trace la coupe. *Plot all x* trace toutes les coupes d'un seul coup.

6.3.4 force et couple optique

- Le premier bouton *Field* permet de choisir de représenter la force ou le couple optique.
- Le bouton *Type* permet de choisir de représenter le module ou la composante x , y ou z du champ étudié.
- Le bouton *Cross section x* (y ou z) permet de choisir l'abscisse de la coupe (ordonnée ou cote). *Plot x* (y ou z) trace la coupe. *Plot all x* trace toutes les coupes d'un seul coup.

Fichiers de sortie pour matlab, octave, scilab,...

Sommaire

7.1	Introduction	25
7.2	Liste de tous les fichiers de sortie	25

7.1 Introduction

Il n'est pas forcément nécessaire d'utiliser l'interface graphique du programme pour regarder les résultats. Pour les sorties scalaires tous les résultats sont le fichier output et pour les images il est possible d'utiliser directement les fichiers de sortie en ascii et les lire à travers d'autres logiciels tels que Matlab, Octave, Scilab,...

- Tous les fichiers de sortie ayant une extension .mat (nameoffile.mat) celle-ci ne sera pas écrite.
- Toutes les sorties sont formatées sous la forme d'un unique vecteur colonne ou deux vecteurs colonnes si le nombre est un complexe (la partie réelle étant associée à la première colonne et la partie imaginaire à la deuxième colonne).
- Dans le cas où le fichier contient des données tridimensionnelles, celles-ci sont toujours rangées de la manière suivante :

```
do i=1,nz
  do j=1,ny
    do k=1,nx
      write(*,*) data(i,j,k)
    enddo
  enddo
enddo
```

Les données tridimensionnelles seront repérées par (3D) en début de ligne.

7.2 Liste de tous les fichiers de sortie

- x,y,z représente les différentes coordonnées utilisés.
- (3D) xc,yc,zc contiennent les coordonnées de tous les points du maillage.
- (3D) xwf,ywf,zwf contiennent les coordonnées de tous les points du maillage dans lequel le champ proche est calculé quand l'option champ large (wide field) est utilisée.

- (3D complexe) `incidentfieldx` (x,y) contient la composante $x(y,z)$ du champ incident dans l'objet uniquement.
- (3D) `incidentfield` contient le module du champ incident dans l'objet uniquement.
- (3D complexe) `macroscopicfieldx` (x,y) contient la composante $x(y,z)$ du champ macroscopique dans l'objet uniquement.
- (3D) `macroscopicfield` contient le module du champ macroscopique dans l'objet uniquement.
- (3D complexe) `mlocalfieldx` (x,y) contient la composante $x(y,z)$ du champ local dans l'objet uniquement.
- (3D) `localfield` contient le module du champ local dans l'objet uniquement.
- (3D complexe) `incidentfieldxwf` (x,y) contient la composante $x(y,z)$ du champ incident dans la boîte de champ proche en large champ.
- (3D) `incidentfieldwf` contient le module du champ incident dans la boîte de champ proche en large champ.
- (3D complexe) `macroscopicfieldxwf` (x,y) contient la composante $x(y,z)$ du champ macroscopique dans la boîte de champ proche en large champ.
- (3D) `macroscopicfieldwf` contient le module du champ macroscopique dans la boîte de champ proche en large champ.
- (3D complexe) `localfieldxwf` (x,y) contient la composante $x(y,z)$ du champ local dans la boîte de champ proche en large champ.
- (3D) `localfieldwf` contient le module du champ local dans la boîte de champ proche en large champ.
- `theta` est un tableau qui contient tous les angles `theta` correspondant à toutes les directions dans lesquelles le vecteur de Poynting est calculé. Il est de taille $(N_{\text{theta}}+1)*N_{\text{phi}}$.
- `phi` est un tableau qui contient tous les angles `phi` correspondant à toutes les directions dans lesquelles le vecteur de Poynting est calculé. Il est de taille $(N_{\text{theta}}+1)*N_{\text{phi}}$.
- `poynting` contient le module du vecteur de poyting dans la direction `theta` et `phi` de taille $(N_{\text{theta}}+1)*N_{\text{phi}}$.
- (3D) `forcex` (y,z) contient la composante x de la force optique dans l'objet uniquement.
- (3D) `torquex` (y,z) contient la composante x de la force optique dans l'objet uniquement.

Bibliographie

- [1] F. M. Kahnert, J. Quant. Spect. Rad. Transf. **79-80**, 775 (2003).
- [2] E. M. Purcell and C. R. Pennypacker, Astrophys. J. **186**, 705 (1973).
- [3] A. Rahmani, P. C. Chaumet, F. de Fornel, and C. Girard, Phys. Rev. A **56**, 3245 (1997).
- [4] B. T. Draine, Astrophys. J. **333**, 848 (1988).
- [5] P. C. Chaumet, A. Sentenac, and A. Rahmani, Phys. Rev. E **70**, 036606 (2004).