



Soutenance de fin d'alternance:
Modélisation numérique pour la conception de
métasurfaces

Roman GELLY

24 juin 2024

Table des matières

1 Contexte

2 Projet d'apprentissage (sept. 2023 → mars 2024)

3 Projet de recherche (mars 2024 → sept. 2024)

4 Perspectives et poursuite en thèse

Contexte

- **Nanophotonique** : étude des *interactions lumière-matière* à l'échelle *nanométrique*
- **Métasurface** : matériau artificiel *ultra-fin* composé d'un ensemble d'éléments nanométriques appelés *nano-résonateurs* offrant un grand contrôle de la lumière sur une distance de propagation très courte

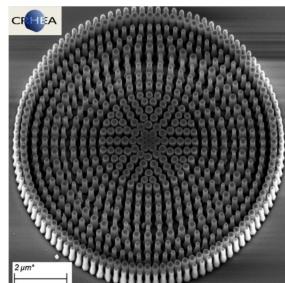
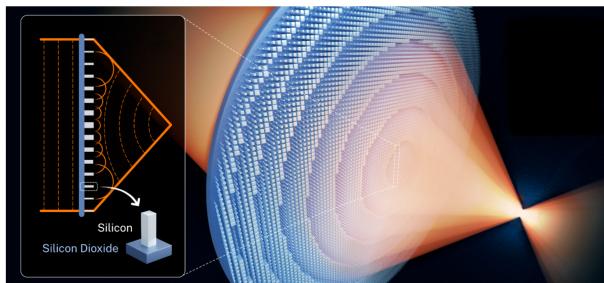


Image MEB de métalenteille,
Inria/CHREA

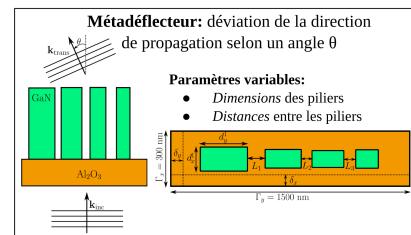


Sean Kelley/NIST

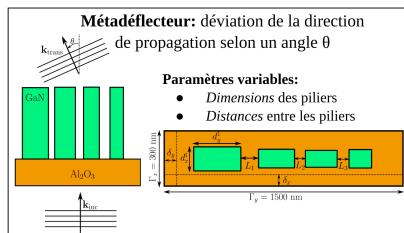
Projet d'apprentissage

Conception numérique de métasurfaces par *design* inverse

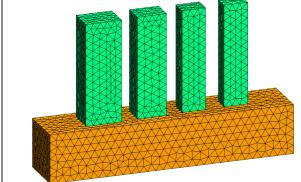
Projet d'apprentissage



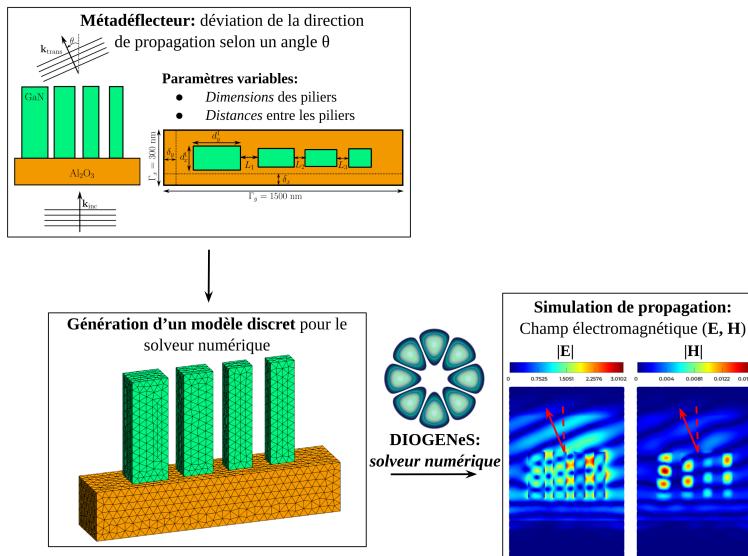
Projet d'apprentissage



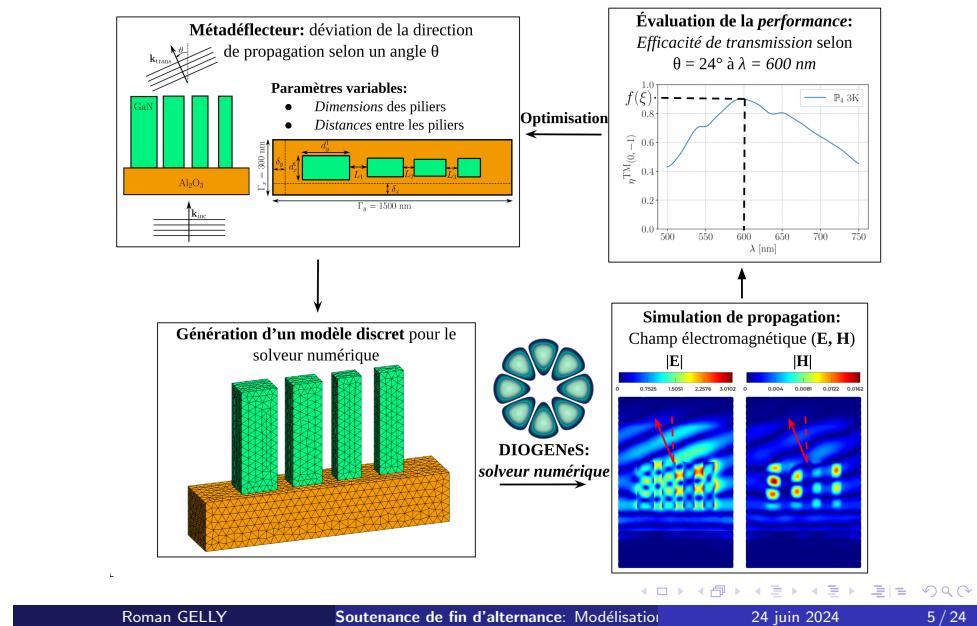
Génération d'un modèle discret pour le solveur numérique



Projet d'apprentissage



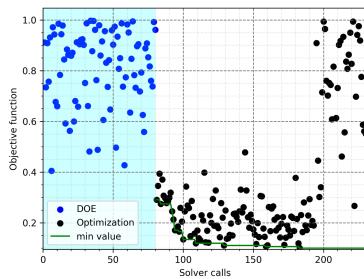
Projet d'apprentissage



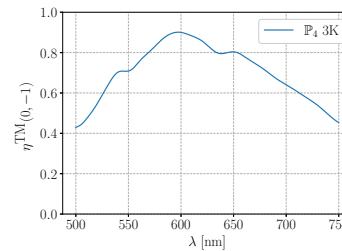
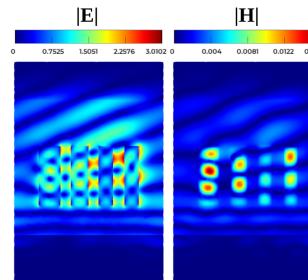
Design inverse d'un métadéflecteur

Méthode d'optimisation bayesienne :
Efficient Global Optimization
(EGO)

- 12 paramètres d'optimisation
- Mono-objectif :
 $f(\xi) = 1 - \eta^{600 \text{ nm}}(0, -1)$



Convergence en < 200 itérations
(~ 20h temps CPU)



→ 90% d'efficacité à $\lambda = 600 \text{ nm}$

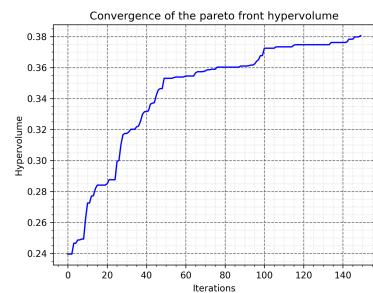
Design inverse d'un beam-splitter

Optimisation EGO :

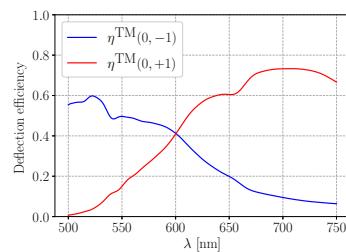
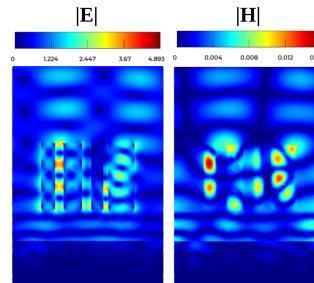
- 12 paramètres d'optimisation

Bi-objectif :

$$\begin{cases} f_1(\xi) = 1 - \eta^{600 \text{ nm}}(0, -1) \\ f_2(\xi) = 1 - \eta^{600 \text{ nm}}(0, +1) \end{cases}$$



Convergence en < 200 itérations
(~ 20h temps CPU)



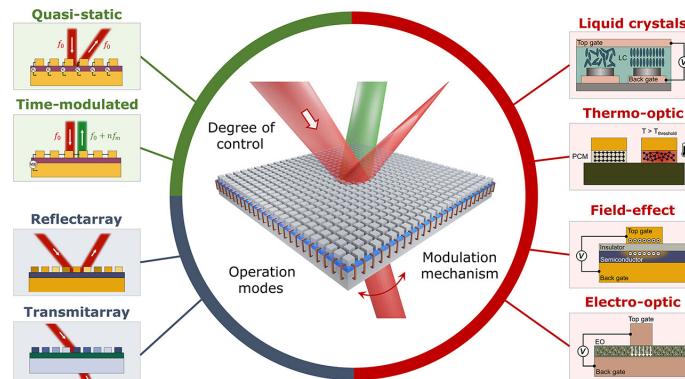
→ 40% d'efficacité par mode à 600 nm

Projet de recherche

Modélisation numérique avancée pour la modulation temporelle de métasurfaces

Les métasurfaces actives

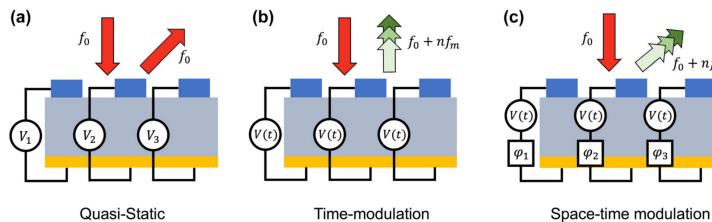
- Méta surface **passive** : propriétés fixées lors de la fabrication
 - Méta surface **active**/modulées temporellement : reconfigurable *en temps réel* grâce à un *mécanisme de modulation*



Kuznetsov et al. 2024

Régimes de modulation

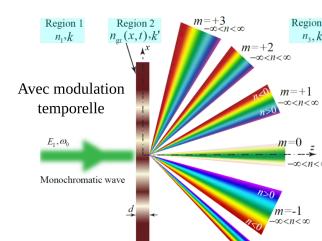
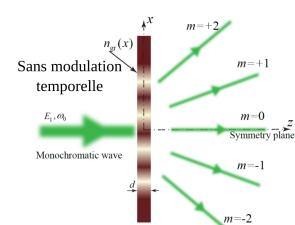
- (a) Si $f_m \ll f_0$: modulation *quasi-statique*
- (b) Si $f_m \gtrsim 1$ MHz (pour un laser) : modulation *temporelle* (haute fréquence)
- (c) Modulation temporelle variable dans l'espace : modulation *spatio-temporelle*



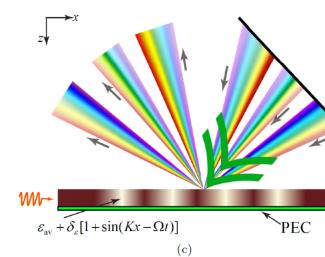
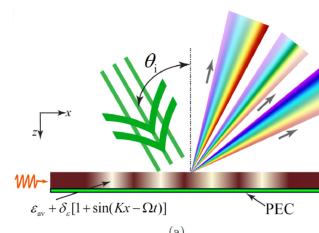
Thureja et al. 2022

Phénomènes physiques (modulation haute fréquence)

Génération d'harmoniques temporelles ($f_0 + nf_m$, $n \in \mathbb{Z}$)

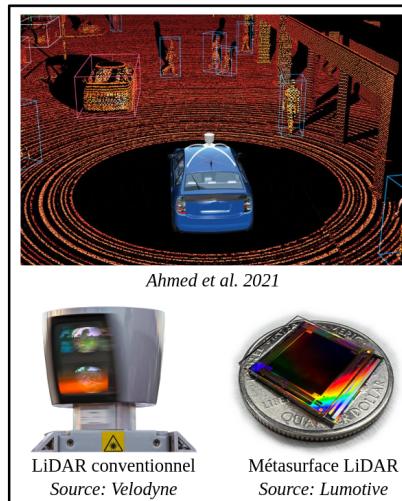
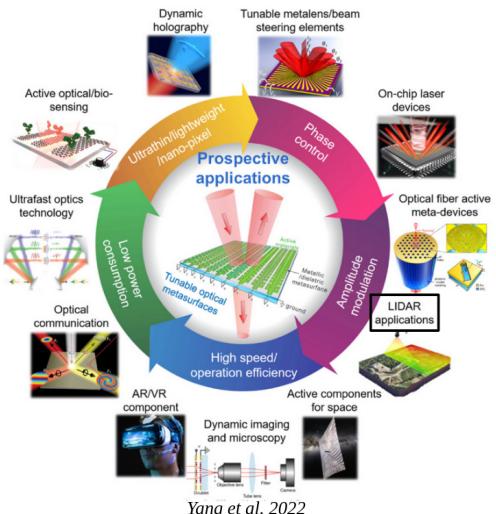


Non-reciprocity



Taravati et Eleftheriades 2019

Applications potentielles



Modélisation numérique

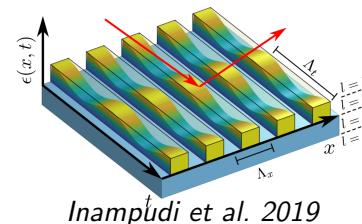
Objectif : Développer une méthode numérique pour modéliser et concevoir des **métasurfaces actives**

Méthode : Résolution numérique des **équations de Maxwell** dans des *milieux hétérogènes* par une méthode de type *Galerkin discontinu* : *Thèse J. Viquerat 2015*

↪ extension aux matériaux **modulés temporellement**

Équations de Maxwell

$$\frac{\partial(\epsilon(\mathbf{x}, t)\mathbf{E})}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H}$$
$$\mu(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} - \mathbf{J}$$

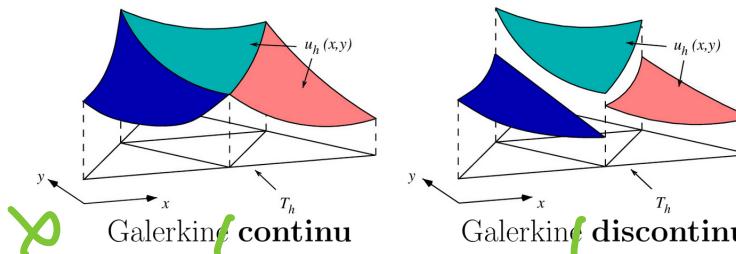


Inampudi et al. 2019

La méthode Galerkin discontinu



- Introduite en 1973 par *Reed et Hill* et application à la résolution des équations de Maxwell en 1998 par *Remaki et Fezoui*
- L'approximation est **discontinue aux interfaces** et le support des fonctions de bases est restreint à chaque élément
 - ↪ Approprié au traitement des **discontinuités dans le champ électromagnétique** aux interfaces entre 2 matériaux.
 - ↪ **Formulation faible locale** → pas d'inversion de matrice coûteuse.



Formulation faible

En multipliant les équations de Maxwell par une **fonction test vectorielle** ψ et en **intégrant sur l'élément** T_i , on obtient après application des **formules de Green** :

Formulation faible en 3D

$$\begin{aligned} \int_{T_i} \frac{\partial(\epsilon_r(t)\mathbf{E})}{\partial t} \cdot \psi - \int_{T_i} \mathbf{H} \cdot \nabla \times \psi &= - \int_{T_i} \mathbf{J} \cdot \psi - \int_{\partial T_i} (\mathbf{H} \times \mathbf{n}_i) \cdot \psi \\ \int_{T_i} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \cdot \psi + \int_{T_i} \mathbf{E} \cdot \nabla \times \psi &= \int_{\partial T_i} (\mathbf{E} \times \mathbf{n}_i) \cdot \psi \end{aligned}$$

Intégrales sur les interfaces

$$\int_{\partial T_i} (\mathbf{H} \times \mathbf{n}_i) \cdot \psi = \sum_{l \in \mathcal{V}_i} \int_{a_{il}} (\mathbf{H} \times \mathbf{n}_{il}) \cdot \psi$$

Flux numériques

expliquer ...

Comme les champs peuvent être **discontinus aux interfaces**, les intégrales sur les faces $\int_{a_{il}}$ ne sont **pas définies uniquement**.
→ On introduit des **flux numériques** pour connecter les éléments voisins :

Flux numériques

$$\int_{a_{il}} (\mathbf{E} \times \mathbf{n}_{il}) \cdot \psi \longrightarrow \int_{a_{il}} (\mathbf{E}_* \times \mathbf{n}_{il}) \cdot \psi$$
$$\int_{a_{il}} (\mathbf{H} \times \mathbf{n}_{il}) \cdot \psi \longrightarrow \int_{a_{il}} (\mathbf{H}_* \times \mathbf{n}_{il}) \cdot \psi$$

Flux centrés

$$\mathbf{E}_* = \frac{\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_l}{2}, \quad \mathbf{H}_* = \frac{\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_l}{2}$$

→ **non-dissipatif** et convergence spatiale en h^p

Intégration en temps

Schéma temporel Leap-Frog d'ordre 2

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t f(t_{n+1/2}, \phi^{n+1/2})$$

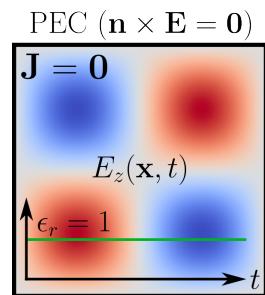
Schéma LF₂-DG

$$\bar{\mathbb{M}}_i \frac{\epsilon_i^{n+1} \bar{\mathbf{E}}_i^{n+1} - \epsilon_i^n \bar{\mathbf{E}}_i^n}{\Delta t} = \bar{\mathbb{K}}_i \times \bar{\mathbf{H}}_i^{n+1/2} - \sum_{l \in \mathcal{V}_i} \bar{\mathbb{S}}_{il} \left(\bar{\mathbf{H}}_*^{n+1/2} \times \mathbf{n}_{il} \right) - \bar{\mathbf{J}}_i (t_{n+1/2})$$

$$\bar{\mathbb{M}}_i \frac{\bar{\mathbf{H}}_i^{n+3/2} - \bar{\mathbf{H}}_i^{n+1/2}}{\Delta t} = -\bar{\mathbb{K}}_i \times \bar{\mathbf{E}}_i^{n+1} + \sum_{l \in \mathcal{V}_i} \bar{\mathbb{S}}_{il} \left(\bar{\mathbf{E}}_*^{n+1} \times \mathbf{n}_{il} \right)$$

Solution manufacturée pour la validation du code 2D

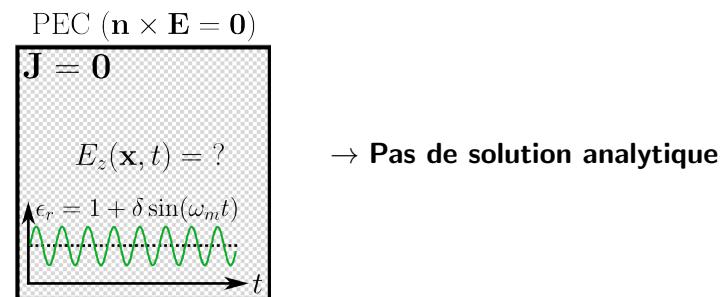
Soit une cavité résonante rectangulaire remplie d'un milieu de *permittivité constante* ($\epsilon_r = 1$), les équations de Maxwell 2D (mode TMz) admettent une **solution analytique** :



$$\begin{cases} H_x = -\frac{k_y}{\omega} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(\omega_s t) \\ H_y = \frac{k_x}{\omega} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(\omega_s t) \\ E_z = \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(\omega_s t) \end{cases}$$

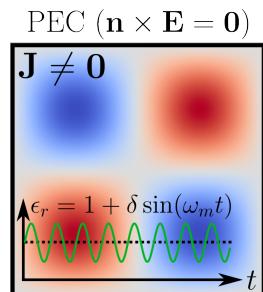
Solution manufacturée pour la validation du code 2D

Nous considérons à présent que la permittivité du milieu subit une modulation temporelle de fréquence ω_m autour de $\epsilon_r = 1$.



Solution manufacturée pour la validation du code 2D

Solution manufacturée : Déterminer un terme source $\mathbf{J} \neq \mathbf{0}$ tel que le nouveau problème admette une solution analytique que l'on impose.

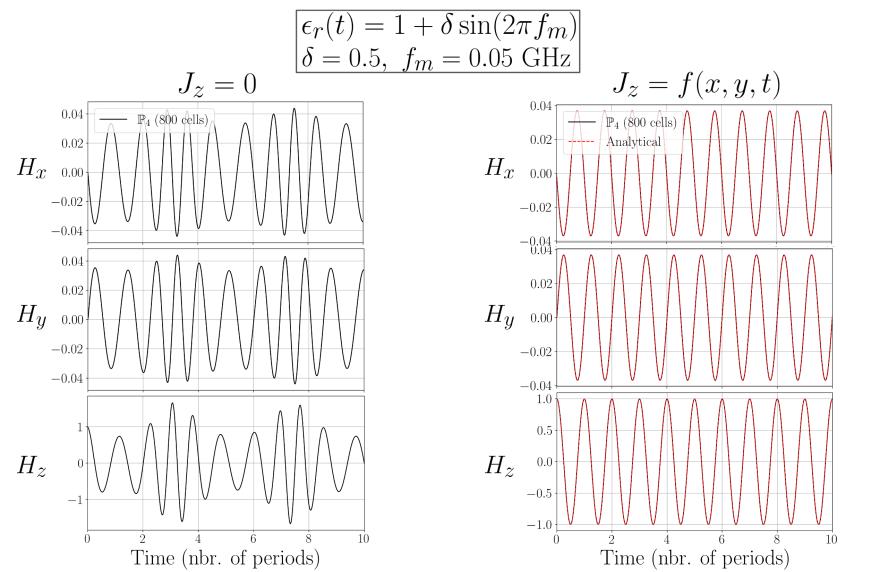


Pour un profil de modulation de la forme
 $\epsilon_r(t) = 1 + \delta \sin(\omega_m t)$, on a :

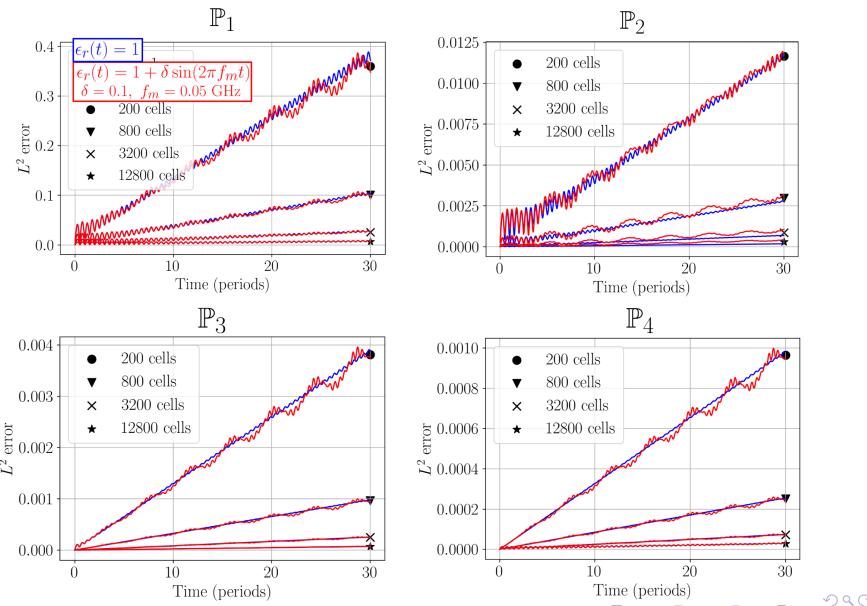
Terme source

$$J_z(x, y, t) = \delta \sin(k_x x) \sin(k_y y) \times \\ [\omega_s \sin(\omega_m t) \sin(\omega_s t) - \omega_m \cos(\omega_m t) \cos(\omega_s t)]$$

Solution manufacturée : résultats numériques



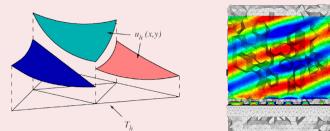
Solution manufacturée : erreur L^2 en fonction du temps



Perspectives et poursuite en thèse

Méthodologie numérique

- Implémentation et validation du schéma numérique



- Couplage avec une méthode d'optimisation

Applications physiques

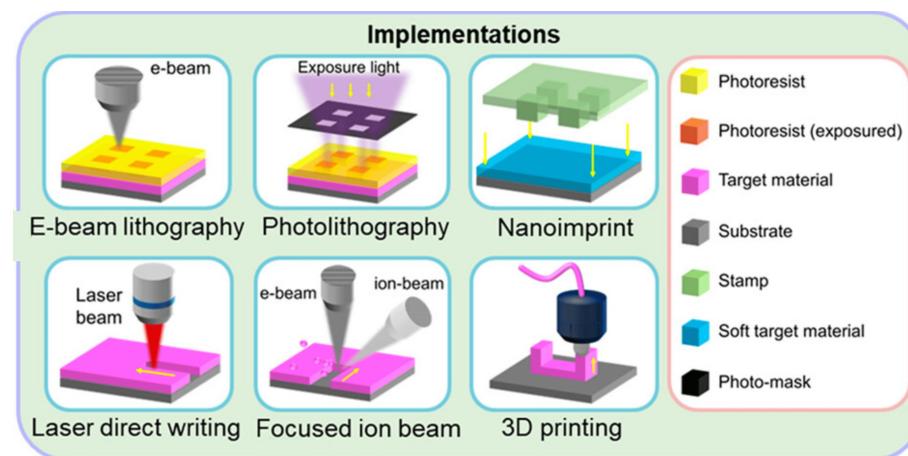
- Exploration des *phénomènes physiques* propres aux métasurfaces actives
- Conception numérique de métasurface actives
- Future *collaboration* avec des physiciens experts



Merci de votre attention

Merci de votre attention !

Méthodes de fabrication



Kuznetsov et al. 2024

Objectifs méthodologiques

- Formulation du schéma numérique en considérant une variation spatio-temporelle de la permittivité $\epsilon(\mathbf{x}, t)$. ✓
- Implémentation et validation du schéma numérique.
- Analyse de stabilité et étude de convergence du schéma numérique.
- Application du solveur développé à la conception numérique de métasurfaces modulées temporellement.