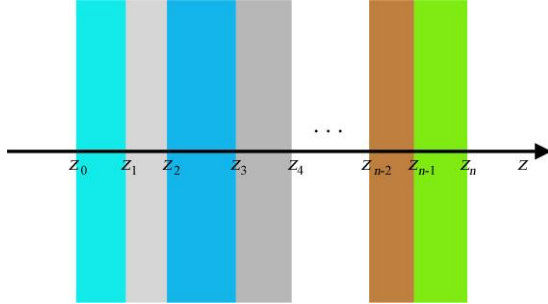


Propagation de la lumière dans les milieux anisotropes stratifiés

Georges Bader et Bernard M. de Dormale

1. Position du problème



On considère un empilement de n couches minces de milieux isotropes ou anisotropes non magnétiques avec des interfaces parallèles (voir figure). On suppose un champ électromagnétique monochromatique incident sur la gauche et on veut calculer les champs réfléchis et transmis. On utilise le formalisme des champs à valeur complexe avec une dépendance harmonique en t via un facteur $e^{-i\omega t}$ ($\omega > 0$).

On choisit l'axe des z perpendiculaire aux interfaces, ce qui donne un problème invariant i) par translation dans les directions x et y et ii) par rotation autour de l'axe des z . On suppose qu'en raison de cette symétrie, on peut considérer des champs qui dépendent de x par un facteur $e^{ik_x x}$ ($k_x \in \mathbb{R}$) et ne dépendent pas de y . Le fait que cette dépendance en x et en y est identique dans toutes les couches est primordial pour pouvoir assurer la continuité des composantes tangentes des champs électrique \mathbf{E} et magnétique \mathbf{H} aux interfaces.

Pour simplifier les notations dans la suite, on posera $\kappa_x = \frac{ck_x}{\omega}$. La conservation de k_x aux interfaces entraîne celle de κ_x , ce qui en fait constitue une généralisation de la loi de Snell (comme on le verra, $\kappa_x = n \sin \theta$ dans les milieux isotropes non absorbants pour des champs non évanescent).

2. Équations de Maxwell-Lorentz dans un milieu anisotrope

Avec les hypothèses précédentes, les équations de Maxwell dans un milieu anisotrope prennent la forme

$$\begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} H_y \\ \frac{\partial}{\partial z} H_x - ik_x H_z \\ ik_x H_y \end{pmatrix} + i\omega \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} E_x + \varepsilon_{xy} E_y + \varepsilon_{xz} E_z \\ \varepsilon_{yx} E_x + \varepsilon_{yy} E_y + \varepsilon_{yz} E_z \\ \varepsilon_{zx} E_x + \varepsilon_{zy} E_y + \varepsilon_{zz} E_z \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial z} E_y \\ \frac{\partial}{\partial z} E_x - ik_x E_z \\ ik_x E_y \end{pmatrix} - i\omega \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} = 0$$

Remarques. 1) On peut définir un tenseur de permittivité relative $\boldsymbol{\varepsilon}'$ par $\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_0 \boldsymbol{\varepsilon}'$.

2) Dans le cas d'un milieu isotrope, le tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}$ est diagonal avec $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_0 \varepsilon'$.

3. Formalisme à quatre composantes

On peut éliminer E_z et $B_z = \mu_0 H_z$ des équations de Maxwell-Lorentz pour obtenir l'équation à 4 composantes

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} E_x \\ Z_0 H_y \\ E_y \\ Z_0 H_x \end{bmatrix} = i \frac{\omega}{c} \Delta \begin{bmatrix} E_x \\ Z_0 H_y \\ E_y \\ Z_0 H_x \end{bmatrix}$$

où $Z_0 = \mu_0 c = \sqrt{\mu_0 / \epsilon_0}$ est l'impédance caractéristique du vide et

$$\Delta = \begin{bmatrix} -\kappa_x \frac{\epsilon'_{zx}}{\epsilon'_{zz}} & 1 - \frac{\kappa_x^2}{\epsilon'_{zz}} & -\kappa_x \frac{\epsilon'_{zy}}{\epsilon'_{zz}} & 0 \\ \epsilon'_{yx} - \frac{\epsilon'_{xz} \epsilon'_{zx}}{\epsilon'_{zz}} & -\frac{\kappa_x \epsilon'_{xz}}{\epsilon'_{zz}} & \epsilon'_{xy} - \frac{\epsilon'_{xz} \epsilon'_{zy}}{\epsilon'_{zz}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ \frac{\epsilon'_{yz} \epsilon'_{zx}}{\epsilon'_{zz}} - \epsilon'_{yx} & \frac{\kappa_x \epsilon'_{yz}}{\epsilon'_{zz}} & \kappa_x^2 - \epsilon'_{yy} + \frac{\epsilon'_{yz} \epsilon'_{zy}}{\epsilon'_{zz}} & 0 \end{bmatrix}$$

(équation de Berreman).

Remarque. L'utilité de ce formalisme réside dans le fait que les composantes tangentielle des champs électrique \mathbf{E} et magnétique \mathbf{H} , E_x, E_y et H_x, H_y sont continues aux interfaces.

4. Calcul des champs dans un milieu homogène

Si la matrice Δ a un système complet de vecteurs propres (ce qui est le cas en pratique), l'équation différentielle vectorielle

$$\frac{d}{dz} \Phi(z) = i \frac{\omega}{c} \Delta \Phi(z)$$

avec la condition $\Phi(z_0) = \Phi_0$ a pour solution

$$\Phi(z) = e^{i \frac{\omega}{c} \Delta (z-z_0)} \Phi_0.$$

Le calcul de l'exponentielle $e^{i \frac{\omega}{c} \Delta (z-z_0)}$ se fait de la manière suivante : soient $\{\lambda_j\}_{j=1}^4$ les valeurs propres (non nécessairement distinctes) de Δ et soient $\{\mathbf{v}_j\}_{j=1}^4$ les vecteurs propres correspondants. Formons la matrice

$$\mathbf{M} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \mathbf{v}_3 \quad \mathbf{v}_4]$$

qui a les \mathbf{v}_j comme colonnes. Alors (voir fadagogo.com pour la justification)

$$e^{\frac{\omega}{c}\Delta(z-z_0)} = \mathbf{M} \text{diag} \left(e^{\frac{\omega}{c}\lambda_1(z-z_0)}, e^{\frac{\omega}{c}\lambda_2(z-z_0)}, e^{\frac{\omega}{c}\lambda_3(z-z_0)}, e^{\frac{\omega}{c}\lambda_4(z-z_0)} \right) \mathbf{M}^{-1}$$

Il peut être utile de considérer aussi les vecteurs lignes \mathbf{v}_i^\perp qui sont les lignes de \mathbf{M}^{-1} . Ils ont la propriété que

$$\mathbf{v}_i^\perp \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$$

et forment ce qu'on appelle la *base duale* de la base des \mathbf{v}_j . On peut montrer qu'on peut aussi écrire

$$e^{\frac{\omega}{c}\Delta(z-z_0)} = \sum_{j=1}^4 \mathbf{v}_j e^{\frac{\omega}{c}\lambda_j(z-z_0)} \mathbf{v}_j^\perp.$$

5. Propagation dans un milieu stratifié

Soit Δ_k la valeur de la matrice Δ dans la couche mince homogène k , entre z_{k-1} et z_k . Si on pose

$$\Phi = \begin{bmatrix} E_x \\ Z_0 H_y \\ E_y \\ Z_0 H_x \end{bmatrix},$$

on aura

$$\Phi(z_{k-1}) = e^{\frac{\omega}{c}\Delta_k(z_{k-1}-z_k)} \Phi(z_k) = e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_k d_k} \Phi(z_k),$$

où $d_k = z_k - z_{k-1}$ est l'épaisseur de la couche. Puisque le vecteur Φ est continu aux interfaces, on aura

$$\Phi(z_0) = e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_1 d_1} e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_2 d_2} e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_3 d_3} \dots e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_{n-1} d_{n-1}} e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_n d_n} \Phi(z_n),$$

c'est-à-dire

$$\Phi(z_0) = \mathbf{N} \Phi(z_n)$$

où¹

$$\mathbf{N} = e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_1 d_1} e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_2 d_2} e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_3 d_3} \dots e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_{n-1} d_{n-1}} e^{-\frac{\omega}{c}\Delta_n d_n}.$$

6. Conditions aux limites

Outre les n couches minces, le problème fait intervenir deux milieux semi-infinis : le milieu 0 (*ambient in*, $z < z_0$) et le milieu $n+1$ (*ambient out*, $z > z_n$). Dans le milieu 0 (supposé non absorbant), le champ

¹ On aura aussi $\Phi(z_n) = \mathbf{N}^{-1} \Phi(z_0)$ où $\mathbf{N}^{-1} = e^{\frac{\omega}{c}\Delta_n d_n} e^{\frac{\omega}{c}\Delta_{n-1} d_{n-1}} \dots e^{\frac{\omega}{c}\Delta_3 d_3} e^{\frac{\omega}{c}\Delta_2 d_2} e^{\frac{\omega}{c}\Delta_1 d_1}$.

est composé d'un *champ incident*, qui se propage vers la droite (c.-à-d. dans le sens des z croissants) et d'un *champ réfléchi*, qui se propage vers la gauche (c.-à-d. dans le sens des z décroissants). Dans le milieu $n+1$, le champ est composé uniquement d'un *champ transmis*, qui se propage vers la droite : il n'y a pas de champ incident se propageant vers la gauche. Les conditions aux limites sont donc

- champ incident dans le milieu 0 : connu et
- champ incident dans le milieu $n+1$: nul.

À partir de là, il faut calculer les champs réfléchi et transmis.

Question : Comment peut-on déterminer le sens de propagation d'un champ ?

Réponse : C'est déterminé par les valeurs propres de la matrice Δ dans le milieu de propagation.

Soit Φ un champ qui est vecteur propre de la matrice Δ dans un certain milieu et soit λ la valeur propre correspondante.

$$\Delta\Phi = \lambda\Phi$$

Cela signifie que Φ a une dépendance spatio-temporelle via un facteur

$$e^{i(k_x x + k_z z - \omega t)}, \quad k_z = \frac{\omega}{c} \lambda.$$

Dans le cas d'une propagation vers la droite, on doit avoir $k_z > 0$ si k_z est réel. Si k_z est complexe, on doit avoir $\text{Im}k_z > 0$: il y a atténuation dans le sens où le champ se propage. On peut résumer les deux cas en disant qu'on doit avoir

$$0 \leq \arg k_z < \pi \Leftrightarrow 0 \leq \arg \lambda < \pi.$$

Inversement, pour une propagation vers la gauche, on aura

$$\pi \leq \arg k_z < 2\pi \Leftrightarrow \pi \leq \arg \lambda < 2\pi.$$

Soit maintenant Δ_0 la valeur de la matrice Δ dans le milieu 0 et soient $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_4$ quatre vecteurs propres linéairement indépendants de Δ_0 avec \mathbf{X}_1 et \mathbf{X}_3 qui se propagent vers la droite, \mathbf{X}_2 et \mathbf{X}_4 qui se propagent vers la gauche. Si c_1, \dots, c_4 sont tels que

$$\Phi(z_0) = c_1 \mathbf{X}_1 + c_2 \mathbf{X}_2 + c_3 \mathbf{X}_3 + c_4 \mathbf{X}_4,$$

alors en z_0 le champ incident est $c_1 \mathbf{X}_1 + c_3 \mathbf{X}_3$ (donc c_1 et c_3 sont supposés connus) et le champ réfléchi est $c_2 \mathbf{X}_2 + c_4 \mathbf{X}_4$.

Similairement, si Δ_{n+1} la valeur de la matrice Δ dans le milieu $n+1$ et si Ξ_1, \dots, Ξ_4 sont quatre vecteurs propres linéairement indépendants de Δ_{n+1} avec Ξ_1 et Ξ_3 qui se propagent vers la droite, Ξ_2 et Ξ_4 qui se propagent vers la gauche et si d_1, \dots, d_4 sont tels que

$$\Phi(z_n) = d_1 \Xi_1 + d_2 \Xi_2 + d_3 \Xi_3 + d_4 \Xi_4,$$

alors le champ transmis en z_n est $d_1 \Xi_1 + d_3 \Xi_3$ et on doit avoir $d_2 = d_4 = 0$.

La solution du problème consiste donc à résoudre le système d'équations linéaires

$$c_1 \mathbf{X}_1 + c_2 \mathbf{X}_2 + c_3 \mathbf{X}_3 + c_4 \mathbf{X}_4 = \mathbf{N}(d_1 \Xi_1 + d_3 \Xi_3) \quad (1)$$

où c_1 et c_3 sont donnés, les inconnues étant les quatre autres coefficients. Ceci peut se faire en deux étapes :

- Tout d'abord, on calcule d_1 et d_3 en résolvant le système

$$\begin{cases} c_1 = d_1 \mathbf{X}_1^\perp \mathbf{N} \Xi_1 + d_3 \mathbf{X}_1^\perp \mathbf{N} \Xi_3 \\ c_3 = d_1 \mathbf{X}_3^\perp \mathbf{N} \Xi_1 + d_3 \mathbf{X}_3^\perp \mathbf{N} \Xi_3 \end{cases}$$

obtenu en multipliant l'équation (1) par \mathbf{X}_1^\perp et \mathbf{X}_3^\perp ;

- Ensuite, on calcule c_2 et c_4 en utilisant les formules

$$\begin{aligned} c_2 &= d_1 \mathbf{X}_2^\perp \mathbf{N} \Xi_1 + d_3 \mathbf{X}_2^\perp \mathbf{N} \Xi_3, \\ c_4 &= d_1 \mathbf{X}_4^\perp \mathbf{N} \Xi_1 + d_3 \mathbf{X}_4^\perp \mathbf{N} \Xi_3 \end{aligned}$$

obtenues en multipliant l'équation (1) par \mathbf{X}_2^\perp et \mathbf{X}_4^\perp .

7. Cas particulier des milieux isotropes

Dans un milieu isotrope,

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 & 1 - \frac{\kappa_x^2}{\varepsilon'} & 0 & 0 \\ \varepsilon' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \kappa_x^2 - \varepsilon' & 0 \end{bmatrix} :$$

il y a découplage des polarisations p et s . Les valeurs propres sont²

$$\lambda_1 = \lambda_3 = \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2}, \quad \lambda_2 = \lambda_4 = -\sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} \quad (0 \leq \arg \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} < \pi).$$

Il y a avantage à utiliser pour les vecteurs propres une notation inspirée de la mécanique quantique :

² En fait, on peut montrer qu'on doit avoir $0 \leq \arg \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} \leq \frac{\pi}{2}$ (voir fadagogo.com).

$$|p \pm \rangle = \begin{bmatrix} \pm \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} / \sqrt{\varepsilon'} \\ \sqrt{\varepsilon'} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |s \pm \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \mp \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} \end{bmatrix}.$$

On vérifie que la base duale de cette base de vecteurs propres est formée des vecteurs

$$\begin{aligned} \langle p \pm | &= \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2}} \left[\pm \sqrt{\varepsilon'} \quad \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} / \sqrt{\varepsilon'} \quad 0 \quad 0 \right] \\ \langle s \pm | &= \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2}} \left[0 \quad 0 \quad \sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} \quad \mp 1 \right] \end{aligned},$$

qui, rappelons-le, ont la propriété que $\langle p \pm | p \pm \rangle = \langle s \pm | s \pm \rangle = 1$, tous les autres produits étant nuls.

Remarque. Pour un champ non évanescent dans un milieu non absorbant, $\kappa_x = n \sin \theta$ et

$\sqrt{\varepsilon' - \kappa_x^2} = n \cos \theta$ où $n = \sqrt{\varepsilon'}$ et θ est l'angle que fait la direction de propagation avec l'axe des z . Dans ce cas, les vecteurs précédents ont la forme

$$|p \pm \rangle = \begin{bmatrix} \pm \cos \theta \\ n \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |s \pm \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \mp n \cos \theta \end{bmatrix}$$

et

$$\begin{aligned} \langle p \pm | &= \frac{1}{2n \cos \theta} \left[\pm n \quad \cos \theta \quad 0 \quad 0 \right] \\ \langle s \pm | &= \frac{1}{2n \cos \theta} \left[0 \quad 0 \quad n \cos \theta \quad \mp 1 \right] \end{aligned}.$$

8. Matrices de Jones pour des ambiants in et out isotropes transparents

Supposons que les ambiants in et out soient isotropes et transparents. Si on utilise les vecteurs propres donnés à la section précédente, les coefficients de réflexion et de transmission forment deux matrices deux par deux appelées *matrices de Jones*. On peut les calculer de la manière suivante :

Tout d'abord, pour un champ incident unitaire de polarisation p , on doit avoir

$$|in p + \rangle + r_{pp} |in p - \rangle + r_{sp} |in s - \rangle = \mathbf{N} (t_{pp} |out p + \rangle + t_{sp} |out s + \rangle) \quad (2)$$

Ce système est résolu en utilisant la technique de la section 6 :

- On commence par multiplier (2) par $\langle in p + |$ et $\langle in s + |$ pour obtenir le système

$$\begin{cases} 1 = t_{pp} \langle in p + | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{sp} \langle in p + | \mathbf{N} | out s + \rangle \\ 0 = t_{pp} \langle in s + | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{sp} \langle in s + | \mathbf{N} | out s + \rangle \end{cases},$$

ce qui permet de calculer t_{pp} et t_{sp} .

- Ensuite, on multiplie (2) par $\langle in p - |$ et $\langle in s - |$ pour obtenir

$$\begin{aligned} r_{pp} &= t_{pp} \langle in p - | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{sp} \langle in p - | \mathbf{N} | out s + \rangle \\ r_{sp} &= t_{pp} \langle in s - | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{sp} \langle in s - | \mathbf{N} | out s + \rangle \end{aligned},$$

ce qui donne r_{pp} et r_{sp} .

On recommence ensuite le processus avec un champ incident unitaire de polarisation s pour obtenir successivement

$$| in s + \rangle + r_{ps} | in p - \rangle + r_{ss} | in s - \rangle = \mathbf{N} (t_{ps} | out p + \rangle + t_{ss} | out s + \rangle),$$

$$\begin{cases} 0 = t_{ps} \langle in p + | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{ss} \langle in p + | \mathbf{N} | out s + \rangle \\ 1 = t_{ps} \langle in s + | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{ss} \langle in s + | \mathbf{N} | out s + \rangle \end{cases}$$

et

$$\begin{aligned} r_{ps} &= t_{ps} \langle in p - | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{ss} \langle in p - | \mathbf{N} | out s + \rangle \\ r_{ss} &= t_{ps} \langle in s - | \mathbf{N} | out p + \rangle + t_{ss} \langle in s - | \mathbf{N} | out s + \rangle \end{aligned}$$

Remarques. 1) La matrice de Jones en réflexion reste définie si l'ambient out n'est pas transparent, ni même isotrope.

2) Lorsqu'on suppose une dépendance harmonique des champs en t via un facteur $e^{i\omega t}$ ($\omega > 0$), les matrices de Jones qu'on obtient sont les conjuguées complexes de celles calculées ici.

Références

R.M.A. Azzam and N.M. Bashara. Ellipsometry and polarized light. North-Holland Pub. Co. 1977.

D.W. Berreman. Optics in stratified and anisotropic media: 4×4-matrix formulation. J. Opt. Soc. Am. **62**, 502 (1972).

H. Fujiwara. Spectroscopic ellipsometry: principles and applications. John Wiley & Sons, Ltd. 2007.

E. Hecht. Optics. 4th ed. Addison-Wesley. 2002.

S. Teitler and B.W. Hennis. Refraction in stratified, anisotropic media. J. Opt. Soc. Am. **60**, 830 (1970).