

Thèse présentée à l'université d'Aix-Marseille pour obtenir
le grade de docteur en sciences : N° _____

Profilométrie optique par méthodes inverses de diffraction électromagnétique

Slimane ARHAB
02 Octobre 2012

Laboratoire d'accueil : *Institut Fresnel, équipe S.E.M.O*
Formation doctorale : *Physique et sciences de la matière*

Membres du jury :

premier rapporteur	<i>Christian PICHOT</i>
deuxième rapporteur	<i>Christophe BOURLIER</i>
premier examinateur	<i>Charles-Antoine GUÉRIN</i>
premier codirecteur de thèse	<i>Gabriel SORIANO</i>
deuxième codirecteur de thèse	<i>Kamal BELKEBIR</i>
directeur de thèse	<i>Hugues GIOVANNINI</i>

Remerciements

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à mon directeur de thèse, Hugues Giovannini, Professeur à l'IUT de Marseille, pour m'avoir accueilli au sein de l'Institut Fresnel, pour avoir relu et corrigé mon manuscrit. J'ai également pu m'enrichir lors des discussions qui nous ont réunis de sa vision lucide des phénomènes physiques subtiles allée à une parfaite clarté d'expression.

Ma profonde gratitude va à Gabriel Soriano, Maître de Conférences à l'Université d'Aix-Marseille, pour l'aide précieuse qu'il a su m'apporter au quotidien durant ces trois années à tous les niveaux, pour avoir relu et corrigé mon manuscrit, pour m'avoir soutenu dans les moments difficiles... Je repense aux longues heures que nous passions au tableau à résoudre des équations. Au cours de cette thèse, j'ai pu constater son incroyable générosité scientifique qui m'a permis de profiter pleinement de son expertise des problèmes directs de diffraction. Son aide m'a également été d'un grand secours lorsque j'ai abordé le cas plus complexe des problèmes inverses.

Je tiens à remercier Kamal Belkebir, Maître de Conférences à l'Université d'Aix-Marseille, pour son aide décisive et ses conseils précieux, pour avoir relu et corrigé mon manuscrit. Je le remercie également de m'avoir aiguillé dans les bonnes directions, par sa profonde connaissance des problèmes inverses.

Je remercie vivement Messieurs les Directeurs de Recherche au CNRS, Christian Pichot et Christophe Bourlier qui ont manifesté leur intérêt pour mon travail en acceptant de rapporter ce manuscrit. Je tiens également à remercier Monsieur Charles-Antoine Guérin, Professeur à l'Université du sud Toulon-Var, pour avoir accepté de faire partie du jury de thèse.

Ma gratitude va également à tous les membres de l'équipe SEMO dont l'aide m'a été précieuse et particulièrement :

Guillaume Maire et son thésard Yi Ruan pour m'avoir fourni les données expérimentales nécessaires à la validation de mon code d'inversion,

Patrick C. Chaumet et Anne Sentenac pour les échanges de vue enrichissants sur le plan scientifique,

Virginie Chamard et Pierre Godard pour leur soutien et leur gentillesse,

aux thésards de l'équipe : Jules, Emeric, David, Rolland, Ting et Yi.

Sans oublier un grand merci à tous les membres des équipes CLARTE et HYPE pour leur sympathie et leur aide.

J'exprime ma profonde gratitude à toute ma famille et notamment : Mon défunt père Abdallah, ma mère Fariza, ma soeur Chanez et mes frères Nadir et Karim. Pour finir, j'ajoute une pensée particulière à mon cousin Khelifa qui m'a appris très jeune à aimer la science et dont l'influence a considérablement joué sur ma trajectoire professionnelle.

Je prie toutes les personnes que j'ai oubliées de trouver ici l'expression de ma profonde gratitude.

Table des matières

Introduction	9
1 Modélisation de la diffraction d'une onde par une surface unidimensionnelle	13
1.1 Introduction	13
1.2 Position du problème	13
1.3 Formulation du problème	16
1.3.1 L'équation de Helmholtz scalaire et les conditions de passage	16
1.3.2 La fonction de Green	18
1.4 Les différentes méthodes de modélisation	18
1.5 Représentation intégrale de surface des champs	20
1.5.1 Le profil et le choix du champ incident	20
1.5.2 Surface de permittivité finie	21
1.5.3 Surface de permittivité infinie	22
1.5.4 Une autre équation intégrale sur le champ électrique	22
1.6 Étude numérique	23
1.6.1 La méthode des moments	23
1.6.2 Génération de surfaces rugueuses à corrélation gaussienne	25
1.6.3 Profil à deux plots	26
1.6.4 Courants induits sur un profil parfaitement conducteur	27
1.6.5 Approche du métal parfait par un diélectrique fortement conducteur	27
1.6.6 Diffusion simple et mécanisme d'interactions multiples	29
1.7 Conclusion	31
2 Étude de la diffraction inverse par une surface unidimensionnelle	32

2.1	Introduction	32
2.2	Position du problème	32
2.3	Comparaison avec le problème de la reconstruction d'un contraste d'objet	34
2.4	Généralités sur l'inversion	35
2.5	Les méthodes d'inversion déterministes	35
2.5.1	Les méthodes d'inversion non itératives. Modèle approché de Kirchhoff-Fraunhofer	36
2.5.2	Les méthodes d'inversion itératives. Méthode de Newton-Kantorovitch	37
2.5.3	La notion de problème mal posé	39
2.5.4	La régularisation de Tikhonov	40
2.5.5	Dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction	42
2.5.6	La méthode du gradient modifié comme une solution alternative au problème de la reconstruction d'une surface	43
2.6	Conclusion	44
3	Étude numérique et résultats expérimentaux	45
3.1	Introduction	45
3.2	Critère de Rayleigh-Abbe des méthodes inverses approchées	45
3.3	Méthode itérative de Newton-Kantorovitch	47
3.4	Configuration étudiée	48
3.5	Limite de validité du modèle approché de Kirchhoff-Fraunhofer	49
3.6	Estimation numérique de la résolution latérale obtenue par l'algorithme itératif de Newton-Kantorovitch	51
3.6.1	Influence de la valeur accordée au paramètre de régularisation	53
3.6.2	Évolution de la reconstruction en fonction des paramètres géométriques de la surface	55
3.7	Étude inverse de la diffraction sous la polarisation fondamentale TM	55
3.7.1	Évolution du champ diffracté en fonction de la longueur d'interactions multiples	58
3.7.2	Évolution du champ diffracté en fonction de la largeur du support spectral de la surface	59
3.7.3	Reconstruction en polarisation TM d'un profil constitué de deux plots	60
3.8	Reconstruction d'une surface rugueuse de grande taille.	62
3.9	Résistance au bruit.	63
3.10	Reconstructions d'une surface métallique : Argent et Aluminium.	66

3.11	Validation expérimentale de la méthode de Newton-Kantorovitch	66
3.12	Conclusion	68
4	Étude directe et inverse de la diffraction par des surfaces bidimensionnelles	70
4.1	Introduction	70
4.2	Étude directe de la diffraction	70
4.2.1	Formulation du problème. Équation de Helmholtz et conditions de passage	70
4.2.2	La fonction de Green	71
4.2.3	Formalisme intégral vectoriel de frontière	71
4.3	Étude inverse de la diffraction	74
4.3.1	Formulation du problème inverse	74
4.3.2	Méthode itérative de Newton-Kantorovitch	75
4.4	Résultats numériques	76
4.5	Conclusion	77
	Conclusion	78
A	Calcul de la dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction par la méthode des états adjoints	83
A.1	Formulation du problème	84
A.2	Terme en champ lointain	87
A.2.1	Configuration tridimensionnelle. Surface bidimensionnelle	87
A.2.2	Configuration bidimensionnelle. Surface unidimensionnelle.	91
A.3	Terme en champ proche	93
A.3.1	Surface de permittivité finie	93
A.3.2	Surface parfaitement conductrice.	97
B	Diffraction électromagnétique par une surface unidimensionnelle	104
B.1	Laplacien d'une fonction discontinue sur une surface Γ	104
B.2	Formule de <i>Green</i> pour le calcul de la fonction ψ^-	104
B.3	Formule de <i>Green</i> pour le calcul de la fonction ψ^+	105
B.4	Le champ électromagnétique pour le cas d'une interface Γ unidimensionnelle	106

Bibliographie

106

Notations mathématiques employées dans le mémoire

- $(o, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$: repère cartésien tridimensionnel.
- $\mathbf{r} = x \mathbf{x} + y \mathbf{y} + z \mathbf{z}$: vecteur position.
- (Γ) : surface entre deux milieux distincts.
- $z = \eta(x, y)$: fonction à deux variables décrivant l'interface (Γ) .
- $\partial_x \eta$: la dérivée partielle $\frac{\partial \eta(x, y)}{\partial x}$.
- $\partial_y \eta$: la dérivée partielle $\frac{\partial \eta(x, y)}{\partial y}$.
- $\partial_x^2 \eta$: la dérivée seconde partielle $\frac{\partial^2 \eta(x, y)}{\partial^2 x}$.
- $\partial_y^2 \eta$: la dérivée seconde partielle $\frac{\partial^2 \eta(x, y)}{\partial^2 y}$.
- $\partial_{xy} \eta$: la dérivée seconde croisée $\frac{\partial^2 \eta(x, y)}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 \eta(x, y)}{\partial y \partial x}$.
- $\nabla_3 = \partial_x \mathbf{x} + \partial_y \mathbf{y} + \partial_z \mathbf{z}$: l'opérateur gradient d'un espace tridimensionnel.
- $\Delta_3 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$: l'opérateur laplacien d'un espace tridimensionnel.
- $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$: repère cartésien d'un espace bidimensionnel.
- $\mathbf{r} = x \mathbf{x} + z \mathbf{z}$: vecteur position.
- $z = \eta(x)$: fonction qui décrit la surface (Γ) invariante dans la direction \mathbf{y} .
- η' : dérivée première $\frac{d\eta(x)}{dx}$.
- η'' : la seconde dérivée $\frac{d^2 \eta(x)}{d^2 x}$.
- $\nabla_2 = \partial_x \mathbf{x} + \partial_z \mathbf{z}$: vecteur gradient dans le plan $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$.
- $\Delta_2 = \partial_x^2 + \partial_z^2$: laplacien dans le plan $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$.
- $\partial_n = \frac{\partial}{\partial n}$: dérivée dans la direction normale à la surface (Γ) .
- $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$: dérivée dans la direction tangentielle à la surface (Γ) .
- f : intégrale au sens de la valeur principale de Cauchy.
- F : symbolise l'opérateur non linéaire de diffraction regroupant l'équation intégrale de surface avec l'équation d'observation.
- D : dérivée de Fréchet de l'opérateur F .
- $\tilde{\eta}$: transformée de Fourier du profil η de la surface (Γ) .
- ζ : fréquence spatiale de la surface.
- C_r : critère d'Abbe-Rayleigh.
- $\bar{\bar{\mathbf{G}}}$: dyade de green magnétique.
- $\nabla_s \cdot \mathbf{J} = \mathbf{t}_1 \cdot \partial_{w_1} \mathbf{J} + \mathbf{t}_2 \cdot \partial_{w_2} \mathbf{J}$: divergence du courant superficiel sur (Γ) .

Introduction

Vers 1865 le physicien écossais James Clerk Maxwell procéda à l'unification des lois de l'électricité, du magnétisme et de l'induction en rajoutant un terme supplémentaire appelé courant de déplacement. De cette manière, il a formulé sa théorie qui se décline en un système cohérent d'équations aux dérivées partielles, celles-ci représentent les postulats de base de l'électromagnétisme. Depuis leur découverte, ces équations n'ont pas arrêté de nous prouver leur utilité au quotidien (Radio, Télévision hertzienne, GPS, téléphone portable, etc). Dans le régime micro onde, ces équations sont exploitées pour décrire les phénomènes de diffraction qui interviennent dans des domaines tels que : la télédétection radar, la compatibilité électromagnétique ou encore la détection d'objets enfouis. Dans le domaine optique, elles servent également à décrire la propagation électromagnétique dans des milieux périodiques comme les fibres à cristaux photoniques, etc.

Dans le domaine de l'imagerie optique, des modèles simples basés sur l'optique géométrique ou l'optique de Fourier ont longtemps été suffisants pour traiter la plupart des problèmes. Toutefois, depuis que les applications dans les domaines des nanotechnologies et de la biologie notamment ont conduit au besoin d'augmenter les performances des systèmes d'imagerie, une modélisation précise, fondée sur la résolution des équations de Maxwell est nécessaire. Dans ce cadre, les problèmes d'imagerie peuvent être classés en deux catégories : les problèmes directs et les problèmes inverses de diffraction. Dans le premier cas, les propriétés optogéométriques de l'objet (forme, permittivité et perméabilité) sont supposées connues. Le champ électromagnétique qui résulte de l'interaction de cet objet avec un champ incident connu peut être alors calculé. Le problème inverse consiste à déterminer les propriétés optogéométriques des objets à partir d'un ensemble de données sur le champ (proche ou lointain) mesuré.

La résolution du problème inverse, rendue plus accessible grâce à la forte augmentation de capacité de calcul et de mémoire des ordinateurs, suscite un fort intérêt depuis une vingtaine d'années. En effet, la reconstruction tridimensionnelle des paramètres optogéométriques d'objets à partir des mesures du champ diffracté a ouvert la

voie à des systèmes d'imagerie nouveaux. L'intérêt principal de ce mode d'imagerie quantitative est qu'il permet d'atteindre des résolutions qui vont au-delà de la limite de diffraction, tout en offrant la possibilité d'intégrer, dans les étapes de reconstruction numérique, des connaissances a priori sur l'objet.

Ce principe d'imagerie a été appliqué d'abord à l'imagerie hyperfréquence où il n'existe pas, pour former les images, de composant efficace équivalent aux lentilles utilisées en optique. Depuis une dizaine d'années, les applications de ce principe d'imagerie à l'optique ont été étudiées, notamment dans le domaine de la microscopie. Dans ce cadre, il a été montré qu'il était possible, grâce au phénomène de diffusion multiple, d'atteindre des résolutions qui vont au-delà du critère de Rayleigh-Abbe. En effet, ce phénomène, qui brouille les images lorsque celles-ci sont formées avec des lentilles permet, lorsqu'il est pris en compte par un modèle électromagnétique adapté, de capter en champ lointain, des informations relatives aux hautes fréquences spatiales de l'objet.

Ces résultats ont conduit au développement d'un nouveau type d'imagerie optique qui est communément appelé Microscopie Tomographique Optique par Diffraction (OTDM) [1, 2]. Les performances atteintes dans ce cas ont conduit l'équipe SEMO de l'Institut Fresnel, à étudier la possibilité d'appliquer ce principe à la profilométrie optique, dans le but de proposer une alternative aux profilomètres classiques. L'objectif visé, consiste à caractériser à partir de mesures en champ lointain, des surfaces présentant des rugosités sub-longueur d'onde.

Parmi les profilomètres classiques, on peut citer ceux qui sont basés sur les interféromètres de Mirau, Linnik ou Michelson. Dans ce cas, les variations de la hauteur d'une surface sont déduites à partir des franges d'interférences obtenues en lumière blanche lorsque le champ réfléchi par la surface est superposé à un champ de référence connu [3]. En microscopie confocale, l'échantillon est éclairé par un faisceau monochromatique focalisé. L'intensité du champ réfléchi est mesurée sur un photodétecteur. Ce dernier est positionné de façon à ce que le maximum d'intensité soit atteint lorsque l'écart entre la hauteur de la surface et le plan focal de l'objectif du microscope s'annule [4]. De cette façon, des translations latérale et axiale avec ce faisceau, permettent d'obtenir la topographie de la surface. Une variante de cette technique qui permet d'éviter le balayage vertical consiste à utiliser un champ incident émis par une source large bande. Ce champ est ensuite focalisé à l'aide d'une lentille chromatique [5, 6]. De cette manière, il est possible d'accéder à la hauteur de la surface en effectuant une analyse spectrale de l'intensité mesurée.

La résolution verticale accessible par ces techniques peut être de l'ordre de quelques angströms, tandis que la résolution latérale qui est liée à la taille de la tache d'éclairement sur la surface n'excède jamais $0.5 \mu\text{m}$, pour une longueur d'onde qui appartient au domaine du visible. Par conséquent, leur domaine d'utilisation se limite aux surfaces à faibles pentes.

Cependant, l'avènement des nanotechnologies et spécialement de la nanofabrication en microélectronique nécessite un développement parallèle de techniques de caractérisation optique qui sont rapides et non destructives. De plus, ces dernières doivent permettre la reconstruction de la rugosité des composants optoélectroniques dont les dimensions latérales avoisinent les 100 nanomètres. Une telle résolution n'est pas envisageable avec les profilomètres et les microscopes optiques classiques. L'application de l'OTDM à la profilométrie optique présente donc un fort intérêt.

Dans la résolution du problème inverse, différents modèles physiques peuvent être utilisés pour décrire l'interaction du champ incident avec l'objet. Lorsque ce dernier présente un faible contraste de permittivité, l'utilisation de l'approximation de Born permet de décrire correctement cette interaction. Dans ce cas la résolution du problème inverse se ramène au calcul d'une transformée de Fourier [7, 8, 9, 10] et les résolutions atteintes peuvent être deux fois meilleures que celles des microscopes classiques. Ceci grâce aux informations supplémentaires apportées par un éclairage successif sous différents angles d'incidence. Pour des objets à fort contraste de permittivité, l'approximation de Born n'est plus valable à cause de l'importance du phénomène de diffusion multiple. Pour résoudre le problème inverse, il est alors nécessaire d'utiliser un modèle rigoureux de diffraction qui prend en compte ce phénomène. Des résolutions au-delà du critère d'Abbe-Rayleigh peuvent alors être atteintes.

Dans le cas de la profilométrie, le paramètre optogéométrique recherché est le profil de la surface, qui délimite une frontière entre deux milieux homogènes de permittivités connues. Le problème inverse peut être résolu en utilisant différents modèles de diffraction pour décrire l'interaction du champ incident avec la surface. Notre attention s'est portée particulièrement sur deux modèles directs. Premièrement, un modèle qui se fonde sur les approximations paraxiale et de diffusion simple valables pour les faibles rugosités. Pour des rugosités plus importantes, il devient nécessaire d'utiliser un modèle de diffraction sans hypothèses simplificatrices. Le profil n'est alors plus donné directement par des relations de type transformée de Fourier, mais par la résolution d'un problème d'optimisation dont la solution est obtenue grâce à une procédure itérative de reconstruction

[11, 12, 13, 14].

Organisation du manuscrit

Le premier chapitre est dédié à l'étude directe de l'interaction d'une onde électromagnétique incidente avec une surface unidimensionnelle. Ce problème est abordé dans le cadre de la formulation intégrale de frontière. L'invariance suivant une direction de l'espace de la géométrie des profils nous permet de représenter les champs par des grandeurs scalaires.

Le second chapitre est consacré à la présentation de différentes méthodes pour l'étude inverse de la diffraction par une surface unidimensionnelle. Nous décrivons, en particulier dans ce chapitre, la méthode itérative de Newton-Kantorovitch, qui est exploitée au troisième chapitre pour la présentation des résultats numériques.

Dans ce troisième chapitre, nous étudions les avantages apportés par une utilisation conjointe des données obtenues dans les deux cas principaux de polarisation. Nous présentons également des reconstructions obtenues à partir de données expérimentales et nous montrons que la méthode peut être utilisée avec succès lorsque les objets présentent une conductivité finie.

Au chapitre quatre, nous abordons l'étude directe et inverse de la diffraction par des surfaces bidimensionnelles. Dans ce cas, les champs ne sont plus représentés par des grandeurs scalaires dans le formalisme intégral de frontière. De même, dans la méthode de Newton-Kantorovitch utilisée pour résoudre le problème inverse, les champs électrique et magnétique sont représentés par des grandeurs vectorielles.

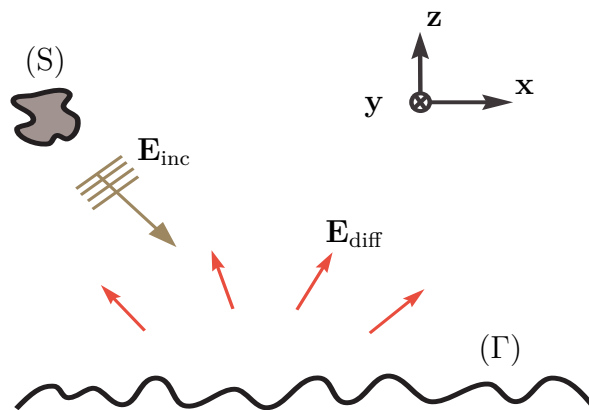
Chapitre 1

Modélisation de la diffraction d'une onde par une surface unidimensionnelle

1.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à l'étude de l'interaction d'une onde électromagnétique incidente avec une surface. Dans ce contexte, nous présentons un modèle physique pour la description rigoureuse de ce phénomène. La résolution de ce problème direct consiste à déterminer le champ diffracté pour une surface connue et un champ incident maîtrisé. Le choix d'une formulation prenant en compte toutes les interactions est motivé par notre objectif qui consiste à faire de la profilométrie optique sub-longueur d'onde. En effet, les techniques conventionnelles dans ce domaine s'appuient sur des modèles physiques approchés et se retrouvent par conséquent fortement limitées en résolution. De plus, ce modèle rigoureux interviendra dans l'étude du problème inverse que nous aborderons au second chapitre. Ici, nous restreignons notre étude aux surfaces invariantes suivant un axe de l'espace.

1.2 Position du problème



Géométrie du problème étudié.

Nous considérons une surface notée (Γ) représentée dans le repère orthonormé $(o, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ par la fonction objet $z = \eta(x, y)$, que nous appellerons également le profil. Cette surface définit une frontière entre deux milieux diélectriques que nous supposons : semi-infinis, linéaires, homogènes, non magnétiques et isotropes.

Nous définissons également un champ incident généré par sa source notée (S) . Elle est représentée par sa distribution de courant volumique \mathbf{j} que nous plaçons suffisamment loin de la surface pour que le champ incident ne soit pas perturbé. Cette distribution de courant s'écrit en notation complexe $\mathbf{j}(x, y, z, t) = \mathbf{j}(x, y, z)e^{-i\omega t}$, elle est monochromatique et génère un champ incident pour une longueur d'onde qui appartient au domaine optique. Nous ajoutons une hypothèse supplémentaire sur la surface (Γ) et la source (S) en les supposant invariantes dans la direction \mathbf{y} . Par conséquent, le profil $z = \eta(x)$ et la distribution de courant $\mathbf{j}(x, z)$ ne dépendent plus de y .

L'autre grandeur importante qui résulte de l'interaction de l'onde incidente avec la surface est le champ diffracté, auquel nous ajoutons le champ incident pour obtenir le champ total $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}_{\text{diff}}$. Les valeurs du champ diffracté sont fortement liées au profil de la surface, c'est pourquoi ce champ va constituer dans la résolution du problème inverse la grandeur observable que nous mesurons.

Les deux milieux homogènes que nous considérons ici sont appelés : milieu incident pour le demi-espace qui contient la source du champ incident et milieu transmis pour l'autre en référence au champ transmis à travers la surface (Γ) . Le milieu incident sera toujours caractérisé par la permittivité et la perméabilité du vide (ε_0, μ_0) . Le milieu transmis est quant à lui supposé non magnétique, de permittivité homogène et isotrope (ε, μ_0) , par abus de langage nous parlerons de permittivité de la surface (Γ) . De plus, comme nous travaillons en régime harmonique, cette grandeur se résume à un nombre complexe. Pour une longueur d'onde appartenant au spectre du visible, les milieux transparents se caractérisent par une permittivité réelle positive. Cette grandeur est complexe dans le cas des métaux et présente, une partie réelle négative, une partie imaginaire positive qui traduit la dissipation de l'énergie électromagnétique dans le matériau par effet Joule. Ce phénomène bien connu sous le nom d'effet de peau est quantifié par sa longueur caractéristique de pénétration. Dans un métal parfait, le champ électromagnétique est nul, l'effet de peau est inexistant. Ce dernier cas constitue une limite asymptotique pour le métal largement utilisé en diffraction électromagnétique. Nous l'avons également exploité dans ce travail de thèse, comme une approche idéale des problèmes de diffraction de la lumière direct et inverse par des surfaces métalliques. De plus, ce modèle nous a permis de faire une approche simple de la profilométrie optique à haute

résolution.

Nous définissons le problème direct de la diffraction par le calcul du champ électromagnétique diffracté par la surface dans le domaine proche ou lointain. Comme a priori au problème physique, nous supposons connus le profil de la surface ainsi que sa permittivité. Le champ incident est également supposé connu.

Les modèles approchés ont suscité beaucoup de travaux dans la littérature, en fonction des régimes étudiés différents modèles sont proposés. Ils sont formulés en posant des approximations sur le phénomène d'interaction entre l'onde électromagnétique incidente et la surface, ces approximations définissant par la même occasion leur domaine de validité. Nous distinguons premièrement le régime des petites perturbations. Dans ce cas, la longueur d'onde du champ exciteur est supposée très grande devant les hauteurs de la surface, ce qui permet de faire un développement perturbatif de l'amplitude complexe diffractée par rapport au profil η de la surface. L'ordre un du développement donne une relation de type transformée de Fourier entre le profil et le champ diffracté. Originellement introduite pour l'étude de la propagation des ondes acoustiques [15], cette méthode a ensuite été appliquée au problème vectoriel de la diffraction électromagnétique par des surfaces rugueuses [16, 17].

A contrario, nous avons l'approximation de Kirchhoff ou de l'optique physique. Ce modèle s'applique aux surfaces qui présentent des rayons de courbure importants, pour n'importe quelle hauteur de profil [18]. Dans ce cas le champ total en un point donné de la surface vaut le champ spéculaire qui serait réfléchi par un plan tangent en ce même point [19], plus le champ incident. Son expression dépend du coefficient de Fresnel calculé sur la base de l'angle d'incidence local. Nous avons montré par ailleurs que ce modèle constitue dans le cas d'une surface infiniment conductrice, le premier terme du développement en série de Neumann [20] de la "Metal Field Integral Equation" (MFIE) [21].

Toutefois, comme nous l'avons mentionné dans l'introduction générale, les applications technologiques potentielles de ce travail portent sur la caractérisation des composants optoélectroniques. Ces structures possèdent des dimensions qui sont de l'ordre de la longueur d'onde pour une source qui émet dans le visible. Par conséquent, cela oriente ce chapitre vers l'étude de profils surfaciques qui possèdent une rugosité avec des dimensions comparables à la longueur d'onde du champ incident. Nous appelons ce domaine le régime résonnant, pour lequel les méthodes rigoureuses, représentent l'unique moyen permettant de décrire toutes les interactions de l'onde électromagnétique incidente avec la surface. Dans ce cas, ces modèles donnent lieu aux solutions numériques des équations de Maxwell pour la configuration étudiée.

1.3 Formulation du problème

Nous disposons d'une surface (Γ) dont nous connaissons la fonction objet $z = \eta(x)$ et la permittivité ε . Nous connaissons également la valeur du champ incident sur toute cette surface. La modélisation du champ consiste à prédire la valeur du champ total en tout point de l'espace.

1.3.1 L'équation de Helmholtz scalaire et les conditions de passage

Nous montrons aisément à partir des équations de Maxwell que les champs électrique et magnétique obéissent à l'équation de Helmholtz dans chaque milieu. Cette équation est vérifiée par chacune des trois composantes du champ électrique et magnétique.

Dans le milieu incident :

$$\begin{cases} (\Delta_2 + k^2) \mathbf{E}(x, z) = \mathbf{0} & \text{et} & \nabla_2 \cdot \mathbf{E}(x, z) = \mathbf{0} \\ (\Delta_2 + k^2) \mathbf{H}(x, z) = \mathbf{0} & \text{et} & \nabla_2 \cdot \mathbf{H}(x, z) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.1)$$

Et dans le milieu transmis, homogène :

$$\begin{cases} (\Delta_2 + k_t^2) \mathbf{E}_t(x, z) = \mathbf{0} & \text{et} & \nabla_2 \cdot \mathbf{E}_t(x, z) = \mathbf{0} \\ (\Delta_2 + k_t^2) \mathbf{H}_t(x, z) = \mathbf{0} & \text{et} & \nabla_2 \cdot \mathbf{H}_t(x, z) = \mathbf{0}, \end{cases} \quad (1.2)$$

où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ représente le module du vecteur d'onde du milieu incident et $k_t = k \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}$ celui du milieu transmis.

Nous ajoutons à ces équations les conditions de passage sur la surface Γ de conductivité finie :

$$\begin{cases} \mathbf{n} \wedge (\mathbf{E}(x, \eta(x)) = \mathbf{n} \wedge \mathbf{E}_t(x, \eta(x)) \\ \mathbf{n} \wedge (\mathbf{H}(x, \eta(x)) = \mathbf{n} \wedge \mathbf{H}_t(x, \eta(x)) \end{cases} \quad (1.3)$$

$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{1+\eta'^2}}(-\eta'\mathbf{x} + \mathbf{z})$ est le vecteur unitaire normal à la surface (Γ), de norme 1. Pour le cas limite d'une surface infiniment conductrice, seul la continuité de la composante tangentielle du champ électrique est respectée [22, 23]. La composante tangentielle du champ magnétique subit dans ce cas un saut que nous appelons communément le courant superficiel noté \mathbf{J} . Nous savons également que le champ électromagnétique transmis dans un métal parfait est strictement nul ($\mathbf{E}_t = \mathbf{0}$, $\mathbf{H}_t = \mathbf{0}$). Dans ce cas les équations de passage se réécrivent sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbf{n} \wedge \mathbf{E}(x, \eta(x)) = \mathbf{0} \\ \mathbf{n} \wedge \mathbf{H}(x, \eta(x)) = \mathbf{J}(x, \eta(x)) \end{cases} \quad (1.4)$$

L'invariance du problème électromagnétique dans une direction de l'espace découple les deux polarisations fondamentales. Cela nous permet de les étudier séparément. Nous avons la polarisation TE(s) lorsque la composante électrique du champ est parallèle à l'axe d'invariance (o, \mathbf{y}). A contrario, nous avons la polarisation TM(p) où la composante magnétique du champ est alignée suivant cet axe.

Par économie de notations, ces deux polarisations peuvent être représentées par la même fonction ψ dans le milieu incident. En effet, nous écrivons sans ambiguïté que $\mathbf{E} = \psi \mathbf{y}$ pour la polarisation TE et $\mathbf{H} = \psi \mathbf{y}$ dans le cas TM. Pour décrire le champ dans le milieu transmis nous accompagnons cette fonction d'un indice t. Dans ce cas, nous écrivons que $\mathbf{E}_t = \psi_t \mathbf{y}$ en polarisation TE et $\mathbf{H}_t = \psi_t \mathbf{y}$ en TM. En tenant compte de ces notations les équations de Helmholtz scalaires des Eqs (1.1), (1.2) se réécrivent sous la forme :

$$\begin{cases} (\Delta_2 + k^2) \psi(x, z) = 0 & \text{TE, TM} \\ (\Delta_2 + k_t^2) \psi_t(x, z) = 0 & \text{TE, TM} \end{cases} \quad (1.5)$$

Les conditions de passage dans l'Eq (1.3) valables pour une surface de conductivité finie se réécrivent dans ce cas :

$$\begin{cases} \psi(x, \eta(x)) = \psi_t(x, \eta(x)) & \text{TE, TM} \\ \partial_n \psi(x, \eta(x)) = \partial_n \psi_t(x, \eta(x)) & \text{TE} \\ \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \partial_n \psi(x, \eta(x)) = \partial_n \psi_t(x, \eta(x)) & \text{TM} \end{cases} \quad (1.6)$$

$\partial_n \psi(x, \eta(x)) = \mathbf{n} \cdot \nabla_2 \psi(x, z)|_{z=\eta(x)}$ est la dérivée normale du champ total sur la surface, de même la dérivée normale du champ total transmis est $\partial_n \psi_t(x, \eta(x)) = \mathbf{n} \cdot \nabla_2 \psi_t(x, z)|_{z=\eta(x)}$.

Dans le cas où la surface possède une permittivité infinie, l'annulation de la composante tangentielle du champ électrique dans l'Eq (1.4) conduit aux expressions suivantes :

$$\begin{cases} \psi(x, \eta(x)) = 0 & \text{TE} \\ \partial_n \psi(x, \eta(x)) = 0 & \text{TM} \end{cases} \quad (1.7)$$

Ces relations sont les conditions aux limites de Dirichlet et Neumann respectivement pour les polarisations TE et TM.

1.3.2 La fonction de Green

L'équation de Helmholtz scalaire avec une distribution de Dirac comme terme source présente deux solutions élémentaires. Toutefois seulement une des deux vérifie la condition de radiation de Sommerfeld. Par conséquent, elle représente l'unique solution du problème physique [24, 25].

Dans le milieu incident :

$$\begin{cases} (\Delta_2 + k^2) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \end{cases} \quad (1.8)$$

Et le milieu transmis :

$$\begin{cases} (\Delta_2 + k_t^2) g_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ g_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k_t|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \end{cases} \quad (1.9)$$

dans lesquelles l'expression $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{(x - x')^2 + (z - z')^2}$ est la distance entre deux points quelconques du plan $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$. Nous notons par $H_0^{(1)}$ la fonction de Hankel d'ordre zéro et de première espèce [26].

1.4 Les différentes méthodes de modélisation

Il existe toute une panoplie de méthodes rigoureuses dédiées à la modélisation des différentes classes de problèmes de diffraction électromagnétique. Parmi elles, nous pouvons citer la théorie de Mie développée pour l'étude de la diffraction par des objets sphériques [27]. Nous avons également la méthode différentielle qui décrit rigoureusement la diffraction dans les réseaux périodiques [28]. L'étude des réseaux peut aussi s'effectuer par le biais de la méthode des éléments finis [29] dont le champ d'applications ne se limite pas à l'électromagnétisme. Une autre possibilité consiste à utiliser les méthodes intégrales. Ces techniques permettent de modéliser la diffraction par des objets de support volumique ou surfacique [30]. L'aspect théorique de ces méthodes a également suscité des travaux dans la littérature [24, 31] où sont traitées des difficultés liées à la singularité de l'opérateur de Green.

Pour toutes ces méthodes de diffraction, le champ total s'écrit comme la somme du champ incident et du champ diffracté. Dans cette expression, la source primaire du champ incident est placée suffisamment loin de l'objet pour qu'elle génère un champ identique dans l'espace homogène. Dans le cadre des méthodes intégrales, le

champ diffracté est obtenu en appliquant un opérateur de Green convolutif sur la source secondaire induite par la présence du champ incident sur le support de l'objet étudié. Parmi ces méthodes, nous avons le formalisme intégral volumique et le formalisme intégral de frontière. Ces deux approches diffèrent par la nature du support sur lequel est définie la source secondaire du champ diffracté. En effet, dans le premier cas nous avons un support volumique et dans l'autre cas le support est surfacique. L'une ou l'autre de ces deux formulations peut s'avérer plus adaptée suivant la configuration électromagnétique envisagée.

Par exemple, l'étude de la diffraction par des objets bornés de permittivité inhomogène se fait plus naturellement dans le cadre du formalisme intégral volumique. Dans ce contexte, c'est la polarisation induite dans le support de l'objet qui constitue la source du champ diffracté. Son expression est donnée par $\mathbf{P} = \chi \mathbf{E}$ où χ représente la susceptibilité diélectrique du milieu. Nous l'obtenons en résolvant une équation intégrale volumique définie dans le support de l'objet. Dans ce cadre d'étude, les premiers travaux ont porté sur la diffraction par des objets cylindriques où ont été considérées les deux polarisations fondamentales [32, 33]. D'autres études sont ensuite venues généraliser le concept aux objets volumiques qui ne présentent aucun axe spatial d'invariance [34, 35].

Cependant, notre intérêt réside dans une autre configuration électromagnétique qui définit le cadre naturel pour l'application de la méthode intégrale de frontière. En effet, dans la formulation du problème nous avons considéré une surface infinie qui délimite une frontière entre deux milieux diélectriques homogènes. Dans ce cas, les sources du champ diffracté sont données par les composantes tangentielles à la surface des champs électrique et magnétique $\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}$ et $\mathbf{n} \wedge \mathbf{H}$. Nous les déterminons par la résolution d'un couple de deux équations intégrales de frontière définie sur la surface qui sépare les deux milieux. Dans ce contexte, Les premières études se sont intéressées à des profils parfaitement conducteurs et invariants suivant un axe spatial [36]. Le cas des surfaces diélectriques a ensuite fait l'objet d'études sous les deux polarisations fondamentales [37]. La généralisation de la méthode aux profils qui ne présentent pas d'axe spatial d'invariance a également fait l'objet d'études [38]. L'existence d'une onde de surface se propageant loin de l'empreinte du champ incident a été démontrée numériquement [37], avec pour particularité, une extension du courant de surface au delà de l'empreinte du champ incident. Ce phénomène se produit lorsque la composante non nulle du champ électrique se trouve dans le plan d'incidence. La deuxième condition est que la surface éclairée soit métallique ou parfaitement conductrice. Au chapitre trois nous reviendrons justement sur le rôle important joué par ces ondes dans l'étude du problème inverse.

1.5 Représentation intégrale de surface des champs

Dans cette partie, nous présentons le formalisme intégral de frontière pour l'étude de la diffraction par une surface unidimensionnelle de permittivité finie ou infinie. Nous nous contentons ici de présenter les équations importantes obtenues par cette formulation. Les détails des calculs sont présentés de manière exhaustive dans la référence [30]. Nous nous en sommes également fortement inspirés pour l'implémentation du code numérique.

1.5.1 Le profil et le choix du champ incident

Les surfaces auxquelles nous nous intéressons sont représentées par leur fonction objet $z = \eta(x)$. Nous ajoutons une hypothèse peu restrictive selon laquelle les profils étudiés sont lisses et ne comportent pas d'arêtes. Au sens mathématiques, cela consiste à dire que les surfaces sont décrites par des fonctions de classe C_2 . Le champ incident généré par la source (S) est supposé connu sur toute la surface (Γ). Pour un éclairage de la surface sous l'angle d'incidence θ_i , son expression vaut :

$$\psi_{\text{inc}}(x, \eta(x); \theta_i) = \frac{g}{2\sqrt{\pi}} \int_{k'_{ix} < k} e^{-(k'_{ix} - k_{ix}(\theta_i))^2 g^2 / 4} e^{i(k'_{ix}x + k'_{iz}\eta(x))} dk'_{ix} \quad (1.10)$$

Notre choix s'est porté sur un faisceau gaussien pour modéliser le champ incident. Dans cette expression g [39] représente le paramètre qui conditionne la taille de l'empreinte du champ incident sur la surface. $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le module du vecteur d'onde dans le milieu incident. $\mathbf{k}_i = k \sin \theta_i \mathbf{x} - k \cos \theta_i \mathbf{z}$ est le vecteur d'onde calculé sur l'angle d'incidence moyen θ_i du faisceau. Le choix de l'expression gaussienne pour le champ incident a été motivé à la fois pour sa simplicité, mais aussi parce qu'il se rapproche assez bien des conditions expérimentales de la profilométrie optique. En effet, lorsque nous éclairons une surface par un laser nous constatons une tache d'illumination dont l'amplitude décroît très vite en partant du centre du faisceau. L'utilisation d'un champ focalisé permet également sur le plan numérique de ramener l'étude d'une surface infinie à celle d'une aire délimitée par la tache d'éclairage. Bien sûr, nous aurions pu substituer à ce faisceau gaussien, l'onde de Thorsos d'expression analytique, nous évitant ainsi d'effectuer une intégration numérique. Cependant, une telle expression ne représente qu'une solution approchée de l'équation de Helmholtz scalaire, d'autant moins précise lorsque l'angle d'incidence s'écarte fortement de la normale au plan moyen du profil.

1.5.2 Surface de permittivité finie

Nous commençons par résoudre deux d'équations intégrales à deux inconnues. Dans ce cas les solutions recherchées correspondent au champ total $\psi(x, \eta(x); \theta_i)$ et à sa dérivée normale $\partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i)$ que nous évaluons sur la surface (Γ). Ce sont des grandeurs qui correspondent aux composantes tangentielles des champs électrique et magnétique exprimées dans Eqs (1.3) puis dans Eqs (1.6). Elles sont solutions des équations suivantes :

$$\begin{cases} \psi_{\text{inc}}(x', \eta(x'); \theta_i) = \frac{1}{2} \psi(x', \eta(x'); \theta_i) - \int_{\Gamma} \partial_n g(x, \eta(x); x', \eta(x')) \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma + \int_{\Gamma} g(x, \eta(x); x', \eta(x')) \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) \\ 0 = \frac{1}{2} \psi(x', \eta(x'); \theta_i) + \int_{\Gamma} \partial_n g_t(x, \eta(x); x', \eta(x')) \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma - \kappa \int_{\Gamma} g_t(x, \eta(x); x', \eta(x')) \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \end{cases} \quad (1.11)$$

Le paramètre κ change de valeur en fonction de la polarisation que nous considérons. Nous avons $\kappa = 1$ pour la polarisation TE et $\kappa = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ pour le cas TM. Le symbole \int signifie que nous intégrons au sens de la valeur principale de Cauchy [40]. Nous ajoutons également le calcul de la dérivée normale de la fonction de Green $\partial_n g(x, \eta(x); x', \eta(x')) = \mathbf{n} \cdot \nabla_2 g(x, z; x', \eta(x'))|_{z=\eta(x)}$ pour le milieu incident. De la même manière nous calculons la dérivée normale de la fonction de Green du milieu transmis.

Une fois que nous avons déterminé les sources du champ, il reste à donner l'expression du champ total ψ sous la forme d'une convolution de la fonction de Green, de sa dérivée normale, par les composantes tangentielles à la surface des champs électrique et magnétique. Dans le couple d'équations ci-dessous V et V_t sont respectivement les milieux incident et transmis :

$$\begin{cases} \text{pour } (x', z') \in V \\ \psi(x', z'; \theta_i) = \psi_{\text{inc}}(x', z'; \theta_i) - \int_{\Gamma} g(x, \eta(x); x', z') \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma + \int_{\Gamma} \partial_n g(x, \eta(x); x', z') \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \\ \text{pour } (x', z') \in V_t \\ \psi_t(x', z'; \theta_i) = \kappa \int_{\Gamma} g_t(x, \eta(x); x', z') \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma - \int_{\Gamma} \partial_n g_t(x, \eta(x); x', z') \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \end{cases} \quad (1.12)$$

1.5.3 Surface de permittivité infinie

Dans le cas d'une surface parfaitement conductrice, la source du champ diffracté est donnée d'après les conditions de passage Eqs (1.4), (1.7) par la composante tangentielle du champ magnétique. Nous l'appelons courant superficiel induit. Par conséquent, nous avons une équation intégrale pour chacune des deux polarisations. Dans le cas TE, la source du champ est la dérivée normale du champ total sur la surface. Pour le cas TM, c'est la valeur du champ total sur la surface qui joue le rôle de source pour le champ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\text{inc}}(x', \eta(x'); \theta_i) = \int_{\Gamma} g(x, \eta(x); x', \eta(x')) \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \quad \text{TE} \\ \psi_{\text{inc}}(x', \eta(x'); \theta_i) = \frac{1}{2} \psi(x', \eta(x'); \theta_i) - \int_{\Gamma} \partial_n g(x, \eta(x); x', \eta(x')) \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \quad \text{TM} \end{array} \right. \quad (1.13)$$

Pour chaque polarisation le champ total dans le milieu incident est donné par les intégrales suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x', z'; \theta_i) = \psi_{\text{inc}}(x', z'; \theta_i) - \int_{\Gamma} g(x, \eta(x); x', z') \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \quad (x', z') \in V \quad \text{TE} \\ \psi(x', z'; \theta_i) = \psi_{\text{inc}}(x', z'; \theta_i) + \int_{\Gamma} \partial_n g(x, \eta(x); x', z') \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \quad (x', z') \in V \quad \text{TM} \end{array} \right. \quad (1.14)$$

Le champ diffracté par la surface est donné par la différence du champ total et du champ incident $\psi_{\text{diff}}(x', z'; \theta_i) = \psi(x', z'; \theta_i) - \psi_{\text{inc}}(x', z'; \theta_i)$. Pour obtenir son expression en diffraction lointaine nous remplaçons dans les équations Eq (1.14) la fonction de Green et sa dérivée normale par leurs développements asymptotiques respectifs. Cela conduit aux deux expressions suivantes relatives aux deux polarisations fondamentales :

$$\psi_{\text{diff}}(\rho, \theta; \theta_i) = \frac{(1+i)e^{ik\rho}}{4\sqrt{\pi k\rho}} \Phi(\theta; \theta_i) \quad (1.15)$$

Avec la distance $\rho = \sqrt{x'^2 + z'^2}$. Le champ diffracté s'écrit donc comme le produit d'une fonction radiale commune aux deux polarisations et d'une amplitude complexe de diffraction spécifique à chacune d'elles :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi(\theta; \theta_i) = - \int_{\Gamma} \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)\eta(x))} d\Gamma \quad \mathbf{k} \in \Sigma \quad \text{TE} \\ \Phi(\theta; \theta_i) = -i \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \psi(x, \eta(x); \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)\eta(x))} d\Gamma \quad \mathbf{k} \in \Sigma \quad \text{TM} \end{array} \right. \quad (1.16)$$

Σ est l'espace dans lequel s'effectue la mesure de l'amplitude complexe et $\mathbf{k} = k \sin \theta \mathbf{x} + k \cos \theta \mathbf{z}$ le vecteur d'onde du champ diffracté dans la direction θ .

1.5.4 Une autre équation intégrale sur le champ électrique

Dans le système d'équations Eqs (1.13), la source du champ diffracté est solution d'une équation intégrale de Fredholm de première espèce en polarisation TE et de deuxième espèce en polarisation TM. Toutefois, il est

possible tout en gardant la même solution d'obtenir une équation identique pour la polarisation TE. En effet, nous commençons par appliquer dans les Eqs (1.14) au cas TE le gradient ∇'_2 par rapport au point d'observation $\mathbf{r}' = x' \mathbf{x} + z' \mathbf{z}$. Ensuite, nous prenons la composante suivant le vecteur normal \mathbf{n}' de la limite du gradient lorsque nous faisons tendre le point d'observation vers la surface (Γ). Nous obtenons une équation intégrale de Fredholm de deuxième espèce pour la polarisation TE :

$$\partial_{\mathbf{n}'} \psi_{\text{inc}}(x', \eta(x'); \theta_i) = \frac{1}{2} \partial_{\mathbf{n}'} \psi(x', \eta(x'); \theta_i) + \int_{\Gamma} \partial_{\mathbf{n}'} g(x, \eta(x); x', \eta(x')) \partial_{\mathbf{n}} \psi(x, \eta(x); \theta_i) d\Gamma \quad (1.17)$$

Cette équation nous sera par la suite utile lorsque nous aborderons au second chapitre les méthodes approchées dans le cadre de l'étude inverse.

1.6 Étude numérique

Dans cette partie du chapitre, nous commencerons par décrire la technique numérique employée pour l'implémentation des équations intégrales de frontière. Ensuite, nous ferons une description détaillée des profils que nous avons considérés en justifiant par là même notre choix pour de telles surfaces. Pour finir, nous présenterons des résultats numériques obtenus sur des surfaces de conductivité finie ou infinie. Dans ce contexte, seront présentées des courbes de courants de surface et de champs proches. Nous illustrerons également par quelques exemples, le phénomène de diffusion multiple induit lorsque la rugosité de la surface devient importante.

1.6.1 La méthode des moments

C'est une technique qui est très adaptée à la résolution des équations intégrales de frontière [41]. Son principe consiste à ramener le problème de la résolution d'une équation intégrale à celui d'un système d'équations linéaires qui se présente sous forme d'un produit matrice vecteur. C'est de cette manière que nous avons implémenté le code de diffraction. Pour illustrer cette technique, prenons le cas général de l'équation intégrale suivante :

$$\int_a^b A(x, x') f(x') dx' = c(x) \quad (1.18)$$

Les équations intégrales formulées dans ce chapitre s'écrivent toutes sous la forme Eq (1.18). Dans cette équation $A(x, x')$ est le noyau, $c(x)$ une fonction connue qui est généralement assimilée au champ incident et $f(x)$ la fonction inconnue que nous cherchons à déterminer. $[a, b]$ est le support de l'échantillon étudié, dans

lequel f et c sont parfaitement définies.

Dans un premier temps, nous introduisons un système de N fonctions de base, $\{f_n\}_{n=1}^N$ définies sur le domaine $[a, b]$. Nous avons :

$$f_n(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [a_n, b_n] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.19)$$

Nous subdivisons le domaine $[a, b]$ en N sous intervalles de même largeur Δx , $[a_n, b_n]$ pour $n = 1, \dots, N$. La solution recherchée $f(x)$ peut alors être décomposée sur les fonctions de base :

$$\begin{cases} f(x) \simeq \sum_{n=1}^N b_n f_n(x) \\ b_n = \frac{1}{\Delta x} \langle f_n, f \rangle \end{cases} \quad (1.20)$$

$\langle f_n, f \rangle = \int_a^b f_n(x) f(x) dx$: la projection de f sur la fonction base f_n , b_n est la moyenne de $f(x)$ dans le sous domaine $[a_n, b_n]$. Si nous remplaçons le développement de f en fonctions de base dans l'équation intégrale Eq (1.18), nous obtenons :

$$\sum_{n=1}^N b_n \int_a^b A(x, x') f_n(x') dx' \simeq c(x) \quad (1.21)$$

Introduisons maintenant les fonctions tests $\{w_m\}_{m=1}^N$. Si nous prenons comme fonctions tests les mêmes que les fonctions de base, nous parlons de la méthode de Galerkin. Cependant, notre choix s'est porté sur la méthode de la collocation par points, qui a pour fonctions tests des distributions de Dirac, notées : $w_m(x) = \delta(x - x_m)$. Multiplions donc l'équation Eq (1.21) par $\delta(x - x_m)$ et intégrons sur le domaine $[a, b]$:

$$\sum_{n=1}^N b_n \int_a^b A(x_m, x') f_n(x') dx' \simeq c(x_m), \quad (1.22)$$

qui se réécrit nous la forme condensée :

$$\sum_{n=1}^N A_{mn} b_n \simeq c_m, \quad (1.23)$$

Avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_m = c(x_m) \\ b_n = \frac{1}{\Delta x} \int_a^b f_n(x) f(x) dx \\ A_{mn} = \int_{a_n}^{b_n} A(x_m, x') dx' . \end{array} \right. \quad (1.24)$$

1.6.2 Génération de surfaces rugueuses à corrélation gaussienne

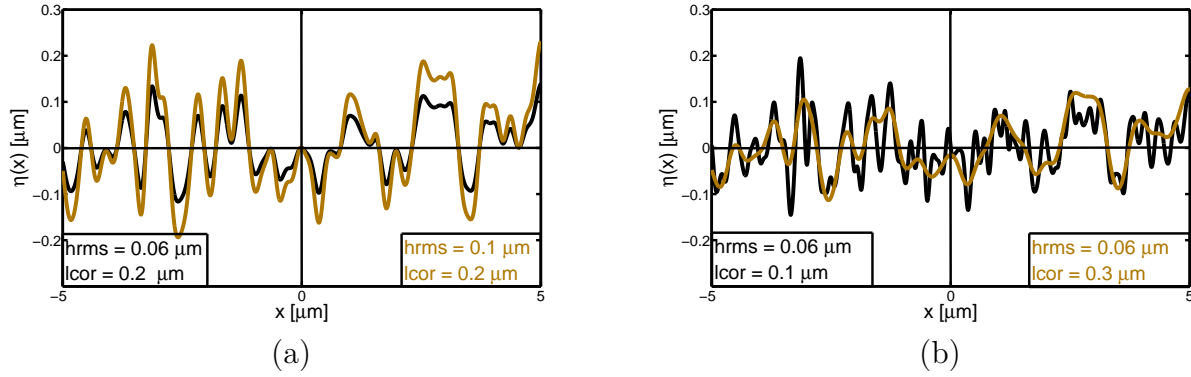


FIGURE 1.1 – Quatre exemples de surfaces rugueuses qui font $60 \mu\text{m}$ de long. Nous représentons seulement la partie centrale du profil sur $10 \mu\text{m}$. (a) les profils présentent une même longueur de corrélation et des hauteurs quadratiques moyennes différentes ; (b) les profils possèdent des longueurs de corrélation différentes, mais une même hauteur quadratique moyenne.

Dans cette partie, nous présentons les profils que nous avons utilisés pour les différentes expériences numériques menées dans l'étude direct et inverse de la diffraction. Nous rappelons que ces surfaces sont représentées par une fonction profil η qui donne la déviation par rapport au plan moyen de référence $\eta = 0$. Dans ce contexte, nous nous sommes premièrement intéressés à des surfaces rugueuses. Elles sont décrites par une distribution des hauteurs qui obéit à une fonction densité de probabilité $p(\eta)$ gaussienne et stationnaire, c'est-à-dire que la probabilité $p(\eta) \delta\eta$ d'avoir une hauteur comprise entre η et $\eta + \delta\eta$ est la même pour n'importe quel point de la surface. Cette densité a pour expression :

$$\left\{ \begin{array}{l} p(\eta) = \frac{1}{(hrms)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\eta^2}{2(hrms)^2}} \\ hrms = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2 p(\eta) d\eta} \end{array} \right. \quad (1.25)$$

Dans ce cas $hrms$ représente la hauteur quadratique moyenne, paramètre statistique qui donne une idée claire de l'écart moyen du profil η par rapport au plan de référence. En effet, nous remarquons bien le rôle joué par ce

paramètre lorsque nous traçons sur une même figure deux surfaces qui ont des hauteurs quadratiques moyennes différentes Fig 1.1(a). Sur la même figure l_{cor} est un paramètre statistique qui donne cette fois une idée précise de la rugosité latérale des surfaces. Ce paramètre entre dans l'expression de la fonction d'auto-corrélation $a(x)$ qui est également stationnaire :

$$\begin{cases} a(x) = \frac{\langle \eta(x_0) \eta(x_0+x) \rangle}{(hrms)^2} \\ a(x) = e^{-\frac{x^2}{(l_{cor})^2}} \end{cases} \quad (1.26)$$

Afin de mieux appréhender la signification de la longueur de corrélation, nous traçons sur la même figure deux surfaces qui possèdent une même hauteur quadratique moyenne et des longueurs de corrélation distinctes Fig 1.1(b), elle exprime donc la corrélation des hauteurs entre deux points quelconques du profil, comme fonction de seulement la distance séparant leurs abscisses respectives. Ces profils ont notamment été utilisés pour l'étude de la rétro-diffusion exaltée [42]. Notre objectif réside dans l'étude inverse de la diffraction. Nous cherchons notamment à tester l'aptitude des méthodes inverses à reconstruire des surfaces rugueuses de grande taille à partir d'un jeux de données sur le champ diffracté.

1.6.3 Profil à deux plots

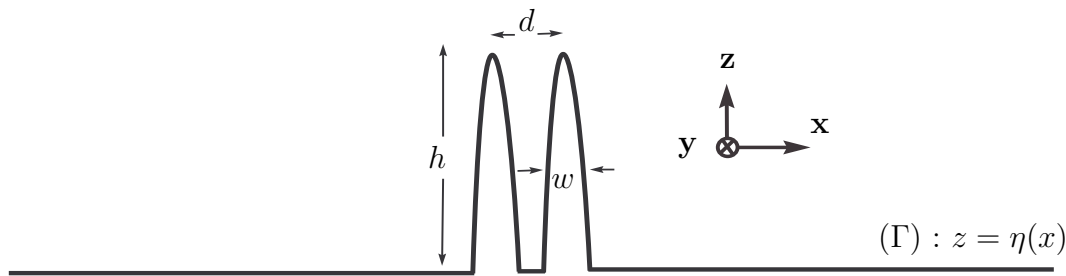


FIGURE 1.2 – Profil de surface constitué de deux plots ($w = 80$ nanomètres, $h = 140$ nanomètres et $d = 200$ nanomètres).

Nous avons également étudié des surfaces constituées de deux pistes que nous alignons suivant l'axe d'invariance (o, \mathbf{y}) . Une représentation dans le plan $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$ donne lieu à un profil $z = \eta(x)$ constitué de deux plots

Fig 1.2. Ces surfaces ont la particularité d'être planes sur la majeure partie de leurs domaine de définition. Leur rugosité se trouvant ainsi localisée sur une zone spatialement réduite. Elles possèdent une taille moyenne de quelques dizaines de longueurs d'onde. L'objectif ici est d'étudier dans le cadre du problème direct le courant de surface généré sur une structure sub-longueur d'onde. Plus loin, nous exploiterons ce profil dans l'étude numérique du problème inverse où sera abordée le pouvoir de résolution des algorithmes d'inversion.

1.6.4 Courants induits sur un profil parfaitement conducteur

Nous considérons une surface qui fait $60 \mu\text{m}$ de long, de hauteur quadratique moyenne $hrms = 0.06 \mu\text{m}$ et de longueur de corrélation $l_{cor} = 0.3 \mu\text{m}$ Fig 1.1(b). Nous éclairons ce profil par un faisceau gaussien sous les deux polarisations fondamentales, son expression Eq (1.10) s'écrit en fonction du paramètre g qui conditionne l'empreinte du champ incident sur la surface. Pour éviter les artefacts numériques dus aux effets de bords, la valeur de ce paramètre est choisie égal au quart de la taille du profil. Sur les figures Figs 1.3(a),(b), nous remarquons que l'amplitude des courants superficiels induits, reflète la rugosité de la surface avec toutefois une intensité plus forte en polarisation TM. Nous rappelons que ces courants sont reliés pour les deux polarisations à la composante tangentielle du champ magnétique.

De la même façon, nous calculons les courants de surfaces pour un profil constitué de deux plots Figs 1.2. Dans ce contexte, la surface étudiée présente une taille moyenne qui fait $10 \mu\text{m}$. Les plots possèdent une hauteur $h = 140$ nanomètres et une inter-distance $d = 200$ nanomètres. L'amplitude des courants induits change d'une polarisation à l'autre avec une intensité plus prononcée dans le cas TM Figs 1.4(a),(b). De plus, nous remarquons que cette amplitude s'apparente au profil de la surface en polarisation TE alors qu'elle est liée à sa courbure pour le cas TM. Ces courants de surfaces représentent des sources secondaires pour le calcul du champ diffracté proche et lointain. De cette manière lorsque nous ajoutons le champ incident au champ diffracté nous obtenons le champ total en tout point de l'espace Figs 1.5(a),(b). Dans ce contexte, nous vérifions bien la continuité de la composante tangentielle du champ électrique lorsque nous passons du milieu incident vers le milieu transmis Fig 1.5(a). Nous remarquons aussi le saut de la composante tangentielle du champ magnétique Fig 1.5(b).

1.6.5 Approche du métal parfait par un diélectrique fortement conducteur

Nous considérons des surfaces de permittivité finie où les sources du champ diffracté sont données par les composantes tangentielles des champs électrique et magnétique. Dans ce contexte, lorsque nous augmentons la permittivité de la surface la composante tangentielle du champ électrique tend vers zéro. La composante tan-

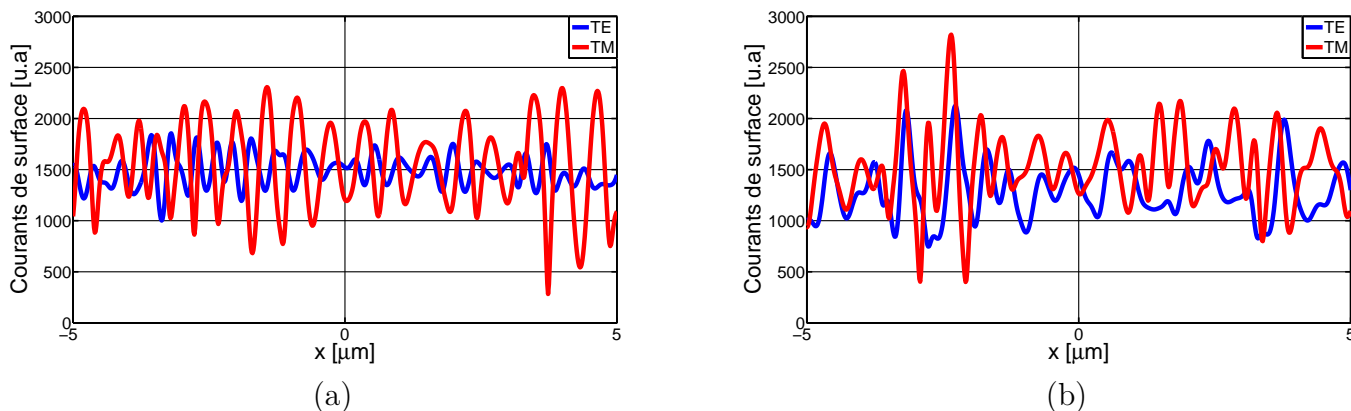


FIGURE 1.3 – Amplitudes des courants induits par un éclairage de la surface sous les deux polarisations fondamentales. Le profil possède une longueur de $60 \mu\text{m}$, ses caractéristiques géométriques sont : $l_{cor} = 0.3 \mu\text{m}$, $h_{rms} = 0.06 \mu\text{m}$. (a) nous éclairons la surface sous l'angle d'incidence $\theta_i = 0^\circ$; (b) nous éclairons le profil sous l'angle d'incidence $\theta_i = 30^\circ$.

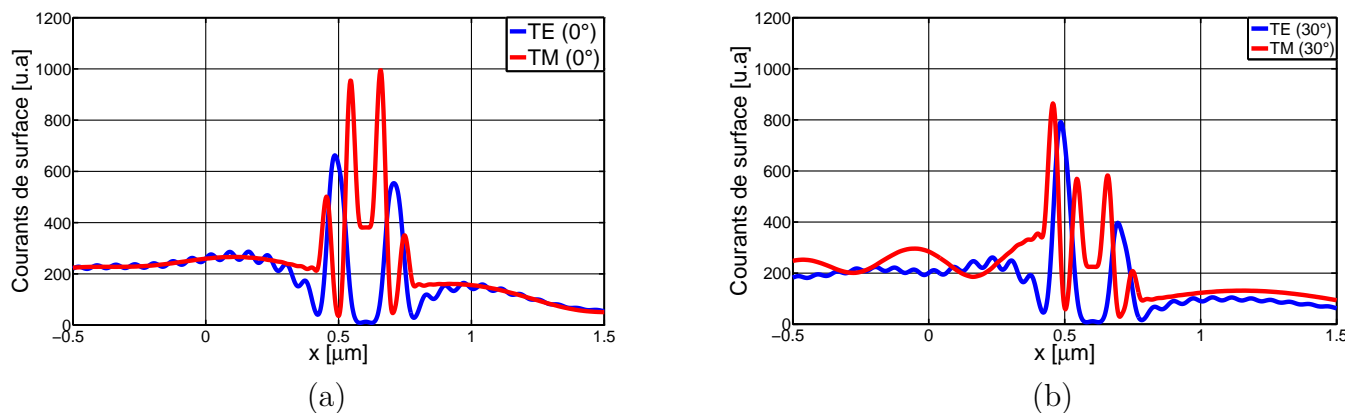


FIGURE 1.4 – Amplitudes des courants induits par un éclairage du profil à deux plots sous les deux polarisations fondamentales. (a) nous éclairons sous l'angle d'incidence $\theta_i = 0^\circ$; (b) nous éclairons sous l'angle d'incidence $\theta_i = 30^\circ$.

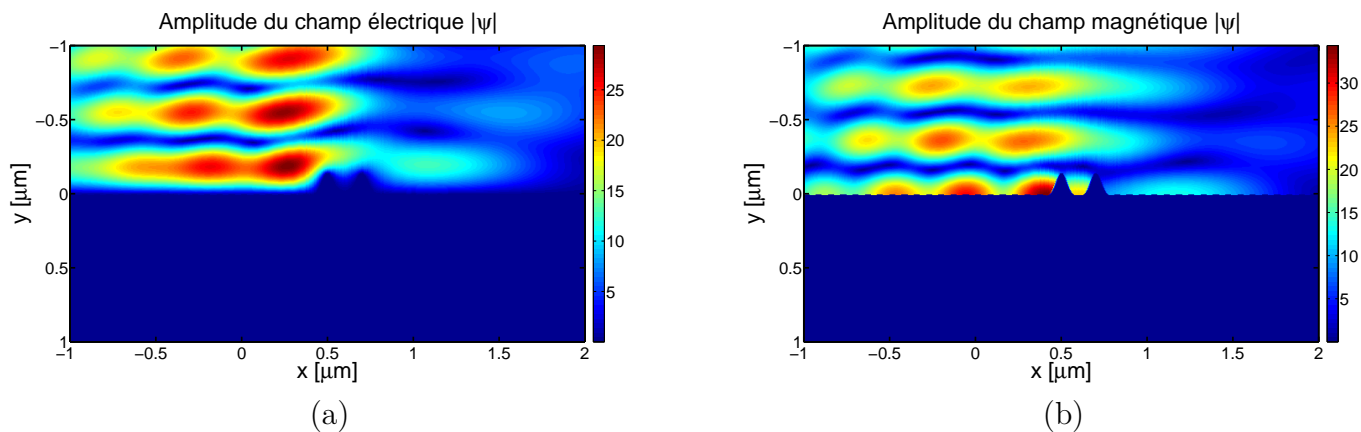


FIGURE 1.5 – Amplitudes du champ total $|\psi|$ dans le domaine du champ proche. Nous éclairons la surface sous les deux polarisations par un faisceau gaussien centré sur l'angle d'incidence $\theta_i = 30^\circ$. (a) amplitude du champ électrique $\mathbf{E} = \psi \mathbf{y}$ en polarisation TE ; (b) amplitude du champ électrique $\mathbf{H} = \psi \mathbf{y}$ en polarisation TM.

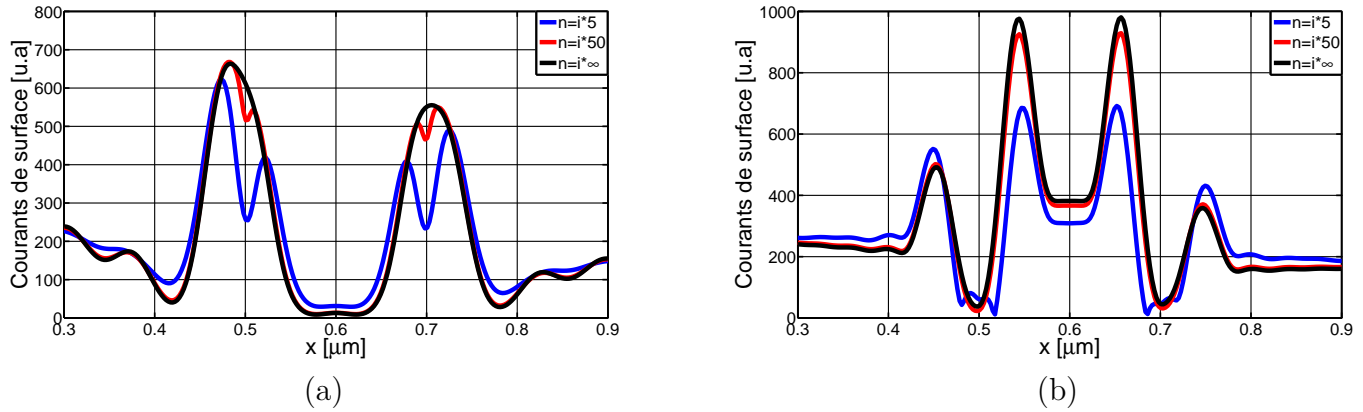


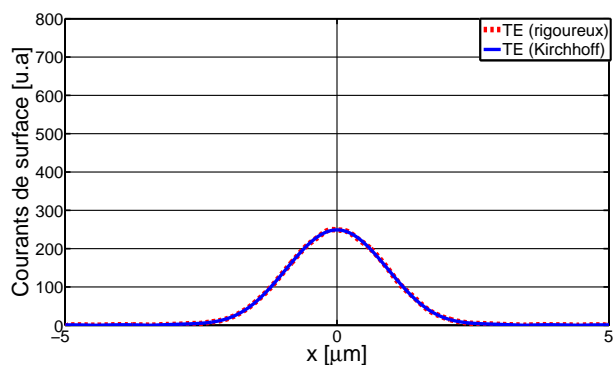
FIGURE 1.6 – Amplitudes des courants induits lorsque nous éclairons la surface par un faisceau gaussien centré sur l’angle d’incidence $\theta_i = 0$. Dans ce cas, nous avons considéré des surfaces de conductivité infinie $n = i\infty$, ainsi que des surfaces diélectriques d’indices fictifs : $n = i5$ et $n = i50$. (a) cas d’un éclairage en polarisation TE, (b) éclairage en polarisation TM

gentielle du champ magnétique converge vers le courant superficiel induit sur un profil parfaitement conducteur Figs 1.6(a),(b).

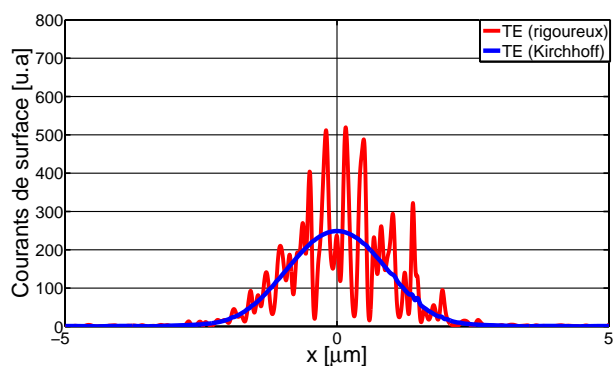
Nous remarquons que les valeurs de permittivité qui assurent la convergence du champ calculé pour un milieu diélectrique vers celui du conducteur parfait sont éloignées des cas réels de métaux dans le domaine optique. Toutefois, cela n’enlève rien à l’intérêt que présente l’étude des modèles direct et inverse à la limite du métal parfaitement conducteur. En effet, cette approche présente le double intérêt d’être simple et de permettre une description complète du phénomène physique. Par conséquent, elle représente une étape nécessaire dans notre démarche scientifique. Par ailleurs, le modèle du métal parfait nous permettra d’établir une borne supérieure sur la résolution latérale que nous sommes susceptibles d’atteindre par nos algorithmes d’inversion.

1.6.6 Diffusion simple et mécanisme d’interactions multiples

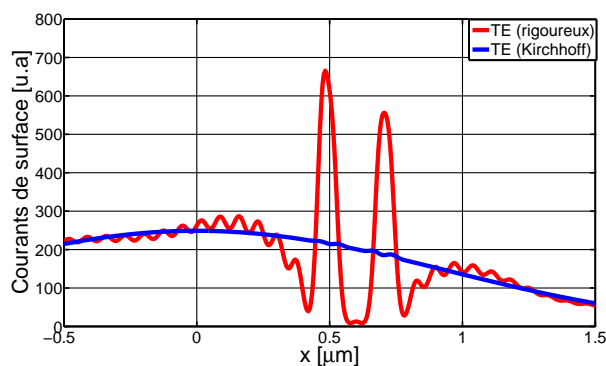
Pour des profils qui présentent de fortes rugosités, les différents points de la surface se comportent comme des diffuseurs en interaction multiple, c’est-à-dire que le champ total en chaque point du profil dépend non seulement du champ incident, mais également du champ total sur toute la surface. Pour mettre en évidence cette interaction multiple du champ, nous comparons le courant de surface calculé rigoureusement à l’aide du formalisme intégral de frontière à celui obtenu dans le cadre d’une approximation de la diffusion simple valable pour des profils peu rugueux. En effet, lorsque nous éclairons une surface rugueuse à faible longueur de corrélation Fig 1.7 (a), nous constatons que le modèle approché donne un résultat sensiblement proche de celui obtenu par le calcul rigoureux. Lorsque nous augmentons la rugosité de cette surface en diminuons la valeur



(a)



(b)



(c)

FIGURE 1.7 – Amplitudes des courants induits lorsque nous éclairons la surface par un faisceau gaussien centré sur l'angle d'incidence $\theta_i = 0$ en polarisation TE. La surface étudiée fait une taille de $10 \mu\text{m}$. Dans ce cas nous comparons le courant de surface obtenu dans le cadre de l'approximation de la diffusion simple (Kirchhoff) avec le courant rigoureux. (a) la surface présente $0.06 \mu\text{m}$ de hauteur quadratique moyenne et $0.5 \mu\text{m}$ de longueur de corrélation; (b) la surface présente $0.06 \mu\text{m}$ de hauteur quadratique moyenne et $0.1 \mu\text{m}$ de longueur de corrélation; (c) la surface est constituée de deux plots de hauteur $h = 140$ nanomètres et d'inter-distance $d = 200$ nanomètres.

de la longueur de corrélation, nous remarquons dans ce cas que les résultats obtenus par le modèle approché de diffraction s'éloignent fortement de ceux obtenus par la formulation exacte Fig 1.7 (b). Cette limitation du modèle approché de diffusion simple se remarque aussi sur le profil à deux plots où nous constatons que toutes les interactions multiples entre les deux bosses ne sont pas prises en compte Fig 1.7 (c). Ce qui illustre bien l'intérêt d'utiliser des méthodes de diffraction rigoureuses lorsque la surface présente une forte rugosité.

1.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le formalisme intégral de frontière pour l'étude de la diffraction par des surfaces qui séparent deux milieux diélectriques homogènes. Nous avons étudié la diffraction par des surfaces de permittivité finie et infinie sous les deux polarisations fondamentales. En particulier, nous avons considéré des surfaces qui présentent une géométrie invariante dans une direction de l'espace. Pour de tels profils, nous avons étudié la limite du métal parfait par un diélectrique fortement conducteur. Pour finir nous avons comparé les résultats d'un calcul rigoureux de courants de surface à ceux obtenus dans le cadre d'un modèle fondé sur l'approximation de la diffusion simple. Cela nous a permis de constater l'importance d'utiliser des modèles rigoureux de diffraction permettant de tenir compte des diffusions multiples.

Chapitre 2

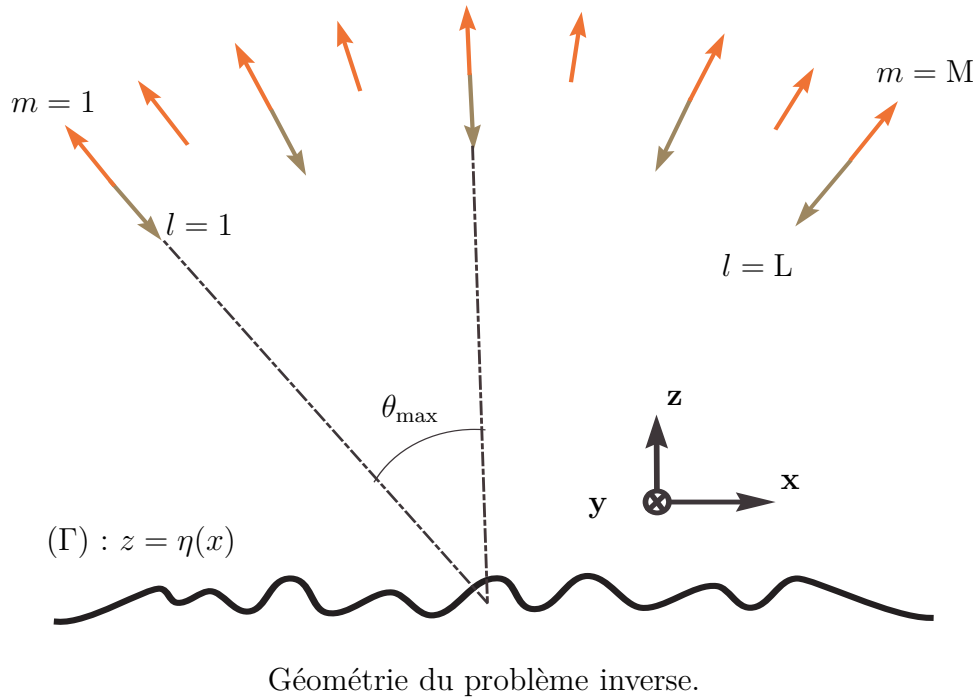
Étude de la diffraction inverse par une surface unidimensionnelle

2.1 Introduction

Dans le présent chapitre, nous nous intéressons à l'étude inverse de la diffraction par des surfaces qui présentent une conductivité finie ou infinie. En particulier, nous allons considérer des profils invariants dans la direction d'un axe spatial. Ce qui nous permettra d'étudier séparément les deux cas de polarisations fondamentales. Premièrement, nous allons décrire une méthode approchée de reconstruction de surfaces qui est basée sur les approximations de Kirchhoff et Fraunhofer. Ensuite, nous passerons à une description complète de la méthode itérative de reconstruction de Newton-Kantorovitch, laquelle sera fortement exploitée au chapitre trois dédié aux résultats numériques et expérimentaux. Pour finir, nous présenterons brièvement la méthode du gradient modifié comme une alternative pour faire de la profilométrie, le cas particulier d'une surface parfaitement conductrice éclairée en polarisation TE sera abordé dans ce contexte.

2.2 Position du problème

Pour résoudre le problème inverse de la diffraction par une surface, nous commençons par nous munir d'un jeu de données sur le champ diffracté que nous notons Φ_{mes} . Ces données sont obtenues en éclairant le profil par un faisceau gaussien sous plusieurs angles d'incidence θ_l , $l = 1, \dots, L$. La mesure de l'amplitude complexe se déroule sur M détecteurs que nous plaçons suivant les directions diffractées définies par les angles θ_m , $m = 1, \dots, M$. Dans ce cas, la résolution du problème inverse consiste à faire la meilleure estimation de la surface qui diffracte ce champ, celle-ci est représentée par son profil $z = \eta_{\text{ex}}(x)$. Les données sur le champ que nous exploitons peuvent être de nature synthétique ou expérimentale. Pour résoudre ce dernier cas, il est nécessaire de bien caractériser expérimentalement le champ incident, contrairement au cas purement numérique où nous



utilisons le même champ excitateur pour générer et inverser les données.

Le problème inverse que nous considérons dans ce chapitre est mal posé. A contrario, un problème physique est dit bien posé s'il satisfait à trois critères que nous devons à Jacques Hadamard [43, 44]. En effet, si nous considérons le problème abstrait de la recherche d'une solution s dans l'espace S à partir des données u qui appartiennent à l'espace U . Ce problème est dit bien posé si les trois conditions suivantes sont satisfaites :

- existence de la solution : pour tout élément $u \in U$, il existe une solution s appartenant à l'espace S .
- la solution est définie de façon unique.
- la solution est stable vis à vis des faibles variations des données u sur l'espace U .

Dans le problème inverse qui nous intéresse, les données $u \in U$ correspondent aux amplitudes complexes que nous mesurons sur les M détecteurs et la solution $s \in S$ recherchée, au profil exact η_{ex} de la surface. Ce problème est également mal posé car comme nous allons le montrer un peu plus loin dans ce chapitre, le profil que nous estimons à partir du jeu de mesures sur l'amplitude complexe n'est pas stable vis-à-vis des faibles variations de ces données. Ce qui se traduit en pratique par des solutions très éloignées les unes des autres alors même que les données correspondantes sont peut perturbées, ici nous supposons que la solution du problème existe toujours et demeure unique. Une façon de renforcer la condition sur la stabilité de la solution consiste à disposer

d'un maximum de mesures sur le champ diffracté. C'est pourquoi nous avons choisi de générer des données en éclairant la surface sous plusieurs angles d'incidence. Cependant, cette initiative bien qu'elle soit intéressante ne permet pas pour autant de valider ce critère. Une solution dans ce cas consiste à exploiter de l'information sur la surface que nous connaissons a priori. Concrètement, cela consiste à ajouter un opérateur régularisant [45], lequel va favoriser parmi toutes les solutions possibles les profils qui présentent le plus de régularité.

2.3 Comparaison avec le problème de la reconstruction d'un contraste d'objet

Dans la littérature, d'innombrables travaux sont consacrés à la reconstruction du contraste de permittivité d'un objet volumique [46]. Ici, nous sommes également en face d'un problème inverse mal posé, toutefois moins difficile à résoudre comparé au cas surfacique.

En effet, considérons le cas de la diffraction par un objet cylindrique, non magnétique et de permittivité inhomogène (ε, μ_0) . La géométrie considérée nous permet d'étudier le problème direct de la diffraction dans le plan d'incidence $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$. Par souci de simplicité, nous considérons, le cas particulier de la polarisation TE pour laquelle la composante non nulle du champ électrique est alignée suivant l'axe d'invariance du cylindre. De la même manière que nous avons pu le faire pour les surfaces au premier chapitre, la formulation du problème direct dans le cadre du formalisme intégral volumique, conduit à un système découplé qui se compose d'une équation d'état plus une équation d'observation [32]. Leurs expressions respectives sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x', z'; \theta_i) = \psi_{\text{inc}}(x', z'; \theta_i) + k^2 \iint_{\Omega} g(x, z; x', z') \chi_{\text{ex}}(x, z) \psi(x, z; \theta_i) d\Omega \quad (x', z') \in \Omega \\ \Phi_{\text{mes}}(\theta; \theta_i) = k^2 \iint_{\Omega} \chi_{\text{ex}}(x, z) \psi(x, z; \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)z)} d\Omega \quad \mathbf{k} \in \Sigma, \end{array} \right. \quad (2.1)$$

où $\chi = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} - 1$ représente le contraste du milieu diffractant et θ_i l'angle d'incidence. Maintenant, nous ajoutons l'autre système d'équations découplées, déjà introduit au premier chapitre pour l'étude de la diffraction par une surface parfaitement conductrice éclairée en polarisation TE :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{n'} \psi_{\text{inc}}(x', \eta_{\text{ex}}(x'); \theta_i) = \frac{1}{2} \partial_{n'} \psi(x', \eta_{\text{ex}}(x'); \theta_i) + \int_{\Gamma} \partial_{n'} g(x, \eta_{\text{ex}}(x); x', \eta_{\text{ex}}(x')) \partial_n \psi(x, \eta_{\text{ex}}(x); \theta_i) d\Gamma \\ \Phi_{\text{mes}}(\theta; \theta_i) = - \int_{\Gamma} \partial_n \psi(x, \eta_{\text{ex}}(x); \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)\eta_{\text{ex}}(x))} d\Gamma \quad \mathbf{k} \in \Sigma \end{array} \right. \quad (2.2)$$

L'étude inverse de la diffraction par le cylindre consiste à faire la meilleure estimation du contraste exact χ_{ex} , à partir du jeu de mesures sur l'amplitude complexe Φ_{mes} . Dans le problème surfacique, c'est le profil exact $z = \eta_{\text{ex}}(x)$ que nous cherchons à estimer à partir des données, cas plus difficile à résoudre. En effet, comme nous pouvons le constater sur les équations Eqs (2.2), le profil de surface est intégré à la fonction de Green dans l'équation d'état, ainsi qu'à l'exposant du terme exponentiel de l'équation d'observation. Alors que dans le cas volumique, le contraste paramètre recherché de l'objet, n'est pas intégré à la fonction de Green du problème Eqs (2.1). Par conséquent, la difficulté particulière à la profilométrie vient de tous ces aspects non linéaires apparaissant dans la formulation du problème direct, lesquels n'existent pas pour le cas volumique.

2.4 Généralités sur l'inversion

Parmi toutes les approches de la diffraction inverse en électromagnétisme, les méthodes stochastiques et les méthodes déterministes constituent deux classes importantes. Dans le premier cas, nous effectuons une recherche aléatoire de la solution où aucune direction n'est privilégiée. Ce sont des méthodes dites d'optimisation globale conduisant à des algorithmes du types : recuit simulé [47], génétique [48]. Pour ce qui est des méthodes déterministes, la recherche de la solution se déroule en privilégiant une direction qui minimise la fonctionnelle coût, critère physique se rapportant à l'écart entre le champ simulé et sa mesure. La technique de minimisation considérée pour chaque méthode, s'accompagne par une définition particulière de cette fonctionnelle. Parmi les méthodes déterministes, nous pouvons citer la méthode de Newton-Kantorovitch [49] ou encore celle du gradient modifié [50].

2.5 Les méthodes d'inversion déterministes

Dans le cadre des méthodes déterministes, nous avons premièrement les méthodes non itératives ou approchées. Ces dernières sont formulées en posant quelques approximations sur l'interaction du champ incident avec la surface. Sur un tout autre registre, nous avons les méthodes d'inversion qui sont dites rigoureuses ou itératives. Dans cette classe de méthodes, la recherche de la solution s'opère par un algorithme itératif où nous privilégions à chaque étape de la reconstruction une direction de recherche du paramètre d'intérêt. Celui-ci peut être soit le contraste d'un objet volumique ou le profil d'une surface. Le choix de cette direction de recherche s'effectue toujours dans le sens de la minimisation de la fonctionnelle coût du problème physique, qui peut

s'exprimer de différentes façons. En effet, nous pouvons travailler sur la base de la fonctionnelle du problème linéarisé dans le cadre de la méthode de Newton-Kantorovitch ou bien avec la fonctionnelle globale du problème physique dans le cas de la méthode du gradient modifié.

2.5.1 Les méthodes d'inversion non itératives. Modèle approché de Kirchhoff-Fraunhofer

Ces méthodes présentent par leur nature non itérative l'intérêt d'être très peu couteuses en temps de calcul. Toutefois, leurs applications sont restreintes au domaine de validité des approximations qu'elles considèrent. L'une des premières méthodes non itératives portant sur la résolution du problème de diffraction inverse repose sur l'approximation de Born [51]. Cette approximation restrictive, valide pour les milieux faiblement diffusant consiste à approcher le champ total dans l'objet par le champ incident. Pour un objet cylindrique que nous représentons dans le plan d'incidence $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$, l'équation d'observation Eq (2.1) qui donne l'amplitude complexe diffractée se réécrit dans le cadre de cette approximation sous la forme :

$$\Phi(\theta; \theta_i) = k^2 \iint_{\Omega} \chi_{\text{ex}}(x, z) \psi_{\text{inc}}(x, z; \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)z)} d\Omega \quad \mathbf{k} \in \Sigma. \quad (2.3)$$

Cette amplitude du champ s'exprime comme la transformée de Fourier de $\chi_{\text{ex}} \psi_{\text{inc}}$, défini sur le domaine spatial Ω . Par conséquent, pour remonter au contraste de l'objet, il suffit d'opérer une transformation de Fourier inverse des données collectées sur l'espace de mesure, et dont la largeur de support est fixée par l'angle maximal pour l'illumination et la détection.

Dans le cas de l'étude inverse du problème de la diffraction par une surface unidimensionnelle, infiniment conductrice, nous appliquons deux approximations. La première est dite de Kirchhoff [52] et consiste à remplacer le courant en un point donné de la surface par le courant d'un plan tangent à la surface Γ au même point. Dans le cadre de cette approximation, les équations d'observation obtenues au premier chapitre pour les deux polarisations fondamentales et une surface parfaitement conductrice se réécrivent sous les formes :

$$\begin{cases} \Phi(\theta; \theta_i) = -2 \int_{\Gamma} \partial_n \psi_{\text{inc}}(x, \eta_{\text{ex}}(x); \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)\eta_{\text{ex}}(x))} d\Gamma & \mathbf{k} \in \Sigma \quad \text{TE} \\ \Phi(\theta; \theta_i) = -2i \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \psi_{\text{inc}}(x, \eta_{\text{ex}}(x); \theta_i) e^{-i(k_x(\theta)x + k_z(\theta)\eta_{\text{ex}}(x))} d\Gamma & \mathbf{k} \in \Sigma \quad \text{TM} \end{cases} \quad (2.4)$$

Nous ajoutons maintenant une approximation supplémentaire dite de Fraunhofer. Celle-ci consiste à approcher

les composantes des vecteurs d'ondes incident et diffracté qui sont normales au plan moyen de la surface par le module du vecteur d'onde du milieu incident ($|k_{iz}| = |k_z| \simeq k$). Dans ce cas, l'équation d'observation se réécrit sous la forme :

$$\begin{cases} \Phi(\theta; \theta_i) = -2i \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{k}_i}{(\mathbf{k}-\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{z}} \int_{\Gamma} e^{-2ik\eta_{\text{ex}}} e^{-i((k_x(\theta)-k_{ix}(\theta_i))x)} dx & \mathbf{k} \in \Sigma \quad \text{TE} \\ \Phi(\theta; \theta_i) = 2i \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{k}_i}{(\mathbf{k}-\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{z}} \int_{\Gamma} e^{-2ik\eta_{\text{ex}}} e^{-i((k_x(\theta)-k_{ix}(\theta_i))x)} dx & \mathbf{k} \in \Sigma \quad \text{TM} \end{cases} \quad (2.5)$$

Dans ces nouvelles expressions, nous constatons que l'amplitude complexe diffractée s'écrit comme la transformée de Fourier d'un terme exponentiel dont l'argument est proportionnel au profil η de la surface. Dans ce contexte, nous avons une forme approchée de l'amplitude que nous mesurons $\Phi \simeq \Phi_{\text{mes}}$, où Φ_{mes} représente la solution rigoureuse du couple d'équations Eqs (2.2). La résolution du problème inverse dans le cadre des approximations de Kirchhoff et Fraunhofer s'obtient à l'aide des expressions suivantes :

$$\begin{cases} \eta = -\frac{\lambda}{4\pi} \arg(\tilde{\Phi}_{\text{mes}}) - \frac{\lambda}{8} & \text{TE} \\ \eta = -\frac{\lambda}{4\pi} \arg(\tilde{\Phi}_{\text{mes}}) + \frac{\lambda}{8} & \text{TM}, \end{cases} \quad (2.6)$$

où $\tilde{\Phi}_{\text{mes}}$ représente la transformée de Fourier de l'amplitude diffractée que nous mesurons. Par conséquent, nous n'obtenons qu'une forme approchée du profil exact $\eta \simeq \eta_{\text{ex}}$, qui sera d'autant moins précise si la surface étudiée présente une forte rugosité.

2.5.2 Les méthodes d'inversion itératives. Méthode de Newton-Kantorovitch

Ces méthodes d'inversion ont été largement développées pour l'étude du problème inverse de la reconstruction du contraste d'un objet. Parmi ces modèles, nous distinguons deux formulations importantes que sont : la méthode de Newton-Kantorovitch [53] et la méthode du gradient modifié [46, 54]. Ces deux méthodes fonctionnent sur le même principe, lequel consiste à réajuster à chaque itération le paramètre d'intérêt, ici le contraste de l'objet.

Dans le cadre de l'étude inverse de la diffraction par des surfaces, le paramètre d'intérêt que nous réajustons à chaque itération est le profil $z = \eta(x)$. Ce type d'études présente un intérêt technologique considérable, notamment pour tout ce qui concerne les applications potentielles en profilométrie optique. Cet aspect applicatif a largement motivé notre démarche scientifique, même si dans la littérature très peu de travaux sont consacrés

à ce problème [49, 55], ce qui est probablement dû à la forte non linéarité qui apparaît dans l'expression de l'amplitude complexe en fonction du profil.

Au précédent paragraphe, nous avons constaté à quel point la relation opérationnelle qui lie le profil au champ diffracté est non linéaire. Cette relation qui peut être symbolisée par l'opérateur de diffraction F est décrite au premier chapitre dans le cadre de la formulation intégrale de frontière. Cette dernière représente l'ensemble de l'équation intégrale de surface qui a pour solutions les composantes tangentielles des champs sur la surface et de l'équation d'observation qui nous donne la valeur de l'amplitude complexe diffractée. L'ensemble de cette formulation peut être réécrite sous la forme condensée suivante :

$$\Phi_{\text{mes}} = F\eta_{\text{ex}} . \tag{2.7}$$

Dans cette équation η_{ex} représente le profil exact et Φ_{mes} l'amplitude complexe que nous mesurons. La résolution du problème inverse consiste à faire la meilleure estimation de η_{ex} , de telle façon à ce que le champ diffracté calculé via le modèle de diffraction direct pour le profil que nous estimons, soit le plus proche possible du champ que nous mesurons. En pratique, nous ne disposons que d'une connaissance approchée de l'amplitude complexe Φ_{mes} .

En effet, les mesures sont nécessairement entachées d'erreurs. Aussi, il est fréquent de rajouter intentionnellement du bruit aux données synthétiques afin d'analyser et d'étudier la robustesse de la méthode à traiter des données expérimentales. Dans tous les cas de figure, la méthode d'inversion doit fournir des solutions qui soient d'une part stables vis-à-vis des faibles variations sur les données du champ, et d'autre part assez précises pour avoir un intérêt applicatif. Mais avant de discuter plus en détails des difficultés que pose cette méthode, nous exposons ci-dessous sa formulation. La reconstruction du profil dans le cadre de la méthode de Newton-Kantorovitch s'effectue par un processus itératif, où nous réajustons à l'itération n le profil estimé à l'itération précédente, suivant l'expression :

$$\eta_n = \eta_{n-1} + \delta\eta_n , \tag{2.8}$$

où $\delta\eta_n$ représente la correction du profil à l'itération n et s'obtient en résolvant l'équation algébrique suivante :

$$\delta\Phi_{n-1} = D_{n-1} \delta\eta_n \quad \text{avec} \quad \delta\Phi_{n-1} = \Phi_{\text{mes}} - \Phi_{n-1}. \quad (2.9)$$

Dans cette équation D_{n-1} représente la dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction non linéaire F calculée sur la base de l'estimation du profil obtenu à l'itération $n - 1$. Pour calculer la correction sur le profil, nous avons également besoin de l'amplitude complexe diffractée par le profil estimé à l'itération $n - 1$, nous notons ce champ par Φ_{n-1} . Par ailleurs, nous avons opté pour une résolution de l'équation Eq (2.9) au sens des moindres carrés [56]. Nous précisons toutefois que cette équation peut également être résolue à l'aide d'une décomposition en valeurs singulières [57]. La résolution au sens des moindres carrés se ramène dans ce cas à la recherche de l'unique solution $\delta\eta_n$ qui minimise la fonctionnelle coût suivante :

$$\xi(\delta\eta) = \|\delta\Phi_{n-1} - D_{n-1} \delta\eta\|^2. \quad (2.10)$$

Cette solution est donnée par l'expression suivante :

$$\begin{cases} \delta\eta_n = [D_{n-1}^\dagger D_{n-1}]^{-1} D_{n-1}^\dagger \delta\Phi_{n-1} \\ \xi(\delta\eta_n) = \min_{\delta\eta \in \Gamma} \xi(\delta\eta). \end{cases} \quad (2.11)$$

2.5.3 La notion de problème mal posé

En pratique, l'expression de la correction sur le profil qui est donnée dans Eq (2.11) demeure instable vis-à-vis des faibles variations sur les données, ce qui conduit à des solutions non physiques. En effet, lorsque nous rajoutons un bruit de très faible amplitude ι au terme de données pures $D^\dagger \delta\Phi$, cela implique des variations de fortes amplitude sur la solution $\delta\eta_n$. Pour mieux s'en rendre compte, nous effectuons une décomposition spectrale de l'opérateur $D^\dagger D$ sur une base orthonormée de vecteurs et de valeurs propres $\{\mathbf{v}_i, \mathbf{e}_i\}$. Dans ce cas l'équation Eq (2.11) se réécrit sous la forme diagonalisée :

$$\tilde{\delta\eta} = [D^\dagger D]^{-1} (D^\dagger \delta\Phi + \iota) = \sum_{i=1}^n \frac{\langle \mathbf{v}_i | D^\dagger \delta\Phi + \iota \rangle \mathbf{v}_i}{e_i}. \quad (2.12)$$

Les valeurs propres e_i de l'opérateur autoadjoint $D^\dagger D$ sont réelles. Afin d'illustrer le caractère mal posé de ce problème nous supposons que ces valeurs propres sont positives et ordonnées comme suit : $e_1 \geq e_2, \dots, \geq e_n > 0$. De plus, nous supposons que le terme des données pures $D^\dagger \delta\Phi$ est entièrement représenté dans l'espace associé au premier vecteur propre \mathbf{v}_1 de valeur propre e_1 , $D^\dagger \delta\Phi = \langle \mathbf{v}_1 | D^\dagger \delta\Phi \rangle \mathbf{v}_1$. D'un autre côté, nous supposons que

le terme de bruit ι appartient à l'espace formé par le vecteur propre \mathbf{v}_n de valeur propre e_n , $\iota = \langle \mathbf{v}_n | \iota \rangle \mathbf{v}_n$. Par suite, en utilisant les relations d'orthogonalités des vecteurs propres nous pouvons séparer dans le calcul de la correction sur le profil la contribution des données pures sur le champ de celle du bruit, nous écrivons : $\tilde{\delta\eta} = \delta\eta + \delta\eta_\iota$ avec :

$$\begin{cases} \delta\eta = \frac{\langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{D}^\dagger \delta\Phi \rangle \mathbf{v}_1}{e_1} & \text{et} & \|\delta\eta\| = \frac{\|\mathbf{D}^\dagger \delta\Phi\|}{e_1} \\ \delta\eta_\iota = \frac{\langle \mathbf{v}_n | \iota \rangle \mathbf{v}_n}{e_n} & \text{et} & \|\delta\eta_\iota\| = \frac{\|\iota\|}{e_n} \end{cases} \quad (2.13)$$

Nous déduisons d'après les expressions Eqs (2.13) que $\frac{\|\delta\eta_\iota\|}{\|\delta\eta\|} = \frac{\|\iota\|}{\|\mathbf{D}^\dagger \delta\Phi\|} \frac{e_1}{e_n}$. Cette relation donne l'erreur relative de la correction sur le profil en fonction de l'erreur relative sur les données mesurées. Le facteur de proportionnalité $\frac{e_1}{e_n}$ est donné par le rapport de la plus grande valeur propre sur la plus petite et s'appelle le conditionnement de l'opérateur $\mathbf{D}^\dagger \mathbf{D}$. Plus cette valeur est grande plus sera importante l'instabilité de la solution vis-à-vis des faibles variations sur les données. Ici nous avons envisagé la pire situation où le bruit est amplifié exclusivement par la plus petite valeur propre. Nous avons également supposé que le signal est entièrement représenté dans l'espace associé au vecteur propre qui possède la plus forte valeur propre. En général, nous avons plutôt à faire à l'inégalité suivante : $\frac{\|\delta\eta_\iota\|}{\|\delta\eta\|} \leq \frac{\|\iota\|}{\|\mathbf{D}^\dagger \delta\Phi\|} \frac{e_1}{e_n}$. Par conséquent, nous déduisons que l'aspect mal posé de ce problème inverse se traduit par un mauvais conditionnement de l'opérateur $\mathbf{D}^\dagger \mathbf{D}$. Une solution pour éviter cette instabilité consiste à introduire un opérateur régularisant, lequel va forcer la recherche de la solution au problème inverse dans la classe des fonctions régulières.

2.5.4 La régularisation de Tikhonov

Nous introduisons la fonctionnelle stabilisante de Tikhonov [45] qui se présente sous sa forme générale :

$$\Pi(\delta\eta) = \sum_{r=0}^p \int_{\Gamma} q_r(x) \left(\frac{d^r \delta\eta}{dx^r} \right)^2 dx \quad (2.14)$$

Cette fonctionnelle va nous permettre de favoriser parmi toutes les solutions possibles de l'équation Eq (2.9) les solutions qui présentent des profils réguliers. Dans ce contexte, nous cherchons à minimiser la nouvelle fonctionnelle coût régularisée suivante :

$$\tilde{\xi}(\delta\eta) = \|\delta\Phi_{n-1} - \mathbf{D}_{n-1} \delta\eta\|^2 + \mu^2 \Pi(\delta\eta), \quad (2.15)$$

avec μ^2 qui représente le paramètre de régularisation de Tikhonov et dont le rôle consiste à pondérer l'importance accordée à la fonctionnelle stabilisante par rapport à la fonctionnelle du problème physique

$\|\delta\Phi_{n-1} - D_{n-1} \delta\eta\|^2$. Dans ce travail, nous nous sommes restreints à l'utilisation des ordres zéro et deux de la régularisation de Tikhonov, dans ce cas nous avons choisi $q_0 = 1 - \alpha$, $q_2 = \alpha$ et $q_1 = q_3 = q_4 \dots = q_p = 0$. Cela nous permet d'écrire l'expression de la nouvelle correction sur le profil de la surface :

$$\delta\eta_n = [D_{n-1}^\dagger D_{n-1} + \mu^2 ((1 - \alpha)I + \alpha S^2)]^{-1} D_{n-1}^\dagger \delta\Phi_{n-1}. \quad (2.16)$$

Dans cette expression I représente donc l'opérateur identité et S l'opérateur dérivée seconde : $\frac{d^2\delta\eta}{dx^2} = S\delta\eta$. La correction sur le profil Eq (2.16) correspond à l'unique solution qui minimise la fonctionnelle coût suivante :

$$\tilde{\xi}(\delta\eta_n) = \min_{\delta\eta \in \Gamma} [\|\delta\Phi_{n-1} - D_{n-1} \delta\eta\|^2 + \mu^2 ((1 - \alpha) \|\delta\eta\|^2 + \alpha \|S \delta\eta\|^2)] \quad (2.17)$$

La fonctionnelle régularisante $(1 - \alpha) \|\delta\eta\|^2 + \alpha \|S \delta\eta\|^2$ s'écrit donc comme la somme d'un terme d'ordre zéro pondéré par le coefficient $1 - \alpha$ et d'un terme d'ordre deux qui est pondéré par le coefficient α avec : $0 \leq \alpha \leq 1$. Nous avons testé numériquement plusieurs valeurs de ce coefficient et nous avons choisi la valeur optimale $\alpha = 0.95$ pour laquelle nous avons obtenu des résultats concluants.

D'un point de vue physique, cela signifie que nous cherchons au problème inverse, une solution régulière et pas trop écartée du plan moyen de référence $z = 0$. En effet, l'opérateur identité I favorise la recherche d'une solution qui ne s'éloigne pas trop du plan moyen de référence $z = 0$. Tandis que l'opérateur dérivée seconde S ajoute une condition supplémentaire en choisissant parmi ces solutions possibles celles qui présentent des profils réguliers.

Au choix de la régularisation, s'ajoute celui de la valeur du paramètre de Tikhonov dont l'importance est fondamentale. En effet, une trop faible valeur de ce paramètre fait ressurgir le caractère instable du problème inverse conduisant par conséquent à des solutions non physiques. Si par contre, nous forçons trop sur la valeur de ce paramètre alors la méthode perd de la sensibilité par rapport aux données du problème. Dans ce cas, nous obtenons très peu de résolution sur les profils reconstruits. Pour comprendre l'importance de la valeur du paramètre de régularisation, nous nous plaçons dans le cas simple d'une régularisation d'ordre zéro. Dans ce contexte, l'expression (2.12) de la correction sur le profil se réécrit sous la forme suivante :

$$\tilde{\delta\eta} = [D^\dagger D + \mu^2 I]^{-1} (D^\dagger \delta\Phi + \iota) = \sum_{i=1}^n \frac{\langle \mathbf{v}_i | D^\dagger \delta\Phi + \iota \rangle \mathbf{v}_i}{e_i + \mu^2}. \quad (2.18)$$

Si nous revenons au cas trivial où le bruit ι est entièrement représenté dans l'espace du vecteur propre \mathbf{v}_n qui a la plus petite valeur propre e_n . Nous supposons aussi le terme des données pures $D^\dagger \delta\Phi$ entièrement représenté dans l'espace formé par le vecteur propre \mathbf{v}_1 qui correspond à la plus forte valeur propre e_1 . Dans ce contexte, il suffit de choisir une valeur pour le paramètre de régularisation μ^2 qui satisfait les inégalités $e_1 \gg \mu^2 \gg e_n$ et $\mu^2 \gg |\iota|$. Cette valeur attribuée au paramètre de régularisation est optimale car elle supprime la totalité du bruit et garde en même temps le signal intact dans son intégralité, en effet dans ce cas nous avons :

$$\begin{cases} \delta\eta = \frac{\langle \mathbf{v}_1 | D^\dagger \delta\Phi \rangle_{\mathbf{v}_1}}{e_1 + \mu^2} \simeq \frac{\langle \mathbf{v}_1 | D^\dagger \delta\Phi \rangle_{\mathbf{v}_1}}{e_1} \\ \delta\eta_\iota = \frac{\langle \mathbf{v}_n | \iota \rangle_{\mathbf{v}_n}}{e_n + \mu^2} \simeq 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

En pratique, le bruit se chevauche aux données pures du champ sur l'intégralité du spectre des valeurs propres de l'opérateur $D^\dagger D$ [58, 59]. De la même façon, les données pures se retrouvent réparties sur l'ensemble du spectre de cet opérateur. Par conséquent, cela rend plus délicate la recherche de la valeur optimale pour le paramètre de régularisation μ^2 . Dans notre cas nous avons opté pour un choix manuel de la valeur de ce paramètre.

2.5.5 Dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction

L'opérateur de Fréchet D s'exprime différemment suivant la situation physique que nous abordons. En effet, cela dépend de la polarisation du champ, de la géométrie de la surface et de la nature diélectrique du milieu étudié. Nous donnons ici quelques unes des expressions mathématiques que prend cet opérateur [60]. Cela dit nous y reviendrons à l'annexe A qui est dédiée à la démonstration détaillée du calcul de cet opérateur dans un contexte plus général qui s'applique aussi bien à la profilométrie qu'à la reconstruction de la permittivité d'un objet. Pour des surfaces unidimensionnelles, infiniment conductrices, nous avons.

$$\begin{cases} \delta\Phi(\theta_m, \theta_l) = - \int_{\Gamma} \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_l) \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi) \delta\eta(x) d\Gamma & \text{TE} \\ \delta\Phi(\theta_m, \theta_l) = - \int_{\Gamma} [k^2 \psi(x, \eta(x); \theta_l) \psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi) - \partial_t \psi(x, \eta(x); \theta_l) \partial_t \psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi)] \delta\eta(x) d\Gamma & \text{TM} \end{cases} \quad (2.20)$$

Dans le cas des surfaces unidimensionnelles de conductivité finie, nous obtenons.

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta\Phi(\theta_m, \theta_l) = \int_{\Gamma} k^2 \chi \psi(x, \eta(x); \theta_l) \psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi) \delta\eta(x) d\Gamma \quad \text{TE} \\ \delta\Phi(\theta_m, \theta_l) = \int_{\Gamma} [\chi \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_l) \partial_n \psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi) + (\frac{\chi}{1+\chi}) \partial_t \psi(x, \eta(x); \theta_l) \partial_t \psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi)] \delta\eta(x) d\Gamma \quad \text{TM} \end{array} \right. \quad (2.21)$$

Dans ces deux dernières expressions $\partial_t \psi(x, \eta(x)) = \mathbf{t} \cdot \nabla \psi(x, z)|_{z=\eta(x)}$ représente la dérivée tangentielle du champ total sur la surface (Γ), et \mathbf{t} un vecteur unitaire tangent à (Γ). $\psi(x, \eta(x); \theta_l)$ et $\psi(x, \eta(x); \theta_m + \pi)$ représentent les champs totaux calculés sur la surface, respectivement pour les angles d'incidence θ_l et $\theta_m + \pi$, de même pour les dérivées normales et tangentielles du champ total sur la surface. Notons enfin que $\delta\Phi(\theta_m, \theta_l)$ représente la variation de l'amplitude diffracté dans la direction θ_m lorsque nous éclairons la surface sous l'angle d'incidence θ_l .

2.5.6 La méthode du gradient modifié comme une solution alternative au problème de la reconstruction d'une surface

La méthode du gradient modifié a été développée initialement [50] pour étudier le problème inverse de la reconstruction d'un contraste inhomogène d'objet cylindrique, à partir de la mesure sur le champ diffracté en amplitude et en phase. Dans ce contexte, nous cherchons à minimiser la fonctionnelle coût en faisant évoluer le champ total dans l'objet et le contraste indépendamment l'un de l'autre. Le minimum trouvé pour cette fonctionnelle correspondrait dans ce cas aux meilleures estimations obtenues sur le contraste et le champ dans l'objet. L'idée que nous proposons consiste à adapter cette méthode à la résolution du problème inverse de la reconstruction d'un profil surfacique à partir de la mesure en champ lointain. Cette démarche consiste à calculer à chaque étape du processus itératif une nouvelle estimation sur le profil plus une autre sur le courant de surface, lesquelles sont données en fonction des estimations obtenues à l'itération précédente :

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta_n = \eta_{n-1} + \alpha_n d_{\eta,n} \\ J_n^l = J_{n-1}^l + \beta_n^l d_{J,n}^l, \end{array} \right. \quad (2.22)$$

où $(d_{\eta,n}, d_{J,n}^l)$ sont respectivement les directions de descentes sur le profil et le courant de surface calculées à l'itération n , l'indice l se référant à l'angle d'incidence θ_l . Ces directions sont évaluées à chaque itération dans le sens qui fait décroître au maximum la fonctionnelle coût globale ξ . Par exemple, dans le cas particulier d'une surface parfaitement conductrice que nous éclairons en polarisation TE sous plusieurs angles d'incidence

$l = 1, \dots, L$, cette fonctionnelle coût s'écrit sous la forme :

$$\xi = \frac{\sum_{l=1}^L \|\psi_{\text{inc}}^l - G_{\eta} J^l\|^2}{\sum_{l=1}^L \|\psi_{\text{inc}}^l\|^2} + \frac{\sum_{l=1}^L \|\Phi_{\text{mes}}^l - K_{\eta} J^l\|^2}{\sum_{l=1}^L \|\Phi_{\text{mes}}^l\|^2} \quad (2.23)$$

Les termes $(\psi_{\text{inc}}^l - G_{\eta} J^l = \rho_e^l)$, $(\Phi_{\text{mes}}^l - K_{\eta} J^l = \rho_d^l)$ représentent les erreurs résiduelles des équations d'état et d'observation du problème direct, exprimées sous leur forme compacte. Les directions de descentes $d_{\eta,n}$ et $d_{J,n}^l$ sont choisies du type Polak-Ribière [61], leurs expressions sont données sous la forme :

$$\begin{cases} d_{\eta,n} = g_{\eta,n} + \frac{\langle g_{\eta,n} | g_{\eta,n} - g_{\eta,n-1} \rangle}{\|g_{\eta,n-1}\|^2} d_{\eta,n-1} \\ d_{J,n}^l = g_{J,n}^l + \frac{\sum_{l'=1}^L \langle g_{J,n}^{l'} | g_{J,n}^{l'} - g_{J,n-1}^{l'} \rangle}{\sum_{l'=1}^L \|g_{J,n-1}^{l'}\|^2} d_{J,n-1}^{l'} \end{cases} \quad (2.24)$$

Les gradients $(g_{\eta,n}, g_{J,n}^l)$ représentent les solutions minimisant les dérivées directionnelles de la fonctionnelle coût ξ . Quant aux facteurs d'échelle α_n et β_n^l , ils sont calculés de telle manière à minimiser la fonction $\xi(\alpha, \beta^l)$.

2.6 Conclusion

Ce chapitre a été l'occasion de présenter les différentes méthodes inverses pour la reconstruction d'une surface à partir de l'amplitude complexe diffractée. Une comparaison avec le problème inverse de la recherche d'un contraste d'objet a fait apparaître une difficulté supplémentaire spécifique à la profilométrie. En effet, nous avons constaté l'existence d'une forte non linéarité dans la relation directe qui exprime le champ diffracté en fonction du profil. Pour reconstruire un profil à partir du champ diffracté, nous avons décrit plusieurs méthodes d'inversion, en particulier l'aspect mal posé de ce problème a été décrit dans le cadre de la méthode de Newton-Kantorovitch. Par suite, cette difficulté a été résolue grâce à l'introduction d'une information connue a priori sur la surface recherché, à travers la régularisation de Tikhonov. Pour finir, nous avons également discuté du rôle important joué par la valeur attribuée au paramètre de Tikhonov, sur la sensibilité du processus d'inversion par rapport au bruit qui entachent les données du champ diffracté.

Chapitre 3

Étude numérique et résultats expérimentaux

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation des résultats numériques obtenus sur l'étude inverse de la diffraction par des surfaces diélectriques ou parfaitement conductrices qui possèdent un axe spatial d'invariance. Ces derniers ont été obtenus en exploitant un code numérique d'inversion que nous avons implémenté et qui est fondé sur la méthode de Newton-Kantorovitch décrite au second chapitre. Dans ce contexte, nous montrerons des exemples de reconstructions de surfaces diélectriques ou parfaitement conductrices. En particulier, nous présenterons des résultats marquants où nous démontrerons numériquement qu'il est possible d'accéder à des résolutions latérales du profil qui vont au delà du critère d'Abbe-Rayleigh. Pour finir, la méthode sera validée par un résultat obtenu en inversant des données expérimentales.

3.2 Critère de Rayleigh-Abbe des méthodes inverses approchées

La surface (Γ) que nous représentons par son profil $z = \eta(x)$ peut se décomposer en une somme continue de fonctions périodiques :

$$\eta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{S_r} \tilde{\eta}(\zeta) e^{i\zeta x} d\zeta. \quad (3.1)$$

Dans l'équation Eq (3.1) $\tilde{\eta}$ représente le spectre du profil et S_r son support, c'est-à-dire le domaine des fréquences spatiales ζ pour lesquelles cette fonction est non nulle. Lorsque nous nous plaçons dans le cadre de certains modèles approchés de diffraction, nous pouvons sous certaines conditions relier directement une fréquence spatiale ζ du profil aux vecteurs d'ondes des champs incident et diffracté.

La méthode des petites perturbations (SPM) fait partie de ces modèles [62]. Dans ce cas nous considérons que le champ diffracté est diffusé simplement par la surface, c'est-à-dire que chaque point que nous éclairons va diffracter un champ sans interagir avec tout les autres points qui constituent la surface. De plus, nous supposons que les hauteurs du profil sont très faibles devant la longueur d'onde du champ incident. Ce qui permet d'écrire l'amplitude diffractée comme un développement limité de Taylor-Volterra par rapport à η . Nous nous intéressons au cas particulier d'une surface parfaitement conductrice que nous éclairons par un champ incident polarisé TE et de vecteur d'onde $\mathbf{k}_i = k_{ix} \mathbf{x} + k_{iz} \mathbf{z}$. L'amplitude diffractée dans la direction du vecteur d'onde $\mathbf{k} = k_x \mathbf{x} + k_z \mathbf{z}$ s'exprime à l'ordre un du développement perturbatif :

$$\Phi(k_x, k_{ix}) = 2 \frac{k_z k_{iz}}{k_z - k_{iz}} \delta(k_x - k_{ix}) - 2i k_z k_{iz} \tilde{\eta}(k_x - k_{ix}) + \dots, \quad (3.2)$$

où le terme d'ordre zéro qui est proportionnel à la distribution de Dirac $\delta(k_x - k_{ix})$ représente la contribution au champ diffracté par la réflexion spéculaire du plan moyen de référence. Le terme d'ordre un du développement est quant à lui proportionnel au spectre du profil évalué pour la fréquence spatiale :

$$k_x - k_{ix} = \zeta. \quad (3.3)$$

Nous constatons d'après la relation Eq (3.2) limitée à l'ordre un qu'il est possible de reconstruire le profil de la surface en calculant la transformée de Fourier de l'amplitude complexe diffractée. Dans le cadre de l'approximation de la diffusion simple, les fréquences spatiales de la surface sont directement reliées d'après l'égalité Eq (3.3) à la différence des composantes parallèles au plan moyen du profil des vecteurs d'ondes diffracté et incident. Cette relation est une conséquence de l'hypothèse sur la diffusion simple. En particulier, la plus haute fréquence spatiale accessible d'après la relation Eq (3.3) dépend directement de l'angle maximal d'illumination et de collection du champ. De plus, cette fréquence spatiale limite détermine la taille des plus petits détails de la surface qui sont visibles par un système d'imagerie. Ce résultat que nous constatons dans le cadre de la méthode des petites perturbations reste valable pour l'approximation de Kirchhoff-Fraunhofer que nous avons décrite au second chapitre. En effet, ces deux méthodes considèrent que la nature de l'interaction du champ incident avec la surface est une diffusion simple.

Dans ce régime de diffusion, nous pouvons donc prédire une limite de résolution latérale. En effet, nous pouvons à l'aide de la relation Eq (3.3) connaître au préalable quelles fréquences spatiales du profil sont accessibles à la mesure. Pour ce faire, nous faisons varier les angles incident et diffracté indépendamment l'un de l'autre sur

le domaine angulaire $[-\theta_{\max}; +\theta_{\max}]$ d'ouverture numérique $\text{NA} = \sin(\theta_{\max})$. Nous trouvons d'après la relation (3.3) que les fréquences spatiales du profil qui sont accessibles appartiennent au domaine $\zeta \in [-\zeta_{\max}; +\zeta_{\max}]$ où $\zeta_{\max} = 2k\text{NA}$ et k le module du vecteur d'onde du milieu incident. Dans ce cas, le critère de résolution maximale d'Abbe-Rayleigh qui est directement lié à la plus haute fréquence spatiale accessible est donné par son expression $\text{Cr} = \pi/\zeta_{\max} = \frac{\lambda}{4\text{NA}}$. Ce dernier correspond à la plus petite distance entre deux points de la surface pouvant être séparés par le système d'imagerie. Dans la suite nous désignerons par basses fréquences spatiales du profil toutes les valeurs qui appartiennent au domaine $\zeta \in [-\zeta_{\max}; +\zeta_{\max}]$, lesquelles représentent les composantes propagatives du champ lointain que nous mesurons dans le domaine angulaire défini par l'ouverture numérique du microscope. Nous appellerons hautes fréquences spatiales celles qui sont hors de ce domaine, plus celles dont la partie imaginaire est non nulle. Ces fréquences correspondent respectivement aux ondes propagatives qui sont hors du domaine fréquentiel défini par l'ouverture numérique NA , ainsi qu'aux ondes évanescentes localisées au niveau du profil. Toutes ces hautes fréquences spatiales ne peuvent pas être reconstruites si nous considérons l'approximation de la diffusion simple dans l'interaction du champ incident avec la surface.

3.3 Méthode itérative de Newton-Kantorovitch

Au premier chapitre, nous avons constaté l'apparition des diffusions multiples lorsque la surface présente une forte rugosité. Dans ce cas, toutes les fréquences spatiales de la surface ne peuvent pas être reconstruites par la relation Eq (3.3). C'est dans ce contexte que nous introduisons la méthode itérative de Newton-Kantorovitch où nous évaluons à chaque étape une nouvelle correction sur le profil sans tenir compte de l'approximation sur la diffusion simple, ni d'aucune autre. Cette correction est obtenue par la résolution au sens des moindres carrés d'un problème linéarisé. Ce dernier fait intervenir l'opérateur de Fréchet qui permet d'associer à toute variation sur le profil une variation de l'amplitude diffractée. L'évaluation de l'opérateur de Fréchet à chaque étape de la reconstruction se fonde sur un calcul rigoureux des composantes tangentielles des champs électrique et magnétique du profil estimé. Dans ce cas la surface que nous reconstruisons est discrétisée sur N points, avec N différent de N_r , qui représente le nombre de points que nous associons au profil exact pour générer les données synthétiques. Cela nous permet d'éviter les artefacts numériques qui seraient dus au crime inverse [57]. De plus, le processus de reconstruction de la surface est accompagné par l'estimation à chaque itération d'un critère de convergence. Dans ce contexte, nous introduisons comme critère la fonctionnelle coût qui évalue à chaque itération l'écart entre l'amplitude complexe mesurée et l'amplitude diffractée par le profil que nous estimons à la même itération. Son expression est donnée par :

$$FC(\eta_n) = \sqrt{\frac{\sum_{m,l} |\Phi_{\text{mes}}^{ml} - \Phi^{ml}(\eta_n)|^2}{\sum_{m,l} |\Phi_{\text{mes}}^{ml}|^2}}, \quad (3.4)$$

avec Φ_{mes} qui représente le champ diffracté par le profil exact et $\Phi(\eta_n)$ le champ diffracté par la surface que nous estimons à l'itération n .

3.4 Configuration étudiée

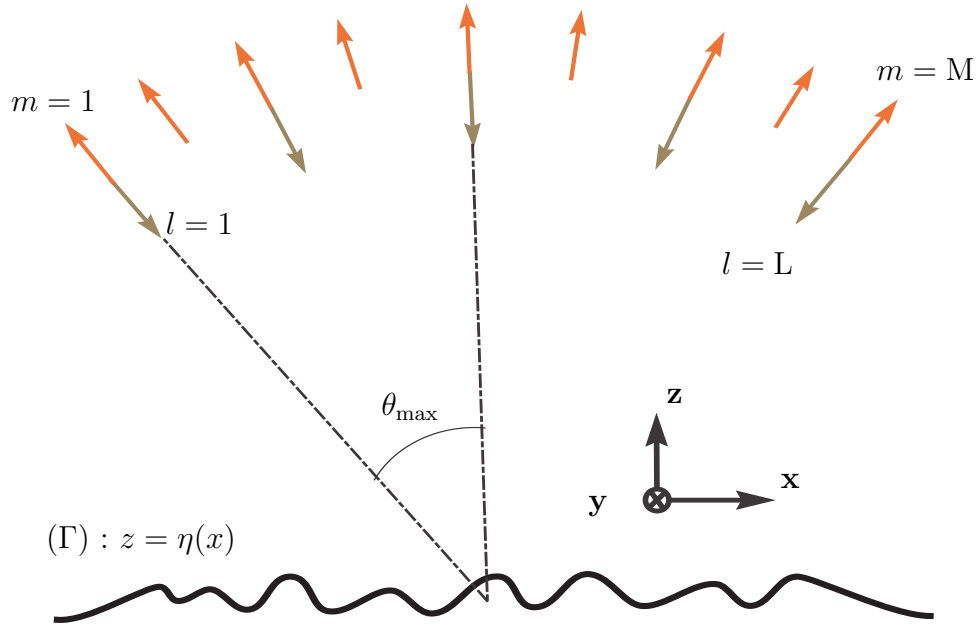


FIGURE 3.1 – Surface (Γ) représentée dans le plan d'incidence (o, x, z) . $L=11$: nombre d'incidences, $M=91$: nombre de points de mesures et $\theta_{\text{max}}=45^\circ$.

Dans toute l'étude numérique qui va suivre, nous éclairons la surface par un faisceau gaussien sous $L=11$ angles d'incidence répartis uniformément sur le domaine angulaire $[-45^\circ; +45^\circ]$ par pas de 9° degrés. Nous travaillons dans le régime du visible à une longueur d'onde de 633 nanomètres. La mesure du champ diffracté en amplitude et en phase se déroule sur le même intervalle d'angles $[-45^\circ; +45^\circ]$ que nous répartissons sur $M=91$ détecteurs par pas de 1° degré. Compte tenu des profils étudiés, ce nombre de détecteurs choisi est suffisamment élevé pour satisfaire au critère de Shannon, de plus ces données sont facilement accessibles par l'expérience. Cela nous permet de définir l'ouverture numérique du microscope pour l'illumination et la collection du champ et dont la valeur est donnée par $NA = \sin(45^\circ) = 0.71$. Dans ce cas, le critère d'Abbe-Rayleigh qui a pour expression $Cr = \frac{\lambda}{4NA}$ vaut 223 nanomètres. La configuration envisagée ici s'accorde avec les conditions expérimentales d'un

microscope optique tomographique fonctionnant en réflexion.

Les données que nous générons pour cette configuration peuvent être de nature synthétique ou expérimentale. Dans le premier cas, ces données sont générées à l'aide du modèle direct de diffraction que nous avons décrit au premier chapitre. Dans ce contexte, nous modélisons le champ diffracté sur les M détecteurs pour chaque éclairage sous l'angle d'incidence θ_l avec $l = 1, 2, \dots, L$ et la surface exacte est discrétisée sur N_r points.

3.5 Limite de validité du modèle approché de Kirchhoff-Fraunhofer

Dans le cadre de l'étude directe de la diffraction menée au premier chapitre, nous avons présenté les surfaces rugueuses à corrélation gaussienne. Nous rappelons que ces profils sont caractérisés par deux paramètres statistiques qui sont : la hauteur quadratique moyenne $hrms$ et la longueur de corrélation $lcor$. Ces deux paramètres décrivent les rugosités axiale et latérale du profil. Les surfaces considérées présentent différentes valeurs de longueur de corrélation et une hauteur quadratique moyenne fixée à $hrms = 60$ nanomètres. Ces exemples de profils ont été choisis car ils placent l'étude directe de la diffraction électromagnétique à la lisière du domaine de validité des méthodes approchées par rapport aux méthodes rigoureuses. En effet, nous avons constaté au premier chapitre que pour une longueur de corrélation $lcor = 0.5 \mu\text{m}$ les méthodes directes approchées simulent correctement le champ électromagnétique. Toutefois, lorsque nous diminuons la valeur de ce paramètre jusqu'à $lcor = 0.1 \mu\text{m}$, les résultats obtenus avec les méthodes approchées commencent à s'écarter de ceux obtenus par la modélisation rigoureuse. Cela est dû aux interactions multiples qui apparaissent lorsque la surface commence à présenter une forte rugosité. Dans la suite, nous allons comparer des résultats de reconstructions de surfaces obtenues par un modèle inverse approché basé sur la diffusion simple avec ceux que nous avons obtenus par une méthode itérative de reconstruction qui tient compte des interactions multiples.

Pour effectuer ces inversions, nous nous intéressons à deux algorithmes distincts pour la reconstruction d'une surface rugueuse à partir de données non bruitées sur le champ diffracté. Premièrement, nous avons un algorithme non itératif noté K-F qui est basé sur la méthode approchée de Kirchhoff-Fraunhofer décrite au second chapitre. Le second algorithme qui se note N-K est construit sur la méthode inverse de Newton-Kantorovitch. C'est un processus itératif de reconstruction de la surface où n'est considérée aucune hypothèse simplificatrice sur l'interaction électromagnétique du champ incident avec le profil.

Nous commençons par reconstruire des surfaces qui présentent des valeurs élevées de la longueur de corrélation

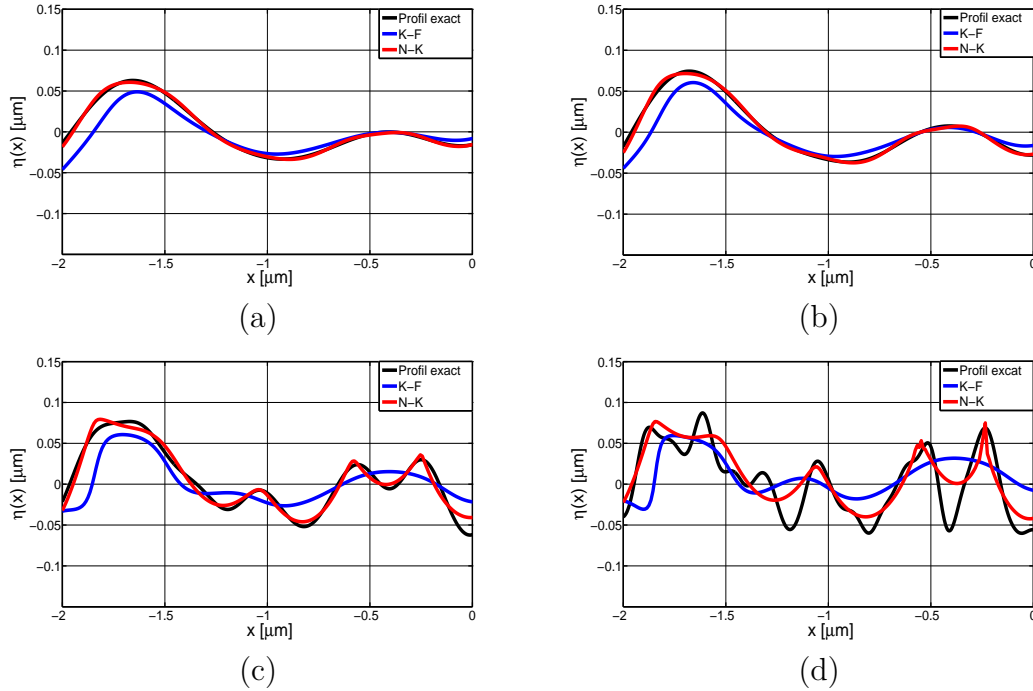


FIGURE 3.2 – Reconstruction de quatre profils exacts présentant la même hauteur quadratique moyenne $hrms=0.06 \mu\text{m}$ et différentes longueurs de corrélation. Dans ce cas nous comparons la méthode approchée de Kirchhoff-Fraunhofer (K-F) à la méthode itérative de Newton-Kantorovitch (N-K), le paramètre de régularisation est fixé à $(\mu^2 = 10^8)$: (a) $lcor=0.5 \mu\text{m}$, (b) $lcor=0.4 \mu\text{m}$, (c) $lcor=0.2 \mu\text{m}$ et (d) $lcor=0.1 \mu\text{m}$.

($lcor = 0.5 \mu\text{m}$, $lcor = 0.4 \mu\text{m}$). Ces profils ont pu être entièrement reconstruits Figs. 3.2(a,b) par les algorithmes K-F et N-K. Ce premier résultat montre que la reconstruction totale du profil a pu s'effectuer dans le cadre des approximations de Kirchhoff et Fraunhofer. Les surfaces que nous considérons ici diffusent simplement le champ de par leur faible rugosité. Dans ce cas l'ouverture numérique du microscope est suffisamment large pour nous permettre d'avoir accès à toutes les fréquences spatiales du profil exact à travers la relation Eq (3.3).

Nous considérons maintenant des surfaces à faible longueur de corrélation ($lcor = 0.2 \mu\text{m}$, $lcor = 0.1 \mu\text{m}$), les spectres associés à ces profils vont présenter des supports plus larges. Dans ce cas nous constatons sur les reconstructions obtenues par l'algorithme K-F Figs. 3.2(c,d) un filtrage des hautes fréquences spatiales de la surface exacte. De plus, comme nous pouvions nous y attendre, nous ne remarquons aucune amélioration sur la reconstruction de ces hautes fréquences spatiales lorsque nous augmentons la rugosité du profil exact. En effet, la résolution maximale accessible par cette méthode ne dépend que de l'ouverture numérique du microscope et non de la rugosité du profil.

En gardant le même jeu de données sur la mesure de l'amplitude complexe, nous remarquons que les reconstructions obtenues à l'aide de l'algorithme N-K montrent plus de détails sur les surfaces exactes Figs. 3.2(c,d). Cette technique d'inversion permet donc d'accéder aux hautes fréquences spatiales habituellement non accessibles lorsque seule la diffusion simple est considérée.

Au premier chapitre, nous avons constaté dans le cadre de l'étude directe de la diffraction par des surfaces l'apparition d'interactions multiples du champ. Ce phénomène se produit lorsque le profil présente des fréquences spatiales élevées. Dans ce cas, il se produit un couplage non linéaire des hautes fréquences spatiales du profil avec ses basses fréquences à travers les interactions multiples. Ce couplage a pour conséquence d'invalider la relation sur la diffusion simple Eq (3.3) et de permettre la présence d'informations sur les hautes fréquences spatiales de la surface dans le champ diffracté que nous mesurons au travers de l'ouverture numérique. La particularité de la méthode inverse de Newton-Kantorovitch vient de son aptitude à décrire au cours des itérations toutes les interactions électromagnétiques du champ incident avec le profil que nous estimons à chaque étape. Cela lui permet d'identifier distinctement dans le champ diffracté la contribution issue de la diffusion simple, du signal qui est dû aux diffusions multiples. Par conséquent la résolution latérale de cette méthode n'est plus limitée par le critère d'Abbe-Rayleigh. Nous pouvons estimer numériquement le maximum de résolution latérale accessible par cette méthode. Cependant, il est difficile d'estimer cette résolution pour des surfaces rugueuses quelconques, c'est pourquoi nous nous sommes restreints dans la suite à des profils présentant deux plots.

3.6 Estimation numérique de la résolution latérale obtenue par l'algorithme itératif de Newton-Kantorovitch

Nous cherchons à montrer numériquement qu'il est possible d'atteindre une super résolution latérale avec la méthode de Newton-Kantorovitch, c'est-à-dire une résolution qui va se situer sous le critère d'Abbe-Rayleigh. Dans ce contexte, nous nous intéressons à un profil qui est constitué de deux plots d'une largeur à mi-hauteur fixée à $w = 80$ nanomètres, d'une hauteur h et d'une inter-distance d variables Fig 3.3.

Nous considérons un premier échantillon dont la hauteur vaut $h = 140$ nanomètres et l'inter-distance $d = 200$ nanomètres. L'ouverture numérique du microscope au travers duquel s'effectue l'éclairement de la surface et la mesure du champ diffracté nous donne un critère d'Abbe-Rayleigh de 223 nanomètres. Une reconstruction de cette surface par l'algorithme de Newton-Kantorovitch conduit à une surface où les deux plots sont partiellement

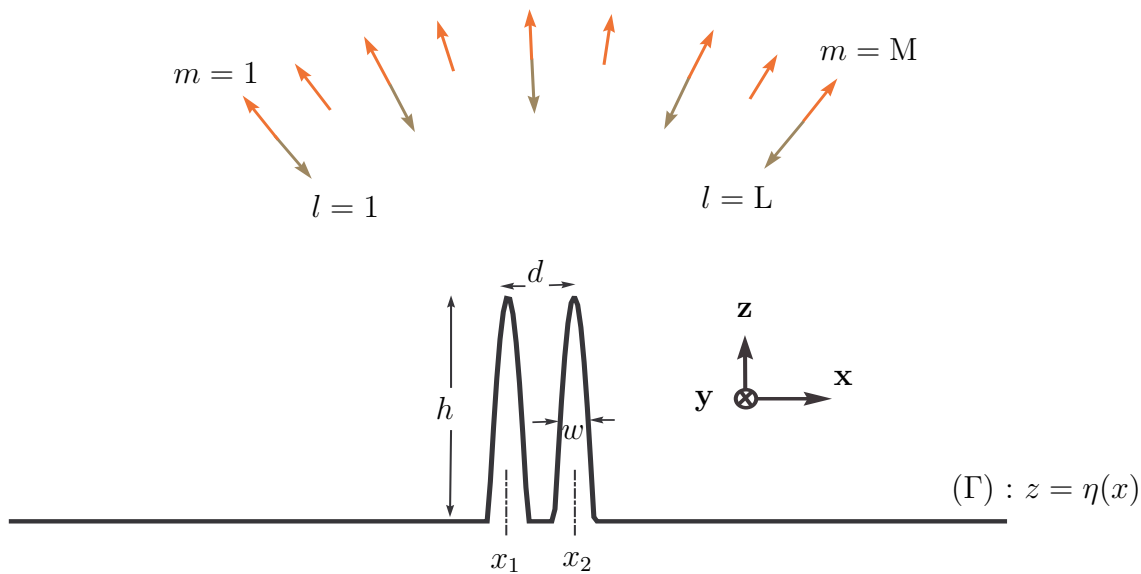


FIGURE 3.3 – Surface constituée de deux plots représentée dans le plan $(o, \mathbf{x}, \mathbf{z})$ normal à l'axe d'invariance (o, \mathbf{y}) . d : largeur entre les deux pics, h : hauteur des deux plots, w : largeur à mi-hauteur de chacun des plots. L : nombre d'incidences, M : nombre de points de mesures.

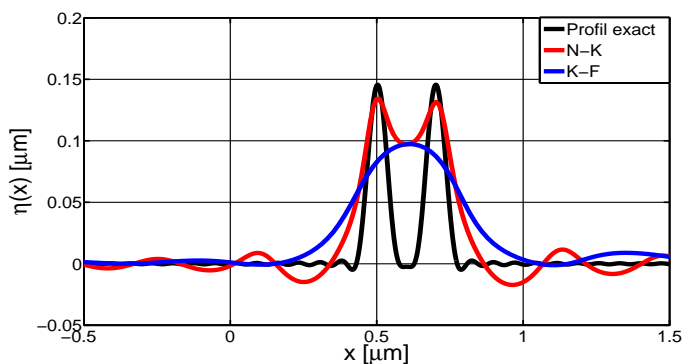


FIGURE 3.4 – Reconstruction des deux plots de paramètres géométriques : $h=140$ nm, $d=200$ nm, $w=80$ nm, par deux méthodes différentes : K-F : modèle approché de Kirchhoff-Fraunhofer, N-K : modèle de Newton-Kantorovitch ($\mu^2 = 10^7$).

séparés Fig 3.4. Nous obtenons également une très bonne estimation de la hauteur. Sur la même figure, nous constatons qu'une reconstruction du profil dans le cadre de l'approximation de Kirchhoff-Fraunhofer conduit à une surface qui est assez éloignée du profil exact. De plus, la hauteur h des plots est fortement sous estimée dans ce cas.

La performance atteinte par l'algorithme de Newton-Kantorovitch indique qu'il est possible d'atteindre une résolution latérale au delà du critère d'Abbe-Rayleigh. Cela illustre bien l'intérêt d'utiliser des techniques itératives qui reposent sur une description complète de l'interaction électromagnétique entre l'onde incidente et la surface. Toutefois, ce résultat concerne le cas spécifique d'une surface parfaitement conductrice que nous éclairons en polarisation TE. Maintenant nous cherchons à étudier le comportement de la résolution en fonction des paramètres géométriques de la surface comme la hauteur h ou l'inter-distance d . Notre intérêt se porte également sur la résolution latérale que nous sommes susceptibles d'atteindre lorsque nous étudions des exemples de surfaces diélectriques dans le domaine optique. L'étude de l'influence de la polarisation du champ incident sur les profils reconstruits représente un aspect important dans cette étude numérique. Nous discuterons notamment du rôle joué par les interactions multiples, leur niveau d'intensité et leur évolution avec la distance, sur la super résolution latérale que nous obtenons. Un dernier aspect qui est cette fois-ci intrinsèque au modèle d'inversion concerne l'influence de la valeur attribuée au paramètre de régularisation sur la sensibilité de la méthode d'inversion par rapport aux données du champ. En effet, au second chapitre nous avons discuté ce point sur un exemple théorique. Ici nous prenons le soins de l'illustrer par quelques exemples numériques.

3.6.1 Influence de la valeur accordée au paramètre de régularisation

Le choix de la valeur attribuée au paramètre de régularisation dans le processus de reconstruction de la surface est fondamental. En effet, si cette valeur est trop faible alors la méthode va être trop sensible au bruit qui est présent dans le signal et donnera des solutions non physiques Fig 3.5(a). Dans l'autre cas, si nous forçons trop sur la valeur de ce paramètre, alors la méthode devient insensible à la partie du signal qui est due aux interactions multiples du champ. En effet, le champ diffracté par ce type de profil est constitué d'une partie de forte amplitude qui est fournie par la diffusion simple et d'une autre partie moins intense issue des diffusions multiples.

Lorsque la régularisation commence par noyer le signal dû aux interactions multiples du champ électromagnétique, cela implique une diminution de la résolution sur les profils reconstruits Figs 3.5(c). Par conséquent, un choix

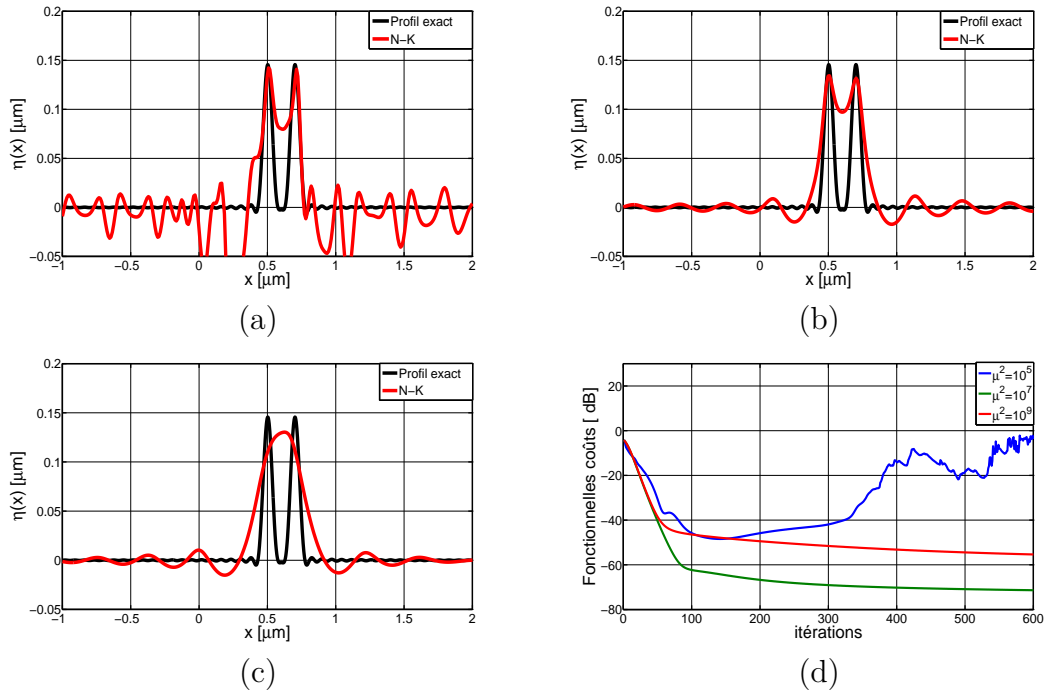


FIGURE 3.5 – Reconstruction en fonction de la valeur du paramètre de régularisation : (a) $\mu^2 = 10^5$, (b) $\mu^2 = 10^7$, (c) $\mu^2 = 10^9$ et (d) les fonctionnelles coûts associées.

optimal pour ce paramètre consiste à lui accorder une valeur qui soit suffisamment forte pour que le problème soit bien posé, tel que nous l'avons décrit au second chapitre. Cette valeur doit également être suffisamment faible pour que la méthode demeure sensible aux informations relatives aux hautes fréquences spatiales du profil Figs 3.5(c). L'étude de l'évolution de la fonction coût au cours des itérations en fonctions de la valeur du paramètre de régularisation montre qu'elle présente un minimum pour la valeur optimale de ce paramètre Figs 3.5(d).

Dans la pratique, nous sommes toujours confrontés à des données entachées d'un bruit de mesure, lequel conditionne la résolution pouvant être atteinte par le système d'imagerie. La valeur optimale du paramètre de régularisation que nous introduisons dans l'inversion s'ajuste dans ce cas selon la valeur du rapport signal sur bruit. Nous avons opté pour un choix manuel de la valeur de ce paramètre. Cette démarche outre sa simplicité s'avère être commode lorsque nous n'avons pas besoin de réajuster à chaque itération la valeur du paramètre de régularisation comme c'est le cas dans le problème que nous étudions.

3.6.2 Évolution de la reconstruction en fonction des paramètres géométriques de la surface

Nous cherchons ici à étudier l'évolution de la résolution obtenue sur les profils reconstruits lorsque nous augmentons la rugosité de la surface. En particulier, nous nous intéressons à la reconstruction du profil constitué de deux plots en fonction de leur hauteur h . L'exemple considéré ici est une surface parfaitement conductrice que nous éclairons en polarisation TE. Dans ce contexte, nous constatons que la séparation des plots devient plus nette avec l'augmentation de la hauteur Fig 3.6(a,b,c,d). Ce résultat s'explique par le fait que l'intensité des interactions multiples qui sont responsables de la résolution augmente avec la hauteur h des plots, comme nous pouvons d'ailleurs le constater sur l'amplitude des courants de surface associés aux quatre profils Fig 3.7. Par conséquent, durant le processus de reconstruction d'une surface qui présente des plots à forte hauteur, la méthode de Newton-Kantorovitch devient sensible aux diffusions multiples et les hautes fréquences spatiales sont mieux reconstruites.

Nous allons nous intéresser maintenant à l'étude de la résolution latérale en fonction de l'inter distance d qui existe entre les sommets des deux plots. Pour une distance légèrement supérieure au critère d'Abbe-Rayleigh nous avons une nette séparation des deux bosses Fig 3.8(a). Lorsque cette distance passe sous la valeur de ce critère de résolution, nous distinguons toujours les deux plots avec toutefois une moins bonne séparation Fig 3.8(b). Si maintenant nous diminuons encore d'avantage l'inter distance d alors nous constatons sur le profil reconstruit une bosse unique qui comprend une légère ondulation en son sommet Fig 3.8(c). Nous concluons que lorsque les deux plots deviennent très proches l'un de l'autre, les interactions multiples responsables de la super résolution deviennent moins importantes en contribuant faiblement au champ diffracté. Par conséquent, la réduction de l'intensité de ce signal dû aux diffusions multiples implique une perte de résolution sur les profils reconstruits.

3.7 Étude inverse de la diffraction sous la polarisation fondamentale TM

Jusque là, nous avons constaté que lorsque nous éclairons la surface par un champ incident polarisé TE, le choix du plan $z = 0$ comme première estimation du profil assure la convergence de l'algorithme vers la bonne reconstruction. En effet, sur le profil reconstruit nous constatons clairement une résolution latérale qui se place sous le critère d'Abbe-Rayleigh Fig (3.5) (b), ainsi qu'une fonctionnelle coût qui atteint son minimum Fig (3.5)

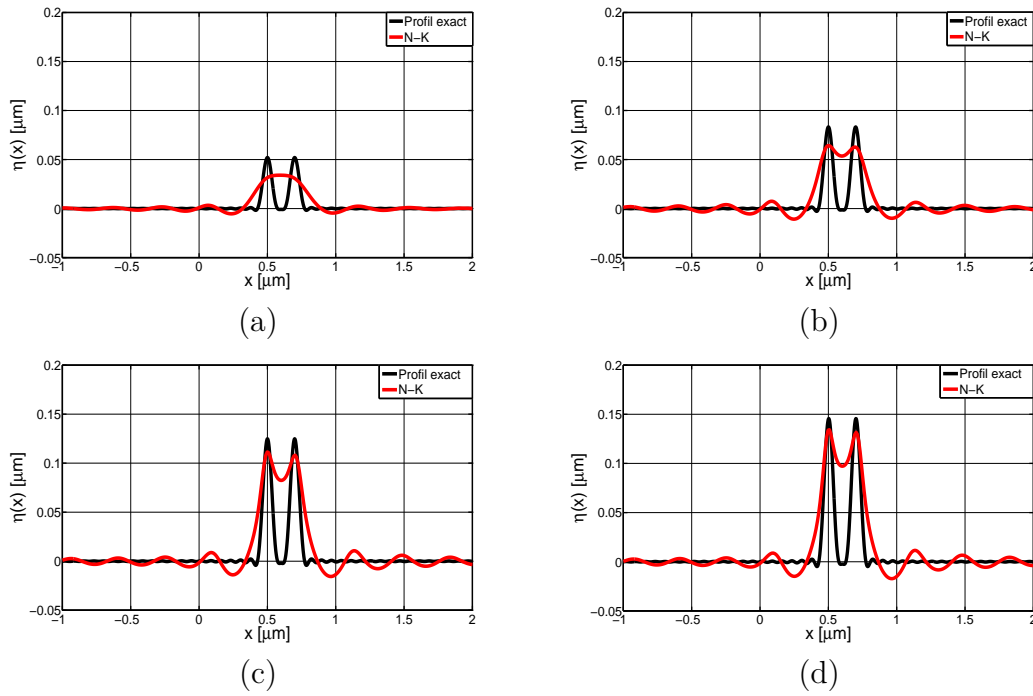


FIGURE 3.6 – Reconstruction en fonction de la hauteur des plots pour un paramètre de régularisation constant ($\mu^2 = 10^7$). (a) $h=50$ nm, (b) $h=80$ nm, (c) $h=120$ nm et (d) $h=140$ nm.

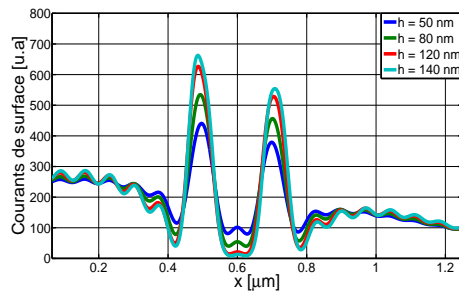


FIGURE 3.7 – Amplitudes des courants de surface correspondant aux différentes hauteurs des plots : $h=50$ nm, $h=80$ nm, $h=120$ nm et $h=140$ nm.

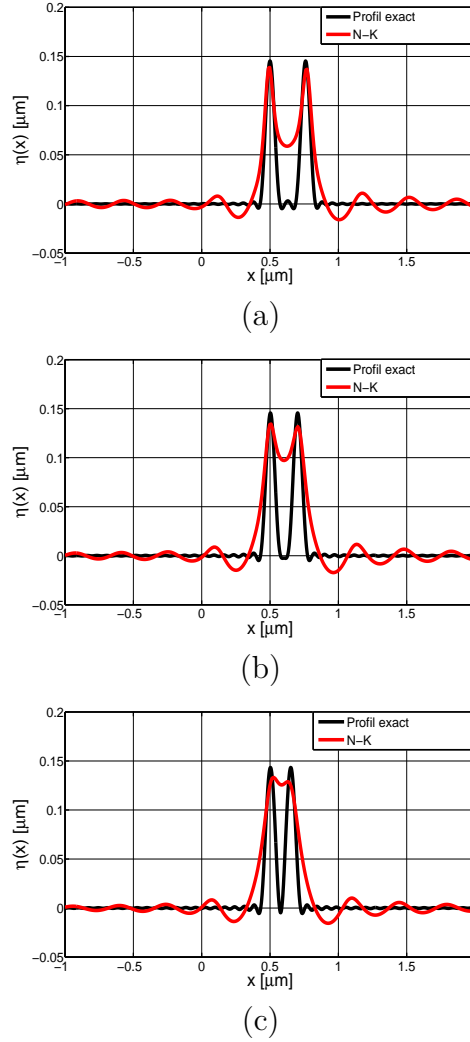


FIGURE 3.8 – Reconstruction en fonction de la distance d qui sépare les plots pour un paramètre de régularisation constant ($\mu^2 = 10^7$) : (a) $d=260$ nm, (b) $d=200$ nm, (c) $d=150$ nm.

(d). Tout au long de cette étude numérique, nous avons remarqué que le choix du plan $z = 0$ comme estimation de départ pour cette polarisation assure toujours la convergence du processus de reconstruction et ce quelque soit la géométrie ou la permittivité de la surface que nous étudions.

Maintenant nous cherchons à résoudre le problème inverse de la diffraction pour un éclairage de la surface en polarisation TM. Cela dit avant de mener l'étude de ce problème inverse, il est préférable de commencer par étudier par rapport au cas TE, la présence dans le champ diffracté d'informations sur les hautes fréquences spatiales de la surface.

3.7.1 Évolution du champ diffracté en fonction de la longueur d'interactions multiples

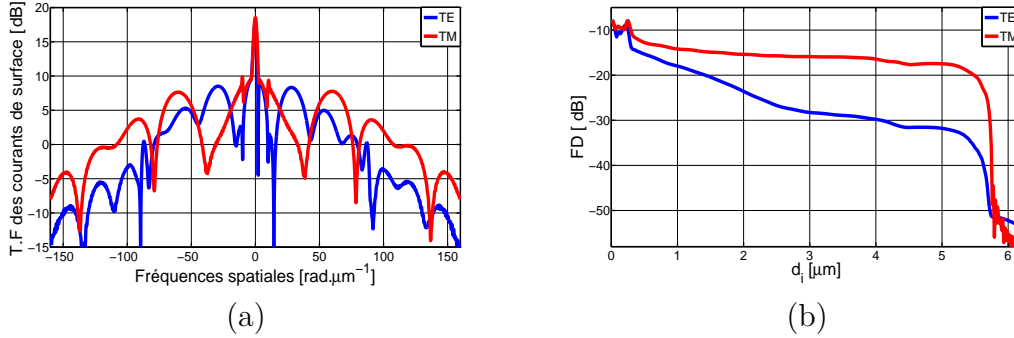


FIGURE 3.9 – (a) Module des transformées de Fourier des courants de surfaces pour les deux polarisations TE et TM. (b) évolution du paramètre différence de champ en fonction de la distance d'interaction d_i pour les deux polarisations.

Cette section porte sur une description détaillée des interactions multiples qui surviennent lorsque la surface présente une forte rugosité. Nous nous intéressons notamment à la manière dont s'effectue le couplage des hautes fréquences spatiales du profil avec ses basses fréquences lorsque nous changeons la polarisation du champ incident. Dans ce contexte, nous montrerons que la polarisation TM présente une exaltation de ce couplage.

Dans le cadre de l'étude directe de la diffraction, nous remarquons que le spectre de Fourier du courant superficiel induit en polarisation TM possède un support plus large que dans le cas de la polarisation TE Fig 3.9(a). Cependant, ce constat ne nous permet pas pour autant de prédire une meilleure résolution latérale dans l'étude inverse du problème de diffraction en polarisation TM. En effet, la mesure en champ lointain à travers l'ouverture numérique filtre dans les deux cas les hautes fréquences spatiales du courant de surface.

Un autre aspect consiste à regarder directement dans le champ diffracté la contribution des interactions multiples pour les deux polarisations fondamentales. Pour ce faire, nous commençons par introduire la distance d'interaction d_i que nous définissons comme la distance maximale d'interactions multiples entre deux points i et j de la surface $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j| \leq d_i$, les interactions qui se déroulent à plus longue distance ne sont pas prises en compte. Par conséquent, le champ diffracté s'écrit comme une fonction de ce paramètre et se note $\Phi(\theta_m; \theta_l; d_i)$, avec la limite $\Phi(\theta_m; \theta_l; d_i) \underset{d_i \rightarrow \infty}{=} \Phi(\theta_m; \theta_l)$ qui redonne le champ total obtenu lorsque nous tenons compte de toutes les interactions. Nous introduisons maintenant la fonction différence de champ qui estime pour chaque valeur de la distance d'interaction d_i l'écart normé entre $\Phi(m, l, d_i)$ et $\Phi(m, l)$, son expression est donnée par :

$$FD(d_i) = \sqrt{\frac{\sum_{m,l} |\Phi_{ml} - \Phi_{ml}(d_i)|^2}{\sum_{m,l} |\Phi_{ml}|^2}}. \quad (3.5)$$

Nous constatons dans l'évolution de FD en fonction de la distance d'interaction d_i que les diffusions multiples s'opèrent à plus longue distance en polarisation TM qu'en TE Fig 3.9(b). Certaines ondes de surface ne peuvent être excitées que par un champ incident polarisé TM [37]. Ces ondes s'expriment à travers le courant superficiel qui dans ce cas se délocalise au delà de l'empreinte du champ incident. Elles pourraient être une des causes de ce phénomène.

Jusque là, nous avons montré qu'en polarisation TM, les interactions multiples du champ sur la surface sont exaltées. De plus, nous savons que ces mêmes interactions sont responsables du couplage des hautes fréquences spatiales du profil avec ces ses basses fréquences. Cela dit, il reste à montrer de quelle façon se couplage s'opère lorsque nous changeons la polarisation du champ incident.

3.7.2 Évolution du champ diffracté en fonction de la largeur du support spectral de la surface

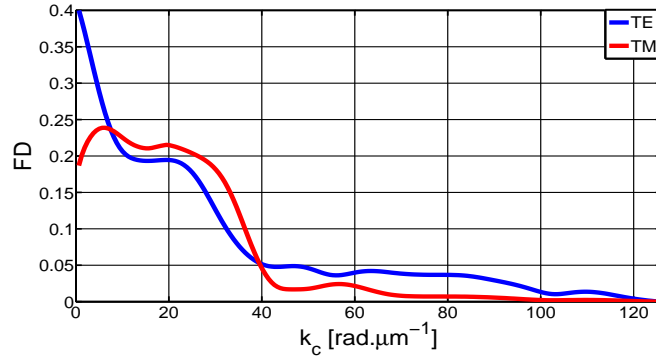


FIGURE 3.10 – Différence de champ normée en fonction de la fréquence de coupure k_c du profil par rapport à un profil de référence.

Nous nous intéressons maintenant à la façon dont les hautes fréquences spatiales du profil se couplent aux basses fréquences à travers les interactions multiples. Nous discuterons notamment de l'influence de la polarisation du champ incident sur ce couplage. Dans ce contexte, nous commençons par étudier l'évolution du champ diffracté en fonction de la fréquence de coupure k_c qui représente la largeur du support spectral du profil exact. Dans ce cas, l'amplitude du champ diffracté dans la direction m lorsque nous éclairons la surface

sous l'incidence l est également une fonction de k_c avec la limite : $\Phi(\theta_m; \theta_l; k_c) \underset{k_c \rightarrow k_{c_{max}}}{=} \Phi(\theta_m; \theta_l)$ où $k_{c_{max}}$ est la fréquence de coupure du profil exact de référence et $\Phi(\theta_m; \theta_l)$ l'amplitude diffractée par cette surface. Nous introduisons la différence de champ FD qui s'exprime dans ce cas comme une fonction de la fréquence de coupure k_c , son expression littérale est donnée par :

$$FD(k_c) = \sqrt{\frac{\sum_{m,l} |\Phi_{ml} - \Phi_{ml}(k_c)|^2}{\sum_{m,l} |\Phi_{ml}|^2}} \quad (3.6)$$

L'étude de l'évolution de la différence de champ en fonction de la fréquence de coupure montre que cette grandeur décroît dans le domaine des très basses fréquences en polarisation TE, alors qu'elle suit la tendance inverse en TM. Cette diminution constatée en polarisation TE signifie que lorsque nous soustrayons au champ total la contribution au signal des très basses fréquences spatiales de la surface, cela conduit à une décroissance de la valeur de FD . Dans ce cas, nous déduisons que le couplage non linéaire des hautes fréquences spatiales de la surface avec les basses fréquences devient négligeable lorsque nous nous approchons des très basses fréquences.

Dans le cas de la polarisation TM, l'augmentation de la valeur de FD dans le domaine des très basses fréquences est la signature même de l'existence d'un fort couplage des hautes fréquences spatiales du profil qui s'étend jusqu'au très basses fréquences, grâce aux interactions multiples. En effet, lorsque nous soustrayons au champ total la contribution au signal des très basses fréquences spatiales, nous négligeons dans ce cas le couplage des hautes fréquences spatiales avec ces dernières.

Nous nous intéressons maintenant aux conséquences de ce fort couplage constaté en polarisation TM sur les résolutions latérales pouvant être atteintes dans la résolution du problème inverse. La deuxième conséquence de ce couplage concerne la sensibilité de la méthode d'inversion à converger ou non par rapport au choix de l'estimation de départ sur le profil.

3.7.3 Reconstruction en polarisation TM d'un profil constitué de deux plots

Nous effectuons une étude de la reconstruction du profil pour plusieurs valeurs du paramètre de régularisation, en choisissant le plan comme première estimation Fig 3.11(b). Dans ce cas, l'algorithme de reconstruction converge vers des profils qui sont trop éloignés de la surface recherchée Fig 3.11(a). L'idée consiste à utiliser une autre estimation initiale qui devra présenter des caractéristiques géométriques proches de la surface exacte que nous recherchons.

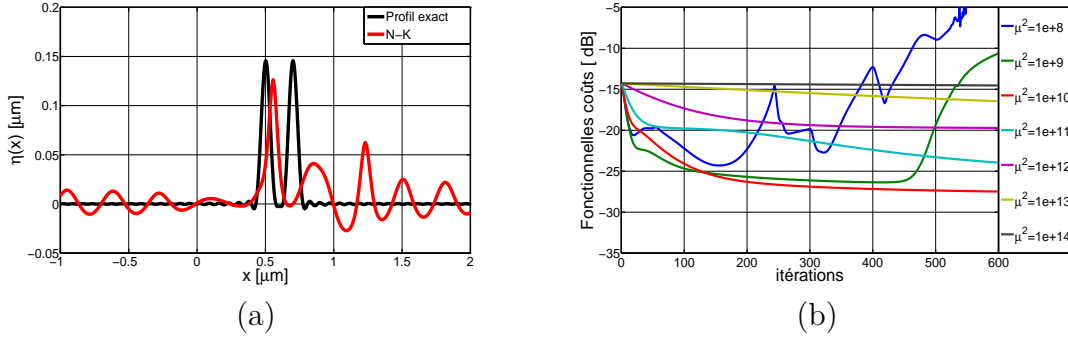


FIGURE 3.11 – (a) : Reconstruction avec un plan comme estimation de départ ($\mu^2 = 10^{10}$). (b) : évolutions des fonctionnelles coûts pour plusieurs valeurs du paramètre de régularisation pour des reconstructions en polarisation TM. $M=91$.

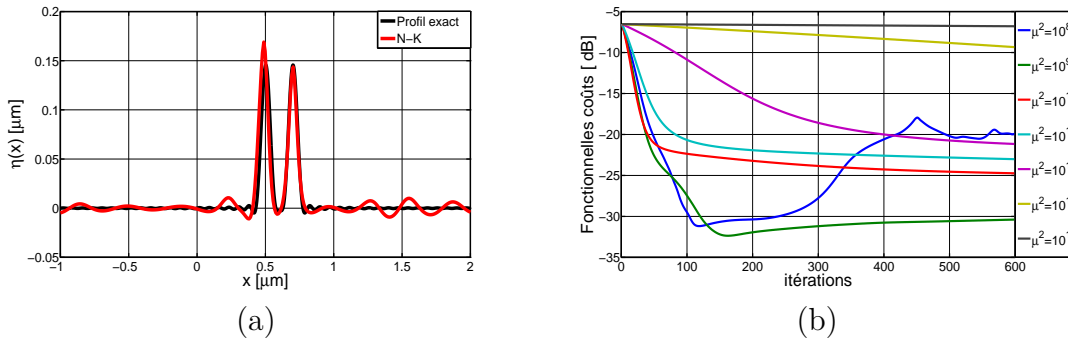


FIGURE 3.12 – (a) : Reconstruction en polarisation TM pour un paramètre de régularisation fixé ($\mu^2 = 10^9$). Nous avons utilisé comme estimation initiale du profil le résultat final d’une reconstruction en polarisation TE pour un paramètre de régularisation égal à ($\mu^2 = 10^9$); (b) : évolutions des fonctionnelles coûts pour plusieurs valeurs du paramètre de régularisation pour des reconstructions en polarisation TM.

Dans ce cas, nous commençons par effectuer une première reconstruction de la surface que nous sondons par un champ incident polarisé (TE). Nous considérons toujours le plan comme une estimation de départ ainsi qu’une valeur du paramètre de Tikhonov suffisamment élevée ($\mu^2 = 10^9$) pour que la surface reconstruite ne présente pas une super résolution latérale Fig 3.5(c). Nous avons choisi cette valeur du paramètre de régularisation car nous voulons que la première estimation du profil ne soit pas non plus trop proche du profil exacte. De plus, cette valeur sera réutilisée plus tard lorsque nous aborderons l’étude de la robustesse au bruit de l’algorithme d’inversion.

Par suite, la reconstruction obtenue va être utilisée comme une nouvelle estimation de départ pour une reconstruction où la surface est éclairée par un champ incident polarisé TM. Dans ce contexte, nous testons plusieurs valeurs de paramètre de régularisation Fig 3.12(b) et nous remarquons une convergence de l’algorithme vers une reconstruction quasi totale des plots Fig 3.12(a), dans ce cas nous avons choisi la valeur ($\mu^2 = 10^9$) de

paramètre de Tikhonov.

Nous remarquons qu'une inversion en polarisation TM permet d'améliorer la résolution latérale de manière significative, à condition de choisir la bonne estimation de départ sur le profil. Cette haute résolution que nous constatons est due à l'exaltation du couplage des hautes fréquences spatiales de la surface avec les basses fréquences, permettant ainsi la présence dans le champ diffracté lointain de plus d'informations sur les plus petits détails de la surface. Nous constatons également que la méthode ne converge pas lorsque nous utilisons un profil plan comme une estimation de départ. En effet, lorsque nous utilisons cette condition initiale nous reconstruisons premièrement les très basses fréquences sans tenir compte des diffusions multiples. Nous savons maintenant que cela n'est pas vrai pour la polarisation TM, contrairement au cas TE pour lequel le choix du profil plan assure bien la convergence de l'algorithme.

3.8 Reconstruction d'une surface rugueuse de grande taille.

En profilométrie optique, nous considérons deux configurations qui correspondent à deux types d'éclairagements distincts. La première que nous avons étudié jusque là consiste à focaliser le champ incident sur une partie de la surface où se situe la rugosité comme nous l'avons fait lorsque nous avons reconstruit le profil à deux plots. L'autre cas consiste à éclairer par un faisceau collimaté la surface sur plusieurs longueurs d'ondes de long. Dans ce cas, nous nous intéressons au problème de la reconstruction des surfaces rugueuses qui font plusieurs longueurs d'onde de long et ce pour un nombre de données sur le champ diffracté identique à celui exploité pour la reconstruction des plots. Pour ce faire, nous gardons la même approche que nous avons adoptée jusque là et qui consiste à utiliser des données générées sous les deux polarisations fondamentales. En effet, une première reconstruction du profil en polarisation TE où nous utilisons un plan comme une estimation de départ donne lieu à des solutions qui reconstruisent les basses et une légère partie des hautes fréquences spatiales de la surface exacte Figs 3.13(a,b). Par suite, nous effectuons une deuxième reconstruction où nous exploitons des données générées en polarisation TM. Dans ce cas, nous choisissons comme condition initiale le profil reconstruit en polarisation TE. Comme résultat numérique, nous obtenons une surface qui contient à la fois les basses fréquences et une bonne partie des hautes fréquences spatiales du profil exact Figs 3.14(a,b). Une comparaison avec le spectre du profil reconstruit en polarisation TM où nous avons choisi le profil plan comme estimation de départ Figs 3.15(a,b) montre bien les apports bénéfiques dûs à une utilisation complémentaire de données générées sous les deux polarisations fondamentales.

Cependant, pour de telles surfaces, le profil exact dans tous les cas de figure n'a pas pu être reconstruit dans sa totalité comme nous avons pu le faire pour les deux plots lorsque nous avons étudié le cas de la polarisation TM. En effet, dans le cadre de l'étude du problème inverse de la reconstruction d'une surface rugueuse de grande taille, nous sommes confrontés au problème de la détermination d'un très grand nombre d'inconnues pour un nombre de données sur le champ qui reste identique à celui que nous avons exploité pour la reconstruction du profil à deux plots. Cependant, nous constatons une bonne estimation des paramètres statistiques de la surface exacte par les profils reconstruits Figs 3.16(a,b,c).

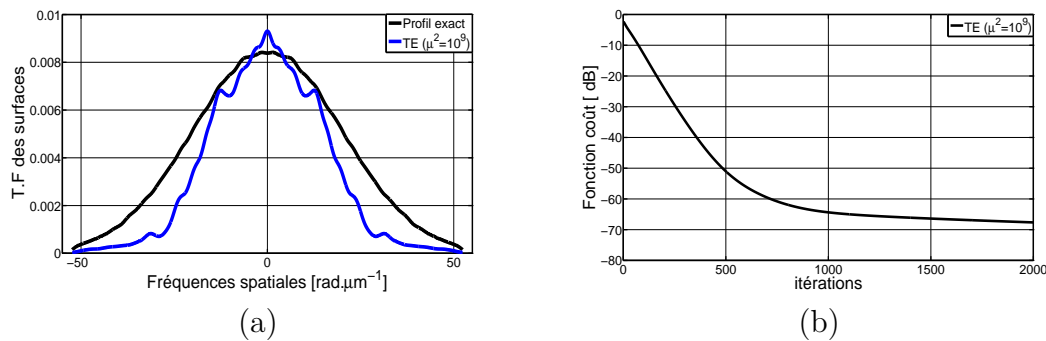


FIGURE 3.13 – Reconstruction d'une surface rugueuses à corrélation gaussienne ($l_{cor} = 0.1 \mu\text{m}$, $hrms = 0.06 \mu\text{m}$) d'une taille égale à $60 \mu\text{m}$, le paramètre de régularisation vaut ($\mu^2 = 10^9$). Les données sont générées par un éclairage en polarisation TE. (a) Comparaison entre le spectre du profil reconstruit et le spectre de la surface exacte; (b) Évolution de la fonctionnelle coût au cours des itérations.

3.9 Résistance au bruit.

Pour tester la résistance au bruit de l'algorithme de Newton-Kantorovitch, nous ajoutons aux données pures un bruit blanc, proportionnelle au maximum des parties réelle et imaginaire de l'amplitude complexe. Dans ce cas, nous considérons trois valeurs de rapport signal sur bruit (SNRs) : 15, 7 et 5. Sachant que le bruit qui entache les données expérimentales du champ correspond approximativement à un rapport de 10 de (SNRs), il apparaît que les reconstructions sont légèrement détériorées pour les deux premières valeurs du bruit Figs 3.17(a,b). La troisième valeur fausse complètement la solution finale Fig 3.17(c). Nous traçons également l'évolution des fonctions coûts associées à ces trois reconstructions Fig 3.17(d). Au vu de ces résultats, nous déduisons que cette méthode présente une robustesse suffisante pour obtenir une résolution identique sur des données expérimentales.

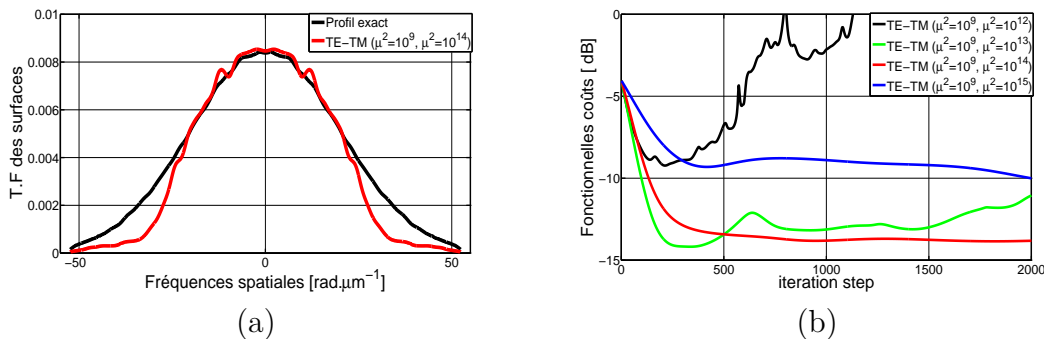


FIGURE 3.14 – Reconstruction en polarisation TM d’une surface rugueuses à corrélation gaussienne ($l_{cor} = 0.1 \mu\text{m}$, $hrms = 0.06 \mu\text{m}$) d’une taille égale à $60 \mu\text{m}$, pour un paramètre de régularisation fixé à ($\mu^2 = 10^{14}$). Nous avons choisi comme estimation initiale du profil la reconstruction finale obtenue en polarisation TE, ($\mu^2 = 10^9$). (a) comparaison entre le spectre du profil reconstruit et le spectre de la surface exacte; (b) évolution des fonctionnelles coûts au cours des itérations pour plusieurs valeurs du paramètre de régularisation en polarisation TM.

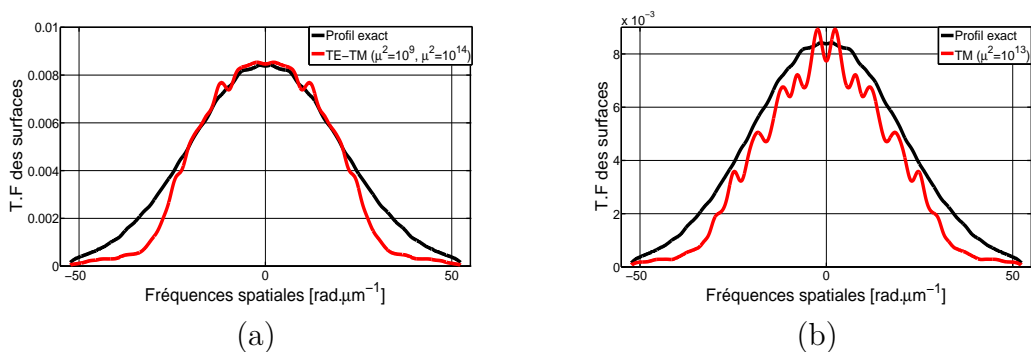
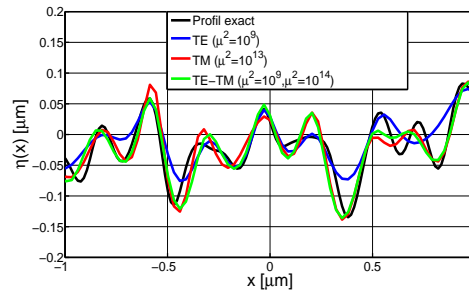
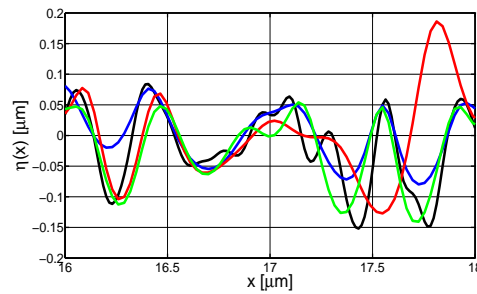


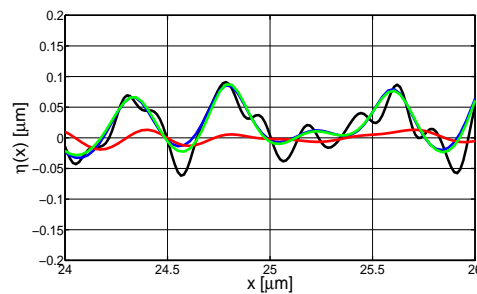
FIGURE 3.15 – Comparaison entre le spectre du profil reconstruit et le spectre du profil exact. (a) reconstruction en polarisation TM ($\mu^2 = 10^{14}$) avec comme estimation initiale, le résultat final d’une reconstruction en polarisation TE ($\mu^2 = 10^9$); (b) reconstruction en polarisation TM ($\mu^2 = 10^{13}$) avec un profil plan comme estimation de départ.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 3.16 – Comparaison de la surface exacte avec les profils reconstruits en : polarisation TE ($\mu^2 = 10^9$) avec un profil plan comme estimation initiale, polarisation TM ($\mu^2 = 10^{13}$) avec un profil plan comme estimation initiale et enfin en polarisation TM ($\mu^2 = 10^{14}$) avec comme estimée initiale le résultat final obtenu en polarisation TE ($\mu^2 = 10^9$). (a) partie centrale $x \in [-1 \mu m ; +1 \mu m]$; (b) partie intermédiaire $x \in [16 \mu m ; 18 \mu m]$ et le bord de la surface $x \in [24 \mu m ; 26 \mu m]$.

3.10 Reconstructions d'une surface métallique : Argent et Aluminium.

Jusque là, nous avons montré sur des reconstructions de surfaces parfaitement conductrices qu'il est possible d'atteindre des résolutions latérales sous le critère d'Abbe-Rayleigh. Nous allons montrer maintenant qu'il est possible de garder ces mêmes résolutions sur des reconstructions de surfaces métalliques de permittivité finie que nous supposons connue. Dans ce contexte, nous générons premièrement des données en éclairant une surface d'argent et une autre d'aluminium par un champ incident polarisé TE. Par suite, ces données sont inversées à l'aide de la méthode de Newton-Kantorovitch définie au chapitre deux dans le cas des surfaces diélectriques. Nous constatons alors une nette séparation des plots Figs 3.18 (a,b) qui illustre la super résolution latérale, nous représentons également l'évolution des fonctions coûts associées à ces deux processus de reconstruction Fig 3.18 (c).

Nous éclairons maintenant la surface d'aluminium en polarisation TM pour générer de nouvelles données synthétiques. Ensuite, nous utilisons le résultat final de la reconstruction que nous avons obtenu en polarisation TE comme première estimation du profil pour une reconstruction en polarisation TM. Nous trouvons dans ce cas un résultat similaire à celui que nous avons observé pour une surface parfaitement conductrice Fig 3.18 (d). Toutefois, le domaine de convergence de la fonction coût pour lequel nous obtenons une telle résolution est plus restreint en terme de valeurs accordées au paramètre de régularisation.

Dans les reconstructions que nous venons d'effectuer la permittivité de la surface est une donnée que nous intégrons au modèle d'inversion, de sorte à ce que seul le profil demeure l'inconnue du problème. Nous constatons dans ce cas que nous avons pu atteindre une résolution identique à celle obtenue sur des profils parfaitement conducteurs. Ce résultat est particulièrement intéressant car il ouvre des perspectives sur de nouvelles applications technologiques comme la profilométrie optique à haute résolution.

3.11 Validation expérimentale de la méthode de Newton-Kantorovitch

Tout au long de ce chapitre nous avons exploité le code itératif d'inversion sur des données synthétiques. Nous cherchons maintenant à le valider par des mesures expérimentales. Pour ce faire, nous considérons une surface d'InP constituée de deux sillons larges de 3 et 2 microns et profonds de 120 nanomètres. Nous éclairons cet échantillon par un champ incident en polarisation TE sous 11 angles d'incidences répartis sur l'intervalle

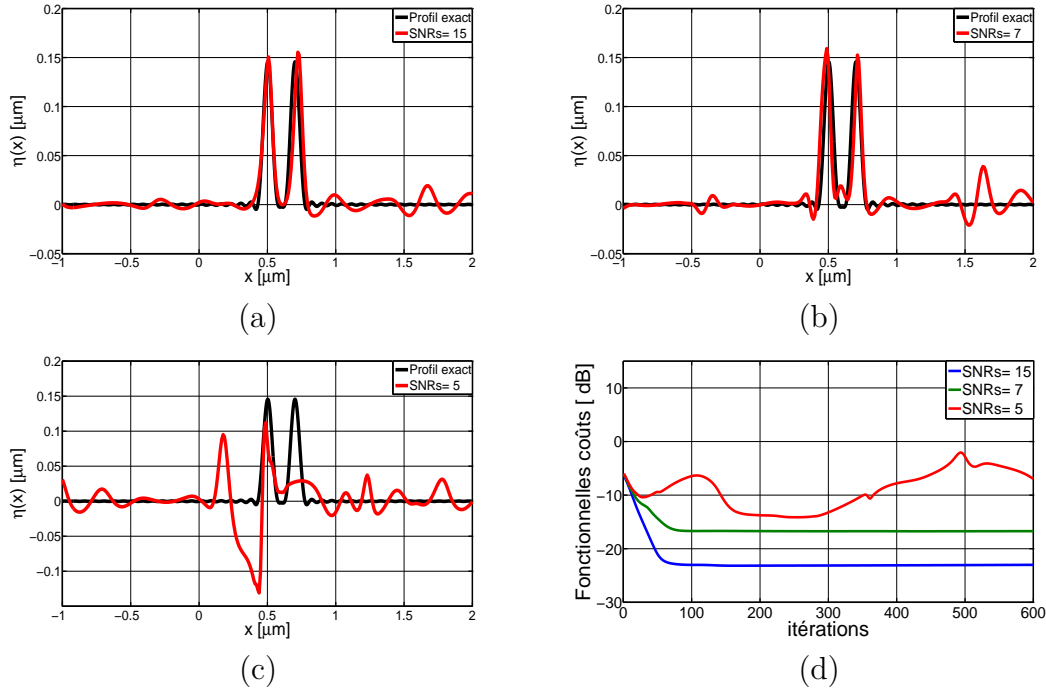


FIGURE 3.17 – Reconstruction du profil à deux plots en polarisations TM ($\mu^2 = 10^9$), nous avons utilisé comme estimation initiale le résultat d’une reconstruction en polarisation TE, ($\mu^2 = 10^9$). Nous testons différentes valeurs de rapport signal sur bruit : (a) SNRs= 15; (b) SNRs= 7; (c) SNRs= 5 et (d) Évolutions des fonctions coûts associées aux trois reconstructions.

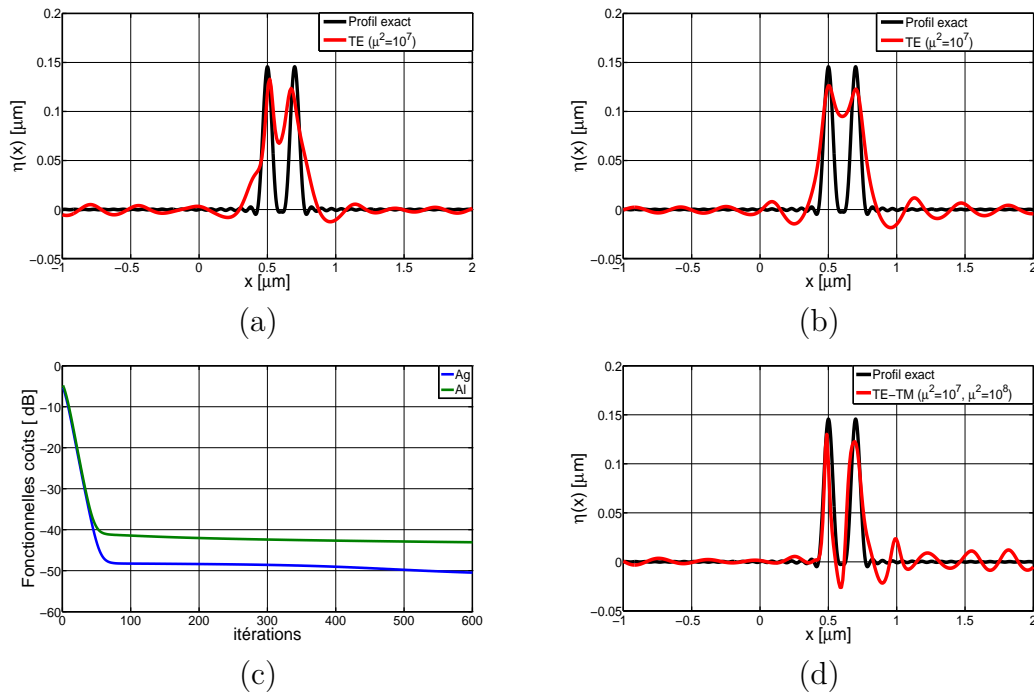


FIGURE 3.18 – Reconstruction des plots d’une surface métallique $d = 200 \text{ nm}$ et $h = 140 \text{ nm}$: (a) Surface d’argent ($n = 0.13+i*3.98$) et polarisation TE ($\mu^2 = 10^7$); (b) Surface d’aluminium ($n = 1.45+i*7.54$) et polarisation TE ($\mu^2 = 10^7$); (c) Fonctions coûts des reconstructions (a) et (b); (d) Surface d’aluminium ($n = 1.45+i*7.54$) et polarisation TM ($\mu^2 = 10^8$) avec la reconstruction (b) comme estimation de départ.

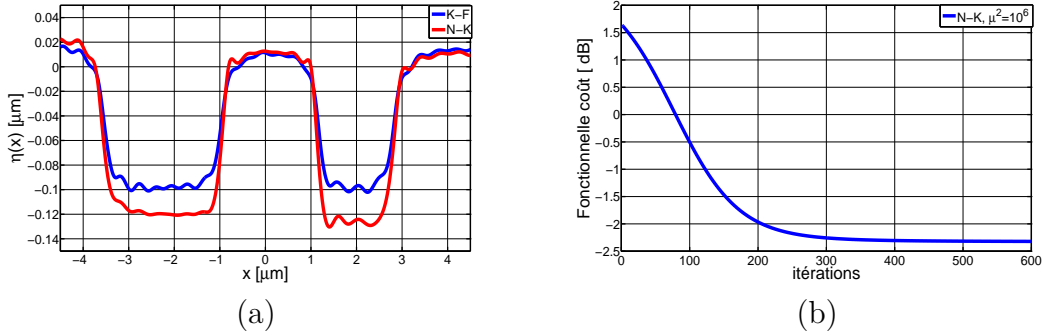


FIGURE 3.19 – Surface d’InP constituée de deux sillons. (a) Reconnstructions avec les méthodes de Kirchhoff Fraunhofer et de Newton Kantorovitch; (b) Évolution de la fonction coût de l’algorithme N-K ($\mu^2 = 10^6$).

$[-62^\circ; 62^\circ]$, la mesure du champ se déroule sur 85 points de mesures que nous avons répartis sur l’intervalle angulaire $[-70^\circ; 70^\circ]$. Dans ce cas, nous constatons que cette surface a pu être reconstruite par la méthode itérative de Newton-Kantorovitch, dans laquelle nous faisons l’hypothèse que le profil est parfaitement conducteur. Nous ajoutons une reconstruction sous l’approximation de Kirchhoff Fraunhofer Fig 3.19 (a,b). Les données sur le champ que nous avons exploité ici sont générées par la diffusion simple uniquement, c’est pourquoi la surface a pu être entièrement reconstruite par les deux méthodes. Nous sommes encore très loin des résolutions que nous avons obtenues dans la partie numérique sur les profils à deux plots. Toutefois, nous espérons que ce premier résultat ne représente qu’une étape préliminaire à une démonstration expérimentale de la super résolution latérale.

3.12 Conclusion

Ce chapitre a été l’occasion de montrer tout l’intérêt d’utiliser des méthodes d’inversion qui tiennent compte des interactions multiples dans le processus de reconstruction de la surface. Nous avons démontré numériquement sur les profils reconstruits des résolutions latérales qui se placent sous le critère d’Abbe-Rayleigh. Ensuite nous nous sommes intéressés à l’étude du comportement de cette résolution en fonction des paramètres géométriques de la surface ainsi que de sa permittivité. Un aspect important que nous avons montré dans cette étude numérique concerne l’influence de la polarisation du champ incident sur la résolution. Nous avons constaté qu’un éclairage en polarisation TM induit des interactions multiples de plus forte intensité qui vont venir exalter le couplage des hautes fréquences spatiales de la surface avec ses basses fréquences. Dans ce cas, nous avons pu améliorer la résolution latérale de manière significative pour des surfaces de conductivité finie et infinie. Pour finir, nous avons testé la robustesse au bruit de la méthode de Newton-Kantorovitch et obtenu des résultats concluants.

La méthode a également été validée par un premier résultat expérimental qui concerne la reconstruction d'une surface faiblement rugueuse. Nous espérons que ce travail puisse être poursuivi par une validation expérimentale de la super résolution latérale sur des profils métalliques.

Chapitre 4

Étude directe et inverse de la diffraction par des surfaces bidimensionnelles

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude directe rigoureuse et inverse itérative de l'interaction d'une onde électromagnétique incidente avec des surfaces bidimensionnelles qui ne possèdent aucun axe spatial d'invariance. L'interaction du champ incident avec le profil est décrite dans le cadre général du formalisme intégral de frontière vectoriel. Au premier chapitre nous avons pu réduire ce problème à une formulation scalaire en exploitant l'invariance des surfaces dans une direction de l'espace. L'étude du problème inverse se fera dans le cadre de la méthode de Newton-Kantorovitch qui sera généralisée aux surfaces bidimensionnelles [60]. Pour finir, nous présenterons quelques résultats numériques sur l'étude directe et inverse de la diffraction par une surface parfaitement conductrice à rugosité gaussienne. A notre connaissance, la littérature sur ce problème se restreint à l'approche publiée dans [63] et limitée aux surfaces à faibles pentes.

4.2 Étude directe de la diffraction

4.2.1 Formulation du problème. Équation de Helmholtz et conditions de passage

Le problème direct de la diffraction consiste à calculer le champ électromagnétique diffracté par la surface dans les domaines proche et lointain. Dans ce contexte, nous supposons connus le profil de la surface ainsi que sa permittivité. Nous faisons également l'hypothèse que nous avons une maîtrise parfaite du champ incident. La surface (Γ) que nous étudions est représentée dans l'espace ($o, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$) par la fonction profil à deux variables $z = \eta(x, y)$. De plus, nous supposons connue sur toute son étendue la valeur du champ incident. Nous nous intéressons tout particulièrement au cas de l'interaction du champ incident avec une surface parfaitement conductrice [38].

Le champ magnétique total $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{inc}} + \mathbf{H}_{\text{diff}}$ qui est la somme du champ incident et du champ diffracté

vérifie dans le milieu incident l'équation de Helmholtz scalaire. De plus, ce champ possède une divergence nulle, en effet nous avons :

$$\begin{cases} (\Delta_3 + k^2) \mathbf{H}(x, y, z) = \mathbf{0} \\ \nabla_3 \cdot \mathbf{H}(x, y, z) = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

Nous nous restreignons dans ce chapitre à l'étude des surfaces bidimensionnelles parfaitement conductrices. Dans ce cas la composante magnétique du champ total vérifie sur la surface les conditions de passage suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{n} \wedge \mathbf{H}(x, y, \eta(x, y)) = \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y)) \\ \mathbf{n} \wedge \mathbf{E}(x, y, \eta(x, y)) = \mathbf{0}. \end{cases} \quad (4.2)$$

Dans cette équation $\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{1+(\partial_x \eta)^2+(\partial_y \eta)^2}}(-\partial_x \eta \mathbf{x} - \partial_y \eta \mathbf{y} + \mathbf{z})$ est l'expression du vecteur unitaire normal à la surface et \mathbf{J} représente le courant superficiel induit par le champ incident.

4.2.2 La fonction de Green

L'équation de Helmholtz scalaire avec une distribution de Dirac comme terme source possède deux solutions élémentaires. Cela dit, une seule de ces fonctions vérifie la condition de radiation de Sommerfeld et représente par conséquent l'unique solution qui est physiquement acceptable. Cette dernière est donnée par son expression :

$$\begin{cases} (\Delta_3 + k^2) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \end{cases} \quad (4.3)$$

où $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}$ représente la distance entre deux points quelconques de l'espace $(o, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$.

4.2.3 Formalisme intégral vectoriel de frontière

Au premier chapitre, nous avons présenté la formulation intégrale de frontière pour l'étude directe de la diffraction par une surface unidimensionnelle [36, 39, 64]. Cette approche, qui nous a permis de décrire rigoureusement toutes les interactions électromagnétiques, représente un cas particulier du problème plus général de la diffraction par une surface bidimensionnelle. Dans ce contexte, les premiers travaux ont porté sur la diffraction par une surface bidimensionnelle parfaitement conductrice [38]. Cette étude a ensuite été généralisée à la diffraction par des surfaces diélectriques où le phénomène de rétro-diffusion exaltée a été particulièrement étudié

[65].

Cependant, les premiers travaux qui se sont intéressés à ce sujet dans la littérature ont porté sur les modèles approchés de diffraction. dans ce cas nous distinguons une méthode approchée de diffraction basée sur le développement du champ en série de Neumann [66]. Ce type de formulation présente l'avantage de ne pas être couteuse en temps de calcul. Par contre elle pose des problèmes de convergence lorsque la surface possède de fortes pentes ou bien lorsque l'angle d'incidence s'éloigne de la verticale [66, 67].

Le champ incident et la géométrie des profils étudiés

Nous nous intéressons donc à une surface bidimensionnelle que nous représentons par son profil $z = \eta(x, y)$. De plus, nous supposons que la surface étudiée est lisse et ne comporte pas d'arêtes. Nous éclairons ce profil au point $\mathbf{r} = (x, y, z)$ par un champ incident que nous définissons à travers sa composante magnétique \mathbf{H}_{inc} . Pour un éclairage sous les angles d'incidence (θ_i, ϕ_i) de vecteur d'onde $\mathbf{k}_i = k(\sin(\theta_i + \pi) \cos \phi_i \mathbf{x} + \sin(\theta_i + \pi) \sin \phi_i \mathbf{y} + \cos(\theta_i + \pi) \mathbf{z})$. Ce champ est donné par son expression :

$$\mathbf{H}_{\text{inc}}(x, y, \eta(x, y); \theta_i, \phi_i) = \frac{g}{4\pi^2} \iint_{|k'_{ix}|, |k'_{iy}| < \frac{k}{\sqrt{2}}} \mathbf{P}(k'_{ix}, k'_{iy}) e^{-((k'_{ix} - k_{ix}(\theta_i, \phi_i))^2 + (k'_{iy} - k_{iy}(\theta_i, \phi_i))^2) \frac{g^2}{4}} e^{i(k'_{ix}x + k'_{iy}y - \sqrt{k^2 - (k'^2_{ix} + k'^2_{iy})} \eta(x, y))} dk'_{ix} dk'_{iy} \quad (4.4)$$

Nous avons opté pour un faisceau gaussien comme champ incident. Dans ce cas, l'expression fait intervenir le paramètre g qui conditionne la taille de l'empreinte de ce faisceau sur la surface [39]. De cette manière, lorsque nous réglons la valeur du paramètre g , nous pouvons nous rapprocher des conditions expérimentales en profilométrie optique. Cela nous permet également sur le plan numérique de ramener l'étude d'un problème de taille infinie à celui d'un problème de taille finie que délimite la tache d'éclairage du champ incident. Cette expression du champ incident fait également intervenir la polarisation \mathbf{P} du champ magnétique, de norme unité. Elle est donnée par son expression :

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{h}_i \cdot \mathbf{y} \mathbf{h}_i + \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{y} \mathbf{e}_i}{\sqrt{(\mathbf{h}_i \cdot \mathbf{y})^2 + (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{y})^2}} \quad (4.5)$$

Avec :

$$\begin{cases} \mathbf{h}_i = \frac{1}{|\mathbf{k}_i \wedge \mathbf{z}|} \mathbf{k}_i \wedge \mathbf{z} \\ \mathbf{e}_i = \frac{1}{k} \mathbf{h}_i \wedge \mathbf{k}_i, \end{cases} \quad (4.6)$$

où les vecteurs $(\frac{1}{k}\mathbf{k}_i, \mathbf{e}_i, \mathbf{h}_i)$ forment une base directe orthonormée. De plus, la polarisation \mathbf{P} du champ magnétique incident parallèle au plan moyen de la surface est majoritairement orientée suivant le vecteur unitaire \mathbf{y} .

Surfaces bidimensionnelles parfaitement conductrices

Pour une surface parfaitement conductrice, la source du champ diffracté est donnée par la composante tangentielle du champ magnétique telle que nous l'avons exprimée dans la relation de passage Eqs (4.2). Ce dernier représente la solution de l'équation intégrale sur le champ magnétique suivante :

$$-\mathbf{H}_{\text{inc}}(x', y', \eta(x', y'); \theta_i, \phi_i) = \frac{1}{2} \mathbf{n}' \wedge \mathbf{J}(x', y', \eta(x', y'); \theta_i, \phi_i) + \iint_{\Gamma} \bar{\bar{\mathbf{G}}}(x, y, \eta(x, y); x', y', \eta(x', y')) \cdot \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_i, \phi_i) \, d\Gamma. \quad (4.7)$$

Dans cette équation \iint_{Γ} symbolise une intégration sur la surface (Γ) au sens de la valeur principale de Cauchy et $d\Gamma = \sqrt{1 + (\partial_x \eta)^2 + (\partial_y \eta)^2} \, dx \, dy$ un élément de surface. Nous avons aussi $\bar{\bar{\mathbf{G}}}$ qui représente la dyade de Green magnétique dont l'expression est donnée par :

$$\bar{\bar{\mathbf{G}}}(x, y, \eta(x, y); x', y', \eta(x', y')) = \begin{bmatrix} 0 & \left. \partial_z g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right|_{\substack{z'=\eta(x', y') \\ z=\eta(x, y)}} & -\left. \partial_y g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right|_{\substack{z'=\eta(x', y') \\ z=\eta(x, y)}} \\ -\left. \partial_z g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right|_{\substack{z'=\eta(x', y') \\ z=\eta(x, y)}} & 0 & \left. \partial_x g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right|_{\substack{z'=\eta(x', y') \\ z=\eta(x, y)}} \\ \left. \partial_y g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right|_{\substack{z'=\eta(x', y') \\ z=\eta(x, y)}} & -\left. \partial_x g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right|_{\substack{z'=\eta(x', y') \\ z=\eta(x, y)}} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Maintenant que nous avons déterminé le courant superficiel, nous pouvons connaître la valeur du champ total dans les domaines proche et lointain du milieu incident de volume V . En effet, ce dernier est donné par son expression intégrale :

$$\mathbf{H}(x', y', z'; \theta_i, \phi_i) = \mathbf{H}_{\text{inc}}(x', y', z'; \theta_i, \phi_i) + \iint_{\Gamma} \bar{\bar{\mathbf{G}}}(x, y, \eta(x, y); x', y', z') \cdot \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_i, \phi_i) \, d\Gamma \quad \text{pour } (x', y', z') \in V. \quad (4.9)$$

Nous savons que le champ diffracté par la surface est donné par la différence entre le champ total et le champ incident $\mathbf{H}_{\text{diff}} = \mathbf{H} - \mathbf{H}_{\text{inc}}$. Dans ce cas, pour obtenir son expression en champ lointain, nous remplaçons dans Eq (4.9) la fonction de Green par son expression asymptotique. Par suite, ce champ diffracté va se réécrire sous la forme d'un produit d'une onde sphérique par une amplitude complexe vectorielle :

$$\mathbf{H}_{\text{diff}}(r, \theta, \phi; \theta_i, \phi_i) = \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \mathbf{A}(\theta, \phi; \theta_i, \phi_i), \quad (4.10)$$

où $r = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}$ représente la distance du centre de la surface jusqu'à la position du détecteur sur lequel nous effectuons la mesure du champ. L'amplitude vectorielle diffractée dans la direction définie par les angles (θ, ϕ) lorsque nous éclairons la surface sous les angles d'incidence (θ_i, ϕ_i) est donnée par son expression :

$$\mathbf{A}(\theta, \phi; \theta_i, \phi_i) = i \mathbf{k} \wedge \iint_{\Gamma} \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_i, \phi_i) e^{-i(k_x(\theta, \phi)x + k_y(\theta, \phi)y + k_z(\theta, \phi)\eta(x, y))} d\Gamma, \quad (4.11)$$

où $\mathbf{k} = k(\sin \theta \cos \phi \mathbf{x} + \sin \theta \sin \phi \mathbf{y} + \cos \theta \mathbf{z})$ est le vecteur d'onde diffracté. Cette amplitude complexe vectorielle représente le champ que nous mesurons en vue de résoudre le problème inverse de la reconstruction de la surface.

4.3 Étude inverse de la diffraction

4.3.1 Formulation du problème inverse

Nous disposons d'un ensemble de données sur la mesure de l'amplitude complexe vectorielle que nous notons \mathbf{A}_{mes} . Ces données ont été obtenues en éclairant la surface dont le profil vaut $z = \eta_{\text{ex}}(x, y)$ par un champ incident maîtrisé, sous les angles d'incidences (θ_l, ϕ_l) pour $l = 1, \dots, L$. Dans ce contexte, nous avons mesuré l'amplitude complexe sur M détecteurs que nous plaçons en champ lointain suivant les directions diffractées (θ_m, ϕ_m) , $m = 1, \dots, M$. Dans ce chapitre, nous exploitons uniquement des données synthétiques obtenues par la résolution du couple d'équations Eqs (4.7), (4.11) du modèle direct.

La résolution du problème inverse pour cette configuration consiste à faire la meilleure estimation possible de la surface exacte $z = \eta_{\text{ex}}(x, y)$. En effet, nous cherchons à trouver un profil de surface $z = \eta(x, y)$ dont l'amplitude diffractée \mathbf{A} devra être la plus proche possible de l'amplitude que nous mesurons \mathbf{A}_{mes} .

4.3.2 Méthode itérative de Newton-Kantorovitch

Dans le cadre de l'étude directe de la diffraction, l'amplitude vectoriel que nous mesurons \mathbf{A}_{mes} est liée au profil exact η_{ex} de la surface à travers un opérateur non linéaire \mathbf{F} . Ce dernier symbolise l'ensemble de l'équation intégrale de surface sur le champ magnétique Eq (4.7) et de l'équation d'observation Eq (4.11) qui donne la valeur de l'amplitude du champ diffracté. Cette relation peut être résumée sous la forme symbolique suivante :

$$\mathbf{A}_{\text{mes}} = \mathbf{F}\eta_{\text{ex}} . \quad (4.12)$$

La résolution du problème inverse de Eq (4.12) consiste à faire la meilleure estimation possible du profil exact η_{ex} à partir de la connaissance que nous avons de l'amplitude mesurée \mathbf{A}_{mes} . Dans ce contexte, nous allons construire une procédure itérative dans laquelle nous réajustons à l'itération n le profil que nous avons estimé à l'itération précédente. Nous écrivons que :

$$\eta_n = \eta_{n-1} + \delta\eta_n , \quad (4.13)$$

où $\delta\eta_n$ représente la correction sur le profil que nous obtenons en résolvant l'équation :

$$\delta\Theta_{n-1} = D_{n-1}\delta\eta_n \quad \text{avec} \quad \delta\Theta_{n-1} = \mathbf{P} \cdot (\mathbf{A}_{\text{mes}} - \mathbf{A}_{n-1}) . \quad (4.14)$$

Dans cette équation D_{n-1} s'obtient en calculant la dérivée de l'opérateur de diffraction non linéaire \mathbf{F} sur la base du profil que nous estimons à l'itération $n - 1$. De plus, nous associons à ce profil l'amplitude complexe vectorielle \mathbf{A}_{n-1} que nous simulons à l'aide du formalisme intégral de frontière décrit à travers les équations Eqs (4.7), (4.11). Nous ajoutons également la polarisation du champ magnétique incident \mathbf{P} que nous supposons parfaitement connue.

Nous choisissons de résoudre l'équation Eq (4.14) au sens des moindres carrés. De plus, le caractère mal posé de ce problème nous oblige à choisir sur l'ensemble des solutions admissibles des profils réguliers. Cela s'effectue en incorporant de l'information que nous connaissons à priori sur la surface à l'aide d'un opérateur régularisant d'ordre zéro. Dans ce contexte, nous cherchons la solution $\delta\eta_n$ qui minimise la fonctionnelle coût :

$$\tilde{\xi}(\delta\eta) = \|\delta\Theta_{n-1} - D_{n-1}\delta\eta\|^2 + \mu^2 \|\delta\eta\|^2 . \quad (4.15)$$

Cette solution est donnée par l'expression suivante :

$$\begin{cases} \delta\eta_n = [D_{n-1}^\dagger D_{n-1} + \mu^2 \mathbf{I}]^{-1} D_{n-1}^\dagger \delta\Theta_{n-1} \\ \tilde{\xi}(\delta\eta_n) = \min_{\delta\eta \in \Gamma} \tilde{\xi}(\delta\eta), \end{cases} \quad (4.16)$$

où \mathbf{I} représente l'opérateur identité et μ^2 le paramètre de régularisation de Tikhonov. Cette régularisation consiste à filtrer les plus petites valeurs propres qui sont responsables du mauvais conditionnement de l'opérateur autoadjoint $D^\dagger D$. Nous donnons maintenant l'expression de la dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction non linéaire F dans le cadre d'une surface bidimensionnelle parfaitement conductrice :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_m \cdot \delta\mathbf{A}(\theta_m, \phi_m; \theta_l, \phi_l) = \iint_{\Gamma} [k^2 \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_l, \phi_l) \cdot \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_m + \pi, \phi_m) - \\ \nabla_s \cdot \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_l, \phi_l) \nabla_s \cdot \mathbf{J}(x, y, \eta(x, y); \theta_m + \pi, \phi_m)] \delta\eta(x, y) d\Gamma \end{aligned} \quad (4.17)$$

Dans cette expression \mathbf{P}_m représente la polarisation du champ incident lorsque nous éclairons la surface sous les angles d'incidences $(\theta_m + \pi, \phi_m)$. Nous avons également $\delta\mathbf{A}(\theta_m, \phi_m; \theta_l, \phi_l)$ qui représente la variation sur l'amplitude diffractée dans la direction (θ_m, ϕ_m) lorsque nous éclairons la surface sous les angles d'incidence (θ_l, ϕ_l) . Nous définissons $\nabla_s \cdot \mathbf{J} = \mathbf{t}_1 \cdot \partial_{w_1} \mathbf{J} + \mathbf{t}_2 \cdot \partial_{w_2} \mathbf{J}$ par la divergence de surface du courant superficiel induit. Cette dernière est calculée dans le cadre d'un système de coordonnées curvilignes non orthogonales (w_1, w_2, w_3) de vecteurs de base $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n})$. La démonstration sur le calcul de cette dérivée de Fréchet est reportée à l'annexe A

4.4 Résultats numériques

Nous considérons une surface rugueuse à corrélation gaussienne faisant une taille de $5 \mu\text{m}$ par $5 \mu\text{m}$ Fig 4.2 (a). Nous éclairons ce profil par un faisceau gaussien sous 9 angles d'incidence pour une ouverture numérique $\text{NA} = 0.64$. Sur la figure Fig 4.1 (a) nous représentons l'amplitude du champ incident obtenue sous l'angle normal d'incidence et sur la figure Fig 4.1 (a) l'amplitude du courant de surface induit.

La mesure du champ diffracté se déroule pour la même ouverture numérique du microscope sur 169 détecteurs. Nous constatons dans ce cas une reconstruction du profil par la méthode de Newton-Kantorovitch Fig 4.2 (b). Nous nous sommes limités à l'étude d'une surface bidimensionnelle faiblement rugueuse. Cette limitation est en partie due à des temps de calcul élevés pour de tels profils où nous avons pris 256 par 256 points pour décrire la surface. Le code d'inversion, implémenté sous Matlab, est très couteux en mémoire vive et plus précisément au niveau du stockage de la matrice $D^\dagger D$ qui comporte 256^4 éléments.

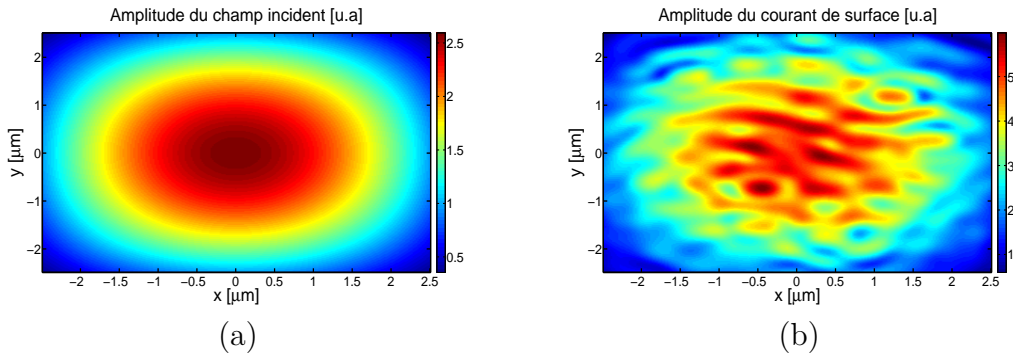


FIGURE 4.1 – (a) Amplitude du champ incident sur une surface bidimensionnel ($hrms= 60$ nanomètres, $lcor= 0.5 \mu\text{m}$); (b) Amplitude du courant superficiel induit.

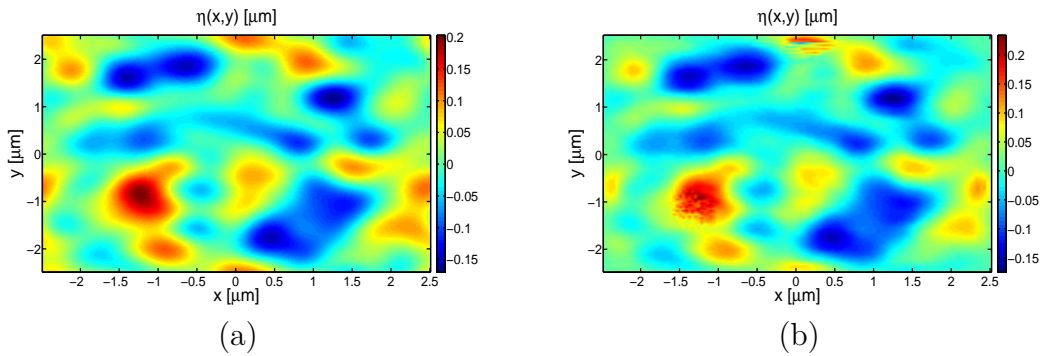


FIGURE 4.2 – (a) profil exact d'une surface bidimensionnel ($hrms= 60$ nanomètres, $lcor= 0.5 \mu\text{m}$); (b) profil reconstruit par la méthode de Newton-Kantorovitch, $\mu^2 = 10^6$.

4.5 Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons présenté une généralisation de la méthode de reconstruction itérative de Newton-Kantorovitch au cas des surfaces bidimensionnelles qui ne possèdent aucun axe spatial d'invariance. Nous avons commencé par générer des données synthétiques que nous avons ensuite exploitées. Ces dernières ont été obtenues à l'aide du formalisme intégral de frontière qui revêt son caractère vectoriel dans ce cas. En particulier, nous nous sommes intéressés à la diffraction directe et inverse par des surfaces rugueuses à corrélation gaussienne et parfaitement conductrices. Nous avons modélisé le champ en travaillant seulement sur sa composante magnétique. Pour finir, nous avons aussi montré quelques résultats numériques sur la reconstruction de surfaces rugueuses bidimensionnelles à corrélation gaussienne.

Conclusion

Nous avons détaillé dans ce mémoire l'état d'avancement de nos recherches sur la profilométrie par méthode inverse de diffraction. Le succès de tout problème inverse reposant sur une parfaite maîtrise du problème direct, nous avons commencé par présenter le formalisme intégral de frontière, dans un contexte de diffraction par une surface unidimensionnelle et pour les deux cas fondamentaux de polarisations TE et TM. Cette partie nous a aussi donné l'occasion d'introduire les caractéristiques des rugosités que l'on cherchera à inverser par la suite : profil gaussien et profil à deux plots, ainsi que les grandeurs électromagnétiques caractéristiques du problème direct : courant induit et champ proche. Cette étude numérique a été réalisée pour des profils infiniment conducteurs, mais l'influence de la conductivité est ensuite soulignée. C'est la méthode des moments qui est utilisée pour la résolution numérique des équations intégrales de frontière; nous montrons à la fin de cette partie que cette méthode est particulièrement adaptée à l'étude de l'influence des interactions multiples dans le processus de diffraction. Par comparaison avec un modèle de diffusion simple, l'impact de ces interactions sur le courant induit est illustré, avec en creux l'importance d'utiliser un modèle direct rigoureux pour la profilométrie.

Nous nous sommes ensuite intéressés à la reconstruction d'une surface à partir de son champ diffracté lointain mesuré en amplitude et en phase pour un ensemble de directions incidentes. Ce problème inverse, comparé au cas volumique de la reconstruction du contraste d'objet, présente une difficulté supplémentaire : le champ diffracté n'est pas linéairement relié à la grandeur recherchée, la fonction hauteur de la surface en l'occurrence. Nous avons décrit différentes méthodes d'inversion déterministes, en commençant par la méthode approchée de Kirchhoff-Fraunhofer. Ensuite, la méthode de Newton-Kantorovitch a été détaillée; en particulier l'aspect mal posé de ce problème a été discuté dans le cadre de cette méthode. Une solution a pu être trouvée en introduisant de manière classique de l'information a priori sur la rugosité au moyen d'un opérateur régularisant de Tikhonov. La méthode de Newton-Kantorovitch repose d'une part sur l'opérateur de diffraction - le modèle direct documenté au premier chapitre - et d'autre part sur la dérivée de Fréchet de cet opérateur. L'expression de cette dérivée est donnée dans le cas des surfaces unidimensionnelles, métalliques et parfaitement conductrices pour

les deux modes de polarisation, et sa démonstration dans le cas général fait l'objet d'une annexe très détaillée. Enfin, en alternative à la méthode de Newton-Kantorovitch, est abordée la méthode du gradient modifiée.

Une étude numérique poussée vient illustrer l'intérêt des méthodes d'inversion bâties sur des modèles rigoureux de diffraction pour une configuration de type Microscopie Tomographique Optique par Diffraction (ODTM). Nous avons montré numériquement sur des profils reconstruits que les résolutions latérales atteintes sont nettement inférieures au critère d'Abbe-Rayleigh, limite de résolution généralement admise en microscopie classique. Nous avons également étudié le comportement de cette résolution obtenue en fonction des paramètres géométriques de la surface et de sa permittivité. Un aspect important qui a suscité notre attention concerne l'influence de la polarisation du champ sur la résolution. Le cas TM apparaît plus mal posé que le cas TE car sensible à l'estimée initiale du profil et plus délicat à régulariser. Toutefois, nous avons constaté sur des profils infiniment conducteurs qu'un éclairage en polarisation TM mène à une résolution latérale encore meilleure que celle obtenue dans le cas TE.

Pour donner une interprétation physique à ce résultat, nous avons entrepris une étude comparative entre les deux polarisations fondamentales sur le comportement du champ diffracté en fonction de la longueur d'interactions multiples des diffuseurs qui composent la surface. Il est apparu de cette étude que les diffusions multiples s'opèrent à plus longue distance en polarisation TM, pour un courant qui se délocalise au delà de l'empreinte du champ incident sur la surface, ce fait n'a pas été constaté en polarisation TE. Une autre étude menée sur l'évolution du champ diffracté en fonction de la largeur spectrale de la rugosité a établi que le couplage des hautes fréquences spatiales du profil avec ses basses fréquences est exalté par les diffusions multiples en polarisation TM, donnant accès à plus d'informations sur les plus petits détails du profil dans le champ diffracté comparé au cas TE.

Cette étude de la méthode de Newton-Kantorovitch pour la profilométrie numérique s'est poursuivie par des résultats encourageants sur la robustesse au bruit, obtenus dans le cas infiniment conducteur encore, et sur la reconstruction réussie de surfaces métalliques en Optique. En effet, si notre méthode profilométrique implémentée pour des profils infiniment conducteurs permet d'inverser aux hyperfréquences des données synthétiques obtenues sur des profils métalliques de conductivité finie à l'aide du problème direct adéquat, il en va différemment aux longueurs d'onde optiques. Il était donc primordial d'étendre notre modèle au cas des milieux pénétrables,

et caractérisés par une permittivité complexe. Cette partie est ensuite clôturée par une première confrontation à des données expérimentales, acquises à 633 nm à l'aide du microscope interférométrique de l'Institut Fresnel, sur une surface de phosphore d'indium. L'échantillon étudié a préalablement été caractérisé au Microscope Électronique à Balayage et se compose donc de deux sillons larges de 3 et 2 microns et profonds de 120 nanomètres.

Pour finir, la profilométrie numérique des surfaces bidimensionnelles a été abordée, par l'étude du cas parfaitement conducteur. Dans ce contexte, les modèles direct et inverse sont étendus à la diffraction tridimensionnelle vectorielle, ce travail a ensuite été accompagné par quelques illustrations numériques obtenues sur une surface rugueuse gaussienne.

Perspectives

Il convient dès maintenant d'asseoir l'ensemble des résultats obtenus avec des données synthétiques et des mesures expérimentales. Est particulièrement visée la reconstruction de rugosités inaccessibles aux techniques profilométriques classiques. De telles reconstructions sont rendues possibles par l'extension de notre méthode de Newton-Kantorovitch aux surfaces unidimensionnelles pénétrables. Nous commencerons par reprendre la confrontation expérience-théorie du chapitre 3 avec ce modèle pénétrable, puis nous passerons à d'autres échantillons optiques présentant des sillons plus profonds et/ou plus étroits. Des mesures à 633nm effectuées à l'Institut Fresnel sont d'ors et déjà disponibles pour ces profils. Certains échantillons présentent des dimensions latérales inférieures au critère d'Abbe-Rayleigh, et de fait, très peu de ces mesures ont pu être inversées par la méthode de Kirchhoff-Fraunhofer.

Le travail entrepris sur les surfaces bidimensionnelles sera poursuivi. Des surfaces rugueuses aléatoires ont été photofabriquées dans le cadre d'une collaboration entre l'Institut Fresnel, L'IM2NP et THALES optronique. Bien qu'imparfaitement caractérisées et présentant le plus souvent des pentes faibles, ces surfaces pourraient servir à des reconstructions expérimentales tridimensionnelles. La méthode de Newton-Kantorovitch apparaît ici moins adaptée numériquement. En passant du profil à la surface, le nombre d'angles et de points de hauteur se trouvent élevés au carré, et la matrice associée à la dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction devient si grande qu'elle sature très rapidement la mémoire d'un serveur de calcul. L'inversion des surface bidimensionnelles pourrait ainsi fournir l'occasion de développer les méthodes de gradient, qui ne présentent pas ce travers, et qui n'ont été qu'abordées au cours de ce travail doctoral.

La dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction par la méthode des états adjoints, dont la formulation est détaillée dans l'annexe A, représente un puissant outil pour l'inversion d'un profil mais aussi du contraste d'un objet. Nous nous sommes restreints dans ce travail de thèse à la reconstruction de surfaces séparant deux milieux diélectriques homogènes. Cela nous a permis d'utiliser uniquement le formalisme intégral de frontière. Toutefois, la méthode inverse que nous avons utilisée est plus générale et pourrait être appliquée à la reconstruction d'une surface rugueuse où le substrat présenterait des inhomogénéités de contraste.

Enfin, dans le cadre de la profilométrie optique, l'espace de mesure est placé en zone lointaine. Pour ouvrir de nouvelles perspectives, il serait intéressant de travailler sur des mesures prises en champ proche.

Annexe A

Calcul de la dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction par la méthode des états adjoints

Nous nous intéressons au calcul détaillé de la dérivée de Fréchet de l'opérateur de diffraction dans lequel différentes situations physiques seront envisagées. L'utilisation de la méthode des états adjoints qui est fondée sur le théorème de réciprocité nous permettra de relier linéairement une variation d'un paramètre intrinsèque de l'objet (profil, contraste) à une variation du champ lointain diffracté. L'ensemble des résultats qui seront présentés dans cette annexe ont déjà fait l'objet d'une publication [60]. Toutefois, une démonstration complète n'est donnée dans ce travail que pour le cas de la diffraction par une surface parfaitement conductrice éclairée en polarisation TE. Dans cette annexe, nous considérons les situations où la surface présente une conductivité infinie et finie pour un éclairage sous les deux polarisations fondamentales. La diffraction par des surfaces bidimensionnelles de conductivité finie et infinie sera également étudiée. Pour finir, nous montrerons de quelle manière cette méthode peut être appliquée au problème volumique de la reconstruction d'un contraste d'objet.

Cette annexe est divisée en trois parties, premièrement nous allons commencer par formuler le problème dans un cadre général où les équations de Maxwell seront abordées au sens des distributions, en régime harmonique et pour des milieux non magnétiques. Ensuite sera abordé le calcul du terme en champ lointain à l'aide du théorème de la phase stationnaire, le théorème de réciprocité y sera également démontré. Pour finir, le calcul explicite de l'opérateur de Fréchet sera effectué, ses différentes expressions seront données en fonction d'une variation sur les paramètres intrinsèques de l'objet que nous recherchons et des grandeurs électromagnétiques telles que : le champ électrique dans l'objet ou bien le courant superficiel sur son profil ...

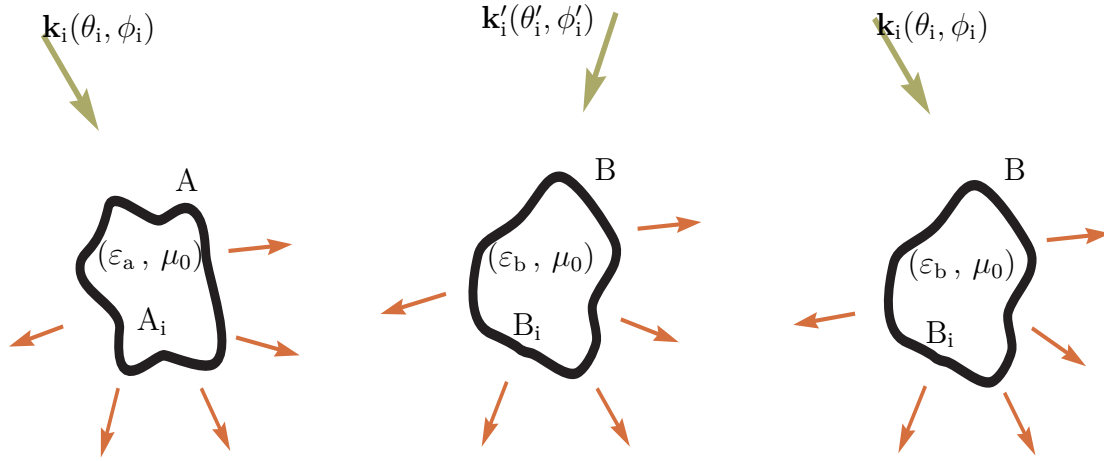


FIGURE A.1 – Trois configurations distinctes : $a(A, \mathbf{k}_i)$ avec $A = \partial A_i$, $b(B, \mathbf{k}'_i)$ avec $B = \partial B_i$ et $b'(B, \mathbf{k}_i)$ avec $B = \partial B_i$.

A.1 Formulation du problème

Nous considérons trois configurations électromagnétiques :

- La configuration $a(A, \mathbf{k}_i)$: un objet volumique de permittivité ε_a définie dans le volume A_i de surface A et éclairé par un champ incident de vecteur d'onde \mathbf{k}_i d'angles θ_i et ϕ_i .
- La configuration $b(B, \mathbf{k}'_i)$: un objet volumique de permittivité ε_b définie dans le volume B_i de surface B et éclairé par un champ incident de vecteur d'onde \mathbf{k}'_i d'angles θ'_i et ϕ'_i .
- La configuration $b'(B, \mathbf{k}_i)$: un objet volumique de permittivité ε_b définie dans le volume B_i de surface B et éclairé par un champ incident de vecteur d'onde \mathbf{k}_i d'angles θ_i et ϕ_i .

Les équations de Maxwell au sens des distributions pour les deux configurations (a) et (b) sont données par :

$$(a), \begin{cases} \nabla \wedge \mathbf{E}_a = i\omega \mu_0 \mathbf{H}_a \\ \nabla \wedge \mathbf{H}_a = -i\omega \varepsilon_a \mathbf{E}_a + \delta_A \mathbf{J}_a \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Et,

$$(b), \begin{cases} \nabla \wedge \mathbf{E}_b = i\omega \mu_0 \mathbf{H}_b \\ \nabla \wedge \mathbf{H}_b = -i\omega \varepsilon_b \mathbf{E}_b + \delta_B \mathbf{J}_b \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

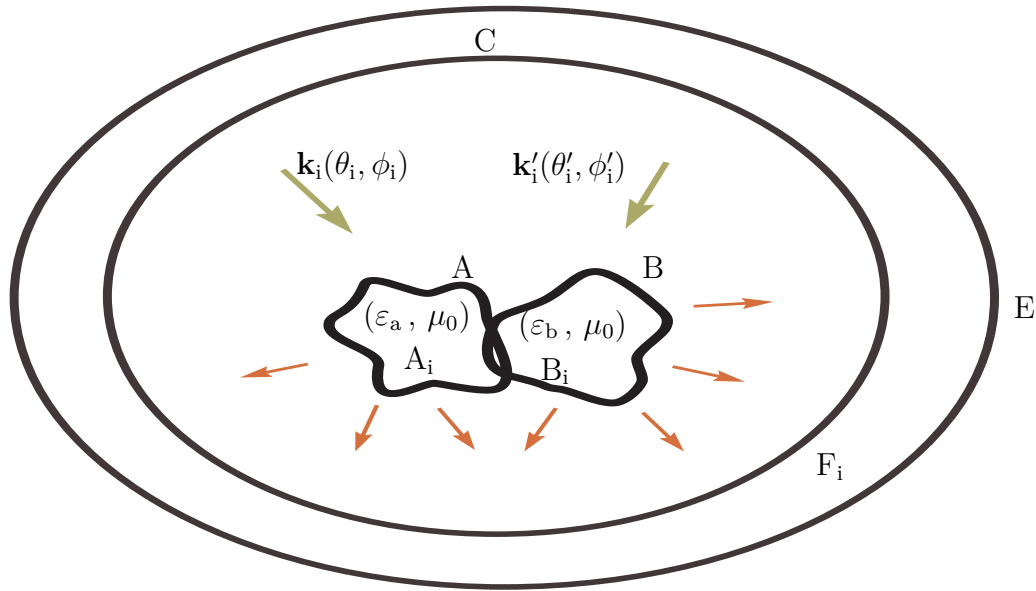


FIGURE A.2 – $C = C_i$, $E = \partial E_i$, $F_i = E_i - C_i$ et $D_i = A_i \cup B_i$. Nous précisons toutefois que les configurations $a(A, \mathbf{k}_i)$, $b(B, \mathbf{k}'_i)$ ne sont pas en interaction électromagnétique mais peuvent être vues comme deux événements possibles.

Nous obtenons à partir des systèmes d'équations Eqs (A.1), (A.2) l'expression suivante obtenue au sens des distributions :

$$\nabla \cdot [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] = -i\omega(\varepsilon_b - \varepsilon_a)\mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b + \delta_B \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b - \delta_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a \quad (\text{A.3})$$

Lorsque nous l'appliquons sur une fonction test nous aboutissons au résultat :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \int_B \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b dB - \int_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a dA - i\omega \int_{D_i} (\varepsilon_b - \varepsilon_a) \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b dD_i} \quad (\text{A.4})$$

Démonstration soit la distribution :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{T} = -i\omega(\varepsilon_b - \varepsilon_a)\mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b + \delta_B \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b - \delta_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a \\ \text{avec,} \\ \nabla \cdot \mathbf{T} = \nabla \cdot [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \end{array} \right. \quad (\text{A.5})$$

Nous introduisons la fonction test $u(\rho, \theta, \phi)$ définie par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} u(\rho, \theta, \phi) = 1 & (\rho, \theta, \phi) \in C_i \quad \text{et} \quad u(\rho, \theta, \phi) = 1 \quad (\rho, \theta, \phi) \in C \\ \nabla \cdot u(\rho, \theta, \phi) \neq 0 & (\rho, \theta, \phi) \in F_i \quad \text{et} \quad u(\rho, \theta, \phi) = 0 \quad (\rho, \theta, \phi) \in E, \end{array} \right. \quad (\text{A.6})$$

où C est la surface fermée qui délimite le volume C_i . De même E représente la surface fermée de volume E_i , avec : $F_i = E_i - C_i$. Nous commençons par appliquer sur la fonction test u la première expression de la distribution $\nabla \cdot \mathbf{T}$, nous écrivons :

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \nabla \cdot \mathbf{T} | u \rangle = \langle \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b \delta_B | u \rangle + \langle -\mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a \delta_A | u \rangle + \langle -i\omega(\varepsilon_b - \varepsilon_a)\mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b | u \rangle \\ = \int_B \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b dB - \int_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a dA - i\omega \int_{D_i} (\varepsilon_b - \varepsilon_a)\mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b dD_i \end{array} \right. \quad (\text{A.7})$$

D'autre part, lorsque nous appliquons à la fonction test u la distribution $\nabla \cdot \mathbf{T}$, le résultat peut être réécrit sous la forme :

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{T} | u \rangle = - \langle \mathbf{T} | \nabla u \rangle = - \int_{F_i} \mathbf{T} \cdot \nabla u dF_i \quad (\text{A.8})$$

Dans l'expression Eq (A.8), nous avons exploité le fait que : $\nabla u \neq 0$ pour $(\rho, \theta, \phi) \in F_i$ et nul partout ailleurs. De plus, dans le volume F_i nous avons l'identité suivante qui est définie au sens des fonctions :

$$\mathbf{T} \cdot \nabla u = \nabla \cdot (\mathbf{T}u) - (\nabla \cdot \mathbf{T})u \quad (\text{A.9})$$

Or pour $(\rho, \theta, \phi) \in F_i$, nous avons $\nabla \cdot \mathbf{T} = 0$ qui se vérifie aisément en remplaçant \mathbf{T} par son expression. Lorsque nous appliquons le théorème de la divergence sur l'intégrale :

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{T} | u \rangle = - \int_{F_i} \nabla \cdot (\mathbf{T}u) dF_i = \int_C \mathbf{T}u \cdot \mathbf{u}_\rho dC - \int_E \mathbf{T}u \cdot \mathbf{u}_\rho dE \quad (\text{A.10})$$

Toutefois d'après les définitions Eq (A.6) la fonction test u s'annule sur la surface E et vaut 1 sur C . De plus, lorsque nous remplaçons \mathbf{T} par son expression $\mathbf{T} = \mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b$, nous obtenons :

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{T} | u \rangle = \int_C \mathbf{T} \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC \quad (\text{A.11})$$

Lorsque nous regroupons cette dernière relation avec le résultat Eq (A.7) nous trouvons :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \int_B \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b dB - \int_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a dA - i\omega \int_{D_i} (\varepsilon_b - \varepsilon_a)\mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b dD_i \quad (\text{A.12})$$

Toutes les grandeurs intervenant dans l'expression Eq (A.4) que nous venons de démontrer sont définies au sens des fonctions. Le membre de gauche exprimant l'intégrale des champs sur la surface d'observation C, nous parlerons de mesures en champ proche si cette surface avoisine les objets diffractant et de mesures en champ lointain lorsque cette surface d'observation possède un rayon qui tend vers l'infini. Dans ce travail doctoral nous n'avons étudié que la configuration en champ lointain.

A.2 Terme en champ lointain

A.2.1 Configuration tridimensionnelle. Surface bidimensionnelle

De l'équation A.4, nous avons.

$$\begin{cases} \int_C [\mathbf{H}_b^i \wedge \mathbf{E}_a^i - \mathbf{H}_a^i \wedge \mathbf{E}_b^i] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = 0 \\ \int_C [\mathbf{H}_b^d \wedge \mathbf{E}_a^d - \mathbf{H}_a^d \wedge \mathbf{E}_b^d] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = 0 \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

La première égalité dans Eq (A.13) est due à l'inexistence des courants d'interfaces plus le fait que le champ incident ne dépend pas de la présence ou non de l'objet. La seconde équation se vérifie aisément si nous remplaçons les champs électrique et magnétique par leurs expressions obtenues en champ lointain. Compte tenu de ces deux égalité nous obtenons la relation :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \int_C \{[\mathbf{H}_b^d \wedge \mathbf{E}_a^i - \mathbf{H}_a^i \wedge \mathbf{E}_b^d] - [\mathbf{H}_a^d \wedge \mathbf{E}_b^i - \mathbf{H}_b^i \wedge \mathbf{E}_a^d]\} \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC \quad (\text{A.14})$$

Cette expression en champ lointain peut être réécrite en fonction de la seule composante magnétique du champ :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{i}{\omega \epsilon_0} \int_C \{[\mathbf{H}_b^d \wedge (\nabla \wedge \mathbf{H}_a^i) - \mathbf{H}_a^i \wedge (\nabla \wedge \mathbf{H}_b^d)] - [\mathbf{H}_a^d \wedge (\nabla \wedge \mathbf{H}_b^i) - \mathbf{H}_b^i \wedge (\nabla \wedge \mathbf{H}_a^d)]\} \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC \quad (\text{A.15})$$

Nous ajoutons également son expression en fonction de la composante électrique :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{-i}{\omega \mu_0} \int_C \{[\mathbf{E}_b^d \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}_a^i) - \mathbf{E}_a^i \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}_b^d)] - [\mathbf{E}_a^d \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}_b^i) - \mathbf{E}_b^i \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}_a^d)]\} \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC \quad (\text{A.16})$$

Désormais, nous travaillerons que sur la composante magnétique à l'aide de l'équation Eq (A.15). La surface de mesure C représente une sphère dans un système de coordonnées sphériques (ρ, θ, ϕ) de vecteurs unitaires $(\mathbf{u}_\rho, \mathbf{u}_\theta, \mathbf{u}_\phi)$, pour $\theta \in [0, \pi]$ et $\phi \in [0, 2\pi]$. Ces derniers sont donnés par leurs expressions respectives :

$$\mathbf{u}_\rho = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad \mathbf{u}_\theta = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta), \quad \mathbf{u}_\phi = (-\sin \phi, \cos \phi, 0) \quad (\text{A.17})$$

Le champ incident que nous considérons ici est une onde plane, nous ajoutons aussi l'expression du champ diffracté pour les deux configurations a et b :

$$\begin{cases} \mathbf{H}_a^i = \mathbf{p}_i e^{i(k\rho)(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho)} & \mathbf{H}_b^i = \mathbf{p}'_i e^{i(k\rho)(\mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho)} \\ \mathbf{H}_a^d = \frac{e^{ik\rho}}{4\pi\rho} \mathbf{A}_a(\theta, \phi) & \mathbf{H}_b^d = \frac{e^{ik\rho}}{4\pi\rho} \mathbf{A}_b(\theta, \phi), \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

où $\mathbf{A}_a(\theta, \phi)$ et $\mathbf{A}_b(\theta, \phi)$ sont respectivement les amplitudes diffractées pour les configurations (a), (b). Les directions incidentes sont définies par les vecteurs unitaires :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i = \frac{\mathbf{k}_i}{k} &= (\sin(\theta_i + \pi) \cos \phi_i, \sin(\theta_i + \pi) \sin \phi_i, \cos(\theta_i + \pi)), & \mathbf{p}_i &= (-\sin \phi_i, \cos \phi_i, 0) \\ \mathbf{u}'_i = \frac{\mathbf{k}'_i}{k} &= (\sin(\theta'_i + \pi) \cos \phi'_i, \sin(\theta'_i + \pi) \sin \phi'_i, \cos(\theta'_i + \pi)), & \mathbf{p}'_i &= (-\sin \phi'_i, \cos \phi'_i, 0) \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Compte tenu des expressions pour les champs magnétiques incident et diffracté, l'équation Eq (A.15) devient après quelques étapes de calcul.

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{k}{\omega \varepsilon_0} \int_C \{ [(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i + (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{H}_b^d)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{H}_a^i)] - [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_a^d \cdot \mathbf{H}_b^i + (\mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{H}_a^d)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{H}_b^i)] \} dC, \quad (\text{A.20})$$

dans laquelle nous avons la nullité des termes intégraux suivants :

$$\begin{cases} \int_C [(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{H}_b^d)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{H}_a^i)] dC = 0 \\ \int_C [(\mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{H}_a^d)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{H}_b^i)] dC = 0 \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Démonstration Pour s'en convaincre nous allons appliquer le théorème de la phase stationnaire [68], celui-ci s'énonce de la façon suivante : *soit $h(t)$ une fonction à variable réelle définie sur l'intervalle $[T_{\min}, T_{\max}]$ et $g(t)$ une autre fonction définie sur le même intervalle. Alors si les conditions suivantes sont respectées. $\exists t_0 \in [T_{\min}, T_{\max}]$ tel que : $h'(t_0) = 0$, $h''(t_0) \neq 0$, $g(t_0) \neq 0$, et $\forall t \in [T_{\min}, T_{\max}]$ alors $h'(t) \neq 0$ si $t \neq t_0$. Nous avons l'égalité suivante.*

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} g(t) e^{i\tau h(t)} dt = \sqrt{\frac{2\pi}{\tau |h''(t_0)|}} g(t_0) e^{[i\tau h(t_0) + i\frac{\pi}{4} \frac{h''(t_0)}{|h''(t_0)|}]} \quad (\text{A.22})$$

Prenons la première intégrale de Eq (A.21), dans la base des coordonnées sphériques cela donne.

$$\int_{\mathcal{C}} [(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{H}_b^d)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{H}_a^i)] d\mathcal{C} = \frac{\rho}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta e^{[ik\rho \cos \theta \cos(\theta_i + \pi)]} d\theta \int_0^{2\pi} (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{A}_b)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{p}_i) e^{ik\rho[1 + \sin \theta \sin(\theta_i + \pi) \cos(\phi - \phi_i)]} d\phi \quad (\text{A.23})$$

Si nous appliquons le théorème Eq (A.22) à l'intégrale sur l'angle ϕ , nous obtenons que cette dernière est strictement nulle :

$$\int_0^{2\pi} (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{A}_b)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{p}_i) e^{ik\rho[1 + \sin \theta \sin(\theta_i + \pi) \cos(\phi - \phi_i)]} d\phi = 0 \quad (\text{A.24})$$

Par conséquent :

$$\int_{\mathcal{C}} [(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{H}_b^d)(\mathbf{u}_\rho \cdot \mathbf{H}_a^i)] d\mathcal{C} = 0 \quad (\text{A.25})$$

De la même manière nous vérifions la nullité de la seconde intégrale dans Eq (A.21).

Dans ce cas l'équation Eq (A.20) se réécrit sous la forme :

$$\int_{\mathcal{C}} [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho d\mathcal{C} = \frac{k}{\omega \varepsilon_0} \int_{\mathcal{C}} \{[(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] - [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_a^d \cdot \mathbf{H}_b^i]\} d\mathcal{C} \quad (\text{A.26})$$

En suivant les mêmes étapes de calcul, cette expression peut être obtenue à partir de Eq (A.16) en fonction de la composante électrique du champ sous la forme :

$$\int_{\mathcal{C}} [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho d\mathcal{C} = \frac{-k}{\omega \mu_0} \int_{\mathcal{C}} \{[(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{E}_b^d \cdot \mathbf{E}_a^i] - [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{E}_a^d \cdot \mathbf{E}_b^i]\} d\mathcal{C} \quad (\text{A.27})$$

Nous allons maintenant utiliser le théorème de la phase stationnaire pour l'évaluation du membre de gauche

de l'équation Eq (A.26)

Prenons le premier terme intégrale dans le membre de gauche de Eq (A.26) et développons le sur les coordonnées sphériques.

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] dC = \frac{k\rho}{4\pi\omega\varepsilon_0} \int_0^\pi \sin\theta e^{[ik\rho \cos\theta \cos(\theta_i + \pi)]} d\theta \int_0^{2\pi} (1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) (\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_b) e^{ik\rho[1 + \sin\theta \sin(\theta_i + \pi) \cos(\phi - \phi_i)]} d\phi \quad (\text{A.28})$$

En vertu du théorème de la phase stationnaire, nous intégrons sur l'angle ϕ et nous obtenons :

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] dC = \frac{k\rho e^{i\frac{\pi}{4}}}{4\pi\omega\varepsilon_0} \int_0^\pi g(\theta) e^{ik\rho[1 - \sin\theta \sin\theta_i - \cos\theta \cos\theta_i]} d\theta \quad (\text{A.29})$$

Avec,

$$g(\theta) = \sin\theta \sqrt{\frac{2\pi}{k\rho |\sin\theta \sin\theta_i|}} [1 + \cos(\theta - \theta_i)] \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_b(\theta, \phi_i) \quad (\text{A.30})$$

En appliquant à nouveau le même théorème sur l'intégrale Eq (A.29), nous obtenons le résultat :

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_b(\theta_i, \phi_i) \quad (\text{A.31})$$

En effectuant un calcul identique, nous obtenons pour l'autre terme intégral le résultat suivant.

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_a^d \cdot \mathbf{H}_b^i] dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \mathbf{p}'_i \cdot \mathbf{A}_a(\theta'_i, \phi'_i) \quad (\text{A.32})$$

L'équation Eq (A.26) se réécrit par conséquent sous la forme :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} [\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_b(\theta_i, \phi_i) - \mathbf{p}'_i \cdot \mathbf{A}_a(\theta'_i, \phi'_i)] \quad (\text{A.33})$$

Par ailleurs nous pouvons déduire à partir de l'expression Eq (A.4) lorsque nous remplaçons la configuration (a) par la configuration (b') :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_{b'} - \mathbf{H}_{b'} \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} [\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_b(\theta_i, \phi_i) - \mathbf{p}'_i \cdot \mathbf{A}_{b'}(\theta'_i, \phi'_i)] = 0 \quad (\text{A.34})$$

$$\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_b(\theta_i, \phi_i) = \mathbf{p}'_i \cdot \mathbf{A}_{b'}(\theta'_i, \phi'_i) \quad (\text{A.35})$$

En effet, dans ce cas nous avons $\mathbf{E}_{b'} \cdot \mathbf{J}_b = 0$, $\mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_{b'} = 0$ et $\varepsilon_b = \varepsilon_a$. La relation Eq (A.35) représente le

théorème de réciprocité. Finalement, lorsque nous combinons le théorème de réciprocité Eq (A.35) au résultat Eq (A.33) nous aboutissons à la différence sur l'amplitude vectorielle magnétique donnée par l'expression suivante :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \mathbf{P}'_i \cdot [\mathbf{A}_{b'}(\theta'_i, \phi'_i) - \mathbf{A}_a(\theta'_i, \phi'_i)]} \quad (\text{A.36})$$

En fonction de l'amplitude vectorielle électrique du champ, nous aurions obtenu en suivant les étapes de calculs identiques à partir de Eq (A.27)

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{-i}{\omega \mu_0} \mathbf{P}'_i \cdot [\mathbf{A}_{b'}(\theta'_i, \phi'_i) - \mathbf{A}_a(\theta'_i, \phi'_i)]} \quad (\text{A.37})$$

A.2.2 Configuration bidimensionnelle. Surface unidimensionnelle.

Repartons de l'expression du terme en champ lointain trouvé dans le cas de la configuration tridimensionnelle. Nous avons trouvé que ce dernier s'écrit en fonction de la composante électrique du champ sous la forme :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{-k}{\omega \mu_0} \int_C \{[(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{E}_b^d \cdot \mathbf{E}_a^i] - [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{E}_a^d \cdot \mathbf{E}_b^i]\} dC, \quad (\text{A.38})$$

ou bien en fonction de la composante magnétique du champ :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{k}{\omega \varepsilon_0} \int_C \{[(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] - [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_a^d \cdot \mathbf{H}_b^i]\} dC \quad (\text{A.39})$$

Pour une configuration bidimensionnelle C représente un cercle dans un système de coordonnées polaires (ρ, θ) de vecteurs unitaires $(\mathbf{u}_\rho, \mathbf{u}_\theta)$, pour $\theta \in [0, 2\pi]$.

$$\mathbf{u}_\rho = (\sin \theta, \cos \theta), \quad \mathbf{u}_\theta = (\cos \theta, -\sin \theta). \quad (\text{A.40})$$

Comme champ incident nous utilisons une onde plane pour les deux configurations d'éclairement, auxquelles nous ajoutons les expressions des champs diffractés en fonction de la composante magnétique :

$$\begin{cases} \mathbf{H}_a^i = \mathbf{y} e^{i(k\rho)(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho)} & \mathbf{H}_b^i = \mathbf{y} e^{i(k\rho)(\mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho)} \\ \mathbf{H}_a^d = \frac{(1+i)e^{ik\rho}}{4\sqrt{\pi k\rho}} \Phi_a(\theta) \mathbf{y} & \mathbf{H}_b^d = \frac{(1+i)e^{ik\rho}}{4\sqrt{\pi k\rho}} \Phi_b(\theta) \mathbf{y}, \end{cases} \quad (\text{A.41})$$

où $\Phi_a(\theta)$ et $\Phi_b(\theta)$ sont respectivement les amplitudes diffractées des configurations (a), (b). Nous donnons aussi les expressions des vecteurs unitaires qui fixent les directions incidentes :

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_i &= \frac{\mathbf{k}_i}{k} = (\sin(\theta_i + \pi), \cos(\theta_i + \pi)), \\ \mathbf{u}'_i &= \frac{\mathbf{k}'_i}{k} = (\sin(\theta'_i + \pi), \cos(\theta'_i + \pi))\end{aligned}\tag{A.42}$$

Le premier terme intégral du membre de gauche de Eq (A.26) se réécrit sous la forme :

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] dC = \frac{(1+i)\sqrt{k\rho}}{\sqrt{16\pi}\omega\varepsilon_0} \int_0^{2\pi} [1 + \cos(\theta - \theta_i)] \Phi_b(\theta) e^{ik\rho[1 + \sin\theta \sin(\theta_i + \pi) \cos(\phi - \phi_i)]} d\theta \tag{A.43}$$

Lorsque nous appliquons le théorème de la phase stationnaire à l'intégrale sur l'angle θ , nous trouvons que :

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_b^d \cdot \mathbf{H}_a^i] dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \Phi_b(\theta_i). \tag{A.44}$$

En effectuant le même calcul sur l'autre terme intégral, nous aboutissons au résultat :

$$\frac{k}{\omega\varepsilon_0} \int_C [(1 - \mathbf{u}'_i \cdot \mathbf{u}_\rho) \mathbf{H}_a^d \cdot \mathbf{H}_b^i] dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \Phi_a(\theta'_i). \tag{A.45}$$

Par conséquent :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} [\Phi_b(\theta_i) - \Phi_a(\theta'_i)]. \tag{A.46}$$

Or lorsque nous remplaçons la configuration a par b', nous avons l'égalité suivante due au théorème de réciprocité démontré dans le cas tridimensionnel :

$$\begin{aligned}\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}'_b - \mathbf{H}'_b \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC &= \frac{i}{\omega\varepsilon_0} [\Phi_b(\theta_i) - \Phi'_b(\theta'_i)] = 0, \\ \Phi_b(\theta_i) &= \Phi'_b(\theta'_i)\end{aligned}\tag{A.47}$$

Finalement, nous trouvons le résultat final suivant pour le terme en champ lointain lorsque nous combinons le théorème de réciprocité Eq (A.47) à l'expression Eq (A.46) :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} [\Phi'_b(\theta'_i) - \Phi_a(\theta'_i)]}. \tag{A.48}$$

En partant de Eq (A.38), ce terme en champ lointain s'écrira en fonction de l'amplitude complexe du champ électrique sous la forme :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = \frac{-i}{\omega\mu_0} [\Phi'_b(\theta'_i) - \Phi_a(\theta'_i)]} \quad (\text{A.49})$$

A.3 Terme en champ proche

A.3.1 Surface de permittivité finie

Configuration tridimensionnelle. surface bidimensionnelle

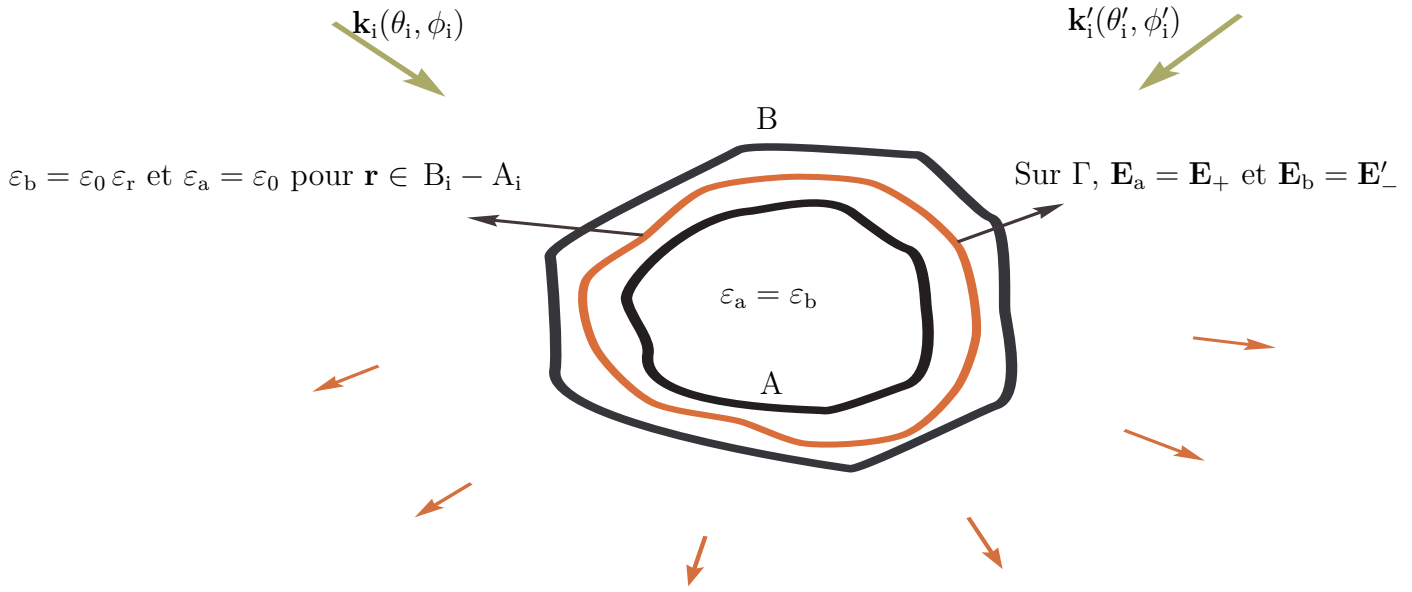


FIGURE A.3 – (\mathbf{E}'_-) représente le champ électrique pour la configuration $b(B, \mathbf{k}'_i)$ calculé au voisinage inférieur de la surface B et (\mathbf{E}_+) le champ électrique pour la configuration $a(A, \mathbf{k}_i)$ calculé au voisinage supérieur de la surface A.

pour un objet de permittivité finie, les courants superficiels sont inexistantes ($\mathbf{J}_a = \mathbf{0}$, $\mathbf{J}_b = \mathbf{0}$). L'intégrale Eq (A.4) se résume dans ce cas à l'expression :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = -i\omega \int_{D_i} (\varepsilon_b - \varepsilon_a) \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b dD_i \quad (\text{A.50})$$

De plus, nous supposons que pour $\mathbf{r} \in A_i$, $\varepsilon_b = \varepsilon_a$ et pour $\mathbf{r} \in B_i - A_i$, $\varepsilon_b = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ et $\varepsilon_a = \varepsilon_0$, nous ajoutons le contraste défini par $\chi = \varepsilon_r - 1$. Lorsque les surfaces A et B deviennent très proches l'une de l'autre, alors l'intégrale volumique peut être approchée par une intégrale surfacique dont l'expression est donnée par :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = -i\omega \int_{D_i} (\varepsilon_b - \varepsilon_a) \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{E}_b dD_i = -i\omega \varepsilon_0 \int_\Gamma \chi \mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{E}'_- \delta\eta d\Gamma \quad (\text{A.51})$$

Avec : $D_i = \delta\eta \, d\Gamma$ et Γ la surface d'intégration que nous positionnons entre A et B. \mathbf{E}_+ désigne le champ électrique au voisinage supérieur de la surface A lorsque nous éclairons la surface sous les angles d'incidence (θ_i, ϕ_i) . \mathbf{E}'_- le champ électrique demeurant au voisinage inférieur de la surface B pour une illumination de la surface sous les angles d'incidence (θ'_i, ϕ'_i) .

Afin de trouver une expression à cette intégrale, nous décomposons les champs électriques \mathbf{E}_+ et \mathbf{E}'_- suivant une composante normale et une autre tangentielle à la surface. Nous écrivons alors :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_+ = (\mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{n}) \, \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}_+) \wedge \mathbf{n} \\ \mathbf{E}'_- = (\mathbf{E}'_- \cdot \mathbf{n}) \, \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}'_-) \wedge \mathbf{n} \end{cases} \quad (\text{A.52})$$

Afin d'exprimer l'équation Eq (A.51) qu'en fonction des champs électriques au voisinage supérieur de la surface Γ , nous ajoutons les équations de passage sur le champ \mathbf{E}'_- :

$$\begin{cases} \mathbf{n} \wedge \mathbf{E}'_- = \mathbf{n} \wedge \mathbf{E}'_+ \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}'_- = \frac{1}{1+\chi} \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}'_+ \end{cases} \quad (\text{A.53})$$

Compte tenu de ces relations de passage, le champ électrique au voisinage inférieur de la surface \mathbf{E}'_- s'écrit en fonction de son expression au voisinage supérieur de la surface \mathbf{E}'_+ sous la forme :

$$\mathbf{E}'_- = \frac{1}{1+\chi} (\mathbf{E}'_+ \cdot \mathbf{n}) \, \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}'_+) \wedge \mathbf{n} \quad (\text{A.54})$$

Lorsque nous incluons cette expression dans le terme en champ proche, nous obtenons :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = -i\omega\epsilon_0 \int_\Gamma \chi [(\mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{n}) \, \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}_+) \wedge \mathbf{n}] \cdot \left[\frac{1}{1+\chi} (\mathbf{E}'_+ \cdot \mathbf{n}) \, \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}'_+) \wedge \mathbf{n} \right] \delta\eta \, d\Gamma \quad (\text{A.55})$$

Nous pouvons également obtenir cette expression en fonction de la composante magnétique du champ, pour ce faire repartons de l'intégrale :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = -i\omega\epsilon_0 \int_\Gamma \chi \, \mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{E}'_- \, \delta\eta \, d\Gamma \quad (\text{A.56})$$

Lorsque nous remplaçons les champs électriques $(\mathbf{E}_+, \mathbf{E}'_-)$ par leurs expressions en fonction des champs magnétiques suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_+ = \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \nabla \wedge \mathbf{H}_+ \\ \mathbf{E}'_- = \frac{i}{\omega \varepsilon_0 (1+\chi)} \nabla \wedge \mathbf{H}'_- \end{cases} \quad (\text{A.57})$$

Nous trouvons que :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \int_\Gamma \frac{\chi}{1+\chi} \nabla \wedge \mathbf{H}_+ \cdot \nabla \wedge \mathbf{H}'_- \, \delta\eta \, d\Gamma} \quad (\text{A.58})$$

Nous allons maintenant introduire le système de coordonnées curvilignes non orthogonales (w_1, w_2, w_3) de vecteurs de base $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n})$ [69] vérifiant les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{et} & \|\mathbf{t}_1\| = 1 \\ \mathbf{t}_2 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{et} & \|\mathbf{t}_2\| = 1 \\ \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \neq 0 & \text{et} & \|\mathbf{n}\| = 1 \end{cases} \quad (\text{A.59})$$

Nous introduisons également l'expression du rotationnel en coordonnées curvilignes généralisées :

$$\begin{cases} \nabla \wedge \mathbf{H} = \frac{1}{\Omega} [\mathbf{t}_1 \left(\frac{\partial H_n}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2}{\partial w_3} \right) + \mathbf{t}_2 \left(\frac{\partial H_1}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n}{\partial w_1} \right) + \mathbf{n} \left(\frac{\partial H_2}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1}{\partial w_2} \right)] \\ \Omega = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \wedge \mathbf{n}) \end{cases} \quad (\text{A.60})$$

H_1, H_2 et H_n sont respectivement les composantes du champ magnétique tel que : $\mathbf{H} = H_1 \mathbf{t}_1 + H_2 \mathbf{t}_2 + H_n \mathbf{n}$, compte tenu de l'expression du rotationnel du champ magnétique en coordonnées curvilignes, le terme en champ proche se réécrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC &= \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \int_\Gamma \frac{\chi}{1+\chi} \frac{1}{\Omega^2} [\{ \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_n^-}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^-}{\partial w_3} \right) + \\ &\left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \left(\frac{\partial H_1^-}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^-}{\partial w_1} \right) + \left(\frac{\partial H_2^+}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^+}{\partial w_2} \right) \left(\frac{\partial H_2^-}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^-}{\partial w_2} \right) \} + \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \\ &\{ \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_1^-}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^-}{\partial w_1} \right) + \left(\frac{\partial H_n^-}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^-}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \}] \delta\eta \, d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

Nous allons maintenant réécrire le champ magnétique H'_- du voisinage inférieur de la surface Γ en fonction de sa valeur H'_+ au voisinage supérieur. D'après les conditions de passage sur les composantes tangentielle et normale du champ électrique, nous trouvons que :

$$\begin{cases} \mathbf{n} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{H}'_-) = (1 + \chi) \mathbf{n} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{H}'_+) \\ \mathbf{n} \cdot (\nabla \wedge \mathbf{H}'_-) = \mathbf{n} \cdot (\nabla \wedge \mathbf{H}'_+) \end{cases} \quad (\text{A.62})$$

Ces deux égalités donnent lieu dans le système de coordonnées curvilignes aux trois relations suivantes :

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial H_n^-}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^-}{\partial w_3} \right) = (1 + \chi) \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \\ \left(\frac{\partial H_1^-}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^-}{\partial w_1} \right) = (1 + \chi) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \\ \left(\frac{\partial H_2^-}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^-}{\partial w_2} \right) = \left(\frac{\partial H_2^+}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^+}{\partial w_2} \right) \end{cases} \quad (\text{A.63})$$

En tenant compte de ces nouvelles égalités, le terme en champ proche se réécrit :

$$\begin{aligned} \int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC &= \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \int_\Gamma \frac{\chi}{1+\chi} \frac{1}{\Omega^2} \left[\{(1 + \chi) \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) + \right. \\ &(1 + \chi) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) + \left. \left(\frac{\partial H_2^+}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^+}{\partial w_2} \right) \left(\frac{\partial H_2^+}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^+}{\partial w_2} \right) \right] + \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \\ &\left\{ \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_1^-}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^-}{\partial w_1} \right) + \left(\frac{\partial H_n^-}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^-}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \right\} \delta \eta \, d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

Configuration bidimensionnelle. surface unidimensionnelle

Dans ce cas les vecteurs de bases $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n})$ deviennent $(\mathbf{t}, \mathbf{y}, \mathbf{n})$ et donc $\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 = \mathbf{t} \cdot \mathbf{y} = 0$ où \mathbf{y} désigne la direction de l'axe d'invariance.

Polarisation TE Réécrivons l'expression du terme en champ proche en fonction de la composante électrique du champ dans le cas général d'une configuration tridimensionnelle :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = -i\omega \varepsilon_0 \int_\Gamma \chi [(\mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}_+) \wedge \mathbf{n}] \cdot \left[\frac{1}{1+\chi} (\mathbf{E}'_+ \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\mathbf{n} \wedge \mathbf{E}'_+) \wedge \mathbf{n} \right] \delta \eta \, d\Gamma \quad (\text{A.65})$$

Dans le cas de la polarisation TE nous avons : $\mathbf{E}_+ = \psi \mathbf{y}$ et $\mathbf{E}'_+ = \psi' \mathbf{y}$. Compte tenu de ces nouvelles expressions nous obtenons directement :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = -i\omega \varepsilon_0 \int_\Gamma \chi \psi \psi' \delta \eta \, d\Gamma} \quad (\text{A.66})$$

Polarisation TM Réécrivons l'expression du terme en champ proche en fonction de la composante magnétique du champ obtenue dans le cas général :

$$\begin{aligned}
\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC &= \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \int_\Gamma \frac{\chi}{1+\chi} \frac{1}{\Omega^2} \left\{ (1+\chi) \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) + \right. \\
(1+\chi) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) &+ \left. \left(\frac{\partial H_2^+}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^+}{\partial w_2} \right) \left(\frac{\partial H_2^+}{\partial w_1} - \frac{\partial H_1^+}{\partial w_2} \right) \right\} + \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 \\
\left\{ \left(\frac{\partial H_n^+}{\partial w_2} - \frac{\partial H_2^+}{\partial w_3} \right) \left(\frac{\partial H_1^-}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^-}{\partial w_1} \right) + \left(\frac{\partial H_1^-}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^-}{\partial w_1} \right) \left(\frac{\partial H_1^+}{\partial w_3} - \frac{\partial H_n^+}{\partial w_1} \right) \right\} &\delta \eta \, d\Gamma
\end{aligned} \tag{A.67}$$

Dans le cas de cette polarisation, nous posons : $\mathbf{H}_+ = \psi \mathbf{y}$ et $\mathbf{H}'_+ = \psi' \mathbf{y}$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2 = \mathbf{t} \cdot \mathbf{y} = 0, & H_1^+ = H_1'^+ = 0 \\ H_1^+ = H_1'^+ = 0, & H_n^+ = H_n'^+ = 0 \\ \frac{\partial}{\partial w_2} \equiv 0, & \Omega = \mathbf{t} \cdot (\mathbf{y} \wedge \mathbf{n}) = 1 \end{array} \right. \tag{A.68}$$

Compte tenu de ces égalités, le terme en champ proche se réécrit sous la forme :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \int_\Gamma \left[\chi \frac{\partial \psi}{\partial w_3} \frac{\partial \psi'}{\partial w_3} + \frac{\chi}{1+\chi} \frac{\partial \psi}{\partial w_1} \frac{\partial \psi'}{\partial w_1} \right] \delta \eta \, d\Gamma} \tag{A.69}$$

A.3.2 Surface parfaitement conductrice.

Configuration tridimensionnelle. surface bidimensionnelle

Dans ce cas seuls les courants superficiels contribuent au champ diffracté, nous avons par conséquent :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \int_B \mathbf{E}_a \cdot \mathbf{J}_b \, dB - \int_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a \, dA \tag{A.70}$$

Si nous supposons maintenant que la surface A entoure complètement B alors nous pourrions écrire que :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = - \int_A \mathbf{E}_b \cdot \mathbf{J}_a \, dA \tag{A.71}$$

La surface B est maintenant renommée par Γ_o et A par Γ où Γ_o correspond à $w_3 = 0$. Les vecteurs de base du système de coordonnées généralisées sur Γ_o sont notés par $(\mathbf{t}_1^o, \mathbf{t}_2^o, \mathbf{n}^o)$, sur la surface Γ ces vecteurs sont notés par $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n})$.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{t}_1 = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial w_1}, & \mathbf{t}_1^o = \frac{\partial \mathbf{R}_o}{\partial w_1} \\ \mathbf{t}_2 = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial w_2}, & \mathbf{t}_2^o = \frac{\partial \mathbf{R}_o}{\partial w_2} \\ \mathbf{n} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial w_3}, & \mathbf{n}^o = \frac{\partial \mathbf{R}_o}{\partial w_3}, \end{array} \right. \tag{A.72}$$

où \mathbf{R}_o et \mathbf{R} désignent des vecteurs position sur les surface Γ et Γ_o . Ces derniers sont également appelés vecteurs primaires. Nous associons à ces vecteurs de base, les vecteurs réciproques $(\mathbf{r}_1^o, \mathbf{r}_2^o, \mathbf{r}_n^o)$ et $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_n)$ définis par :

$$\begin{cases} \mathbf{r}_1 = \frac{1}{\Omega} \mathbf{t}_2 \wedge \mathbf{n}, & \mathbf{r}_1^o = \frac{1}{\Omega_o} \mathbf{t}_2^o \wedge \mathbf{n}^o \\ \mathbf{r}_2 = \frac{1}{\Omega} \mathbf{n} \wedge \mathbf{t}_1, & \mathbf{r}_2^o = \frac{1}{\Omega_o} \mathbf{n}^o \wedge \mathbf{t}_1^o \\ \mathbf{r}_n = \frac{1}{\Omega} \mathbf{t}_1 \wedge \mathbf{t}_2, & \mathbf{r}_n^o = \frac{1}{\Omega} \mathbf{t}_1^o \wedge \mathbf{t}_2^o, \end{cases} \quad (\text{A.73})$$

où $\Omega = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \wedge \mathbf{n})$ et $\Omega_o = \mathbf{t}_1^o \cdot (\mathbf{t}_2^o \wedge \mathbf{n}^o)$. Les vecteurs primaires sont également définis à partir des vecteurs réciproques à travers les relations :

$$\begin{cases} \mathbf{t}_1 = \Omega \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{r}_n, & \mathbf{t}_1^o = \Omega_o \mathbf{r}_2^o \wedge \mathbf{r}_n^o \\ \mathbf{t}_2 = \Omega \mathbf{r}_n \wedge \mathbf{r}_1, & \mathbf{t}_2^o = \Omega_o \mathbf{r}_n^o \wedge \mathbf{r}_1^o \\ \mathbf{n} = \Omega \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}_2, & \mathbf{n}^o = \Omega_o \mathbf{r}_1^o \wedge \mathbf{r}_2^o \end{cases} \quad (\text{A.74})$$

Nous renommons \mathbf{J}_a par \mathbf{J} courant induit sur la surface Γ sous les angles d'incidence (θ_i, ϕ_i) et \mathbf{E}_b par \mathbf{E}'_o , lequel représente la valeur du champ électrique sur la surface Γ lié à sa source induite sur la surface Γ_o par un champ incident sous les angles d'incidence (θ'_i, ϕ'_i) . Dans ce cas nous pouvons écrire :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = - \int_\Gamma \mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{J} d\Gamma \quad (\text{A.75})$$

Lorsque les surfaces Γ et Γ_o sont très proches l'une de l'autre, nous pouvons alors faire un développement limité à l'ordre un pour le champ électrique par rapport à la coordonnée curviligne w_3 . Dans ce cas nous pouvons approcher le terme en champ proche par l'expression :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = - \int_\Gamma (\mathbf{E}'_o + \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} dw_3) \cdot \mathbf{J} d\Gamma \quad (\text{A.76})$$

Dorénavant nous assimilons le déplacement normal à la surface dw_3 à la correction $\delta\eta$ sur la profil. Dans ce cas nous pouvons réécrire :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = - \int_\Gamma \mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{J} d\Gamma - \int_\Gamma \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{J} \delta\eta d\Gamma \quad (\text{A.77})$$

Le produit $\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{J}$ vaut zéro. En effet :

Démonstration De $\mathbf{n}_o \wedge \mathbf{E}'_o = \mathbf{0}$ et $\mathbf{n} \wedge \mathbf{H} = \mathbf{J}$ nous savons que \mathbf{E}'_o est normal à la surface Γ_o tandis que \mathbf{J} est tangent à la surface Γ . Nous pouvons alors décomposer ces deux grandeurs sur les vecteurs primaires et réciproques :

$$\begin{cases} \mathbf{E}'_o = \mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{r}_n^o \mathbf{n}_o \\ \mathbf{J} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_1 \mathbf{t}_1 + \mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_2 \mathbf{t}_2 + \mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_n \mathbf{n} \end{cases} \quad (\text{A.78})$$

Nous approchons maintenant les vecteurs primaires (\mathbf{t}_1 , \mathbf{t}_2 , \mathbf{n}) par leurs développements au voisinage de la surface Γ_o suivant les expressions :

$$\begin{cases} \mathbf{t}_1 = \mathbf{t}_1^o + \frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3} \delta\eta \\ \mathbf{t}_2 = \mathbf{t}_2^o + \frac{\partial \mathbf{t}_2^o}{\partial w_3} \delta\eta \\ \mathbf{n} = \mathbf{n}_o + \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_3} \delta\eta, \end{cases} \quad (\text{A.79})$$

dans ce cas le produit scalaire s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{J} = (\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{r}_n^o) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_1) (\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{t}_1^o) + (\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{r}_n^o) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_2) (\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{t}_2^o) + (\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{r}_n^o) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_1) (\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3}) \delta\eta + (\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{r}_n^o) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_2) (\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{t}_2^o}{\partial w_3}) \delta\eta \quad (\text{A.80})$$

Les deux premiers termes du second membre de cette équation sont nuls car : $\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{t}_1^o = 0$ et $\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{t}_2^o = 0$. Les deux derniers termes du second membre de cette équation sont strictement nuls. En effet, nous avons $\frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3} = \frac{\partial}{\partial w_3} \left(\frac{\partial \mathbf{R}_o}{\partial w_1} \right) = \frac{\partial}{\partial w_1} \left(\frac{\partial \mathbf{R}_o}{\partial w_3} \right) = \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_1}$ où \mathbf{R}_o désigne le vecteur position. Dans ce cas : $\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3} = \mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_1} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w_1} (\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{n}_o) = 0$. En effectuant le même raisonnement nous trouvons également que : $\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{t}_2^o}{\partial w_3} = 0$

Par conséquent nous avons :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = - \int_\Gamma \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{J} \delta\eta d\Gamma, \quad (\text{A.81})$$

où :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} = \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o \mathbf{r}_1^o + \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o \mathbf{r}_2^o + \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{n}^o \mathbf{r}_n^o \\ \mathbf{J} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2 \mathbf{r}_2 \simeq \mathbf{J} \cdot (\mathbf{t}_1^o + \frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3} \delta\eta) (\mathbf{r}_1^o + \frac{\partial \mathbf{r}_1^o}{\partial w_3} \delta\eta) + \mathbf{J} \cdot (\mathbf{t}_2^o + \frac{\partial \mathbf{t}_2^o}{\partial w_3} \delta\eta) (\mathbf{r}_2^o + \frac{\partial \mathbf{r}_2^o}{\partial w_3} \delta\eta) \end{cases} \quad (\text{A.82})$$

Dans le produit scalaire de $\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3}$ par \mathbf{J} nous négligeons les termes évoluant en $\delta\eta$ et $\delta\eta^2$. Par conséquent, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC &= - \int_\Gamma \left\{ \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) \mathbf{r}_1^o \cdot \mathbf{r}_1^o + \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) \mathbf{r}_2^o \cdot \mathbf{r}_2^o + \right. \\ &\quad \left. \left[\left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) + \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) \right] \mathbf{r}_1^o \cdot \mathbf{r}_2^o \right\} \delta\eta d\Gamma, \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

D'autre part, de :

$$\begin{cases} \nabla \wedge \mathbf{E}'_o = i\omega\mu_0 \mathbf{H}'_o \\ \mathbf{n}_o \wedge \mathbf{H}'_o = \mathbf{J}'_o, \end{cases} \quad (\text{A.84})$$

nous avons :

$$i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o = \mathbf{n}_o \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}'_o) \quad (\text{A.85})$$

Nous avons d'après la définition du rotationnel en coordonnées curvilignes non orthogonales :

$$\nabla \wedge \mathbf{E}'_o = \frac{1}{\Omega_o} \left[\mathbf{t}_1^o \left(\frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{n}_o)}{\partial w_2} - \frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_3} \right) + \mathbf{t}_2^o \left(\frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_3} - \frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{n}_o)}{\partial w_1} \right) + \mathbf{n}_o \left(\frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_1} - \frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_2} \right) \right] \quad (\text{A.86})$$

En utilisons les relations : $\mathbf{r}_2^o = \frac{1}{\Omega_o} (\mathbf{n}_o \wedge \mathbf{t}_1^o)$, $\mathbf{r}_1^o = \frac{1}{\Omega_o} (\mathbf{t}_2^o \wedge \mathbf{n}_o)$ et $\mathbf{n}_o \wedge \mathbf{n}_o = \mathbf{0}$ nous obtenons que :

$$\mathbf{n}_o \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}'_o) = i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o = \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{n}_o)}{\partial w_1} - \frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_3} \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{n}_o)}{\partial w_2} - \frac{\partial(\mathbf{E}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_3} \right) \quad (\text{A.87})$$

Ce qui donne :

$$i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o = \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o + \mathbf{E}'_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_1} - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o - \mathbf{E}'_o \cdot \frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3} \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o + \mathbf{E}'_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_2} - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o - \mathbf{E}'_o \cdot \frac{\partial \mathbf{t}_2^o}{\partial w_3} \right), \quad (\text{A.88})$$

sachant que nous avons les identités $\frac{\partial \mathbf{t}_1^o}{\partial w_3} = \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_1}$ et $\frac{\partial \mathbf{t}_2^o}{\partial w_3} = \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_2}$, nous écrivons que :

$$i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o = \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o \right) \quad (\text{A.89})$$

De plus, nous avons également :

$$\mathbf{J} = (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) \mathbf{r}_1^o + (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) \mathbf{r}_2^o \quad (\text{A.90})$$

Dans ce cas nous pouvons écrire que :

$$\begin{aligned} i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J} &= \mathbf{r}_1^o \cdot \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) + \mathbf{r}_1^o \cdot \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_1^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) + \\ &\quad \mathbf{r}_2^o \cdot \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) + \mathbf{r}_2^o \cdot \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o - \frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{t}_2^o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) \end{aligned} \quad (\text{A.91})$$

Compte tenu de l'expression de $i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J}$ et de celle de $\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_3} \cdot \mathbf{J}$, nous pouvons écrire que :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = - \int_\Gamma \left\{ -i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J} + \mathbf{r}_1^o \cdot \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) + \mathbf{r}_2^o \cdot \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) + \right. \quad (\text{A.92})$$

$$\left. \mathbf{r}_2^o \cdot \mathbf{r}_2^o \left[\left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o) + \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o \right) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o) \right] \right\} \delta \eta d\Gamma,$$

Lorsque nous approchons le courant \mathbf{J} par la décomposition $\mathbf{J} \simeq \mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_1^o \mathbf{r}_1^o + \mathbf{J} \cdot \mathbf{t}_2^o \mathbf{r}_2^o$, le terme en champ proche se réécrit :

$$\int_{\mathcal{C}} [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho d\mathcal{C} = - \int_{\Gamma} \left\{ -i\omega\mu_0 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J} + \mathbf{J} \cdot [\mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o \right)] \right\} \delta\eta d\Gamma, \quad (\text{A.93})$$

Concentrons nous maintenant sur l'évaluation du terme $\mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o \right)$

Pour ce faire, nous partons de :

$$\mathbf{E}'_o = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \nabla \wedge \mathbf{H}'_o \quad (\text{A.94})$$

Qui se réécrit lorsque nous utilisons la définition du rotationnel en coordonnées curvilignes non orthogonales sous la forme :

$$\mathbf{E}'_o = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \frac{1}{\Omega_o} \left[\mathbf{t}_1^o \left(\frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{n}_o)}{\partial w_2} - \frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_3} \right) + \mathbf{t}_2^o \left(\frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_3} - \frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{n}_o)}{\partial w_1} \right) + \mathbf{n}_o \left(\frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_1} - \frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_2} \right) \right] \quad (\text{A.95})$$

Or de $\mathbf{n}_o \wedge \mathbf{E}'_o = \mathbf{0}$, nous savons que le champ électrique \mathbf{E}'_o est normal à la surface Γ_o , par conséquent :

$$\mathbf{E}'_o = \frac{i}{\omega\varepsilon_0} \frac{1}{\Omega_o} \mathbf{n}_o \left(\frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_1} - \frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_2} \right) \quad (\text{A.96})$$

Pour mettre en relation cette expression du champ électrique avec le courant superficiel, nous partons de l'expression :

$$\mathbf{J}'_o = \mathbf{n}_o \wedge \mathbf{H}'_o = \mathbf{n}_o \wedge [(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o) \mathbf{r}_1^o + (\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o) \mathbf{r}_2^o], \quad (\text{A.97})$$

compte tenu du fait que $\mathbf{n}_o = \mathbf{r}_n^o$ (se démontre) et des relations exprimant les vecteurs primaires en fonction des vecteurs réciproques, nous obtenons :

$$\mathbf{J}'_o = -\frac{1}{\Omega_o} (\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o) \mathbf{t}_1^o + \frac{1}{\Omega_o} (\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o) \mathbf{t}_2^o = (\mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{r}_1^o) \mathbf{t}_1^o + (\mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{r}_2^o) \mathbf{t}_2^o \quad (\text{A.98})$$

Calculons maintenant la divergence de surface ∇_s donnée par sa définition en coordonnées curvilignes :

$$\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o = \frac{1}{\Omega_o} \left[\frac{\partial(\Omega_o \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{r}_1^o)}{\partial w_1} + \frac{\partial(\Omega_o \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{r}_2^o)}{\partial w_2} \right], \quad (\text{A.99})$$

qui conduit dans ce cas au résultat :

$$\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o = -\frac{1}{\Omega_o} \left[\frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_2^o)}{\partial w_1} - \frac{\partial(\mathbf{H}'_o \cdot \mathbf{t}_1^o)}{\partial w_2} \right] \quad (\text{A.100})$$

Par conséquent compte tenu de Eqs (A.100), (A.96) le champ électrique \mathbf{E}'_o se réécrit en fonction du courant de surface \mathbf{J}'_o sous la forme :

$$\mathbf{E}'_o = -\frac{i}{\omega\varepsilon_0} \mathbf{n}_o \nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o \quad (\text{A.101})$$

Compte tenu de cette nouvelle expression du champ électrique, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o \right) &= -\frac{i}{\omega\varepsilon_0} \left\{ [(\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_1}) (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) + (\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{n}_o) \frac{\partial(\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o)}{\partial w_1}] \mathbf{r}_1^o + \right. \\ &\quad \left. [(\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_2}) (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) + (\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{n}_o) \frac{\partial(\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o)}{\partial w_2}] \mathbf{r}_2^o \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.102})$$

Or de $\mathbf{n}_o \cdot \mathbf{n}_o = 1$ nous avons $\mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_1} = \mathbf{n}_o \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_o}{\partial w_2} = 0$. Dans ce cas :

$$\mathbf{r}_1^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_1} \cdot \mathbf{n}_o \right) + \mathbf{r}_2^o \left(\frac{\partial \mathbf{E}'_o}{\partial w_2} \cdot \mathbf{n}_o \right) = -\frac{i}{\omega \varepsilon_0} \left[\frac{\partial (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o)}{\partial w_1} \mathbf{r}_1^o + \frac{\partial (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o)}{\partial w_2} \mathbf{r}_2^o \right] = -\frac{i}{\omega \varepsilon_0} \nabla_s \cdot \nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o \quad (\text{A.103})$$

Par conséquent le terme en champ proche se réécrit sous la forme :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \int_\Gamma \{k_0^2 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J} + (\nabla_s \cdot \nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) \cdot \mathbf{J}\} \delta \eta \, d\Gamma, \quad (\text{A.104})$$

où $k_0^2 = \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0$ le module au carré du vecteur d'onde. Nous ajoutons l'identité :

$$(\nabla_s \cdot \nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) \cdot \mathbf{J} = \nabla_s \cdot [(\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) \mathbf{J}] - (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) (\nabla_s \cdot \mathbf{J}) \quad (\text{A.105})$$

Dans ce cas le terme en champ proche se réécrit sous la forme :

$$\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \int_\Gamma \{k_0^2 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J} - (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) (\nabla_s \cdot \mathbf{J})\} \delta \eta \, d\Gamma + \int_\Gamma \nabla_s \cdot [(\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) \mathbf{J}] \delta \eta \, d\Gamma \quad (\text{A.106})$$

En pratique le deuxième terme intégral du second membre de cette équation vaut zéro (se démontre). Par conséquent nous obtenons le résultat final :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho \, dC = \int_\Gamma \{k_0^2 \mathbf{J}'_o \cdot \mathbf{J} - (\nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o) (\nabla_s \cdot \mathbf{J})\} \delta \eta \, d\Gamma,} \quad (\text{A.107})$$

où les divergences surfaciques des courants sont données par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \nabla_s \cdot \mathbf{J}'_o = \mathbf{r}_1^o \cdot \frac{\partial \mathbf{J}'_o}{\partial w_1} + \mathbf{r}_2^o \cdot \frac{\partial \mathbf{J}'_o}{\partial w_2} \\ \nabla_s \cdot \mathbf{J} = \mathbf{r}_1^o \cdot \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial w_1} + \mathbf{r}_2^o \cdot \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial w_2} \end{cases} \quad (\text{A.108})$$

Configuration bidimensionnelle. surface unidimensionnelle

Dans ce cas les vecteurs primaires sont confondus avec les vecteurs réciproques : $\mathbf{t}_1^o = \mathbf{r}_1^o = \mathbf{t}_o$, $\mathbf{t}_2^o = \mathbf{r}_2^o = \mathbf{y}$ (axe d'invariance) et $\mathbf{n}_o = \mathbf{r}_n^o$ (déjà vérifié dans le cas tridimensionnel). De plus, nous avons $\Omega_o = \mathbf{t}_1^o \cdot (\mathbf{t}_2^o \wedge \mathbf{n}_o) = \mathbf{t}_o \cdot (\mathbf{y} \wedge \mathbf{n}_o)$ et $\frac{\partial}{\partial w_2} \equiv 0$ (invariance des champs suivant cet axe).

Polarisation TE Les courants s'écrivent : $\mathbf{J}'_o = J'_o \mathbf{y}$ et $\mathbf{J} = J \mathbf{y}$ et le terme en champ proche devient :

$$\begin{aligned} \int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC &= \int_\Gamma \{k_0^2 J'_o J - (\mathbf{t}_o \cdot \mathbf{y}) (\mathbf{t}_o \cdot \mathbf{y}) \frac{\partial J'_o}{\partial w_1} \frac{\partial J}{\partial w_1}\} \delta\eta d\Gamma \\ &= \int_\Gamma k_0^2 J'_o J \delta\eta d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{A.109})$$

En partant des relations $\mathbf{n}_o \wedge \mathbf{H}'_o = \mathbf{J}'_o$ et $\mathbf{H}'_o = -\frac{i}{\omega\mu_0} \nabla \wedge \mathbf{E}'_o$, nous trouvons que : $\mathbf{J}'_o = -\frac{i}{\omega\mu_0} \mathbf{n}_o \wedge (\nabla \wedge \mathbf{E}'_o)$. De plus, si nous remplaçons le champ électrique par son expression $\mathbf{E}'_o = \psi' \mathbf{y}$ nous trouvons l'expression suivante pour le courant de surface :

$$\mathbf{J}'_o = \frac{i}{\omega\mu_0} \frac{\partial \psi'}{\partial w_3} \mathbf{y} \quad (\text{A.110})$$

En effectuant le même calcul, nous trouvons pour le courant de surface \mathbf{J} en fonction du champ électrique $\mathbf{E} = \psi \mathbf{y}$:

$$\mathbf{J} = \frac{i}{\omega\mu_0} \frac{\partial \psi}{\partial w_3} \mathbf{y} \quad (\text{A.111})$$

Par conséquent le terme en champ proche est donné par le produit des dérivées normales du champ électrique sous la forme :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = -\frac{k_0^2}{\omega^2 \mu^2} \int_\Gamma \frac{\partial \psi}{\partial w_3} \frac{\partial \psi'}{\partial w_3} \delta\eta d\Gamma} \quad (\text{A.112})$$

Polarisation TM Dans ce cas les courants de surface sont donnés par les expressions : $\mathbf{J}'_o = J'_o \mathbf{t}_o$ et $\mathbf{J} = J \mathbf{t}_o$. De plus en utilisant les relations $\mathbf{J}'_o = \mathbf{n}_o \wedge \mathbf{H}'_o$, $\mathbf{J} = \mathbf{n}_o \wedge \mathbf{H}$ et les définitions $\mathbf{H}'_o = \psi' \mathbf{y}$, $\mathbf{H} = \psi \mathbf{y}$ nous trouvons dans ce cas que le terme en champ proche s'écrit sous la forme :

$$\boxed{\int_C [\mathbf{H}_b \wedge \mathbf{E}_a - \mathbf{H}_a \wedge \mathbf{E}_b] \cdot \mathbf{u}_\rho dC = -\int_\Gamma \{k_0^2 \psi \psi' - \frac{\partial \psi}{\partial w_1} \frac{\partial \psi'}{\partial w_1}\} \delta\eta d\Gamma} \quad (\text{A.113})$$

Annexe B

Diffraction électromagnétique par une surface unidimensionnelle

B.1 Laplacien d'une fonction discontinue sur une surface Γ

On considère une interface Γ fermée qui délimite un volume (V^-). On note par V^+ son volume extérieur et l'on désigne tout l'espace par $V^\infty = V^- \cup V^+$. Soit ψ une fonction de classe C^2 par morceau et discontinue sur Γ . On note $\sigma^{(o)} = \psi^+ - \psi^-$ le saut que fait la valeur de la fonction ψ lorsqu'on passe du volume (V^-) au volume (V^+). On note également $\sigma_n^{(1)} = \partial_n \psi^+ - \partial_n \psi^-$ le saut de sa dérivée normale. Au sens des fonctions ψ s'écrit :

$$\psi = \begin{cases} \psi^+ & \mathbf{r} \in V^+ \\ \psi^- & \mathbf{r} \in V^- \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Au sens des distributions le laplacien de ψ [40] vaut :

$$\Delta\psi = \{\Delta\psi\} + \sigma_n^{(1)}\delta_\Gamma + \sigma^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma \quad (\text{B.2})$$

Dans l'équation B.2 le terme $\{\Delta\psi\}$ est la partie régulière de la distribution $\Delta\psi$, tandis que $\sigma_n^{(1)}\delta_\Gamma + \sigma^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma$ représente sa partie singulière. δ_Γ est la distribution delta surfacique dont l'action sur toute fonction test ϕ donne le résultat $\langle \delta_\Gamma, \phi \rangle = \iint_\Gamma \phi \, d\Gamma$

B.2 Formule de Green pour le calcul de la fonction ψ^-

Soit la fonction $\psi^- = \begin{cases} 0 & \mathbf{r} \in V^+ \\ \psi^- & \mathbf{r} \in V^- \end{cases}$. Cette fonction de support borné fait un saut $\sigma_-^{(o)} = 0 - \psi^-$ en traversant l'interface Γ de l'intérieur vers l'extérieur. La dérivée normale fait également un saut $\sigma_{n-}^{(1)} = 0 - \partial_n \psi^-$ à travers l'interface Γ . Son laplacien au sens des distribution est donné par l'expression :

$$\Delta\psi^- = \{\Delta\psi^-\} + \sigma_{n^-}^{(1)}\delta_\Gamma + \sigma_-^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma \quad (\text{B.3})$$

Appliquons la distribution $\Delta\psi^- - \{\Delta\psi^-\}$ à une fonction test ϕ^- . Cela donne :

$$\langle \Delta\psi^- - \{\Delta\psi^-\}, \phi^- \rangle = \langle \sigma_{n^-}^{(1)}\delta_\Gamma + \sigma_-^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma, \phi^- \rangle \quad (\text{B.4})$$

Sachant que $\langle \sigma_-^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma, \phi^- \rangle = -\langle \sigma_-^{(o)}\delta_\Gamma, \partial_n\phi^- \rangle$ et $\langle \Delta\psi^-, \phi^- \rangle = \langle \psi^-, \Delta\phi^- \rangle$. L'égalité B.4 se réécrit sous la forme explicite :

$$\iiint_{V^\infty} \{\psi^- \Delta\phi^- - \Delta\psi^- \phi^-\} dV = \iint_\Gamma \{\sigma_{n^-}^{(1)}\phi^- - \sigma_-^{(o)}\partial_n\phi^-\} d\Gamma \quad (\text{B.5})$$

Sachant que $\Delta\psi^- = -k_-^2\psi^-$ et $\Delta\phi^- = -k_-^2\phi^- - \delta_{\mathbf{r}'}$, on trouve finalement :

$$\iint_\Gamma \{\phi^- \partial_n\psi^- - \psi^- \partial_n\phi^-\} d\Gamma = \begin{cases} 0 & \mathbf{r}' \in V^+ \\ \psi^- & \mathbf{r}' \in V^- \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

B.3 Formule de *Green* pour le calcul de la fonction ψ^+

La fonction $\psi^+ = \begin{cases} \psi^+ & \mathbf{r} \in V^+ \\ 0 & \mathbf{r} \in V^- \end{cases}$ possède un support non borné car elle s'écrit comme la somme $\psi^+ = \psi^d + \psi^i$ d'un champ diffracté dont le support est borné, et du champ incident dont le support peut être infini c'est le cas d'une onde plane par exemple. Avec ψ^+ qui fait le saut $\sigma_+^{(o)} = \psi^+ - 0$ sur l'interface Γ , de même sa dérivée normale fait le saut $\sigma_{n^+}^{(1)} = \partial_n\psi^+ - 0$ au passage à travers Γ . La distribution associée au laplacien de la fonction ψ^+ est :

$$\Delta\psi^+ = \{\Delta\psi^+\} + \sigma_{n^+}^{(1)}\delta_\Gamma + \sigma_+^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma \quad (\text{B.7})$$

Sachant que $\Delta\psi^+ - \{\Delta\psi^+\} = \Delta\psi^d - \{\Delta\psi^d\}$ car $\Delta\psi^i - \{\Delta\psi^i\} = 0$. ψ^i étant une fonction de classe C^2 sur tout l'espace V^∞ , si maintenant on applique $\Delta\psi^d - \{\Delta\psi^d\}$ sur une fonction test ϕ^+ :

$$\langle \Delta\psi^d - \{\Delta\psi^d\}, \phi^+ \rangle = \langle \sigma_{n^+}^{(1)}\delta_\Gamma + \sigma_+^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma, \phi^+ \rangle \quad (\text{B.8})$$

En utilisant les propriétés liées aux distributions $\langle \Delta\psi^d, \phi^+ \rangle = \langle \psi^d, \Delta\phi^+ \rangle$ ainsi que $\langle \sigma_+^{(o)}\partial_n\delta_\Gamma, \phi^+ \rangle = -\langle \sigma_+^{(o)}\delta_\Gamma, \partial_n\phi^+ \rangle$. Sachant que $\Delta\psi^+ = -k_+^2\psi^+$ et $\Delta\phi^+ = -k_+^2\phi^+ - \delta_{\mathbf{r}'}$, l'égalité B.8 se réécrit sous la forme explicite :

$$\psi^i - \iint_{\Gamma} \{\phi^+ \partial_n \psi^+ - \psi^+ \partial_n \phi^+\} d\Gamma = \begin{cases} \psi^+ & \mathbf{r}' \in V^+ \\ 0 & \mathbf{r}' \in V^- \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

B.4 Le champ électromagnétique pour le cas d'une interface Γ unidimensionnelle

Une façon générale d'exprimer le champ électromagnétique soit à travers sa composante électrique pour le cas de la polarisation TE . Ou de sa composante magnétique dans le cas de la polarisation TM , peut se faire grâce à la fonction scalaire $\psi(\mathbf{r})$ qu'on définit par :

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \psi^+(\mathbf{r}) & \mathbf{r} \in V^+ \\ \psi^-(\mathbf{r}) & \mathbf{r} \in V^- \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

$\psi^+(\mathbf{r})$ représente le champ total dans le volume V^+ qui est somme du champ incident et du champ diffracté $\psi^+(\mathbf{r}) = \psi^i(\mathbf{r}) + \psi^d(\mathbf{r})$. Alors que $\psi^-(\mathbf{r})$ représente le champ transmis à travers l'interface Γ . Ils sont donnés par les deux expressions suivantes :

$$\iint_{\Gamma} \{g_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \partial_n \psi^-(\mathbf{r}) - \psi^-(\mathbf{r}) \partial_n g_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\} d\Gamma = \begin{cases} 0 & \mathbf{r}' \in V^+ \\ \psi^-(\mathbf{r}') & \mathbf{r}' \in V^- \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

Et

$$\psi^i(\mathbf{r}') - \iint_{\Gamma} \{g_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \partial_n \psi^+(\mathbf{r}) - \psi^+(\mathbf{r}) \partial_n g_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\} d\Gamma = \begin{cases} \psi^+(\mathbf{r}') & \mathbf{r}' \in V^+ \\ 0 & \mathbf{r}' \in V^- \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

Jusque là on a pas encore introduit de condition de passage du champ électromagnétique à l'interface Γ . Ces équations de passage se traduisent par des conditions imposées aux fonctions ψ^- , ψ^+ ainsi que leurs dérivées normales respectives $\partial_n \psi^-$ et $\partial_n \psi^+$ sur l'interface Γ .

Bibliographie

- [1] V. Lauer. New approach to optical diffraction tomography yielding a vector equation of diffraction tomography and a novel tomographic microscope. *Journal of Microscopy*, 205(2) :165–176, 2002.
- [2] O. Haeberlé, K. Belkebir, H. Giovaninni, and A. Sentenac. Tomographic diffractive microscopy : Basics, techniques and perspectives. *Journal of Modern Optics*, 57(9) :686–699, 2010.
- [3] D. Huang, E.A. Swanson, C.P. Lin, J.S. Schuman, W.G. Stinson, W. Chang, M.R. Hee, T. Flotte, K. Gregory, C.A. Puliafito, et al. Optical coherence tomography. *Science*, 254(5035) :1178–1181, 1991.
- [4] T. Wilson and CJR Sheppard. Theory and practice of optical scanning microscopy. *Academic, London*, page 47, 1984.
- [5] GQ Xiao, T.R. Corle, and GS Kino. Real-time confocal scanning optical microscope. *Applied physics letters*, 53(8) :716–718, 1988.
- [6] H.J. Tiziani and H.M. Uhde. Three-dimensional image sensing by chromatic confocal microscopy. *Applied optics*, 33(10) :1838–1843, 1994.
- [7] S.A. Alexandrov, T.R. Hillman, T. Gutzler, and D.D. Sampson. Synthetic aperture fourier holographic optical microscopy. *Physical review letters*, 97(16) :168102, 2006.
- [8] M. Debailleul, B. Simon, V. Georges, O. Haeberlé, and V. Lauer. Holographic microscopy and diffractive microtomography of transparent samples. *Measurement Science and Technology*, 19 :074009, 2008.
- [9] M. Debailleul, V. Georges, B. Simon, R. Morin, and O. Haeberlé. High-resolution three-dimensional tomographic diffractive microscopy of transparent inorganic and biological samples. *Optics letters*, 34(1) :79–81, 2009.
- [10] W. Choi, C. Fang-Yen, K. Badizadegan, S. Oh, N. Lue, R.R. Dasari, and M.S. Feld. Tomographic phase microscopy. *Nature methods*, 4(9) :717–719, 2007.

- [11] G. Maire, F. Drsek, J. Girard, H. Giovannini, A. Talneau, D. Konan, K. Belkebir, P.C. Chaumet, and A. Sentenac. Experimental demonstration of quantitative imaging beyond abbe's limit with optical diffraction tomography. *Physical review letters*, 102(21) :213905, 2009.
- [12] K. Belkebir, P.C. Chaumet, and A. Sentenac. Influence of multiple scattering on three-dimensional imaging with optical diffraction tomography. *JOSA A*, 23(3) :586–595, 2006.
- [13] F. Simonetti. Multiple scattering : The key to unravel the subwavelength world from the far-field pattern of a scattered wave. *Physical Review E*, 73(3) :036619, 2006.
- [14] J. Girard, G. Maire, H. Giovannini, A. Talneau, K. Belkebir, P.C. Chaumet, and A. Sentenac. Nanometric resolution using far-field optical tomographic microscopy in the multiple scattering regime. *PHYSICAL REVIEW A Phys Rev A*, 82(061801) :061801, 2010.
- [15] JWS Rayleigh. The theory of sound, vol. 2, 1896. *Reprinted, Dover, New York*, 1945.
- [16] S.O. Rice. Reflection of electromagnetic waves from slightly rough surfaces. *Communications on pure and applied mathematics*, 4(2-3) :351–378, 1951.
- [17] S.O. Rice. Reflection of electromagnetic waves from slightly rough surfaces. (*New York : Interscience*), 1963.
- [18] Beckmann P and Spizzichino. The scattering of electromagnetic waves from rough surfaces. (*Oxford : Pergamon*), 1963.
- [19] J.A. Ogilvy and H.M. Merklinger. Theory of wave scattering from random rough surfaces. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 90 :3382, 1991.
- [20] F.G. Tricomi. *Integral equations*. Dover Pubns, 1985.
- [21] W. C. Meecham. On the use of the kirchhoff approximation for the solution of reflection problems. *J. Rational Mech, Anal.* 5 :323–34, 1956.
- [22] J.D. Jackson and R.F. Fox. Classical electrodynamics. *American Journal of Physics*, 67 :841, 1999.
- [23] P. Poincelot and L. de Broglie. *Précis d'électromagnétisme théorique*, volume 9. Dunod, 1963.

- [24] D.L. Colton and R. Kress. *Integral equation methods in scattering theory*, volume 57. Wiley New York, 1983.
- [25] J.C. Nédélec. *Acoustic and electromagnetic equations : Integral representations for harmonic problems*, volume 144. Springer Verlag, 2001.
- [26] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, volume 55. Dover publications, 1964.
- [27] C.F. Boliren and D.R. Huffman. Absorption and scattering of light by small particles. *J Wiley & Sons, New York*, 1983.
- [28] R. Petit, L.C. Botten, et al. *Electromagnetic theory of gratings*, volume 62. Springer-Verlag Berlin, 1980.
- [29] J. Jin, J. Jin, and J.M. Jin. *The finite element method in electromagnetics*. Wiley New York, 1993.
- [30] L. Tsang, J.A. Kong, K.H. Ding, and C.O. Ao. *Scattering of electromagnetic waves*. Wiley Online Library, 2001.
- [31] G.F. Roach. *Green's functions*. Cambridge Univ Pr, 1982.
- [32] J. Richmond. Scattering by a dielectric cylinder of arbitrary cross section shape. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 13(3) :334–341, 1965.
- [33] J. Richmond. Te-wave scattering by a dielectric cylinder of arbitrary cross-section shape. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 14(4) :460–464, 1966.
- [34] H. Gan and W.C. Chew. A discrete bcg-fft algorithm for solving 3d inhomogeneous scatterer problems1. *Urbana*, 51 :61801, 1995.
- [35] A.L. Aden and M. Kerker. Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres. *Journal of Applied Physics*, 22(10) :1242–1246, 1951.
- [36] R. Axline and A. Fung. Numerical computation of scattering from a perfectly conducting random surface. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 26(3) :482–488, 1978.
- [37] M. Saillard and D. Maystre. Scattering from metallic and dielectric rough surfaces. *JOSA A*, 7(6) :982–990, 1990.

- [38] P. Tran, V. Celli, and AA Maradudin. Electromagnetic scattering from a two-dimensional, randomly rough, perfectly conducting surface : iterative methods. *JOSA A*, 11(5) :1686–1689, 1994.
- [39] E.I. Thorsos. The validity of the kirchhoff approximation for rough surface scattering using a gaussian roughness spectrum. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 83 :78, 1988.
- [40] W. Appel. Mathématiques pour la physique et les physiciens! *Recherche*, 67 :02, 2002.
- [41] R.F. Harrington. *Field computation by moment methods*. Wiley-IEEE Press, 1993.
- [42] AA Maradudin, T. Michel, AR McGurn, and ER Méndez. Enhanced backscattering of light from a random grating. *Annals of Physics*, 203(2) :255–307, 1990.
- [43] J. Hadamard. Sur les problemes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton University Bulletin*, 13(49-52) :28, 1902.
- [44] J. Hadamard. *Le probleme de Cauchy et les équations aux dérivées partielles linéaires hyperboliques*, volume 1032. Paris, 1932.
- [45] A. Tikhonov and V. Arsenine. *Méthodes de résolutions de problèmes mal posés*. Editions Mir, 1976.
- [46] K. Belkebir, R.E. Kleinman, and C. Pichot. Microwave imaging-location and shape reconstruction from multifrequency scattering data. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 45(4) :469–476, 1997.
- [47] A. Franchois. *Contribution à la Tomographie Microonde : Algorithmes de Reconstruction Quantitative et Vérifications Expérimentales*. Thèse de Doctorat, Université de Paris-XI, 1993.
- [48] J.M. Elissalt. *Imagerie Microonde : Reconstruction Quantitative Bidimensionnelle : Applications au Domaine Biomédical*. Thèse de Doctorat, Université de Paris-XI,, 1995.
- [49] A. Roger. Newton-kantorovitch algorithm applied to an electromagnetic inverse problem. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 29(2) :232–238, 1981.
- [50] RE Kleinman and PM Berg. A modified gradient method for two-dimensional problems in tomography. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 42(1) :17–35, 1992.

- [51] E. Wolf. Three-dimensional structure determination of semi-transparent objects from holographic data. *Optics Communications*, 1(4) :153–156, 1969.
- [52] R.J. Wombell and J.A. DeSanto. Reconstruction of rough-surface profiles with the kirchhoff approximation. *JOSA A*, 8(12) :1892–1897, 1991.
- [53] N. Joachimowicz, C. Pichot, and J.P. Hugonin. Inverse scattering : An iterative numerical method for electromagnetic imaging. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 39(12) :1742–1753, 1991.
- [54] RE Kleinman and PM Van den Berg. Two-dimensional location and shape reconstruction. *RADIO SCIENCE-WASHINGTON-*, 29 :1157–1157, 1994.
- [55] A. Roger and D. Maystre. Inverse scattering method in electromagnetic optics : application to diffraction gratings. *JOSA*, 70(12) :1483–1495, 1980.
- [56] G. Strang. Linear algebra and its applications, thomson learning. *Inc. USA*, 1988.
- [57] J. Kaipio and E. Somersalo. *Statistical and computational inverse problems*, volume 160. Springer Verlag, 2005.
- [58] N. Magnoli and GA Viano. The source identification problem in electromagnetic theory. *Journal of Mathematical Physics*, 38 :2366, 1997.
- [59] E. De Micheli and G.A. Viano. Inverse optical imaging viewed as a backward channel communication problem. *JOSA A*, 26(6) :1393–1402, 2009.
- [60] A. Roger. Reciprocity theorem applied to the computation of functional derivatives of the scattering matrix. *Electromagnetics*, 2(1) :69–83, 1982.
- [61] E. Polak and G. Ribiere. Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées. *Revue Fr Inf Rech Oper*, 3(1) :35–43, 1969.
- [62] T.M. Elfouhaily and C.A. Guérin. A critical survey of approximate scattering wave theories from random rough surfaces. *Waves in Random Media*, 14(4) :1–40, 2004.
- [63] M. El-Shenawee and E.L. Miller. Multiple-incidence and multifrequency for profile reconstruction of random rough surfaces using the 3-d electromagnetic fast multipole model. *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on*, 42(11) :2499–2510, 2004.

- [64] M. Nieto-Vesperinas and JA Sanchez-Gil. Intensity angular correlations of light multiply scattered from random rough surfaces. *JOSA A*, 10(1) :150–157, 1993.
- [65] K. Pak, L. Tsang, and J. Johnson. Numerical simulations and backscattering enhancement of electromagnetic waves from two-dimensional dielectric random rough surfaces with the sparse-matrix canonical grid method. *JOSA A*, 14(7) :1515–1529, 1997.
- [66] DJ Wingham and RH Devayya. A note on the use of the neumann expansion in calculating the scatter from rough surfaces. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 40(5) :560–563, 1992.
- [67] E.I. Thorsos and D.R. Jackson. Studies of scattering theory using numerical methods. *Waves in Random Media*, 1(3) :165–190, 1991.
- [68] J. Dieudonne. Calcul infinitésimal. *Hermann, Paris*, 1968.
- [69] C.T. Tai, IEEE Antennas, and Propagation Society. *Generalized vector and dyadic analysis : applied mathematics in field theory*. IEEE press, 1997.

Résumé : La profilométrie optique est une technique de métrologie de surface rapide et non destructive. Dans ce mémoire, nous avons abordé cette problématique par des méthodes inverses de diffraction électromagnétique et dans une configuration de type Microscopie Tomographique Optique par Diffraction (ODTM). La surface est sondée par un éclairage sous plusieurs angles d'incidences ; la mesure en amplitude et en phase du champ lointain diffracté constitue les données du problème. Des profils de surfaces ont été reconstruits en considérant différents modèles de diffraction, parmi lesquelles une méthode approchée fondée sur les approximations de diffusion simple et de paraxialité. La résolution latérale de cette méthode et des techniques classiques de profilométrie est limitée par le critère d'Abbe-Rayleigh, défini sur la base de l'ouverture numérique pour l'éclairage et la détection du champ. Afin de dépasser cette limite de résolution, nous avons développé une méthode itérative de Newton-Kantorovitch régularisée. L'opérateur de diffraction y est rigoureusement modélisé par une méthode des moments, résolution numérique des équations du formalisme intégral de frontière, et l'expression de la dérivée de Fréchet de cet opérateur est obtenue par la méthode des états adjoints, à partir du théorème de réciprocité. Pour les surfaces unidimensionnelles métalliques, notre technique permet d'inverser à partir de données synthétiques des surfaces très rugueuses avec une résolution au delà du critère d'Abbe-Rayleigh. Les conditions d'inversion et les performances de la méthode diffèrent très nettement d'un cas de polarisation à l'autre : dans le cas TM, des interactions à plus longue distance que dans le cas TE augmentent encore la résolution. Ce mémoire comprend aussi une validation expérimentale de notre modèle inverse sur des sillons tracés dans du phosphore d'indium à 633nm. Enfin, la méthode a été étendue aux surfaces bidimensionnelles dans le cas infiniment conducteur et testée sur des surfaces numériques faiblement rugueuses.

Mots clés : Diffraction électromagnétique (formalisme intégral de frontière), problème inverse (méthode de Newton-Kantorovitch), profilométrie optique.

Abstract : Optical profilometry is a nondestructive and fast noncontact surface metrology technique. In this thesis, we have tackled this issue with inverse scattering electromagnetic methods and in an Optical Digital Tomographic Microscopy (ODTM) configuration. The surface is probed with illuminations under several incidence angles ; the measure of far scattered field amplitude and phase constitutes the problem data. Surface profiles have been reconstructed using different scattering models among which an approximate theory based on single scattering and paraxiality. The lateral resolution of this technique and classical profilometric approaches is limited by the so-called Abbe-Rayleigh's criterion defined out of the numerical aperture for illumination and field detection. In order to overpass this resolution limit, we have developed a regularized iterative Newton-Kantorovitch's method. The scattering operator is rigorously modeled with the method of moments, that is a numerical solution of boundary integral equations, and its Fréchet derivative adjoint states expression is deduced from the reciprocity theorem. For one-dimensional metallic surfaces, our method succeeds in inverting from synthetic data very rough surfaces with the resolutions beyond the Abbe-Rayleigh's criterion. The performance of this technique and inversion conditions clearly differ from one polarization to the other : in the TM case, interactions at longer distance than in the TE case improve yet the resolution. This work includes also an experimental validation of our inverse model on grooves in indium phosphure substrate at 633 nm. Lastly, the method has been extended to two-dimensional surfaces in the perfectly conducting case and tested on mildly rough numerical surfaces.

Keywords : Electromagnetic diffraction (boundary integral formulation), inverse problem (Newton-Kantorovitch method), optical profilometry.