



HAL
open science

Contribution à la modélisation par la méthode des éléments finis de composants hyperfréquences contrôlés optiquement.

Jean-Daniel Arnould

► **To cite this version:**

Jean-Daniel Arnould. Contribution à la modélisation par la méthode des éléments finis de composants hyperfréquences contrôlés optiquement.. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2002. Français. NNT: . tel-00422342

HAL Id: tel-00422342

<https://theses.hal.science/tel-00422342v1>

Submitted on 6 Oct 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° attribué par la bibliothèque

□□□□□□□□□□

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'INPG

Spécialité : Optique, Optoélectronique et Microondes

préparée à l'**Institut de Microélectronique, Électromagnétisme et Photonique**
et au **Laboratoire d'Électrotechnique de Grenoble**

dans le cadre de l'**École Doctorale Électronique, Électrotechnique,**
Automatique, Télécommunications et Signal

présentée et soutenue publiquement

par

Jean-Daniel ARNOULD

(Ingénieur ENSERG, INPG)

le 02 octobre 2002

Titre :

**Contribution à la modélisation par la méthode des éléments finis de
composants hyperfréquences contrôlés optiquement**

Directeurs de thèse : Anne VILCOT, Gérard MEUNIER

JURY

Monsieur	Laurent NICOLAS	, Rapporteur
Monsieur	Serge TOUTAIN	, Rapporteur
Monsieur	Michel AUBOURG	, Examineur
Monsieur	Xavier BRUNOTTE	, Examineur
Madame	Anne VILCOT	, Directeur de thèse
Monsieur	Gérard MEUNIER	, Co-directeur de thèse

Remerciements

LES travaux de recherche présentés dans ce rapport sont le fruit d'une collaboration, par le biais de la fédération ELESA, entre l'Institut de Microélectronique, Électromagnétisme et Photonique (IMEP) pour l'aspect *microonde* et le Laboratoire d'Électrotechnique de Grenoble (LEG) pour l'aspect *éléments finis*.

Je tiens tout d'abord à remercier les membres du jury qui ont accepté de juger ces travaux avec intérêts, compétences et indulgences :

- Monsieur Serge Toutain, Professeur à l'École polytechnique de l'université de Nantes qui m'a fait l'honneur de présider mon jury de thèse et d'avoir accepté d'être rapporteur.
- Monsieur Laurent Nicolas, Directeur de Recherche au CNRS et directeur du Centre de Génie Électrique de Lyon pour avoir accepté d'être rapporteur.
- Monsieur Michel Aubourg, Chargé de Recherche au CNRS à l'Institut de Recherche en Communications Optiques et Microondes et Monsieur Xavier Brunotte, Ingénieur à CEDRAT, pour avoir accepté de participer au jury.
- Madame Anne Vilcot, Maître de Conférence à l'IMEP et Monsieur Gérard Meunier, Directeur de Recherche au CNRS au LEG pour avoir co-encadré ces travaux.

Je tiens à exprimer à Anne et Gérard, ma plus profonde reconnaissance pour l'aide précieuse qu'ils m'ont apportée sur ce sujet aux multiples facettes. Leur grande compétence scientifique, leur disponibilité et leurs qualités humaines m'ont permis d'avancer dans mes recherches tout au long de ces trois années de thèse.

J'exprime également toute ma gratitude à Monsieur Jean-Louis Coulomb avec qui j'ai eu des discussions scientifiques très constructives sur les éléments finis d'arêtes et Monsieur Michel Aubourg à qui j'ai emprunté quelques formulations physiques géniales et technique efficace de calcul des paramètres S .

Merci également à :

- Patrick Eustache pour sa précieuse aide informatique concernant Linux et son soutien moral,
- Patrice Labie pour m'avoir aidé à debugguer mes programmes en Fortran pour Flux3d,
- Etiennette, Brigitte pour les autres problèmes informatiques,
- Chahla, Véronique, Monique, Elise, Chantal pour leur gentillesse et leur aide administrative.

Il y a également tous mes camarades de thèse, qui m'ont permis de passer ces trois années dans la bonne humeur : les motards tout de cuir vêtus Christophe, Gilles et Alban, les crépisseurs en tout genre Olivier, Mickey, Fleur et Delphine, les buveurs de rhum Kérim et Yann, l'homme qui m'a enfermé dans le placard Gérald, le "linux gang" de l'ex-LEMO, Mathieu, Fred, Elise et Manu, les anciens du contrôle optique, Jihad, Stéphanie et Paul.

Je tiens aussi à remercier toute ma famille qui m'a permis d'entreprendre ces études supérieures et tout particulièrement mon papa qui est un modèle pour moi.

Enfin, je voudrais dédier ce travail à ma femme qui m'a encouragé, supporté tout au long de cette thèse et donné deux magnifiques enfants.

Table des matières

Introduction générale	7
Bibliographie de l'introduction générale	11
I Présentation du problème	15
1 Étude expérimentale du contrôle optique de composants hyperfréquences . . .	17
1.1 Ligne ouverte	19
1.2 Ligne avec stub	21
2 Phénomènes physiques mis en jeu	24
2.1 Propagation hyperfréquence sur ligne microruban	25
2.2 Interaction rayonnement-semiconducteur	27
2.3 Interface métal-semiconducteur	29
2.4 Diffusion des porteurs dans le semiconducteur	33
2.5 Évolution des concentrations des porteurs	35
2.6 Analyse du problème	38
2.7 Résolution de l'équation de diffusion ambipolaire	44
3 Conclusion	48
Bibliographie du chapitre I	49
II Présentation des outils mathématiques	51
1 Modèle mathématique	53
1.1 Équations de Maxwell en régime harmonique	53
1.2 Relations constitutives du milieu	55
1.3 Relations de passage et distribution	56
1.4 Équations de propagation des ondes	60
2 Propagation guidée	63
2.1 Les différents modes de propagation	63
2.2 Deux types de problème en hyperfréquences	64
3 Principe de résolution par la MEF	65
3.1 Formulation faible du problème 3D	65
3.2 Ondes de référence	68
3.3 Problème 2D aux valeurs propres	69
4 Résolution	71

4.1	Résolution du problème 2D	71
4.2	Résolution du problème 3D : calcul des paramètres S	74
5	Conclusion	76
	Bibliographie du chapitre II	79
III	Éléments finis d'arêtes	81
1	Discrétisation	83
1.1	Éléments de référence surfaciques triangulaires	87
1.2	Éléments de référence surfaciques rectangulaires	94
1.3	Conclusion sur les fonctions de forme d'arête bidimensionnelles	101
1.4	Éléments de référence volumiques tétraédriques	102
1.5	Éléments de référence volumiques hexaédriques	104
1.6	Conclusion sur les fonctions de forme d'arête tridimensionnelles	108
2	Passage des coordonnées de référence aux coordonnées réelles	110
3	Conclusion	111
	Bibliographie du chapitre III	113
IV	Présentation des résultats numériques	117
1	Rappel théorique sur le guide rectangulaire	119
1.1	Guide rectangulaire 2D partiellement rempli de diélectrique	121
1.2	Guide rectangulaire 3D rempli d'air	124
1.3	Guide rectangulaire 3D rempli d'un diélectrique à pertes	128
2	Ligne microruban	129
2.1	Accès 2D de la ligne microruban	129
2.2	Ligne microruban contrôlée optiquement	131
3	Conclusion	133
	Bibliographie du chapitre IV	135
	Conclusion générale	137
	Bibliographie de la conclusion générale	141
	Publications de l'auteur sur le sujet	143

Liste des figures

Chapitre I

I.1	Dispositif expérimental	18
I.2	Caractéristiques physiques de la ligne ouverte	19
I.3	Caractéristique courant-tension de polarisation sous différents éclairagements	20
I.4	Module du coefficient de réflexion de la ligne ouverte en fonction de la fréquence sous différents éclairagements	20
I.5	Module du coefficient de réflexion de la ligne ouverte en fonction de la fréquence sous différentes polarisations	21
I.6	Caractéristiques physiques de la ligne avec stub	22
I.7	Coefficient de transmission de la ligne avec stub sous différents éclairagements	23
I.8	Longueurs caractéristiques et points d'étude de la ligne avec stub	23
I.9	Caractéristiques de base d'une ligne microruban	25
I.10	Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect	27
I.11	Coefficients d'absorption de quelques semiconducteurs en fonction de la longueur d'onde lumineuse	29
I.12	Diagramme de bandes d'énergie de l'aluminium et du silicium	30
I.13	Mise en contact de l'aluminium et du silicium (p) avec $\Phi_m < \Phi_s$ à l'équilibre thermodynamique	31
I.14	Contact métal-semiconducteur (p) avec $\Phi_m < \Phi_s$ sous polarisation a) $V_a = V_s - V_m < 0$, b) $V_a = V_s - V_m > 0$	32
I.15	Recombinaisons indirectes et non-radiatives dans le silicium : (a) capture d'un électron, (b) émission d'un trou, (c) émission d'un électron, (d) capture d'un trou	37
I.16	Variation du coefficient de diffusion ambipolaire en fonction du niveau d'injection	41
I.17	Variation de la mobilité ambipolaire en fonction du niveau d'injection	42
I.18	Variation de la durée de vie des porteurs en fonction du niveau d'injection	43
I.19	Concentration des porteurs en excès en fonction de la profondeur dans le silicium	47
I.20	Domaine simulant la charge photoinduite en très forte injection	47

Chapitre II

II.1 Continuité tangentielle et discontinuité normale du champ électrique entre deux diélectriques ($\epsilon_1 > \epsilon_2$) 58

II.2 Configuration du problème 60

Chapitre III

III.1 Élément triangulaire 87

III.2 Champ de vecteurs $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ et \mathbf{W}_{ij}^{t1} sur les différentes arêtes ij 90

III.3 Champ de vecteurs $\mathbf{W}_{ijk}^{t3/2}$ et \mathbf{W}_{ij}^{t2} sur les différentes arêtes ij 93

III.4 Élément rectangulaire 94

III.5 Champ de vecteurs $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ et \mathbf{W}_{ij}^{t1} 97

III.6 Champ de vecteurs $\mathbf{W}_{ij}^{r3/2}$ et \mathbf{W}_{ij}^{r2} 100

III.7 Élément tétraédrique 102

III.8 Élément hexaédrique 104

Chapitre IV

IV.1 Caractéristiques physiques du guide rectangulaire 119

IV.2 Caractéristiques physiques du guide rectangulaire partiellement rempli de diélectrique 122

IV.3 Propagation du mode TE_{10} dans le plan $y = 1 \text{ mm}$ 124

IV.4 Propagation du mode TE_{10} dans le plan $x = 2 \text{ mm}$ 125

IV.5 Propagation du mode TE_{11} dans le plan $y = 1 \text{ mm}$ 127

IV.6 Propagation du mode TE_{11} dans le plan $x = 2 \text{ mm}$ 127

IV.7 Plan de coupe de la ligne microruban simulée 129

IV.8 Paramètres géométriques de la ligne microruban contrôlée optiquement 131

Liste des tableaux

Chapitre I

- I.1 Constantes utilisées dans l'expression de la permittivité plasma [Lee80] 35
 I.2 Caractéristiques initiales de notre silicium à la température $T = 300 K$ 40

Chapitre III

- III.1 Approximations conseillées (Nodale/Arête/Facette/Volume) 85
 III.2 Propriétés des fonctions de forme \mathbf{W} sur les éléments surfaciques triangulaires
 et rectangulaires 101
 III.3 Propriété des fonctions de forme \mathbf{W} sur les éléments volumiques tétraédriques
 et hexaédriques 109

Chapitre IV

- IV.1 Taux d'erreur relative $|\beta^{\text{simu}} - \beta^{\text{th}}|/\beta^{\text{th}}$ sur la constante de phase [%] 123
 IV.2 Fréquences de coupure f_{cmn} [GHz] pour le guide rectangulaire rempli d'air . . . 124
 IV.3 Comparaison théorie/simulation pour le mode TE_{10} 125
 IV.4 Comparaison théorie/simulation pour le mode TE_{11} 127

Introduction générale

LA recherche scientifique dans le domaine de l'opto-microonde est née il y a une trentaine d'année de la fusion des avantages de l'optoélectronique et de ceux des microondes [Iss90, Iss95]. Deux axes de recherche ont alors émergé, à savoir l'étude de l'action des microondes sur les circuits photoniques et l'étude de l'action de la lumière sur les composants hyperfréquences.

Le premier axe de recherche concerne principalement la modulation hyperfréquence de la lumière dans le domaine des communications optiques. De nombreux travaux se sont focalisés sur le développement des diodes lasers et des photodétecteurs ou sur les performances de la modulation, afin d'augmenter la largeur de bande des fibres optiques utilisées dans les systèmes de communications [Kas87, Bow87, Hie95].

Le deuxième axe de recherche fait partie de ce que l'on appelle le contrôle optique de composants hyperfréquences. Les avantages du contrôle optique sont multiples : isolation de la commande optique du signal microonde commandé, temps de réponse extrêmement rapide, immunité aux interférences électromagnétiques, pas d'ajout de circuits électroniques pouvant induire des effets parasites, possibilité d'intégration de la commande optique, faible coût [Her85].

Le contrôle optique utilise l'effet photoconducteur qui consiste à créer des porteurs libres dans un substrat semiconducteur par injection optique. Les caractéristiques diélectriques sont alors localement modifiées dans le semiconducteur et changent le comportement hyperfréquence d'une onde pouvant se propager dans le substrat. Pour s'en persuader, une expérience simple consiste à interrompre une ligne microruban par un gap sur un substrat semiconducteur très résistif [Aus75]. Lorsque le gap n'est pas éclairé, l'onde hyperfréquence injectée en début de ligne est totalement réfléchi par le gap qui forme un circuit ouvert. Lorsque le gap est éclairé par un faisceau laser de longueur d'onde et de puissance appropriées, une partie de l'onde hyperfréquence est transmise à l'extrémité opposée de la ligne microruban. L'injection optique a donc fait augmenter la conductivité locale au niveau du gap, créant ainsi un milieu photoinduit que l'on peut apparenter à un plasma. Cette expérience a donc permis la réalisation du premier interrupteur hyperfréquence contrôlé optiquement. D'autres fonctions plus complexes ont ensuite été réalisées,

tels que des résonateurs, atténuateurs et filtres. Ce type de commande optique permet également de contrôler des circuits actifs en agissant directement sur les composants actifs, ou indirectement en contrôlant les circuits passifs associés. Des travaux ont été réalisés sur des transistors MESFET [Sun81, Des81, Des83], HEMT [Sim87], HBT [Kar93], sur des diodes IMPATT [Yva77, See78, Sin86] ou Gunn [Cal69, Yu90].

Ce travail de recherche s'inscrit dans la continuité des travaux de J. Haïdar [Hai96], S. Chouteau [Cho97], B. Boyer [Boy98] et P. Ahouassa [Aho01] à l'Institut de Microélectronique, Électromagnétisme et Photonique (ex-Laboratoire d'Électromagnétisme, Microondes et Optoélectronique et Laboratoire de Physique des Composants Semiconducteurs). J. Haïdar a mis en évidence l'aspect résistif et réactif de la charge photoinduite en réalisant des filtres, atténuateurs et résonateurs accordables par une méthode optoélectronique. S. Chouteau a intégré la commande optique dans un silicium polycristallin en réalisant un commutateur microonde en technologie coplanaire. B. Boyer a approfondi l'étude menée par J. Haïdar sur la modélisation de la charge photoinduite en examinant plus particulièrement l'influence de la longueur d'onde optique sur la charge photoinduite et en développant les applications mettant en œuvre les aspects non linéaires de cette charge. P. Ahouassa, enfin, a développé une méthode permettant d'extraire la durée de vie des porteurs à partir de simulations numériques 2D réalisées avec le logiciel *Atlas*® de *Silvaco* [Sil98], d'un modèle électrique *RC* parallèle et de courbes expérimentales.

Cette thèse a pour but non seulement de développer un logiciel qui permet, grâce à la souplesse de la méthode des éléments finis, la *simulation hyperfréquence* mais aussi de *modéliser l'injection optique* et son *couplage* avec l'onde qui se propage dans le substrat semiconducteur, sur des structures passives contrôlées optiquement en technologie microruban. Au début de ce travail de recherche, il n'existait pas de logiciels commerciaux permettant ce type de simulation à la frontière de ces deux domaines physiques très spécialisés. Ce travail s'inscrit donc dans la tendance actuelle de développement de logiciels multi-métiers et multi-physiques demandés par les industriels qui préfèrent investir plutôt dans un seul logiciel touchant à plusieurs métiers que dans plusieurs logiciels dédiés ayant une compatibilité plus ou moins grande entre eux.

C'est pourquoi cette thèse a été réalisée d'une part en collaboration avec l'Institut de Microélectronique, Électromagnétisme et Photonique (IMEP) pour sa connaissance approfondie du contrôle optique des composants hyperfréquences, et d'autre part en collaboration avec le Laboratoire d'Électrotechnique de Grenoble (LEG) qui contribue au développement

du logiciel *Flux3d*® commercialisé par la société *Cedrat*, basé sur la méthode des éléments finis mais travaillant sur des dispositifs essentiellement électrotechniques, c'est-à-dire en basses fréquences. Le choix de la méthode des éléments finis est motivé par le fait qu'elle est capable de prendre en considération des structures ayant des géométries et des comportements physiques complexes.

Ce travail de thèse est présenté suivant quatre chapitres comportant chacun un sommaire, un résumé, une conclusion et une bibliographie propres.

- Le premier chapitre pose le problème du contrôle optique en décrivant les différents phénomènes physiques mis en jeu lorsqu'on éclaire un substrat semiconducteur. Basé sur l'expérimentation de deux composants hyperfréquences simples en technologie microruban, un modèle traduisant le comportement de la charge photoinduite est proposé suivant la théorie des plasmas.
- Le but du second chapitre est de présenter les outils mathématiques nécessaires à la formulation par la méthode des éléments finis. La propagation hyperfréquence pose le triple problème du calcul précis bidimensionnel des modes propagatifs dans les accès-sources, de la propagation résultante de l'onde hyperfréquence dans la structure tridimensionnelle et du calcul des paramètres S nécessaire pour toute comparaison avec des résultats aussi bien expérimentaux qu'analytiques. Nous verrons que le calcul 2D précis du champ électromagnétique source dans les accès doit s'effectuer à l'aide de la résolution d'un problème aux valeurs propres, résolution dans laquelle, à une fréquence donnée, les valeurs propres sont les constantes de propagation, et les vecteurs propres associés, les champs électriques et magnétiques transversaux.
- Le troisième chapitre se consacre à la présentation des éléments finis d'arêtes utilisés dans nos simulations. Les éléments finis d'arêtes font partie, plus globalement, des éléments finis de Whitney dont nous donnerons un bref aperçu au début de ce chapitre. Ces éléments d'arêtes possèdent l'avantage sur les éléments finis nodaux classiques d'imposer la continuité des composantes tangentielles du champ sans contraindre sa composante normale. Associés aux formulations développées dans le chapitre précédent, ils permettent ainsi d'éliminer les solutions non physiques des problèmes. Nous décrirons principalement les propriétés géométriques des fonctions de forme bidimensionnelles, attachées aux triangles et rectangles, ainsi que celles

des fonctions de forme tridimensionnelles, attachées aux tétraèdres et hexaèdres.

- Le dernier chapitre fait la synthèse des trois autres, en testant sur des exemples dont on connaît la solution analytique, les formulations 2D et 3D du chapitre II associées aux éléments finis d'arêtes du chapitre III. Il présente enfin un premier résultat de simulation sur une structure microruban contrôlée optiquement en utilisant le modèle de la charge photoinduite développée dans le chapitre I selon la théorie des plasmas et suivant l'équation de diffusion ambipolaire.

Nous terminerons ce mémoire de thèse par une conclusion générale qui résumera le travail effectué et proposera les perspectives du travail futur à accomplir concernant la simulation numérique de ces composants hyperfréquences contrôlés optiquement.

Bibliographie de l'introduction générale

- [Aho01] P. Ahouassa
Comportement microondes de charges photo-induites dans le silicium : Analyse et applications
Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Septembre 2001.
- [Aus75] D.H. Auston
“Picosecond optoelectronic switching and gating in silicon”
Applied Physics Letters, vol. 26, no. 3, pp. 101–103, February 1975.
- [Bow87] J.E. Bowers and C.A. Burrus
“Ultrawide-band long-wave p-i-n photodetectors”
Journal of Lightwave Technologies, vol. 5, pp. 1339–1350, October 1987.
- [Boy98] B. Boyer
Comportement en microondes de la charge capacitive photo-induite sur un substrat silicium
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, Juillet 1998.
- [Cal69] F.P. Califano
“Frequency modulation of three-terminal Gunn devices by optical means”
IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 16, no. 17, January 1969.
- [Cho97] S. Chouteau
Intégration de la commande optique d'un commutateur microonde en technologie coplanaire sur silicium
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, Juillet 1997.
- [Des81] A.A. De Salles and J.R. Forrest
“Initial observations of optical injection locking of GaAs metal semiconductor field”
Applied Physics Letters, vol. 38, no. 5, March 1981.
- [Des83] A.A. De Salles
“Optical control of GaAs MESFET's”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 31, no. 10, October 1983.
- [Hai96] J. Haidar
Commande optoélectronique d'atténuateurs, de résonateurs et de filtres microondes réalisés sur substrat silicium
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, Juillet 1996.

- [Her85] P.R. Herczfeld, A.S. Daryoush, V.M. Contarino, A. Rosen, Z. Turski and A.P.S. Khana
“Optically controlled microwave devices and circuits”
In *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques - Symposium proceedings*, pp. 211–214, 1985.
- [Hie95] V.M. Hietala, G.A. Vawter, T.M. Brennan and B.E. Hammons
“Traveling-wave photodetectors for high-power, large-bandwidth applications”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 43, no. 9, pp. 2291–2298, September 1995.
- [Iss90] “Special issue on applications of lightwave technology to microwave devices, circuits and systems”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 38, May 1990.
- [Iss95] “Special issue on microwave and millimeter-wave photonics”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 43, September 1995.
- [Kar93] K. Karakuqk, Q.W. Li, P.N. Freeman, J.R. East, G.I. Haddad and P.K. Bhattacharya
“A direct optically injection-locked 2.6 GHz HBT oscillator”
Microwave and optical technology letters, vol. 6, no. 10, August 1993.
- [Kas87] B.L. Kasper and J.C. Campbell
“Multigigabit-per-second avalanche photodiode lightwave receivers”
Journal of Lightwave Technologies, vol. 5, no. 10, pp. 1351–1364, October 1987.
- [See78] A.J. Seeds and J.R. Forrest
“Initial observation of optical injection locking of an X-band IMPATT oscillator”
Electronics Letters, vol. 14, no. 25, December 1978.
- [Sil98] SILVACO
“Atlas device simulation software”
Santa Clara, California, USA, November 1998.

- [Sim87] R.N. Simons
“Microwave performance of an optically-controlled AlGaAs/GaAs high electron mobility transistor and GaAs MESFET”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 35, no. 12, December 1987.
- [Sin86] J.F. Singleton, A.J. Seeds and S.P. Brunt
“Optical control of W-band IMPATT oscillators”
IEE Proceedings-J, vol. 133, no. 6, December 1986.
- [Sun81] H.J. Sun, R.J. Gutmann and J.M. Borrego
“Photoeffect in common-source and common drain microwave silicon on sapphire films”
Solid-state electronics, vol. 10, October 1981.
- [Yu90] Z. Yu and W. Lin
“A new way to optically control a millimeter-wave oscillator”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 38, no. 9, September 1990.
- [Yva77] H.P. Yvas, R.J. Gutmann and J.M. Borrego
“Leakage current enhancement in IMPATT oscillators by photoexcitation”
Electronics Letters, vol. 13, no. 7, March 1977.

Chapitre I

Présentation du problème

Sommaire

1	Étude expérimentale du contrôle optique de composants hyperfréquences	17
1.1	Ligne ouverte	19
1.2	Ligne avec stub	21
2	Phénomènes physiques mis en jeu	24
2.1	Propagation hyperfréquence sur ligne microruban	25
2.2	Interaction rayonnement-semiconducteur	27
2.3	Interface métal-semiconducteur	29
2.4	Diffusion des porteurs dans le semiconducteur	33
2.5	Évolution des concentrations des porteurs	35
2.5.1	Processus de génération	36
2.5.2	Processus de recombinaison	37
2.6	Analyse du problème	38
2.7	Résolution de l'équation de diffusion ambipolaire	44
3	Conclusion	48
	Bibliographie du chapitre I	49

CE chapitre introductif permet de poser correctement les bases de nos réflexions sur le contrôle optique de composants hyperfréquences. Nous nous sommes en particulier intéressés à des composants microondes passifs, contrôlés optiquement, en technologie microruban et sur substrat silicium. La simulation numérique de ce type de composants pose le double problème de la simulation “globale” hyperfréquence d’une structure ouverte et de la simulation “locale” du changement de conductivité en extrémité de ligne. Afin de mieux cerner les problèmes physiques mis en jeu, nous avons commencé par établir une base de données expérimentales qui servira de référence qualitative et quantitative à nos simulations. Nous avons ensuite adopté le modèle de la diffusion ambipolaire lors de la photogénération des porteurs par paires. Nous avons enfin traduit le changement local de la conductivité de l’extrémité de la ligne éclairée par une permittivité plasma complexe équivalente qui varie suivant la profondeur dans le substrat et suivant la coordonnée radiale.

1 Étude expérimentale du contrôle optique de composants hyperfréquences

Notre travail s'est limité à la modélisation numérique de composants hyperfréquences *passifs* contrôlés optiquement. Aussi est-il intéressant, avant de se lancer dans les calculs, de manipuler ces composants afin d'appréhender leurs comportements physiques. Nous nous sommes intéressés en particulier aux composants passifs de technologie microruban. Nous verrons que ce choix technologique convient particulièrement bien à la gamme de fréquences de notre étude ($f = 0,5 - 10,5 \text{ GHz}$) et à l'éclairement par un faisceau laser du substrat. Afin de cerner les problèmes mis en jeu dans le contrôle optique de lignes microrubans, nous avons commencé par établir une base de données expérimentales qui permettra une comparaison qualitative et quantitative avec les résultats de nos simulations numériques.

Nous avons choisi, pour effectuer cette étude expérimentale, deux dispositifs caractéristiques simples dont on maîtrise bien la technologie pour la réalisation et dont on connaît bien le comportement hyperfréquence en l'absence d'éclairement pour la compréhension physique. Il s'agit de la ligne ouverte et de la ligne avec stub. Ces structures sont réalisées sur un substrat semiconducteur qui doit être très résistif pour diminuer les pertes par propagation, et dont la durée de vie des porteurs doit être grande pour l'application au contrôle optique en régime d'éclairement continu. Plusieurs candidats répondent à ces deux critères. Aussi avons-nous choisi le candidat local qui est le moins cher et dont on maîtrise le mieux la technologie de fabrication, le silicium. Pour réaliser ces expériences, nous avons utilisé un Analyseur Vectoriel de Réseaux (AVR) HP5510 pouvant mesurer les paramètres S jusqu'à 40 GHz et une diode laser de puissance maximale 100 mW et de longueur d'onde 830 nm (infrarouge).

La difficulté majeure dans ce type d'expérience est le positionnement correct du faisceau laser (visible à la caméra IR) qui doit éclairer de manière optimale et reproductible le bout de la ligne microruban. Nous avons donc conçu un dispositif de positionnement en (xyz) à l'aide de tables micrométriques montées sur un marbre perpendiculaire à l'axe optique de la diode laser comme le montre la figure I.1.

En ce qui concerne la reproductibilité de l'expérience, celle-ci est pratiquement assurée par la donnée du couple courant-tension de polarisation (I_{max}, V_{max}) pour une puissance lumineuse fixée qui doit être suffisante au passage d'un courant statique dans le dispositif. En effet, si on polarise la ligne sous une tension inverse de -10 V et que l'on déplace le

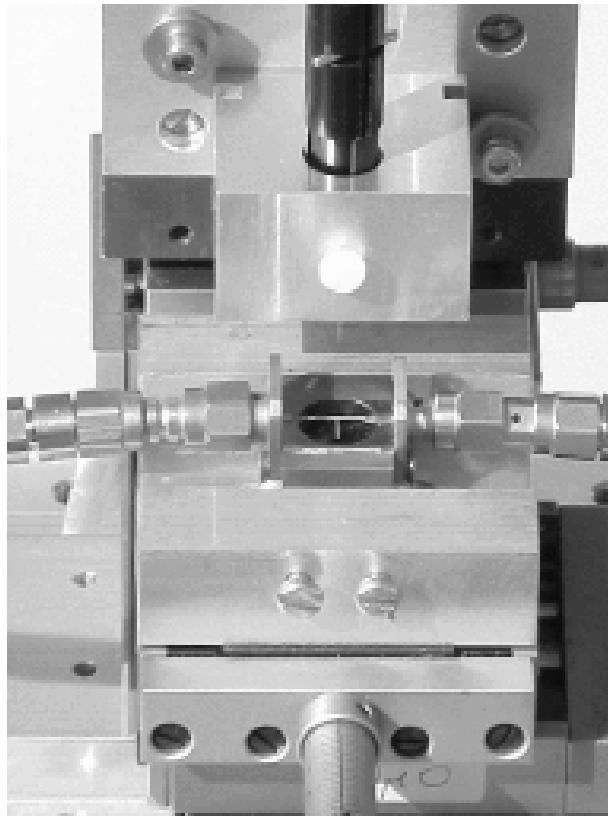


Figure I.1 : *Dispositif expérimental*

faisceau lumineux, dont on a fixé la puissance en général à 20 mW , au voisinage du bout de la ligne, on peut mesurer de façon reproductible le courant statique correspondant. Ce courant statique varie donc avec la position du faisceau laser au voisinage du bout de la ligne et devient maximal en amplitude pour une position nous semblant optimale pour l'étude du contrôle optique, c'est-à-dire lorsque le cercle lumineux du faisceau laser est tangent et dans le prolongement de la ligne microruban (cf. figure I.2).

Nous allons maintenant décrire les comportements physiques des deux dispositifs choisis en étudiant leur comportement respectif en réflexion et en transmission en faisant varier à tour de rôle la tension de polarisation de la ligne microruban et la puissance optique injectée.

1.1 Ligne ouverte

La ligne ouverte est un dispositif microonde simple dont on peut caractériser le comportement en réflexion en faisant le rapport des puissances de l'onde incidente P_i sur l'onde réfléchie P_r . Cette ligne a été conçue de façon à avoir son impédance caractéristique égale à celle des accès hyperfréquences de l'AVR afin de limiter toute désadaptation sur la bande de fréquences choisie avec l'appareil de mesure. Les caractéristiques physiques de cette ligne sont données sur la figure I.2.

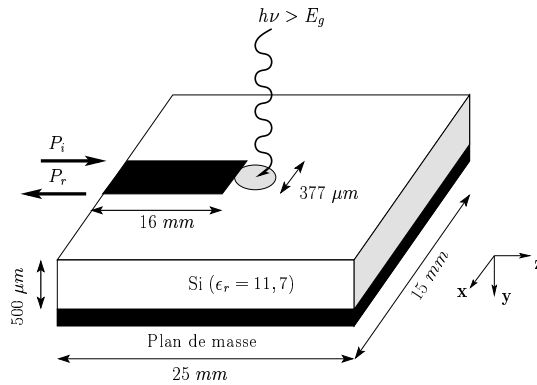


Figure I.2 : Caractéristiques physiques de la ligne ouverte

Nous nous sommes d'abord intéressés à la caractéristique courant-tension de polarisation en éclairant le bout de la ligne avec différentes puissances lumineuses afin d'étudier le contact entre le métal (aluminium) et le semiconducteur (silicium) comme le montre la figure I.3.

Nous constatons alors que plus la puissance optique appliquée est forte, plus la structure a un comportement Schottky. En l'absence d'éclairement, la caractéristique courant-tension de polarisation est également de type Schottky sur une plage de tensions de polarisation de l'ordre du mV .

Nous nous sommes intéressés ensuite à la variation du coefficient de réflexion S_{11} sur la bande de fréquences $500 MHz - 10,5 GHz$ en fonction de la puissance lumineuse injectée et sous une polarisation constante de $5 V$ comme le montre la figure I.4. Nous pouvons nous contenter ici de donner les coefficients de réflexion en module, sachant que la phase passe de π à $-\pi$ à chacune des fréquences de résonance.

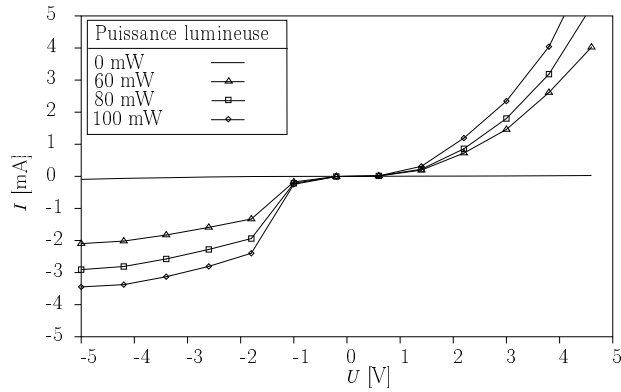


Figure I.3 : Caractéristique courant-tension de polarisation sous différents éclairnements

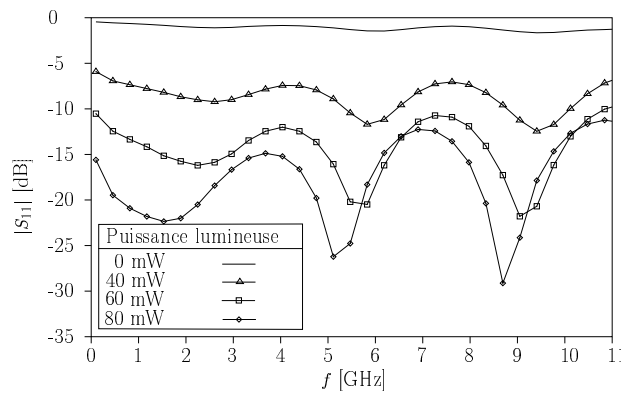


Figure I.4 : Module du coefficient de réflexion de la ligne ouverte en fonction de la fréquence sous différents éclairnements

Nous constatons ici que plus la ligne est éclairée, plus le module du coefficient de réflexion est mauvais. En effet, en l'absence d'éclaircement, la ligne ouverte se comporte comme un coupe-circuit pur c'est-à-dire que l'onde incidente est totalement réfléchie en bout de ligne. On observe néanmoins de faibles pertes sur la figure I.4 car $|S_{11}| \neq 1$. Par contre, lorsque l'extrémité de la ligne est fortement éclairée, l'onde incidente n'est pas totalement réfléchie ; elle est partiellement absorbée par la charge photoinduite en extrémité de ligne, et on peut observer par exemple des pertes de 25 dB environ à 5 GHz sous une puissance lumineuse de 80 mW. Nous observons également une translation des pics de résonance de la ligne selon la puissance lumineuse injectée.

Examinons maintenant sur la figure I.5 l'effet de la polarisation de la ligne sur le module du coefficient de réflexion et sous une puissance lumineuse constante de 100 mW .

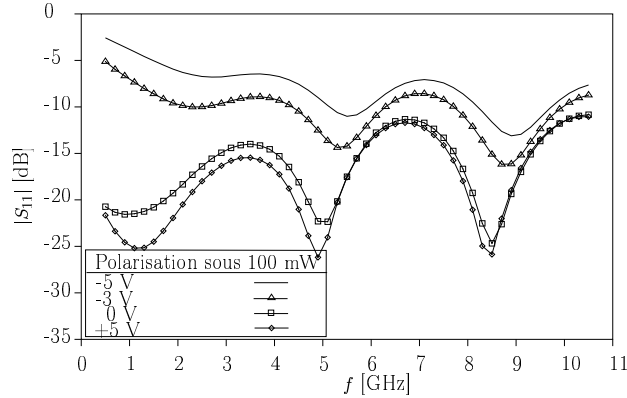


Figure I.5 : *Module du coefficient de réflexion de la ligne ouverte en fonction de la fréquence sous différentes polarisations*

Nous observons ici une diminution du coefficient de réflexion lorsque la tension de polarisation augmente.

Ces expériences simples permettent déjà de dégager 2 conclusions :

- Plus la puissance lumineuse injectée en bout de ligne est forte, plus les pertes engendrées sont fortes ; l'extrémité de cette ligne résonante se comporterait donc comme une charge d'impédance complexe qui serait photoinduite.
- Le phénomène de pertes est renforcé lorsque la ligne est polarisée en direct c'est-à-dire lorsqu'on applique une différence de potentiel positive entre la ligne microruban et le plan de masse qui est pris conventionnellement comme plan de référence (0 V).

Nous allons maintenant passer à l'expérimentation sur la ligne avec stub qui permet d'obtenir des résultats en transmission.

1.2 Ligne avec stub

La deuxième structure étudiée est une ligne microruban d'impédance caractéristique $50\ \Omega$ avec un stub de longueur 4 mm placé au milieu de cette ligne principale que nous

caractérisons en transmission. La figure I.6 décrit les caractéristiques physiques de cette ligne.

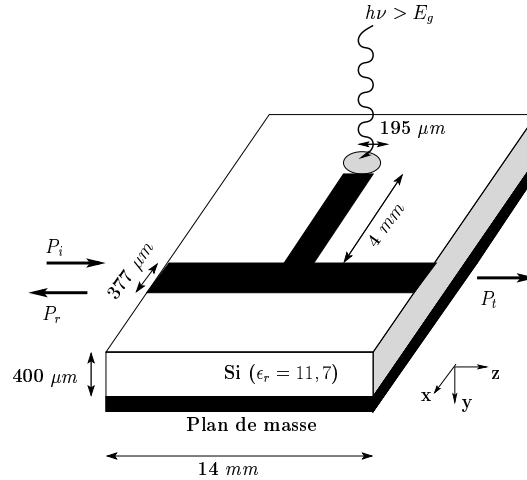


Figure I.6 : *Caractéristiques physiques de la ligne avec stub*

Si nous regardons à nouveau la caractéristique courant-tension de polarisation de cette structure sous différents éclairagements, nous observons le même comportement Schottky que pour la ligne ouverte décrite précédemment, qui s'accroît avec la puissance lumineuse injectée.

L'observation sur la figure I.7 de la variation du module du coefficient de transmission $|S_{21}| = \sqrt{P_t/P_i}$ en fonction de la fréquence, avec la puissance lumineuse injectée comme paramètre, nous permet à nouveau d'évaluer les pertes occasionnées par la charge photoinduite.

Plaçons-nous d'abord dans le cas simple d'un système sans pertes et non éclairé pour raisonner. La figure I.8 donne les longueurs caractéristiques et les points particuliers facilitant l'étude de la ligne avec stub.

L'impédance $Z_L = \infty$ au bout du stub ramène au point A l'impédance Z_A telle que :

$$Z_A = Z_c \frac{Z_L + jZ_c \tan(\beta L_1)}{Z_c + jZ_L \tan(\beta L_1)} = -j \frac{Z_c}{\tan(\beta L_1)} \quad (\text{I.1})$$

L'impédance ramenée Z_A est donc imaginaire pure et se trouve en parallèle avec l'impédance en B qui est l'impédance caractéristique Z_c puisque la sortie S est adaptée (c'est le cas ici lors de nos mesures).

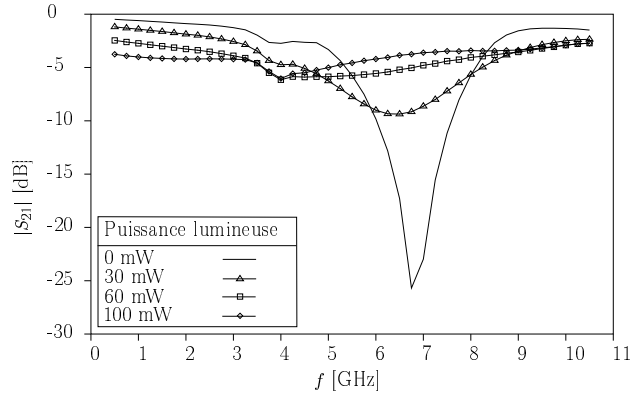


Figure I.7 : Coefficient de transmission de la ligne avec stub sous différents éclaircements

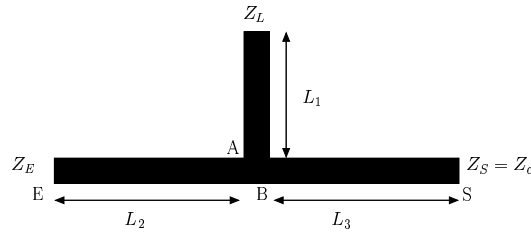


Figure I.8 : Longueurs caractéristiques et points d'étude de la ligne avec stub

A la jonction entre le stub et la ligne de transmission principale, nous pouvons donc calculer l'admittance Y_j de la manière suivante :

$$Y_j = Y_c + Y_A = Y_c[1 + j \tan(\beta L_1)] = Y_c \left[1 + j \tan \left(\frac{2\pi}{\lambda} L_1 \right) \right] \quad (\text{I.2})$$

Or on observe, sur la figure I.7, que le module du coefficient de transmission comporte un pic vers 7 GHz . A cette première fréquence de résonance, la longueur du stub L_1 est équivalente à $\lambda/4$ et ramène au niveau de la jonction avec la ligne principale de transmission, un court-circuit en parallèle ($\tan(2\pi L_1/\lambda) \rightarrow \infty \Rightarrow Z_j \rightarrow 0$). On peut ainsi déduire à cette fréquence de résonance l'impédance $Z_j = 0$ ramenée en entrée E de la ligne principale après un parcours de longueur L_2 :

$$Z_E = jZ_c \tan(\beta L_2) = jX \quad (\text{I.3})$$

Ceci se traduit par une réflexion totale (ou quasi-totale si on considère en toute rigueur

les pertes non nulles dans le silicium) car nous avons $|S_{11}|^2 = |(jX - Z_c)/(jX + Z_c)|^2 = 1$.

Revenons maintenant à notre système éclairé comportant des pertes photoinduites. Lorsque la puissance lumineuse augmente, l'impédance ramenée en début de stub puis en début de ligne principale diffère de plus en plus d'une impédance imaginaire pure. Si on considère le milieu de propagation avec des pertes négligeables, la transmission $|S_{21}|^2 = 1 - |S_{11}|^2$ s'améliore donc en module car le module du coefficient de réflexion diffère de plus en plus de l'unité à cause d'une partie réelle existante.

Nous pouvons également ajouter que la phase subit toujours une discontinuité de $-\pi$ à π au niveau de la fréquence de résonance et qu'elle se translate sous l'effet de l'éclairement. De la même manière que pour la ligne ouverte, la polarisation en direct accentue le phénomène de pertes.

Nous allons maintenant passer de l'observation des phénomènes expérimentaux à l'explication théorique des phénomènes physiques complexes mis en jeu lors de l'éclairement continu de la structure en bout de ligne.

2 Phénomènes physiques mis en jeu

L'interprétation des phénomènes physiques est basée sur les thèses successives de J. Haidar [Hai96], S. Chouteau [Cho97], B. Boyer [Boy98] et P. Ahouassa [Aho01] à l'IMEP et également de M. Serres [Ser99] et G. Torrese [Tor02] au laboratoire d'hyperfréquences de l'Université Catholique de Louvain, Belgique. Nous allons en proposer ici une synthèse explicative et un approfondissement numérique tout en gardant en mémoire l'objectif de la modélisation de la charge photoinduite en bout de ligne et des contraintes liées aux méthodes numériques.

2.1 Propagation hyperfréquence sur ligne microruban

Rappelons brièvement les caractéristiques de base de la propagation hyperfréquence sur ligne microruban comme le montre la figure I.9 :

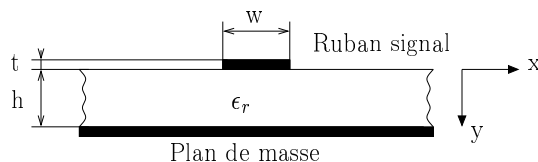


Figure I.9 : Caractéristiques de base d'une ligne microruban

Ce dispositif planaire se compose donc d'un substrat d'épaisseur h et de permittivité relative ϵ_r , d'une ligne microruban en aluminium, de largeur w et d'épaisseur t , qui est déposée sur le silicium par un procédé classique de photolithographie et de gravure chimique du métal et enfin d'un plan de masse métallique épais, collé sous le silicium et qui permet de fixer les connecteurs SMA nécessaires aux mesures avec l'AVR.

La ligne microruban étant un milieu non homogène où la propagation du champ électromagnétique se fait conjointement dans l'air et dans le substrat, le mode TEM pur ne peut se propager (voir définition des modes dans le chapitre II). Nous admettons par contre, pour les géométries des lignes considérées, qu'un mode quasi-TEM peut se propager pour des fréquences inférieures à la fréquence du premier mode d'ordre supérieur c'est-à-dire pour $f < f_c = 30 \text{ GHz}$ [Hai96, Boy98]. Pour ces fréquences, nous avons vérifié dans nos simulations numériques que les composantes longitudinales du champ étaient effectivement faibles devant les composantes transversales (voir chapitre IV).

Pour calculer l'impédance caractéristique Z_c de la ligne microruban, Schneider et Hammerstad ont proposé des formules empiriques qui dépendent du rapport w/h et de la permittivité effective ϵ_{eff} du milieu inhomogène formé par l'air et le substrat diélectrique [Sch69, Ham75].

Donnons d'abord la formule qui permet d'exprimer la permittivité effective ϵ_{eff} qui est au premier ordre la moyenne géométrique des permittivités de l'air et du substrat :

$$\epsilon_{eff} = \frac{\epsilon_r + 1}{2} + \frac{\epsilon_r - 1}{2} f\left(\frac{w}{h}\right) \quad (\text{I.4})$$

$$\text{avec } \begin{cases} f\left(\frac{w}{h}\right) = \left(1 + 12\frac{h}{w}\right)^{-1/2} + 0,04\left(1 - \frac{w}{h}\right)^2 & \text{si } \frac{w}{h} \leq 1 \\ f\left(\frac{w}{h}\right) = \left(1 + 12\frac{h}{w}\right)^{-1/2} & \text{si } \frac{w}{h} > 1 \end{cases}$$

L'impédance caractéristique Z_c dépendant de ϵ_{eff} , dépend également du rapport w/h :

$$\begin{aligned} Z_c &= \frac{Z_0}{2\pi\sqrt{\epsilon_{eff}}} \ln\left(\frac{8h}{w} + \frac{w}{4h}\right) & \text{si } \frac{w}{h} \leq 1 \\ Z_c &= \frac{Z_0}{\sqrt{\epsilon_{eff}}} \left[\frac{w}{h} + 1,393 + 0,667 \ln\left(\frac{w}{h} + 1,444\right)\right]^{-1} & \text{si } \frac{w}{h} > 1 \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

où $Z_0 = 120\pi$ est l'impédance caractéristique du vide.

Ces équations ne sont bien sûr valables que dans le cas idéal où les pertes sont négligées, le ruban infiniment mince ($t = 0$) et l'impédance caractéristique indépendante de la fréquence. Si l'on désire se placer le plus près possible de l'expérimentation, il existe des facteurs correctifs qui prennent en compte l'épaisseur t non nulle de la ligne microruban, la conductivité σ non infinie de l'aluminium, la tangente de pertes $\tan\delta$ du diélectrique et le caractère dispersif de la ligne ($\epsilon_{eff} = \epsilon_{eff}(f)$) [Bah88].

Plaçons nous simplement dans le cas idéal afin de vérifier si les caractéristiques physiques des lignes répondent bien à la nécessité d'adaptation avec les câbles de mesure d'impédance caractéristique $Z_c \approx 50 \Omega$ de l'AVR :

- Pour la ligne ouverte ($w/h = 0,754$), les formules précédentes donnent $\epsilon_{eff} = 7,66$ et $Z_c = 51,57 \Omega$.
- Pour la ligne avec stub ($w/h = 0,942$), les formules précédentes donnent $\epsilon_{eff} = 7,79$ et $Z_c = 46,55 \Omega$. Nous remarquons également que pour la fréquence de résonance $f_r = 6,8 \text{ GHz}$ mesurée, le stub a une longueur égale à $L_1 = \lambda/4$ avec $\lambda = c_0/(\sqrt{\epsilon_{eff}}f)$ c'est-à-dire $L_1 = 4,0 \text{ mm}$.

Compte-tenu des imprécisions sur la mesure de l'épaisseur du substrat, sur la connaissance de la permittivité relative et de l'approximation des pertes négligeables du semiconducteur, nous pouvons envisager les résultats empiriques de Hammerstadt comme des points valables de comparaison avec les résultats numériques du chapitre IV.

Après ces quelques rappels sur les caractéristiques bidimensionnelles de la ligne microruban qui permettent le calcul de ϵ_{eff} et Z_c , nous allons expliquer les phénomènes physiques mis en jeu dans le contrôle optique.

2.2 Interaction rayonnement-semiconducteur

Les dispositifs microondes utilisés sont réalisés sur un substrat de silicium de haute résistivité. Ce semiconducteur, comme son nom l'indique, joue à la fois un rôle d'isolant pour la propagation hyperfréquence et à la fois un rôle de conducteur lorsqu'il est localement éclairé avec une longueur d'onde appropriée.

En effet, lorsqu'un semiconducteur non dégénéré est éclairé, des paires d'électron-trou peuvent être créées par absorption de photons à condition que l'énergie $h\nu$ des photons soit supérieure à la largeur de bande interdite E_g du silicium comme le montre la figure I.10. Dans le cas d'un semiconducteur à gap indirect comme le silicium, l'électron monte alors plus haut dans la bande de conduction, l'excédent d'énergie $h\nu - E_g$ est dissipé sous forme de chaleur (thermalisation) et l'électron redescend dans le bas de la bande de conduction [Mat96].

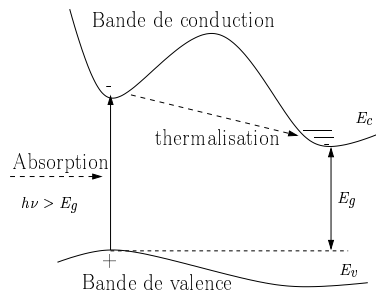


Figure I.10 : Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect

La longueur d'onde lumineuse maximale λ_{lum}^{max} (exprimée en $[\mu m]$ lorsque E_g est en $[eV]$) nécessaire pour qu'il y ait absorption de photons est donc :

$$\lambda_{lum}^{max} [\mu m] = \frac{hc}{E_g} = \frac{1,242}{E_g [eV]} \quad (I.6)$$

Si nous prenons la largeur du gap du silicium $E_g = 1,12 eV$ à la température $T = 300 K$, nous avons alors $\lambda_{lum}^{max} = 1,109 \mu m$ [Mat96]. Le laser utilisé, ayant une longueur d'onde $\lambda_{lum} = 830 nm$, convient donc bien au contrôle optique de nos structures qui sont fabriquées à partir de plaquettes de silicium.

Il s'agit maintenant de connaître la quantité de photons Φ effectivement absorbée par le silicium par rapport au flux Φ_0 de photons incidents :

$$\Phi_0 = \frac{I_{lum} \lambda_{lum}}{hc_0} = 5 \cdot 10^{18} I_{lum} [W.cm^{-2}] \lambda_{lum} [\mu m] \quad (I.7)$$

où I_{lum} est la densité de puissance lumineuse, λ_{lum} la longueur d'onde optique de la diode laser utilisée pour éclairer le bout de la ligne, $h = 6,626 \cdot 10^{-34} J.s$ la constante de Planck et $c_0 = 3 \cdot 10^8 m.s^{-1}$ la célérité de la lumière dans le vide.

Compte-tenu du coefficient de réflexion en incidence normale $r = (\sqrt{\epsilon_r} - 1)/(\sqrt{\epsilon_r} + 1)$ à la surface du matériau, le flux de photons transmis en surface dans le matériau est donc :

$$\Phi_t = (1 - r^2) \Phi_0 \quad (I.8)$$

Le flux décroît ensuite de manière exponentielle dans le matériau dans la direction de l'éclairement c'est-à-dire suivant y :

$$\Phi = \Phi_t \exp(-\alpha y) \quad (I.9)$$

où α désigne le coefficient d'absorption dans le matériau et s'exprime habituellement en $[cm^{-1}]$.

On peut trouver la variation du coefficient d'absorption de la lumière en fonction de la longueur d'onde pour quelques semiconducteurs dans [Sze85].

Une fois cette relation entre le flux de photons incidents et le flux de photons transmis dans le semiconducteur décrite, nous allons maintenant nous intéresser à l'interaction entre le métal et le semiconducteur qui permet d'expliquer le comportement Schottky de l'étude statique courant-tension de polarisation.

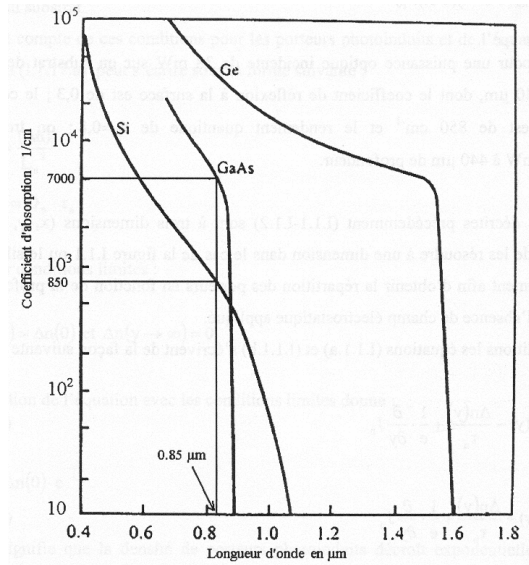


Figure I.11 : Coefficients d'absorption de quelques semiconducteurs en fonction de la longueur d'onde lumineuse

2.3 Interface métal-semiconducteur

Nous abordons ici l'étude de l'hétérostructure qui résulte de l'association d'un métal (Al) et d'un semiconducteur (Si). Le contact métal-semiconducteur peut donner naissance soit à un comportement ohmique, soit à un comportement redresseur selon le type de dopage du semiconducteur et des travaux de sortie du métal et du semiconducteur. Nous sommes dans le cas ici d'un semiconducteur légèrement dopé p ($p_0 = N_a = 2,4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $n_0 = 9,8 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$). Le travail de sortie d'un métal Φ_m est l'énergie minimale qu'il faut fournir pour extraire un électron sans vitesse initiale. Il correspond à la différence entre le niveau de Fermi E_{Fm} et l'énergie potentielle d'un électron dans le vide comme le montre la figure I.12.

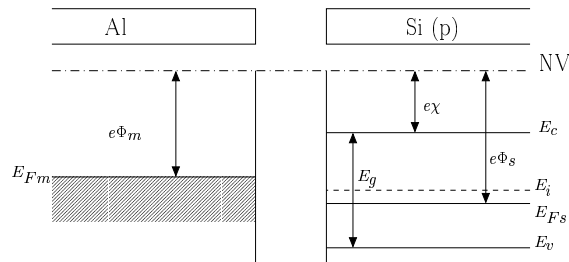


Figure I.12 : Diagramme de bandes d'énergie de l'aluminium et du silicium

En ce qui concerne l'aluminium, nous avons $e\Phi_m = 4,3 \text{ eV}$. Le travail de sortie du silicium se détermine à l'aide de l'équation suivante :

$$e\Phi_s = e\chi + E_g - (E_{Fs} - E_v) = \chi + E_g - k_B T \ln \left(\frac{N_v}{N_a} \right) \quad (\text{I.10})$$

où χ est l'affinité électronique du silicium ($4,01 \text{ eV}$), E_g est la différence des niveaux énergétiques ($E_c - E_v = 1,12 \text{ eV}$), E_{Fs} le niveau de Fermi du silicium, E_v le plus haut niveau de la bande de valence, E_c le plus bas niveau de la bande de conduction, k_B la constante de Boltzmann ($8,625 \cdot 10^{-5} \text{ eV.K}^{-1}$), T la température ambiante (300 K), N_v la densité équivalente d'états dans la bande de valence ($1,04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$).

Le travail de sortie du silicium $e\Phi_s = 4,7 \text{ eV}$ étant supérieur à celui du métal et se trouvant dans la situation d'un semiconducteur dopé p , nous allons montrer que nous sommes en présence d'un contact redresseur.

Lorsqu'un métal et un semiconducteur sont mis en contact, ils peuvent échanger de l'énergie et constituent ainsi un seul système thermodynamique. La distribution statistique des électrons dans ce système est alors représentée par un niveau de Fermi unique, les niveaux E_{Fm} et E_{Fs} s'alignent comme le montre la figure I.13.

Les électrons qui passent du métal dans le semiconducteur font apparaître un déficit d'électrons à la surface du métal. Dans le semiconducteur, les électrons qui viennent du métal se recombinent avec les trous créant une zone de déplétion due à la présence des ions fixes accepteurs N_a qui ne sont plus compensés par les trous. Il apparaît ainsi une zone de charge d'espace négative étalée dans le semiconducteur. La diffusion des électrons s'arrête lorsque le champ électrique dû à la zone de déplétion équilibre celui dû à la tension de diffusion ($V_d = 4,7 - 4,3 = 0,4 \text{ V}$).

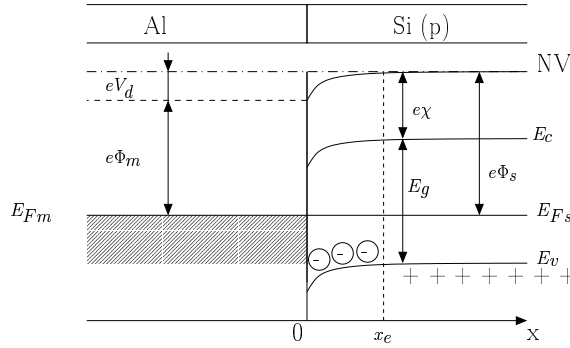


Figure I.13 : Mise en contact de l'aluminium et du silicium (p) avec $\Phi_m < \Phi_s$ à l'équilibre thermodynamique

Polarisons maintenant la structure sous une tension $V_a = V_s - V_m$.

Si la tension de polarisation V_a est négative, les bandes de conduction et de valence s'élèvent, augmentant la courbure des bandes. La barrière de potentiel est augmentée, rendant la circulation du courant plus difficile. On dit alors que la structure est polarisée en inverse ou dans le sens "bloqué" (voir figure I.14a).

Si la tension de polarisation du semiconducteur est positive, les bandes sont abaissées et la barrière de potentiel que doivent franchir les trous pour passer dans le métal est réduite ; le courant circule donc librement. On dit alors que la structure est polarisée en direct ou dans le sens "passant" (voir figure I.14b).

La structure métal-semiconducteur (p) constitue donc un contact redresseur, c'est une diode Schottky.

La zone de charge d'espace a une largeur x_e au niveau de la jonction qui dépend de la tension de polarisation appliquée V_a [Sze85] :

$$x_e(V_a) = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r(V_d - V_a)}{eN_a}} \quad (\text{I.11})$$

où $V_d = \Phi_m - \Phi_s = 0,4 \text{ V}$ est la tension de diffusion résultant de la différence des travaux de sortie du métal et du semiconducteur.

La capacité différentielle de diffusion C_d résultante est alors donnée par la relation :

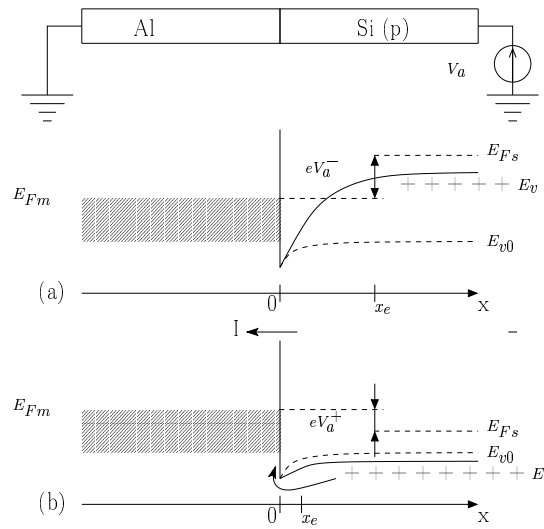


Figure I.14 : Contact métal-semiconducteur (p) avec $\Phi_m < \Phi_s$ sous polarisation
 a) $V_a = V_s - V_m < 0$, b) $V_a = V_s - V_m > 0$

$$C_d(V_a) = \frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{x_e} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_r e N_a}{2(V_d - V_a)}} \quad (\text{I.12})$$

En l'absence d'une polarisation externe ($V_a = 0$), la largeur de la zone de charge donnée par l'équation (I.11) est $x_e = 14,7 \mu\text{m}$ et la capacité de diffusion par unité de surface est alors $C_d = 0,7 \text{ nF.cm}^{-2}$.

Nous n'avons, dans cette étude, pas tenu compte des états d'interface. En effet, à la jonction des deux matériaux, il y a rupture de la maille cristalline du semiconducteur, ainsi que des impuretés dues à l'oxydation de la surface du silicium ou à des dépôts de corps inconnus. Tous ces défauts introduisent des niveaux supplémentaires dans la bande interdite du semiconducteur et courbent les bandes vers le milieu de la bande interdite. Le niveau de Fermi étant déjà pratiquement au milieu de la bande interdite, ces perturbations restent négligeables.

Nous allons maintenant nous intéresser aux équations décrivant la diffusion des porteurs dans le semiconducteur.

2.4 Diffusion des porteurs dans le semiconducteur

Dans le semiconducteur éclairé, les porteurs libres créés sont soumis à un champ électrique \mathbf{E} de pulsation ω . En effet, au niveau de la zone éclairée du semiconducteur, le milieu peut s'apparenter à un plasma dans lequel les particules libres, de charge q et de concentration N , oscillent autour de particules lourdes fixes (ions). Chaque particule libre est donc soumise à une force de rappel \mathbf{F}_r :

$$\mathbf{F}_r = \frac{Nq^2}{\epsilon_0} \mathbf{s} \quad (\text{I.13})$$

où \mathbf{s} représente le vecteur élongation de la particule par rapport à sa position d'équilibre.

Si on applique le principe fondamental de la dynamique à la particule de masse effective m^* qui est soumise à la force de rappel \mathbf{F}_r , on peut définir par homogénéité de l'expression une pulsation que l'on appellera pulsation plasma ω_p :

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Nq^2}{\epsilon_0 m^*}} \quad (\text{I.14})$$

On peut montrer que cette force de rappel devient négligeable devant la force d'origine électrique $\mathbf{F}_e = q\mathbf{E}$. On suppose de plus que les collisions des porteurs libres sur les particules lourdes sont représentées par la force de frottement $\mathbf{F}_f = -m^*/\tau \dot{\mathbf{s}}$ qui est proportionnelle à la vitesse de déplacement $\dot{\mathbf{s}} = d\mathbf{s}/dt$ de la particule libre et dans laquelle τ désigne le temps moyen entre 2 collisions ou temps de relaxation.

Si on applique maintenant l'équation du mouvement de la particule soumise à la force électrique \mathbf{F}_e et à la force de frottement \mathbf{F}_f , on obtient :

$$m^* \ddot{\mathbf{s}} + \frac{m^*}{\tau} \dot{\mathbf{s}} = q\mathbf{E} \quad (\text{I.15})$$

Le déplacement de ces particules libres (électrons ou trous) dans ce plasma crée alors un courant que l'on appelle courant de conduction et qui est proportionnel à \mathbf{E} :

$$\mathbf{J}_c = \sigma\mathbf{E} = Nq\dot{\mathbf{s}} \quad (\text{I.16})$$

Compte tenu de l'équation du mouvement (I.15), de l'expression de la pulsation plasma (I.14), nous pouvons déduire, avec la relation $\ddot{\mathbf{s}} = j\omega \dot{\mathbf{s}}$, la conductivité équivalente du plasma :

$$\sigma = \epsilon_0 \frac{\omega_p^2 \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} (1 - j\omega\tau) \quad (\text{I.17})$$

Nous allons maintenant traduire les caractéristiques de ce plasma en terme de permittivité, en tenant compte, en plus du courant de conduction \mathbf{J}_c , du courant de déplacement $\mathbf{J}_d = \epsilon_0 \epsilon_r d\mathbf{E}/dt$.

Si nous notons $\mathbf{J}_t = \mathbf{J}_c + \mathbf{J}_d$, nous obtenons $\mathbf{J}_t = [\epsilon_0 \epsilon_r + \sigma/(j\omega)] d\mathbf{E}/dt = \epsilon_0 \epsilon_p d\mathbf{E}/dt$ avec :

$$\epsilon_p = \epsilon_r - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} - j \frac{\tau}{\omega} \frac{\omega_p^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (\text{I.18})$$

où ϵ_p désigne la permittivité relative du plasma.

Nous avons raisonné jusqu'ici, par souci de clarté, pour un seul type de particule libre (électron ou trou) à la fois. Il est clair que tous les types de porteurs, électrons et trous, participent de manière plus ou moins prépondérante, suivant leur concentration respective n ou p , au courant de conduction dans le plasma.

Si on veut tenir compte de tous les types de porteurs dans le plasma, on doit réécrire la permittivité relative du plasma ϵ_p comme la contribution des 2 types de porteurs en développant l'expression de la pulsation plasma pour chacun des types des porteurs [Lee80] :

$$\epsilon_p = 1 - \frac{e^2}{\epsilon_0} \left[\frac{n\tau_e^2}{m_e^*(1 + \omega^2 \tau_e^2)} + \frac{p\tau_h^2}{m_h^*(1 + \omega^2 \tau_h^2)} + \frac{j}{\omega} \left(\frac{n\tau_e}{m_e^*(1 + \omega^2 \tau_e^2)} + \frac{p\tau_h}{m_h^*(1 + \omega^2 \tau_h^2)} \right) \right] \quad (\text{I.19})$$

où $N = n$, $m^* = m_e^* = 0,259 m_0$, $\tau = \tau_e$ et $q = -e$ pour les électrons,
 et $N = p$, $m^* = m_h^* = 0,38 m_0$, $\tau = \tau_h$ et $q = +e$ pour les trous.

Nous avons regroupé dans le tableau I.1, les constantes utilisées dans l'expression de la permittivité plasma (I.19).

Nous avons donc décrit le plasma à partir de sa permittivité relative ϵ_p qui est une fonction des concentrations des porteurs $n = n(x, y, z, t)$ et $p = p(x, y, z, t)$ à un instant t donné.

En prévision de nos simulations numériques, nous avons besoin de comprendre comment

Porteurs	Temps de relaxation [ps]	Masse effective [kg]	Charge [C]
électrons	$\tau_e = 0,221$	$m_e^* = 2,359 \cdot 10^{-31}$	$-e = -1,6022 \cdot 10^{-19}$
trous	$\tau_h = 0,13$	$m_h^* = 3,462 \cdot 10^{-31}$	$+e = 1,6022 \cdot 10^{-19}$

Tableau I.1 : Constantes utilisées dans l'expression de la permittivité plasma [Lee80]

évoluent les concentrations des porteurs n et p dans le plasma en fonction des coordonnées d'espace (x, y, z) et du temps t afin d'en extraire un modèle global et simplifié.

2.5 Évolution des concentrations des porteurs

Afin de garantir l'électroneutralité dans le plasma, il faut considérer un troisième type de courant qui tente à redistribuer les porteurs libres dans le plasma en les faisant diffuser des régions les plus concentrées aux régions les moins concentrées. Il s'agit des courants de diffusion \mathbf{J}_{dn} et \mathbf{J}_{dp} qui sont proportionnels aux gradients des concentrations des porteurs :

$$\mathbf{J}_{dn} = eD_n \nabla n \quad (\text{I.20a})$$

$$\mathbf{J}_{dp} = -eD_p \nabla p \quad (\text{I.20b})$$

Nous pouvons également séparer, selon le type de porteur, les courants de conduction \mathbf{J}_{cn} et \mathbf{J}_{cp} en les exprimant par rapport à leurs mobilités respectives μ_n et μ_p :

$$\mathbf{J}_{cn} = en\mu_n \mathbf{E} \quad (\text{I.21a})$$

$$\mathbf{J}_{cp} = ep\mu_p \mathbf{E} \quad (\text{I.21b})$$

En posant les courants de transport (conduction et diffusion) $\mathbf{J}_n = \mathbf{J}_{cn} + \mathbf{J}_{dn}$ et $\mathbf{J}_p = \mathbf{J}_{cp} + \mathbf{J}_{dp}$ pour chaque type de porteur, nous pouvons écrire les équations traduisant la continuité des charges n et p respectivement :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}_n + g_n - r_n \quad (\text{I.22a})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}_p + g_p - r_p \quad (\text{I.22b})$$

où les termes g_i et r_i désignent respectivement les taux de génération et les taux de recombinaison des porteurs $i = n, p$.

A ces équations, il ne faut bien sûr pas oublier d'adjoindre l'équation de Poisson qui traduit l'existence d'une charge d'espace due aux différences de mobilité des électrons et des trous :

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \epsilon_p \mathbf{E}) = \rho \quad (\text{I.23})$$

Cette charge d'espace ρ induit un champ électrique interne \mathbf{E}_i qui accélère les porteurs les plus lents et freine les porteurs les plus rapides. Le champ électrique total $\mathbf{E} = \mathbf{E}_i - \nabla V + \mathbf{E}_a$ résulte donc d'une triple contribution ; du champ électrique interne \mathbf{E}_i , d'une éventuelle tension de polarisation V et *a priori* du champ électrique hyperfréquence \mathbf{E}_a appliqué.

Nous avons donc ici un problème complexe à résoudre, où les inconnues principales sont $n(x, y, z, t)$, $p(x, y, z, t)$ et $\mathbf{E}_i(x, y, z, t)$, et les inconnues secondaires g_n , g_p , r_n et r_p . Nous allons d'abord traiter le cas des inconnues secondaires.

2.5.1 Processus de génération

Comme nous l'avons décrit dans le paragraphe précédent, les électrons et les trous sont photogénérés par paires si l'énergie lumineuse incidente est suffisante. Nous avons donc $g_n = g_p = g$.

Le taux de génération g des paires créées dépend directement du flux de photons incident Φ par la relation :

$$g = -\eta_0 \frac{d\Phi}{dy} \quad (\text{I.24})$$

où η_0 désigne l'efficacité quantique c'est-à-dire le nombre de paires électron-trou générées par photon.

Nous obtenons donc d'après l'équation (I.9) :

$$g(y) = \eta_0 \Phi_t \alpha \exp(-\alpha y) = \eta_0 \alpha (1 - r^2) \frac{I_{lum} \lambda_{lum}}{hc_0} \exp(-\alpha y) = g_0 \exp(-\alpha y) \quad (\text{I.25})$$

Une application numérique simple peut donner une idée du taux de génération de paires électron-trou en éclairant fortement le silicium. Par exemple, si on éclaire le bout de la ligne microruban avec notre diode laser avec une densité de puissance lumineuse $I_{lum} = 17,2 \text{ W.cm}^{-2}$ ($P_{lum} = 100 \text{ mW}$), le coefficient de réflexion à la surface $r^2 = 0,3$, le coefficient d'absorption $\alpha = 850 \text{ cm}^{-1}$ et le rendement quantique $\eta_0 = 0,8$ [Mat96], on trouve $g = g_0 = 3,42 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ en surface et $g(h) = 5,9 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ à la profondeur $h = 400 \mu\text{m}$ de notre semiconducteur.

2.5.2 Processus de recombinaison

De manière générale, il existe 3 types de recombinaison dans les matériaux semiconducteurs qui peuvent se produire avec une probabilité plus ou moins grande selon la nature du semiconducteur et son état de surface : les recombinaisons directes, les recombinaisons indirectes en volume et les recombinaisons indirectes en surface.

En ce qui concerne le processus de recombinaison dans le silicium qui est un semiconducteur à gap indirect, il s'effectue plutôt de manière indirecte et non-radiative (effet Auger) [Mat96]. En effet, les impuretés incontrôlées ou les défauts de maille introduisent dans la bande interdite des centres de recombinaison intermédiaires de niveau d'énergie E_r comme le montre la figure I.15.

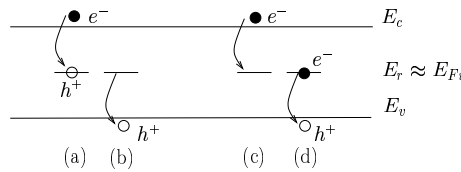


Figure I.15 : *Recombinaisons indirectes et non-radiatives dans le silicium : (a) capture d'un électron, (b) émission d'un trou, (c) émission d'un électron, (d) capture d'un trou*

Les centres de recombinaison ont des niveaux d'énergie en général proches du milieu de

la bande interdite de telle sorte que $E_r \approx E_{Fi}$ où E_{Fi} désigne le niveau d'énergie de Fermi intrinsèque.

Le modèle de Schokley-Read-Hall nous permet maintenant d'écrire le taux de recombinaison en volume r_v sous la forme :

$$r_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \text{ avec } \tau_n = \frac{\Delta n}{pn - n_i^2} [\tau_{p0}(n + n_i) + \tau_{n0}(p + n_i)] \quad (\text{I.26a})$$

$$r_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \text{ avec } \tau_p = \frac{\Delta p}{pn - n_i^2} [\tau_{p0}(n + n_i) + \tau_{n0}(p + n_i)] \quad (\text{I.26b})$$

où $\tau_{n,p}$ désigne la durée de vie respectivement des électrons et des trous, n_i la concentration intrinsèque ($n_i^2 = n_0 p_0$), l'indice zéro désignant les durées de vie ou les concentrations à l'équilibre.

A la surface du semiconducteur, la recombinaison en surface est décrite également par la statistique de Schokley-Read-Hall mais la concentration des défauts y étant plus importante, la durée de vie des porteurs en surface est inférieure à celle en volume. Le gradient de concentration donne alors naissance à un flux de diffusion des porteurs dirigé du volume vers la surface. Les vitesses de recombinaison en surface pour les électrons et les trous sont caractérisées par $r_s/\Delta n$ et $r_s/\Delta p$. Elles sont assez difficiles à caractériser car elles dépendent de la qualité de la préparation de la plaquette de semiconducteur. En ce qui concerne nos dispositifs, elles sont de l'ordre de 10^3 à 10^5 cm.s^{-1} pour une surface polie avec un oxyde natif [Wal95].

2.6 Analyse du problème

L'équation de la permittivité équivalente (I.19) montre que la permittivité du plasma photoinduit dépend des concentrations des porteurs $n(x, y, z, t)$ et $p(x, y, z, t)$. Le but de notre étude est de traduire la permittivité du plasma ϵ_p en terme de coordonnées d'espace (x, y, z) pour la formulation numérique de notre problème qui prend en compte les relations constitutives des milieux (voir chapitre II).

L'axe optique (y) du faisceau laser apparaît clairement comme une direction privilégiée pour étudier la diffusion des porteurs suivant la profondeur dans le semiconducteur. Nous allons donc résoudre les équations de continuité de la charge (I.22) dans un premier temps suivant un modèle 1D.

Compte tenu du rapport important qui existe entre les temps de relaxation τ_e, τ_h [ps] et la durée de vie des porteurs τ_n, τ_p [μs], nous pouvons considérer que la neutralité électrique est rétablie en un temps infiniment plus bref que son retour à l'équilibre. L'égalité des concentrations des électrons et des trous en excès ($n(y, t) - n_0 \approx p(y, t) - p_0$) par rapport à leur concentration à l'équilibre est donc constamment vérifiée dans le processus de photogénération permanent.

Si on considère que $\tau_{n0} = \tau_{p0} = \tau_0$ [Hai96], on obtient que $\tau_n = \tau_p = \tau_a$ et donc $r_n = r_p = r_a$ avec :

$$r_a = \frac{\Delta n}{\tau_a} \text{ avec } \tau_a = \tau_0 \frac{p + n + 2n_i}{p_0 + n_0 + \Delta n} \text{ si } (\Delta n = \Delta p) \quad (\text{I.27})$$

Nous allons donc traduire les équations de continuité de la charge par rapport à ($\Delta n = \Delta p$), sous un régime d'éclairement permanent. Ce qui donne, après injection de l'expression des courants \mathbf{J}_n et \mathbf{J}_p dans les équations (I.22) et projection sur l'axe optique (y) :

$$0 = \mu_n E \frac{\partial \Delta n}{\partial y} + \mu_n n \frac{\partial E}{\partial y} + D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial y^2} + g_0 \exp(-\alpha y) - \frac{\Delta n}{\tau_a} \quad (\text{I.28a})$$

$$0 = -\mu_p E \frac{\partial \Delta n}{\partial y} - \mu_p p \frac{\partial E}{\partial y} + D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial y^2} + g_0 \exp(-\alpha y) - \frac{\Delta n}{\tau_a} \quad (\text{I.28b})$$

En multipliant les équations (I.28a) et (I.28b) respectivement par $p\mu_p$ et $n\mu_n$ et en effectuant la somme membre à membre, nous obtenons, compte tenu de la relation d'Einstein $D/\mu = k_B T/e$, l'expression :

$$D_a \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial y^2} + \mu_a E \frac{\partial \Delta n}{\partial y} - \frac{\Delta n}{\tau_a} = -g_0 \exp(-\alpha y) \quad (\text{I.29})$$

avec :

$$D_a = \frac{(p+n)D_n D_p}{pD_p + nD_n} \quad (\text{I.30a})$$

$$\mu_a = \frac{(p-n)\mu_n \mu_p}{p\mu_p + n\mu_n} \quad (\text{I.30b})$$

$$\tau_a = \tau_0 \frac{p+n+2n_i}{p_0+n_0+\Delta n} \quad (\text{I.30c})$$

L'équation (I.29) est l'équation de diffusion ambipolaire, les coefficients D_a , μ_a et τ_a sont respectivement appelés constante de diffusion, mobilité et durée de vie ambipolaires. Cette équation traduit donc la diffusion des paires électron-trou excédentaires créées par photoexcitation, les durées de vie des porteurs étant égales ($\tau_n = \tau_p = \tau_a$) à chaque instant ainsi que les concentrations des porteurs en excès ($\Delta n = \Delta p$).

Il s'agit alors de résoudre cette équation du second degré en y avec un second membre non constant $g = g_0 \exp(-\alpha y)$ et des coefficients D_a , μ_a et $1/\tau_a$ qui dépendent *a priori* de l'inconnue Δn .

Nous allons d'abord étudier l'évolution de ces coefficients en fonction de ($\Delta n = \Delta p$) c'est-à-dire du niveau d'injection en considérant les caractéristiques initiales de notre silicium légèrement dopé p , données par le tableau I.2 [Sze85, Hai96].

Porteurs	Constante de diffusion [$cm^2.s^{-1}$]	Mobilité [$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$]	Concentration [cm^{-3}]	Durée de vie [μs]
électrons	$D_n = 29,4$	$\mu_n = 1350$	$n_0 = 3,8 \cdot 10^7$	$\tau_{n0} = 2$
trous	$D_p = 12,4$	$\mu_p = 480$	$p_0 = 2,6 \cdot 10^{12}$	$\tau_{p0} = 2$

Tableau I.2 : *Caractéristiques initiales de notre silicium à la température $T = 300 K$*

A partir des mobilités et des concentrations initiales des électrons et des trous, nous pouvons vérifier que notre semiconducteur est bien résistif. En effet, le calcul de la résistivité donne $\rho_0 = 1/\sigma_0 = 5001 \Omega.cm$ avec $\sigma_0 = \mu_n n_0 e + \mu_p p_0 e$, la conductivité initiale (en l'absence d'éclairement).

Récrivons les coefficients de l'équation de diffusion ambipolaire (I.29) en fonction de ($\Delta n = \Delta p$) :

$$D_a = \frac{(p_0 + n_0 + 2\Delta n)D_n D_p}{p_0 D_p + n_0 D_n + \Delta n(D_n + D_p)} \quad (\text{I.31a})$$

$$\mu_a = \frac{(p_0 - n_0)\mu_n \mu_p}{p_0 \mu_p + n_0 \mu_n + \Delta n(\mu_n + \mu_p)} \quad (\text{I.31b})$$

$$\tau_a = \tau_0 \frac{p_0 + n_0 + 2\Delta n + 2n_i}{p_0 + n_0 + \Delta n} \quad (\text{I.31c})$$

Le coefficient de diffusion ambipolaire D_a varie en fonction de la concentration des porteurs en excès $\Delta n = \Delta p$ comme le montre la figure I.16.

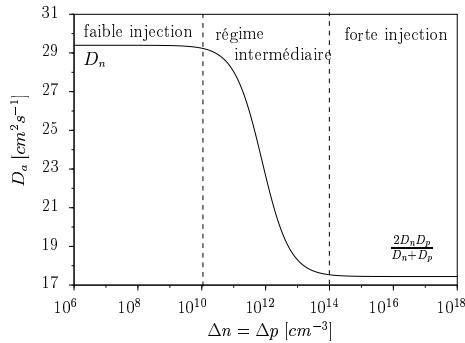


Figure I.16 : Variation du coefficient de diffusion ambipolaire en fonction du niveau d'injection

Nous pouvons en dégager 3 zones par rapport au niveau d'injection :

- Pour $\Delta n < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, nous sommes en régime de *faible injection (fi)* ; le coefficient de diffusion ambipolaire peut être considéré comme constant et égal à celui des porteurs minoritaires représentés par les électrons $D_a(fi) = D_n = 29,4 \text{ cm}^2.s^{-1}$.
- Pour $\Delta n > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, nous sommes en régime de *forte injection (FI)* ; le coefficient de diffusion ambipolaire peut être également considéré comme constant. Les électrons et les trous sont tous deux excédentaires et participent au phénomène de diffusion ; on a alors $D_a(FI) = 2D_n D_p / (D_n + D_p) = 17,4 \text{ cm}^2.s^{-1}$.
- Pour $10^{10} \leq \Delta n [\text{cm}^{-3}] \leq 10^{14}$, nous sommes dans un régime *intermédiaire* ; le coefficient de diffusion ambipolaire varie quasi-linéairement entre les 2 constantes définies précédemment.

Examinons maintenant sur la figure I.17 la variation de la mobilité ambipolaire μ_a en fonction du niveau d'injection.

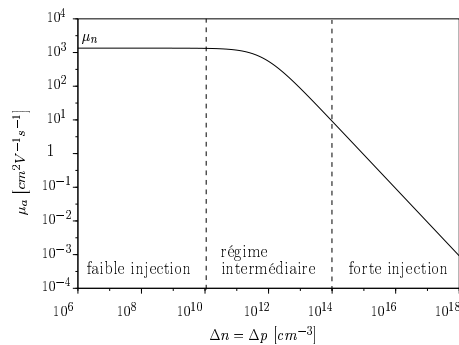


Figure I.17 : Variation de la mobilité ambipolaire en fonction du niveau d'injection

En régime de *faible injection*, la mobilité ambipolaire est constante et est égale à celle des électrons qui sont les porteurs minoritaires : $\mu_a(fi) = \mu_n$.

Pour les *fortes injections*, les porteurs sont en trop grand nombre pour pouvoir se déplacer librement dans la structure cristalline ; la mobilité ambipolaire chute donc de manière exponentielle avec la concentration des porteurs en excès : $\mu_a(FI) = 0$.

Enfin, si nous observons sur la figure I.18 la variation de la durée de vie des porteurs τ_a avec la concentration des porteurs en excès, nous retrouvons les 3 zones du cas de la diffusion ambipolaire :

- Pour $\Delta n < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, nous retrouvons le régime de *faible injection* ; la durée de vie des porteurs ne dépend que du dopage initial ; $\tau_a(fi) = \tau_0$.
- Pour $\Delta n > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, nous sommes en régime de *forte injection* ; la durée de vie est le double de la valeur précédente ; $\tau_a(FI) = 2\tau_0$.
- Pour $10^{10} \leq \Delta n [\text{cm}^{-3}] \leq 10^{14}$, nous retrouvons le régime *intermédiaire* ; la durée de vie des porteurs varie quasi-linéairement du simple au double.

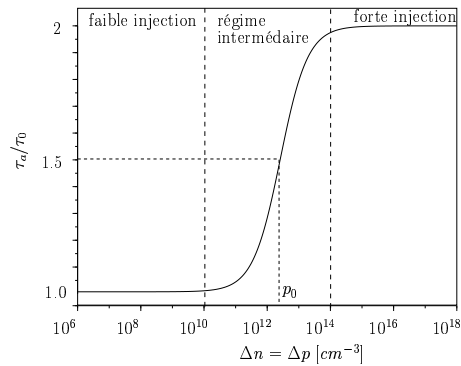


Figure I.18 : Variation de la durée de vie des porteurs en fonction du niveau d'injection

Pour résumer les variations des coefficients de l'équation de diffusion ambipolaire, nous pouvons définir 3 zones d'étude :

- Le régime de *faible injection (fi)* $\Delta n \ll p_0$; le comportement du matériau est gouverné par les porteurs minoritaires c'est-à-dire les électrons compte tenu du dopage de notre silicium. Les grandeurs D_a , μ_a et τ_a sont alors constantes et respectivement égales à D_n , μ_n et τ_0 .
- Le régime de *forte injection (FI)* $\Delta n \gg p_0$; les phénomènes de conduction sont négligeables et les électrons et les trous sont tous deux des porteurs excédentaires qui diffusent dans le milieu. Les grandeurs D_a , μ_a et τ_a sont alors également constantes et respectivement égales à $2D_n D_p / (D_n + D_p)$, 0 et $2\tau_0$.
- Pour le régime *intermédiaire*, toutes les grandeurs sont variables et la résolution de l'équation de diffusion ambipolaire qui est une équation non linéaire du deuxième ordre n'est pas possible analytiquement.

Afin de comprendre comment varie la concentration des porteurs dans la profondeur du silicium, nous allons d'abord résoudre analytiquement l'équation de diffusion ambipolaire dans les 2 zones de régime extrêmes (*fi* et *FI*) où les coefficients peuvent être considérés comme constants.

2.7 Résolution de l'équation de diffusion ambipolaire

L'équation de diffusion ambipolaire (I.29), dans les zones de *faible et forte injections*, est une équation différentielle à coefficients constants, avec second membre, que nous pouvons réécrire, en introduisant des coefficients homogènes à des longueurs, sous la forme suivante :

$$L_a^2 \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial y^2} + L_E \frac{\partial \Delta n}{\partial y} - \Delta n = -g_0 \tau_a \exp(-\alpha y) \quad (\text{I.32})$$

avec

$$L_a = \sqrt{D_a \tau_a} \quad (\text{I.33a})$$

$$L_E = \mu_a E_a \tau_a \quad (\text{I.33b})$$

La solution analytique de cette équation est la somme de l'équation générale sans second membre et d'une solution particulière :

$$\Delta n(y) = A^+ \exp\left(\frac{y}{L_a^+}\right) + A^- \exp\left(-\frac{y}{L_a^-}\right) + K \exp(-\alpha y) \quad (\text{I.34})$$

avec

$$K = \frac{g_0 \tau_a}{1 + L_E \alpha - L_a^2 \alpha^2} \quad (\text{I.35a})$$

$$L_a^\pm = \frac{\pm 2L_a^2}{-L_E \pm \sqrt{L_E^2 + 4L_a^2}} \quad (\text{I.35b})$$

Les constantes A^\pm seront déterminées à partir des conditions aux limites c'est-à-dire des vitesses de recombinaison en surface $v_s(y=0)$ et $v_s(y=h)$.

Dans le cas d'un modèle 1D, la vitesse de recombinaison en surface des électrons ou des trous est donnée par $v_s(y) = \pm [D_a / \Delta n(y)] d\Delta n(y) / dy$ [Sze85]. Dans le cas de notre silicium, la surface inférieure n'étant pas polie, la vitesse de recombinaison $v_s(y \rightarrow h)$ doit alors tendre vers l'infini et $\Delta n(y \rightarrow h)$ vers zéro.

Plaçons nous dans un premier temps dans le cas de la *forte injection (FI)* c'est-à-dire $\Delta n \gg p_0$ sur une zone telle que $y(FI) > y > 0$. Nous avons alors $\tau_a(FI) \approx 2\tau_0$, $\mu_a(FI) = 0$ et $D_a(FI) = 2D_n D_p / (D_n + D_p)$. Nous pouvons en déduire la longueur $L_a^+ = L_a^- = L_a(FI) = \sqrt{2D_a \tau_0} = 83 \mu m$ qui est la longueur de diffusion ambipolaire en *forte injection*. Nous pouvons comparer cette longueur à la longueur de pénétration $y_0 = 1/\alpha = 12 \mu m$ et à la

longueur due à une polarisation, par exemple, de 5 V de la ligne $L_E(FI) = 0,027 \mu m$. L'application d'un éventuel champ électrique E_a n'a pas d'influence sur la concentration des porteurs excédentaire Δn dans cette zone car ce terme se trouve en facteur de la mobilité ambipolaire $\mu_a(FI)$ qui tend vers 0 en *forte injection*.

La solution de l'équation de diffusion ambipolaire, dans le cas du régime de *forte injection*, est donc :

$$\Delta n(y)(FI) = A_{(FI)}^- \exp\left(-\frac{y}{L_a(FI)}\right) + A_{(FI)}^+ \exp\left(\frac{y}{L_a(FI)}\right) + \frac{2g_0\tau_0}{1 - (L_a(FI)\alpha)^2} \exp\left(\frac{-y}{y_0}\right) \quad (I.36)$$

pour $\Delta n > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et où $A_{(FI)}^-$ et $A_{(FI)}^+$ sont des constantes que nous déterminerons ultérieurement par les conditions aux limites.

Au fur et à mesure que les porteurs photogénérés diffusent dans la profondeur du substrat vers le plan de masse, ils se recombinent ; leur concentration diminue exponentiellement, leur mobilité augmente et leur durée de vie décroît. Nous passons donc rapidement d'un niveau de *forte injection* à un niveau de *faible injection*. Comme la mobilité μ_a ne devient plus négligeable et tend vers la mobilité μ_n des porteurs minoritaires, le champ électrique appliqué E_a modifie les longueurs de diffusion L_a^\pm comme le prouve l'équation (I.35b).

En régime de *faible injection*, les coefficients de l'équation de diffusion (I.32) sont modifiés mais peuvent être toujours considérés comme des constantes à partir du moment où la condition $\Delta n < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ est vérifiée. Nous obtenons alors dans ce régime $\tau_a(fi) \approx \tau_0$, $\mu_a(fi) = \mu_n$ et $D_a(fi) = D_n$. Si nous polarisons fortement la ligne sous une différence de potentiel de 5 V afin d'accroître le rôle de L_E , nous obtenons $L_E(fi) = \mu_n E_a \tau_0 = 2700 \mu m$ pour un substrat d'épaisseur $h = 500 \mu m$ que nous pouvons comparer à $L_a(fi) = \sqrt{D_n \tau_0} = 77 \mu m$. Un développement limité de L_a^+ et L_a^- en fonction de $L_a(fi)/L_E(fi) \ll 0$ donne $L_a^+ = L_E(fi) = 2700 \mu m$ et $L_a^- = L_a^2(fi)/L_E(fi) = 2,2 \mu m$. Au niveau du contact entre le semiconducteur et le plan de masse quand $y \rightarrow h$, la vitesse de recombinaison des porteurs tend vers l'infini et donc la concentration des porteurs en excès Δn tend vers zéro, ce qui donne $A_{(fi)}^+ = 0$.

La solution de l'équation de diffusion ambipolaire, dans le cas du régime de *faible injection*, devient donc :

$$\Delta n(y)(fi) = A_{(fi)}^- \exp\left(-\frac{y}{L_a^2(fi)/L_E}\right) + \frac{g_0\tau_0}{1 + L_E\alpha} \exp\left(-\frac{y}{y_0}\right) \text{ pour } \Delta n < 10^{10} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{I.37})$$

Nous pouvons encore simplifier ces équations en considérant les ordres de grandeurs des coefficients dans les exponentielles. En effet, le profil des densités de porteurs en excès décroît de façon exponentielle avec une pente en $1/L_a(FI) = 120 \text{ cm}^{-1}$ en régime de *forte injection* et avec une pente plus forte ensuite en $1/y_0 = 850 \text{ cm}^{-1}$, en régime de *faible injection*, s'il apparaît. La profondeur sur laquelle s'établit le régime de *forte injection* dépend donc de la puissance lumineuse injectée ; plus cette dernière est forte, plus la concentration de paires d'électron-trou générées en surface sera importante et plus la profondeur sur laquelle nous aurons $\Delta n \gg p_0$ sera importante, le régime de *faible injection* ne pouvant s'établir alors qu'après une recombinaison suffisante des paires électron-trou.

Traisons maintenant le cas de la très forte injection en éclairant fortement l'extrémité de la ligne sous une puissance lumineuse $P_{lum} = 100 \text{ mW}$.

Les conditions initiales prises à la surface du silicium en $y = 0$ sont les suivantes : $\Delta n_0 = 2g_0\tau_0 = 1,4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $(d\Delta n/dy)_0 = -\Delta n_0/L_a(FI) = -1,6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-4}$.

Nous pouvons simplifier alors l'équation (I.36) en considérant que le deuxième terme n'a pas de signification physique ($A_{(FI)}^+ = 0$) et que le troisième terme est négligeable devant le premier à cause des coefficients dans les exponentielles :

$$\Delta n(FI) = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{y}{L_a(FI)}\right) \text{ pour } \Delta n > 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{I.38})$$

Nous pouvons vérifier sur la figure I.19 que la concentration des porteurs en excès Δn reste bien dans le domaine où le régime de forte injection est valable ($\Delta n > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$).

Pour passer du modèle 1D à un modèle 3D, il suffit de multiplier les résultats précédents par $\exp(-\alpha r)$ où $r = \sqrt{x^2 + z^2}$ représente la coordonnée polaire traduisant la diffusion latérale des porteurs dans le silicium. Nous allons donc utiliser dans nos futures simulations (voir chapitre IV) une permittivité ϵ_p dont l'expression est donnée par l'équation (I.19) avec :

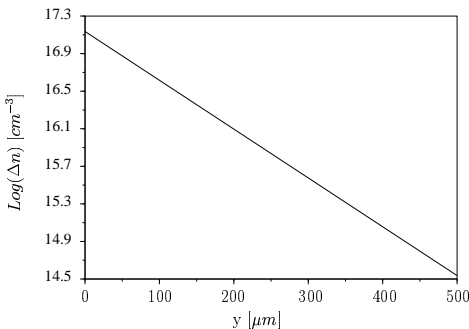


Figure I.19 : Concentration des porteurs en excès en fonction de la profondeur dans le silicium

$$n(x, y, z) = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{y}{L_a(FI)}\right) \exp(-\alpha\sqrt{x^2 + z^2}) + n_0 \quad (\text{I.39a})$$

$$p(x, y, z) = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{y}{L_a(FI)}\right) \exp(-\alpha\sqrt{x^2 + z^2}) + p_0 \quad (\text{I.39b})$$

Cette permittivité équivalente sera valable sur toute la profondeur du silicium et sur un rayon $0 < r < 430 \mu m$ qui correspond au rayon de la tache lumineuse de la diode laser sur la surface du substrat [Aho01] comme le montre la figure I.20.

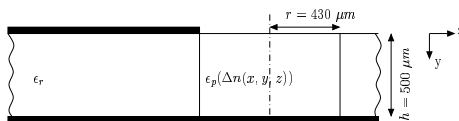


Figure I.20 : Domaine simulant la charge photoinduite en très forte injection

Si on éclaire l'extrémité de la ligne microruban avec une puissance lumineuse $P_{lum} < 100 mW$, le domaine sur lequel s'étend le régime de forte injection diminue pour laisser place rapidement à celui de faible injection. Les constantes des équations analytiques pour les régimes de *(FI)* et *(fi)* (I.36) et (I.37) sont plus difficiles à déterminer à cause du régime intermédiaire où les coefficients de l'équation de diffusion ambipolaire varient rapidement.

Il faut alors avoir recours à la simulation numérique.

En effectuant le changement de fonctions $\Delta n_1 = \Delta n$ et $\Delta n_2 = \Delta n'$, l'équation de diffusion ambipolaire (I.32) à une fonction du second ordre peut se modifier en un système

d'équations différentielles à deux fonctions couplées mais du premier ordre :

$$\Delta n_1' = \Delta n_2 \quad (\text{I.40a})$$

$$\Delta n_2' = -\frac{E_a \mu_a}{D_a} \Delta n_2 + \frac{1}{D_a \tau_a} \Delta n_1 - \frac{g_0}{D_a} \exp(-\alpha y) \quad (\text{I.40b})$$

où $\Delta n_i'$ désigne la dérivée de Δn_i par rapport à la profondeur y , et D_a , μ_a et τ_a sont des fonctions qui dépendent de $\Delta n_1(y)$ et qui sont définies par les équations (I.31).

Nous avons essayé de résoudre ce système d'équations non linéaires à l'aide de la fonction *ode15s* de *Matlab*® mais les résultats obtenus n'ont pas été retenus à cause de la trop grande raideur du système. En effet, si nous revenons simplement dans le cas du régime précédent de très forte injection, nous constatons que $g_0/D_a \gg 1/(D_a \tau_a)$ et les résultats numériques obtenus divergent rapidement de la solution analytique proposée dans ce régime particulier résolu avec les mêmes conditions aux limites.

3 Conclusion

Nous avons donc, dans ce chapitre, présenté le problème du contrôle optique de composants hyperfréquences. Nous avons commencé, afin de mieux cerner les problèmes physiques, par établir une base de données expérimentales sur deux composants simples en technologie microruban qui serviront de références qualitatives et quantitatives. Nous avons ensuite décrit en termes de conductivité plasma puis de permittivité complexe équivalente, le transport des charges dans ce milieu photoinduit. Pour la formulation numérique hyperfréquence décrite dans le chapitre suivant, nous avons besoin de connaître la répartition spatiale des charges dans le semiconducteur afin de traduire les relations constitutives de plasma photoinduit. Nous avons donc résolu analytiquement et de manière simplifiée l'équation de diffusion ambipolaire dans le plasma pour les régimes de forte et faible injections, puis nous nous sommes placés dans le cas particulier du régime de très forte injection afin d'établir un modèle simple pour nos simulations globales.

Bibliographie du chapitre I

- [Aho01] P. Ahouassa
Comportement microondes de charges photo-induites dans le silicium : Analyse et applications
Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Septembre 2001.
- [Bah88] I. Bahl and P. Bhartia
Microwave solid state circuit design
A Wiley-Interscience Publication, 1988.
- [Boy98] B. Boyer
Comportement en microondes de la charge capacitive photo-induite sur un substrat silicium
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, Juillet 1998.
- [Cho97] S. Chouteau
Intégration de la commande optique d'un commutateur microonde en technologie coplanaire sur silicium
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, Juillet 1997.
- [Hai96] J. Haidar
Commande optoélectronique d'atténuateurs, de résonateurs et de filtres microondes réalisés sur substrat silicium
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, Juillet 1996.
- [Ham75] E.O. Hammerstad
"Equations for microstrip circuit design"
In *5th European microwave conference proceedings*, September 1975.
- [Lee80] C.H. Lee, P.S. Mak, and A.P. Defonzo
"Optical control of millimeter-wave propagation in dielectric waveguides"
IEEE Journal of selected topics in quantum electronics, vol. 16, no. 3, pp. 277–288, March 1980.
- [Mat96] H. Mathieu
Physique des semiconducteurs et des composants électroniques
Masson, 1996.
- [Sch69] M.V. Schneider
"Microstrip lines for microwave integrated circuits"
Bell system technical journal, vol. 48, no. 5, pp. 1421–1444, May-June 1969.

- [Ser99] M. Serres
Optical control of microwave planar devices on semiconductor substrate
PhD thesis, Université Catholique de Louvain, December 1999.
- [Sze85] S.M. Sze
Physics of semiconductor devices
John Wiley and Sons, second edition Edition, 1985.
- [Tor02] G. Torrese
Ultra-wide bandwidth photodetectors for optical receivers
PhD thesis, Université Catholique de Louvain, February 2002.
- [Wal95] D. Walz
Caractérisation de la contamination métallique dans le silicium par des méthodes de durée de vie. Application au cas du fer dans le silicium de type p
Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1995.

Chapitre II

Présentation des outils mathématiques

Sommaire

1	Modèle mathématique	53
1.1	Équations de Maxwell en régime harmonique	53
1.2	Relations constitutives du milieu	55
1.3	Relations de passage et distribution	56
1.3.1	Conditions de continuité entre deux diélectriques	58
1.3.2	Interface avec un conducteur parfait	59
1.4	Équations de propagation des ondes	60
2	Propagation guidée	63
2.1	Les différents modes de propagation	63
2.2	Deux types de problème en hyperfréquences	64
3	Principe de résolution par la MEF	65
3.1	Formulation faible du problème 3D	65
3.2	Ondes de référence	68
3.3	Problème 2D aux valeurs propres	69
4	Résolution	71
4.1	Résolution du problème 2D	71
4.2	Résolution du problème 3D : calcul des paramètres S	74
5	Conclusion	76
	Bibliographie du chapitre II	79

LES équations de Maxwell qui sont à la base de la résolution des phénomènes électromagnétiques, entres autres en hyperfréquences, ont été établies il y a plus d'un siècle. Cependant, leur résolution en basses ou hautes fréquences demeure un grand sujet de recherche. Nous allons exposer, dans ce chapitre, les outils mathématiques nécessaires à la simulation par la Méthode des Éléments Finis (MEF) d'un problème de propagation hyperfréquence en restant le plus général possible. Nous allons établir la formulation faible du problème 3D qui tient compte des courants de déplacement et le problème 2D aux valeurs propres qui permet de construire un solveur de modes nécessaire au calcul des courants sources et des paramètres S .

1 Modèle mathématique

Tous les phénomènes de propagation électromagnétique hyperfréquence que nous voulons étudier ici sont régis, d'un point de vue macroscopique, par les équations aux dérivées partielles de Maxwell, par les relations constitutives du milieu et par les conditions aux limites du domaine.

La difficulté en simulation numérique est alors de savoir comment modéliser les équations de la physique, comment introduire les caractéristiques des matériaux dans les modèles mathématiques choisis et comment exprimer les conditions aux limites du problème afin de rester le plus proche possible de la réalité.

1.1 Équations de Maxwell en régime harmonique

Dans le cas général, les équations de Maxwell sont exprimées à l'aide de 4 grandeurs physiques réelles \mathcal{H} , \mathcal{E} , \mathcal{B} et \mathcal{D} qui sont reliées à ce qu'il est convenu d'appeler les sources, \mathcal{J}_e et ρ_e .

$$\text{Loi d'Ampère} \quad \nabla \times \mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t} + \mathcal{J}_e \quad (\text{II.1a})$$

$$\text{Loi de Faraday} \quad \nabla \times \mathcal{E} = - \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial t} \quad (\text{II.1b})$$

$$\text{Conservation du flux} \quad \nabla \cdot \mathcal{B} = 0 \quad (\text{II.1c})$$

$$\text{Loi de Gauss} \quad \nabla \cdot \mathcal{D} = \rho_e \quad (\text{II.1d})$$

où le symbole $\nabla \times$ exprime le rotationnel et $\nabla \cdot$, la divergence.

Dans le cas du régime harmonique qui nous intéresse plus particulièrement, ces grandeurs physiques réelles sont des fonctions (vectorielles ou scalaires) qui dépendent du temps t sous la forme d'un $\cos(\omega t + \phi)$ et des coordonnées d'espaces (x, y, z) que l'on prendra dans un repère cartésien pour traiter notre type de problème.

Avec la notation complexe et en choisissant convenablement l'origine des temps de telle sorte que le déphasage ϕ soit nul, il est commode d'écrire :

- Champ magnétique $\mathcal{H}(x, y, z, t) = \Re\{\mathbf{H}(x, y, z) \exp(j\omega t)\}$ exprimé en A/m .
- Champ électrique $\mathcal{E}(x, y, z, t) = \Re\{\mathbf{E}(x, y, z) \exp(j\omega t)\}$ exprimé en V/m .
- Induction magnétique $\mathcal{B}(x, y, z, t) = \Re\{\mathbf{B}(x, y, z) \exp(j\omega t)\}$ exprimée en Wb/m^2 .
- Induction électrique $\mathcal{D}(x, y, z, t) = \Re\{\mathbf{D}(x, y, z) \exp(j\omega t)\}$ exprimée en Cb/m^2 .
- Densité volumique de courant électrique $\mathcal{J}_e(x, y, z, t) = \Re\{\mathbf{J}_e(x, y, z) \exp(j\omega t)\}$ exprimée en A/m^2 .
- Densité volumique de charge électrique $\rho_e(x, y, z, t) = \Re(\rho_e(x, y, z) \exp(j\omega t))$ exprimée en Cb/m^3 .

où $\Re\{\cdot\}$ désigne la partie réelle de l'expression entre accolades et ω la pulsation du régime harmonique.

On choisira de noter, de manière classique, **en gras** les fonctions vectorielles \mathbf{X} , *en italique* les fonctions scalaires x , en écriture droite les grandeurs complexes \mathbf{X} et en écriture cursive les grandeurs réelles \mathcal{X} .

Cette notation complexe permet alors “d'oublier” temporairement le terme $\exp(j\omega t)$ qui se trouve, comme on peut le constater, de façon homogène en facteur de part et d'autres des équations de Maxwell. Les grandeurs réelles \mathcal{H} , \mathcal{E} , \mathcal{B} et \mathcal{D} pourront alors être reconstruites à partir des grandeurs complexes \mathbf{H} , \mathbf{E} , \mathbf{B} et \mathbf{D} de manière simple.

En remarquant que la dérivée temporelle s'écrit $\partial./\partial t = j\omega.$, les équations de Maxwell s'écrivent en régime harmonique de la manière suivante :

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega\mathbf{D} + \mathbf{J}_e \quad (\text{II.2a})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mathbf{B} \quad (\text{II.2b})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{II.2c})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e \quad (\text{II.2d})$$

En hautes fréquences, nous ne pouvons bien sûr pas négliger les courants de déplacement $\mathbf{J}_d = j\omega\mathbf{D}$ devant la densité de courant électrique source \mathbf{J}_e .

Nous allons maintenant décrire les relations qui unissent respectivement les champs \mathbf{E} et \mathbf{H} avec les inductions \mathbf{D} et \mathbf{B} afin de garder uniquement comme inconnues les champs, les inductions étant alors déduites par les relations constitutives du milieu.

1.2 Relations constitutives du milieu

Pour décrire complètement le problème, il faut ajouter aux 4 équations précédentes, les 2 relations constitutives du milieu que l'on supposera comme parfait, c'est-à-dire qu'à chaque instant, les polarisations électrique \mathbf{P}_e et magnétique \mathbf{P}_m sont proportionnelles respectivement aux champs \mathbf{E} et \mathbf{H} ($\mathbf{P}_e = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E}$ et $\mathbf{P}_m = \mu_0 \chi_m \mathbf{H}$).

Ces relations relient donc linéairement et respectivement les inductions $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_e$ et $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{P}_m$ aux champs \mathbf{E} et \mathbf{H} pour un milieu Ω caractérisé par le couple (ϵ_r, μ_r) par rapport au vide et que l'on notera désormais par $\Omega(\epsilon_r, \mu_r)$:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \quad (\text{II.3a})$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \quad (\text{II.3b})$$

où ϵ_0 et μ_0 sont respectivement la permittivité et la perméabilité du vide, $\epsilon_r = 1 + \chi_e$ et $\mu_r = 1 + \chi_m$ expriment respectivement la permittivité relative et la perméabilité relative (par rapport au vide, bien sûr).

Dans le cas de milieux à pertes et dans le cas du régime harmonique, la permittivité relative ϵ_r et la perméabilité relative μ_r sont considérées comme des grandeurs complexes ; dans le cas de milieux anisotropes, ces grandeurs deviennent des tenseurs et enfin, dans le cas où les caractéristiques du milieu dépendent de l'espace, ces grandeurs sont considérées aussi comme des fonctions de (x, y, z) .

En pratique, il est courant d'approximer les "très bons" conducteurs par des conducteurs parfaits de conductivité électrique σ infinie et les "très bons" isolants par des diélectriques parfaits de conductivité électrique σ nulle.

Mais, pour les matériaux dont la conductivité σ ne peut être considérée ni comme nulle, ni comme infinie, il ne faut pas oublier la loi d'Ohm qui exprime la proportionnalité entre la densité de courant de conduction \mathbf{J}_c et le champ électrique \mathbf{E} :

$$\mathbf{J}_c = \sigma \mathbf{E} \quad (\text{II.4})$$

Dans ce cas, il est alors utile d'introduire l'artifice mathématique de permittivité relative apparente ϵ_{ra} :

$$\epsilon_{ra} = \epsilon_r' - j\epsilon_r'' - j\frac{\sigma}{\omega\epsilon_0} \quad (\text{II.5})$$

La partie imaginaire de la permittivité relative apparente ϵ_{ra} comporte à la fois un terme constant ϵ_r'' et un terme inversement proportionnel à la fréquence $\sigma/\omega\epsilon_0$; nous pouvons ainsi considérer le matériau à la fois comme un diélectrique à pertes $\epsilon_r'' \neq 0$ et comme un semi-conducteur de conductivité $\sigma \neq 0$. Il suffira alors de remplacer ϵ_r par ϵ_{ra} dans les équations de Maxwell pour considérer la conductivité du matériau et donc pour prendre en compte de manière implicite la densité de courant de conduction \mathbf{J}_c .

Nous avons donc décrit les lois régissant les phénomènes électromagnétiques au sein d'un même milieu $\Omega(\epsilon_r, \mu_r)$, ce qui nous permet de garder comme inconnues les champs \mathbf{E} et \mathbf{H} .

Nous allons nous intéresser, dans la section suivante, au comportement du champ électromagnétique au passage d'un milieu $\Omega_1(\epsilon_1, \mu_1)$ vers un milieu $\Omega_2(\epsilon_2, \mu_2)$.

1.3 Relations de passage et distribution

Pour décrire le comportement du champ électromagnétique au passage d'un milieu vers un autre, il est commode d'interpréter les équations de Maxwell (II.2) au sens des distributions [Sch66].

Faisons alors un bref rappel sur l'écriture des opérateurs au sens des distributions : si nous notons Γ la surface frontière séparatrice des milieux Ω_1 et Ω_2 , \mathbf{n}_{12} le vecteur unitaire normal à la surface Γ au point courant M et orienté dans le sens du milieu Ω_1 vers le milieu Ω_2 , Ψ une distribution vectorielle et σ_Ψ le saut de Ψ , nous écrirons alors *avec précaution* les opérateurs $\nabla \times$ et $\nabla \cdot$ au sens des distributions de la manière suivante :

$$\nabla \times \Psi = \{\nabla \times\} \Psi + \mathbf{n} \times \sigma_\Psi \delta_\Gamma \quad (\text{II.6a})$$

$$\nabla \cdot \Psi = \{\nabla \cdot\} \Psi + \mathbf{n} \cdot \sigma_\Psi \delta_\Gamma \quad (\text{II.6b})$$

où $\{\nabla \times\}$ et $\{\nabla \cdot\}$ désignent respectivement les opérateurs rotationnel et divergence au sens des fonctions c'est-à-dire *sans précaution* et la notation δ_Γ signifie que la quantité en facteur est localisée sur Γ .

Récrivons la première équation de Maxwell-Ampère (II.2a) au sens des distributions :

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega \mathbf{D} + \mathbf{J}_e = \{\nabla \times\} \mathbf{H} + \mathbf{n} \times \sigma_{\mathbf{H}} \delta_{\Gamma} \quad (\text{II.7})$$

Si on identifie les termes correspondants au même support de distribution, on peut écrire que :

- $\{\nabla \times\} \mathbf{H} = j\omega \mathbf{D} + \mathbf{J}_v$ partout où le rotationnel est défini au sens des fonctions, c'est-à-dire dans le complémentaire de Γ (supports volumiques).
- $\mathbf{n} \times \sigma_{\mathbf{H}} \delta_{\Gamma} = \mathbf{J}_s$ sur le support surfacique Γ c'est-à-dire $\mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{J}_s$ sur Γ .

Nous pouvons alors établir les mêmes types de relation avec l'équation de Maxwell-Faraday (II.2b) au sens des distributions :

- $\{\nabla \times\} \mathbf{E} = -j\omega \mathbf{B}$ dans le complémentaire de Γ (supports volumiques).
- $\mathbf{n} \times \sigma_{\mathbf{E}} \delta_{\Gamma} = \mathbf{0}$ sur le support surfacique Γ c'est-à-dire $\mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0}$ sur Γ .

Si nous considérons maintenant l'opérateur divergence au sens des distributions, nous obtenons des informations sur la continuité normale des vecteurs inductions.

Si nous récrivons l'équation de Maxwell (II.2c) au sens des distributions :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 = \{\nabla \cdot\} \mathbf{B} + \mathbf{n} \cdot \sigma_{\mathbf{B}} \delta_{\Gamma} \quad (\text{II.8})$$

Et en identifiant de la même façon les distributions suivant leur support :

- $\{\nabla \cdot\} \mathbf{B} = 0$ dans le complémentaire de Γ (supports volumiques).
- $\mathbf{n} \cdot \sigma_{\mathbf{B}} \delta_{\Gamma} = 0$ sur le support surfacique Γ c'est-à-dire $\mathbf{n}_{12} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0$ sur Γ .

Enfin, la dernière équation de Maxwell (II.2d) au sens des distributions donne :

- $\{\nabla \cdot\} \mathbf{D} = \rho_v$ dans le complémentaire de Γ (supports volumiques).
- $\mathbf{n} \cdot \sigma_{\mathbf{D}} \delta_{\Gamma} = \rho_s$ sur le support surfacique Γ c'est-à-dire $\mathbf{n}_{12} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \rho_s$ sur Γ .

Nous avons donc vu comment l'interprétation moderne des équations de Maxwell au sens des distributions permet, de façon implicite, de considérer les relations de continuité pour \mathbf{H} , \mathbf{E} , \mathbf{B} et \mathbf{D} au passage d'un milieu 1 à un milieu 2 en fonction des charges et courants éventuels se trouvant sur le support surfacique séparant les milieux volumiques.

Nous allons maintenant résumer ces relations de passage en termes de conditions de continuité pour les inconnues \mathbf{H} et \mathbf{E} qui nous intéressent en introduisant les relations constitutives des milieux $\Omega_1(\epsilon_1, \mu_1)$ et $\Omega_2(\epsilon_2, \mu_2)$. Les deux cas que nous allons considérer

ici sont directement reliés au problème qui nous intéresse plus particulièrement, à savoir les conditions de passage entre deux diélectriques sans charges ni courants superficiels et les conditions à l'interface avec un conducteur parfait. Le cas des sources imposées dans les accès des structures hyperfréquences sera traité à part mais de façon analogue avec la théorie des distributions lorsque nous établirons les équations de propagation de Helmholtz avec termes sources.

1.3.1 Conditions de continuité entre deux diélectriques

A l'interface Γ de deux milieux Ω , notés en indice 1 et 2, caractérisés respectivement par $\Omega_1(\epsilon_1, \mu_1)$ et $\Omega_2(\epsilon_2, \mu_2)$, *sans charges ni courants* (cf. figure II.1), les relations de continuité tangentielle et normales sont donc pour les champs \mathbf{H} et \mathbf{E} :

$$\mathbf{H}_{t2} = \mathbf{H}_{t1} \quad (\text{II.9a})$$

$$\mathbf{E}_{t2} = \mathbf{E}_{t1} \quad (\text{II.9b})$$

$$\mu_2 H_{n2} = \mu_1 H_{n1} \quad (\text{II.9c})$$

$$\epsilon_2 E_{n2} = \epsilon_1 E_{n1} \quad (\text{II.9d})$$

où \mathbf{X}_t désigne la partie tangentielle du vecteur \mathbf{X} à l'interface entre les deux diélectriques et X_n la composante normale à cette interface, au point courant M .

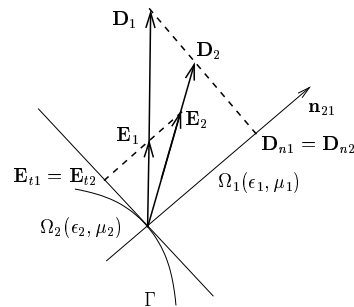


Figure II.1 : Continuité tangentielle et discontinuité normale du champ électrique entre deux diélectriques ($\epsilon_1 > \epsilon_2$)

Ces relations, déduites des propriétés du rotationnel et de la divergence liées aux équations de Helmholtz, sont :

tions de Maxwell écrites au sens des distributions, traduisent les continuités tangentielles des champs magnétiques et électriques (équations (II.9a) et (II.9b)) et leurs discontinuités normales (équations (II.9c) et (II.9d)). Ce cas concerne le passage entre diélectriques parfaits ou à pertes, *sans charges ni courants superficiels*.

Il exclut le cas du passage entre conducteurs parfaits ainsi qu'entre très bons conducteurs dans lesquels les champs sont nuls mais sur lesquels charges et courants superficiels existent, cas que nous allons considérer dans la section suivante.

1.3.2 Interface avec un conducteur parfait

Si l'un des deux milieux est un conducteur électrique parfait $\sigma = \infty$, par exemple le milieu Ω_1 , les champs électrique \mathbf{E}_1 et magnétique \mathbf{H}_1 sont nuls à cause de la profondeur de pénétration $\delta = 1/\sqrt{\pi\mu_0\sigma f}$ nulle. La surface Γ sert alors de support à des courants superficiels \mathbf{J}_s et à des charges superficielles ρ_s .

Les relations à l'interface Γ sont alors les suivantes pour les champs \mathbf{H}_2 et \mathbf{E}_2 :

$$\mathbf{E}_{t2} = \mathbf{0} \quad (\text{II.10a})$$

$$\mathbf{n}_{12} \times \mathbf{H}_2 = \mathbf{J}_s \quad (\text{II.10b})$$

$$\epsilon_2 E_{n2} = \rho_s \quad (\text{II.10c})$$

$$\mu_2 H_{n2} = 0 \quad (\text{II.10d})$$

A l'interface avec un conducteur parfait, nous avons donc une condition de mur électrique (\mathbf{E} tangential nul ou \mathbf{H} normal nul) à respecter, ce qui se traduit par un courant surfacique \mathbf{J}_s induit par le champ magnétique tangential et par des charges superficielles ρ_s portées par le champ électrique normal.

Nous pouvons aussi montrer que la condition de mur électrique est similaire à un plan de symétrie magnétique. En procédant de manière duale, nous pouvons également définir une condition de mur magnétique (\mathbf{H} tangential nul ou \mathbf{E} normal nul) à respecter, ce qui traduirait un plan de symétrie électrique.

Ces 2 conditions peuvent s'avérer très utiles lors de simulation numérique lorsque la structure à modéliser comporte des plans de symétrie ; on réduit ainsi les temps de calcul

par 2^n , n étant le nombre de plans de symétrie.

Nous allons maintenant découpler les équations de Maxwell en \mathbf{E} et en \mathbf{H} pour obtenir les équations de propagation des ondes avec termes sources afin d'obtenir une équation différentielle en \mathbf{E} ou en \mathbf{H} nécessaire à la formulation faible du problème pour la méthode des éléments finis.

1.4 Équations de propagation des ondes

Considérons alors de nouveau un milieu homogène $\Omega(\epsilon_r, \mu_r)$, de frontière globale Γ constituée de murs électriques Γ_e , de murs magnétiques Γ_m et de plans d'accès S_a comme le montre la figure II.2.

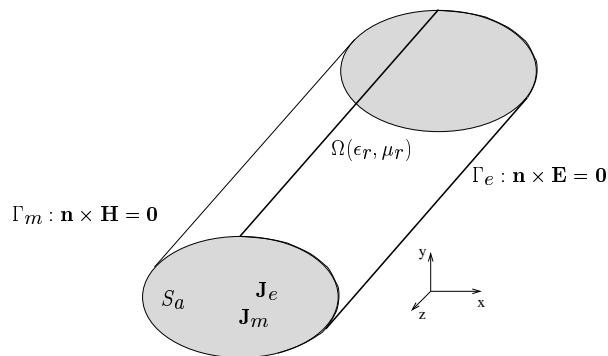


Figure II.2 : Configuration du problème

Afin de maintenir la symétrie des équations en \mathbf{E} et en \mathbf{H} , un courant magnétique fictif \mathbf{J}_m a été introduit dans l'équation de Maxwell-Faraday (II.2b) ainsi que des charges magnétiques fictives ρ_m dans l'équation (II.2c). Les équations principales de Maxwell, écrites toujours au sens des distributions et en remplaçant les expressions des champs \mathbf{D} et \mathbf{B} , deviennent :

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega\epsilon_0\epsilon_r\mathbf{E} + \mathbf{J}_e \quad (\text{II.11a})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu_0\mu_r\mathbf{H} - \mathbf{J}_m \quad (\text{II.11b})$$

Les courants \mathbf{J}_e et \mathbf{J}_m traduisent ici les sources électromagnétiques (2D) que l'on *impose* sur les accès S_a . Il faut tout d'abord décomposer *avec précaution* l'opérateur rotationnel suivant son support de distribution mais, cette fois, en considérant un terme source sur la surface d'accès S_a et des termes supplémentaires traduisant le comportement discontinu ou non du champ Ψ sur les murs électriques Γ_e et magnétiques Γ_m :

$$\nabla \times \Psi = \{\nabla \times\} \Psi + \mathbf{n} \times \sigma_{\Psi} \delta_{\Gamma_e} + \mathbf{n} \times \sigma_{\Psi} \delta_{\Gamma_m} + \mathbf{n} \times \sigma_{\Psi} \delta_{S_a} \quad (\text{II.12})$$

où $\{\nabla \times\}$ est la partie régulière du rotationnel (à support volumique), \mathbf{n} la normale au point courant de Γ orientée vers l'intérieur. La notation δ_S signifie que la quantité en facteur est localisée sur la surface S et la notation σ_{Ψ} exprime le saut éventuel du vecteur Ψ sur son support de distribution.

En identifiant les différents supports de distribution avec l'équation (II.11b), nous obtenons pour une formulation dite en E :

$$\{\nabla \times\} \mathbf{E} = -j\omega\mu_0\mu_r \mathbf{H} \quad (\text{II.13a})$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} \delta_{\Gamma_e} = \mathbf{0} \quad (\text{II.13b})$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} \delta_{\Gamma_m} = -\mathbf{J}_{m|\Gamma_m} \quad (\text{II.13c})$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} \delta_{S_a} = -\mathbf{J}_{m|S_a} \quad (\text{II.13d})$$

où le symbole mathématique $|$ désigne la restriction du vecteur de gauche au support de droite. Ainsi $\mathbf{J}_{m|S_a}$ représente la trace tangentielle du courant magnétique \mathbf{J}_m sur la surface d'accès S_a .

De même, avec l'équation (II.11a), nous obtenons pour une formulation dite en H :

$$\{\nabla \times\} \mathbf{H} = j\omega\epsilon_0\epsilon_r \mathbf{E} \quad (\text{II.14a})$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{H} \delta_{\Gamma_m} = \mathbf{0} \quad (\text{II.14b})$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{H} \delta_{\Gamma_e} = \mathbf{J}_{e|\Gamma_e} \quad (\text{II.14c})$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{H} \delta_{S_a} = \mathbf{J}_{e|S_a} \quad (\text{II.14d})$$

En prenant le rotationnel de l'équation (II.13a) (respectivement de l'équation (II.13b)) et en y substituant l'équation (II.11a) (respectivement l'équation (II.11b)), nous obtenons

les équations d'ondes :

$$\nabla \times \{\nabla \times\} \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r \mu_r \mathbf{E} = -j\omega \mu_0 \mu_r \mathbf{J}_e \quad (\text{II.15a})$$

$$\nabla \times \{\nabla \times\} \mathbf{H} - k_0^2 \epsilon_r \mu_r \mathbf{H} = -j\omega \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{J}_m \quad (\text{II.15b})$$

avec le nombre d'onde dans le vide $k_0 = \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$.

Ces deux équations d'ondes sont fondamentales car elles permettront dans la suite de ce mémoire de développer les formulations faibles, nécessaires à la méthode des éléments finis, qui traduisent les phénomènes de propagation avec terme source.

Nous allons maintenant établir les équations de propagation de Helmholtz qui nous serviront aux calculs analytiques du champ électromagnétique dans un guide rectangulaire au chapitre IV.

En utilisant la relation vectorielle du double rotationnel :

$\nabla \times (\nabla \times \Psi) = \nabla(\nabla \cdot \Psi) - \nabla^2 \Psi$ et en supposant que $\nabla \cdot \Psi = 0$, nous obtenons les équations de propagation de Helmholtz, symétriques en \mathbf{E} et en \mathbf{H} , *sans* termes sources au second membre :

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (\text{II.16a})$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = \mathbf{0} \quad (\text{II.16b})$$

avec k le nombre d'onde dans le milieu $\Omega(\epsilon_r, \mu_r)$ défini à l'aide de la relation $k^2 = k_0^2 \epsilon_r \mu_r$.

Nous pouvons remarquer que les équations d'Helmholtz (II.16) sont moins générales que les équations d'ondes (II.15) car elles supposent que $\nabla \cdot \Psi = 0$ c'est-à-dire qu'il n'y a pas de charges électriques ρ_e ou magnétiques ρ_m superficielles apportées, donc pas de courants sources \mathbf{J}_e ou \mathbf{J}_m .

Ces équations nous permettent d'étudier tous les phénomènes d'ondes électromagnétiques :

- Propagation qui se fait à l'aide de supports : fils conducteurs en basse fréquence et lignes de transmission en haute fréquence.
- Propagation qui ne nécessite aucun support métallique : propagation dans l'espace

libre ou dans les guides diélectriques.

Nous allons nous intéresser plus particulièrement à la propagation guidée par un système de transmission rectiligne et uniforme, suivant la direction \mathbf{u}_z , que nous avons choisie de manière conventionnelle.

2 Propagation guidée

Si l'on veut canaliser une onde hyperfréquence, on doit avoir recours à des guides d'ondes (conducteurs creux) dont la section peut être simplement connexe (rectangulaire, circulaire, elliptique, ...), ou multiples connexes (coaxiale) avec des dimensions dépendant de la longueur d'onde.

2.1 Les différents modes de propagation

Les réflexions de l'onde sur les parois du guide ont pour résultante une certaine distribution des champs dans l'espace intérieur, et des courants de conduction à la surface des parois. L'ensemble forme un mode de propagation. Chaque mode a des caractéristiques différentes. On peut regrouper ces caractéristiques en quatre types de modes définis de la manière suivante :

- Dans les lignes ou les guides coaxiaux, le mode de propagation de l'onde correspond au mode Transverse Electrique-Magnétique (TEM), les champs électriques et magnétiques sont perpendiculaires à la direction de propagation c'est-à-dire $E_z = 0$ et $H_z = 0$.
- Dans les lignes microrubans par exemple, un mode quasi-TEM peut se propager c'est-à-dire $E_z \ll (E_x, E_y)$ et $H_z \ll (H_x, H_y)$.
- Dans les guides creux, on montre que le mode TEM ne peut se propager car les conducteurs ne sont pas séparés d'un point de vue potentiel. Les champs électriques et/ou magnétiques ont une composante parallèle à la direction de propagation :

$E_z = 0$ et $H_z \neq 0$: mode Transverse Electrique (TE).

$H_z = 0$ et $E_z \neq 0$: mode Transverse Magnétique (TM).

- La superposition de modes TE et TM peut se produire pour donner naissance aux modes hybrides : $E_z \neq 0$ et $H_z \neq 0$.

Les expressions analytiques des champs électriques et magnétiques peuvent être seulement obtenues dans le cas de géométries simples comme, par exemple, dans un guide WR à section rectangulaire. Nous comparerons à la fin de ce chapitre les résultats des simulations numériques avec les résultats analytiques dans un guide WR.

Nous nous intéresserons donc, dans la suite de ce mémoire, aux problèmes hyperfréquences de propagation guidée à une fréquence donnée f_0 , laissant ainsi de côté les problèmes tridimensionnels d'oscillations libres dans les cavités.

2.2 Deux types de problème en hyperfréquences

Nous avons séparé, dans notre cas, les problèmes hyperfréquences de propagation guidée à une fréquence fixée en deux types : le problème 2D aux valeurs propres et le problème 3D déterministe.

- Le premier type de problème consiste à résoudre les équations de Maxwell dans un système fermé 2D. Il s'agit alors ici de réaliser un solveur de modes 2D à une fréquence f_0 fixée afin de connaître les modes susceptibles de se propager. Nous aurons donc à chercher les valeurs propres solutions et les vecteurs propres associés. C'est le cas de la recherche d'une solution propagative en champs électrique et magnétique dans l'accès 2D de notre ligne microruban, solution qui servira ensuite de source électromagnétique "correcte" au problème 3D et au calcul des paramètres S .
- Le deuxième type de problème est la résolution d'un système 3D alimenté par des sources 2D. L'alimentation s'effectue à travers des plans d'accès S_a qui imposent les champs et la pulsation $\omega_0 = 2\pi f_0$ à l'intérieur de la structure. C'est le cas de la propagation 3D dans notre ligne microruban. L'étude de ce problème déterministe nous mène directement à la détermination des paramètres de répartition S qui relie

l'onde incidente et l'onde réfléchie ou transmise à travers les accès, et qu'il est utile de comparer à ceux obtenus par la mesure.

De façon plus générale, nous pouvons mentionner également le problème 3D aux valeurs propres qui consiste à chercher les fréquences qui peuvent se propager dans un mode donné.

3 Principe de résolution par la MEF

Pour résoudre l'équation aux dérivées partielles des ondes, nous nous sommes placés dans le cadre de la Méthode des Éléments Finis (MEF), méthode numérique basée sur la transformation des équations aux dérivées partielles (formulations fortes) en équations intégrales équivalentes (formulations faibles) pour diminuer l'ordre d'intégration [Tou80].

Il y a deux manières d'aborder cette transformation [Sab86] :

- L'approche variationnelle, ou *méthode de Ritz*, qui repose sur une fonctionnelle, qualifiée de coénergie, qui est extrémale pour les fonctions solutions recherchées.
- La méthode des résidus pondérés, ou *méthode de Galerkin*, qui consiste à annuler le résidu correspondant à la multiplication de la forme différentielle par une fonction test adéquate.

Nous allons plutôt utiliser la deuxième méthode, qui est plus générale mais moins élégante que la première, même s'il est possible de trouver, par des considérations énergétiques, une fonctionnelle équivalente par la méthode de Ritz.

3.1 Formulation faible du problème 3D

Nous allons d'abord construire la formulation E par la méthode de Galerkin sachant que la formulation H s'obtient de manière analogue.

Considérons les sous-espaces vectoriels suivants :

$$E_{\Omega}^0 = \{\mathbf{E} \in H(\text{rot}, \Omega); \mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_e\}$$

$$H_{\Omega}^0 = \{\mathbf{H} \in H(\text{rot}, \Omega); \mathbf{n} \times \mathbf{H} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_m\}$$

où $H(\text{rot}, \Omega) = \{\mathbf{A} \in \mathbf{L}^2(\Omega); \nabla \times \mathbf{A} \in \mathbf{L}^2(\Omega)\}$ est l'espace de Hilbert conservant le rotationnel que nous étudierons plus en détail dans le chapitre III, et $\mathbf{L}^2(\Omega) = \{\mathbf{A} : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^3; \int_{\Omega} |\mathbf{A}|^2 d\Omega < \infty\}$ est l'espace des fonctions vectorielles à valeurs complexes de carré du module sommable.

Une propriété fondamentale des fonctions de l'espace $H(\text{rot}, \Omega)$ est qu'elles sont à composantes tangentielles continues aux interfaces dans Ω (voir chapitre III). Si nous imposons à \mathbf{E} d'être dans E_{Ω}^0 , l'équation (II.13b) est alors vérifiée naturellement. Sachant que les courants magnétiques sur les murs magnétiques sont *induits*, l'équation (II.13c) qui définit le courant magnétique par sa trace tangentielle, est alors satisfaite implicitement.

Multiplions donc l'équation (II.15a) par une fonction test quelconque Ψ' de E_{Ω}^0 et intégrons sur tout le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} (\mu_r^{-1} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E}) \cdot \Psi' d\Omega = -j\omega\mu_0 \int_{\Omega} \mathbf{J}_e \cdot \Psi' d\Omega \quad (\text{II.17})$$

En tenant compte de l'identité :

$$\int_{\Omega} (\nabla \times \mathbf{A}) \times \Psi' d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \Psi') d\Omega - \int_S (\mathbf{A} \times \Psi') \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{II.18})$$

avec $\mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{E}$, nous obtenons alors la formulation en E :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{E} \in E_{\Omega}^0 \\ \int_{\Omega} \mu_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot (\nabla \times \Psi') d\Omega - k_0^2 \int_{\Omega} \epsilon_r \mathbf{E} \cdot \Psi' d\Omega = -j\omega\mu_0 \int_{S_a} \mathbf{J}_e \cdot \Psi' dS \\ \forall \Psi' \in E_{\Omega}^0 \end{array} \right. \quad (\text{II.19})$$

sans oublier l'équation (II.13d) qui définit le courant magnétique sur l'accès S_a : $\mathbf{J}_{m|S_a} = -\mathbf{n} \times \mathbf{E}\delta_{S_a}$.

Nous obtenons la formulation en H en procédant de manière analogue :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{H} \in H_{\Omega}^0 \\ \int_{\Omega} \epsilon_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{H}) \cdot (\nabla \times \Psi') d\Omega - k_0^2 \int_{\Omega} \mu_r \mathbf{H} \cdot \Psi' d\Omega = -j\omega\epsilon_0 \int_{S_a} \mathbf{J}_m \cdot \Psi' dS \\ \forall \Psi' \in H_{\Omega}^0 \end{array} \right. \quad (\text{II.20})$$

sans oublier l'équation (II.14d) qui définit le courant électrique sur l'accès S_a : $\mathbf{J}_{e|S_a} = \mathbf{n} \times \mathbf{H}\delta_{S_a}$.

Nous pouvons vérifier que la solution en \mathbf{E} (respectivement en \mathbf{H}) de l'équation (II.19) (respectivement (II.20)) est solution au sens faible de l'équation (II.15a) (respectivement (II.15b)). Nous pouvons également démontrer que nous avons implicitement la divergence nulle de la solution, propriété fondamentale si nous voulons éviter les modes parasites [Bi95]. Nous reparlerons ultérieurement de ces modes parasites lorsque nous parlerons des éléments finis d'arêtes dans le chapitre III.

La préférence pour l'une ou l'autre des formulations (en E ou en H) dépend du problème à traiter. Si le système à modéliser contient, par exemple, plus de conducteurs électriques parfaits sur lesquels on doit imposer la condition de mur électrique $\mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$, il sera plus judicieux d'utiliser une formulation électrique.

Dans le domaine des hyperfréquences, nous avons l'habitude d'utiliser et de mesurer les paramètres S qui sont un bilan des puissances entrantes, sortantes ou transmises dans le système considéré. Nous avons, pour cela, besoin de définir les ondes de référence dans les accès où seront calculés ces paramètres S .

Nous allons donc présenter dans la suite de l'exposé les méthodes utilisées pour réaliser un solveur de mode 2D dans le plan des accès sources et pour calculer les paramètres S dans un système microonde général à n accès. La formulation 2D ayant comme inconnues \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t sert à déterminer correctement la distribution du champ électromagnétique source dans l'accès dans le mode considéré et à calculer, ensuite, les paramètres S correspondants.

Ces méthodes de calcul sont basées sur les travaux de recherche de M. Aubourg que je tiens à remercier pour son aide précieuse.

3.2 Ondes de référence

Les paramètres S expriment le rapport en amplitude entre les coefficients des ondes entrantes a et les coefficients des ondes sortantes b , relativement à la définition d'une base constituée d'ondes de référence dans les accès. Ils sont classiquement représentés, pour un système à n accès, par les coefficients de la matrice $[S]$ de terme général $S_{ij} = b_i/a_j$ avec $a_{k \neq j} = 0, \forall k \in [1, n]$.

Les ondes de référence sont définies à partir des modes propres par un couple $(\mathbf{E}_t, \mathbf{n} \times \mathbf{H}_t)$ où \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t sont les champs transversaux à la direction de propagation \mathbf{u}_z , tangentiels à $S_a = (x0y)$. Les structures de propagation étant réciproques, si $(\mathbf{E}_t, \mathbf{n} \times \mathbf{H}_t)$ correspond à un mode entrant, $(\mathbf{E}_t, -\mathbf{n} \times \mathbf{H}_t)$ correspond à un mode sortant.

De plus, si les structures de propagation sont sans pertes, les modes propres constituent une base sur laquelle tout champ peut se décomposer et à une fréquence donnée, on sait qu'il y a un nombre fini de modes propagatifs et une infinité de modes évanescents. Si les accès sont suffisamment éloignés des discontinuités, les modes évanescents deviennent négligeables devant les modes propres.

Soient $(\mathbf{E}_t^i, \mathbf{H}_t^i)_{i \in [1, n]}$ les champs transversaux des n modes propres entrants dans l'ensemble des accès $S_a = \bigcup_{i=1}^n S_i$ et $\mathbf{J}_e^i = \mathbf{n} \times \mathbf{H}_t^i \delta_{S_a}$ le courant électrique source.

L'équation (II.19) peut être écrite en introduisant les coefficients a_i et b_i :

$$\int_{\Omega} \mu_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot (\nabla \times \Psi') d\Omega - k_0^2 \int_{\Omega} \epsilon_r \mathbf{E} \cdot \Psi' d\Omega = -j\omega\mu_0 \sum_{i=1}^n (a_i - b_i) \int_{S_a} \mathbf{J}_e^i \cdot \Psi' dS \quad (\text{II.21})$$

En général, les ondes de référence sont normalisées en puissance pour chaque mode i :

$$\frac{1}{2} \int_{S_a} \mathbf{E}_t^i \cdot \mathbf{J}_e^{i*} dS = -1 \quad (\text{II.22})$$

Une fois ces ondes de références définies, nous allons expliquer comment les obtenir à l'aide de la résolution du problème aux valeurs propres.

3.3 Problème 2D aux valeurs propres

Pour obtenir les ondes de référence et calculer ensuite les paramètres S , il faut calculer les modes propres dans chaque accès physique. Pour cela, il faut utiliser les composantes transversales des champs \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t [Ang87, Aub91].

Les champs électromagnétiques, solutions des équations d'ondes (II.15) peuvent s'écrire en séparant la variation longitudinale suivant les z croissants des variations transversales en (x, y) , sous la forme [Bad93] :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = [\mathbf{E}_t(x, y) + E_z(x, y)\mathbf{u}_z] \exp(-\gamma z) \quad (\text{II.23a})$$

$$\mathbf{H}(x, y, z) = [\mathbf{H}_t(x, y) + H_z(x, y)\mathbf{u}_z] \exp(-\gamma z) \quad (\text{II.23b})$$

où $\gamma = \alpha + j\beta$ est la constante de propagation complexe dans le diélectrique à pertes.

Nous allons maintenant projeter les équations de Maxwell (II.11a) et (II.11b) sur l'axe \mathbf{u}_z :

$$\nabla \times \mathbf{H}_t = j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_z \mathbf{u}_z + J_{ez} \mathbf{u}_z \quad (\text{II.24a})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_t = -j\omega\mu_0\mu_r H_z \mathbf{u}_z - J_{mz} \mathbf{u}_z \quad (\text{II.24b})$$

ainsi que sur le plan (xy) de section droite transversale :

$$\nabla \times (H_z \mathbf{u}_z) - \gamma \mathbf{u}_z \times \mathbf{H}_t = \mathbf{J}_{et} + j\omega\epsilon_0\epsilon_r \mathbf{E}_t \quad (\text{II.25a})$$

$$\nabla \times (E_z \mathbf{u}_z) - \gamma \mathbf{u}_z \times \mathbf{E}_t = -\mathbf{J}_{mt} - j\omega\mu_0\mu_r \mathbf{H}_t \quad (\text{II.25b})$$

Nous définissons comme pour le cas 3D précédent les espaces vectoriels suivants :

$$E_{S_a}^0 = \{\mathbf{E} \in H(\text{rot}, S_a); \mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_e\}$$

$$H_{S_a}^0 = \{\mathbf{H} \in H(\text{rot}, S_a); \mathbf{n} \times \mathbf{H} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_m\}$$

Si nous imposons $\mathbf{E}_t \in E_{S_a}^0$ et $\mathbf{H}_t \in H_{S_a}^0$, les équations (II.24) se réduisent à :

$$E_z \mathbf{u}_z = \frac{1}{j\omega\epsilon_0\epsilon_r} \{\nabla \times\} \mathbf{H}_t \quad (\text{II.26a})$$

$$H_z \mathbf{u}_z = \frac{1}{-j\omega\mu_0\mu_r} \{\nabla \times\} \mathbf{E}_t \quad (\text{II.26b})$$

ce qui nous permet d'exprimer la composante longitudinale en fonction du rotationnel des composantes transversales.

Nous obtenons, en procédant de la même manière que pour la formulation faible (II.21), le système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{E} \in E_{S_a}^0 \text{ et } \mathbf{H} \in H_{S_a}^0 \\ \int_{S_a} \mu_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{E}_t) \cdot (\nabla \times \Psi'_e) dS - k_0^2 \int_{S_a} \epsilon_r \mathbf{E}_t \cdot \Psi'_e dS = \\ -j\omega\gamma \int_{S_a} \mu_0 (\mathbf{u}_z \times \mathbf{H}_t) \cdot \Psi'_e dS \\ \int_{S_a} \epsilon_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{H}_t) \cdot (\nabla \times \Psi'_m) dS - k_0^2 \int_{S_a} \mu_r \mathbf{H}_t \cdot \Psi'_m dS = \\ -j\omega\gamma \int_{S_a} \epsilon_0 (\mathbf{E}_t \times \mathbf{u}_z) \cdot \Psi'_m dS \\ \forall \Psi'_e \in E_{S_a}^0 \text{ et } \forall \Psi'_m \in H_{S_a}^0 \end{array} \right. \quad (\text{II.27})$$

En supposant la fréquence et donc ω connue, ce problème est un problème aux valeurs propres généralisé, la valeur propre étant $-j\omega\gamma$.

Trois cas de problèmes peut alors se présenter à nous :

- Pour un mode propagatif pur ($\alpha = 0$), nous avons $-j\omega\gamma = \omega\beta$ et les champs \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t sont en phase ; nous pouvons les considérer comme étant à valeurs réelles.
- Pour un mode évanescant pur ($\beta = 0$), nous avons $-j\omega\gamma = -j\omega\alpha$ et les champs \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t sont en quadrature ; nous pouvons nous ramener à des valeurs réelles en remplaçant, par exemple, l'inconnue \mathbf{H}_t par $\pm j\mathbf{H}_t$.
- Il existe enfin le cas général du mode mixte c'est-à-dire où $\gamma = \alpha + j\beta$ avec $\alpha \neq 0$ et $\beta \neq 0$; toutes les composantes de \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t ont des valeurs complexes.

Maintenant que nous avons établi les problèmes 2D et 3D pour la propagation guidée hy-

perfréquence, nous allons utiliser, pour résoudre ces problèmes, les éléments mixtes d'arêtes de $H(\text{rot}, \Omega)$ et $H(\text{rot}, S_a)$ dont les fonctions de forme seront présentées plus précisément dans le chapitre III.

4 Résolution

Pour la résolution des problèmes 2D et 3D, nous allons utiliser exclusivement des discrétisations de type élément fini d'arête de $H(\text{rot})$. A condition que les arêtes soient orientées dans le même sens en 2D et en 3D, nous pouvons considérer que les traces tangentielles des fonctions 3D correspondent aux fonctions 2D.

Nous notons I_Ω l'ensemble des indices des arêtes du maillage 3D du domaine volumique Ω , $I_{\Omega \setminus \Gamma_e}$ l'ensemble des indices des arêtes de Ω qui *ne* sont *pas* sur les murs électriques Γ_e .

De la même façon, nous notons $I_{S_a \setminus \Gamma_e}$ (respectivement $I_{S_a \setminus \Gamma_m}$) l'ensemble des indices des arêtes du maillage 2D du domaine surfacique S_a des accès qui *ne* sont *pas* sur les murs électriques Γ_e (respectivement sur les murs magnétiques Γ_m).

Par souci de clarté, nous allons raisonner maintenant avec des fonctions de forme et des fonctions tests de plus bas degré ; à chaque arête a_i du maillage, nous associons la fonction de forme de Whitney notée \mathbf{W}_i qui sera explicitée dans le chapitre III.

4.1 Résolution du problème 2D

Il s'agit d'expliquer ici comment est réalisé le solveur de mode 2D servant au calcul des courants sources pour le problème 3D et à l'obtention des paramètres S .

Le degré de liberté E_{ii} , associé à l'arête a_i , correspond à une fonction de pondération. En effet, l'approximation par éléments d'arête pour le plus bas degré donne :

$$\mathbf{E}_t = \sum_{i_e \in I_{S_a} \setminus \Gamma_e} E_{ti_e} \mathbf{W}_{i_e} \quad (\text{II.28a})$$

$$\mathbf{H}_t = \sum_{i_m \in I_{S_a} \setminus \Gamma_m} H_{ti_m} \mathbf{W}_{i_m} \quad (\text{II.28b})$$

Nous pouvons vérifier facilement que E_{ti} (respectivement H_{ti}) est la circulation du champ électrique tangentiel (respectivement du champ magnétique tangentiel) à l'accès sur l'arête a_i en intégrant \mathbf{E}_t (respectivement \mathbf{H}_t) sur cette arête particulière a_i . Nous obtenons alors la conséquence suivante :

$$E_{ti} = \int_{a_i} \mathbf{E}_t \cdot \mathbf{t}_i \, dl \quad (\text{II.29a})$$

$$H_{ti} = \int_{a_i} \mathbf{H}_t \cdot \mathbf{t}_i \, dl \quad (\text{II.29b})$$

où \mathbf{t}_i est le vecteur unitaire porté par l'arête a_i , orienté positivement dans l'ordre croissant des numéros de sommets qui appartiennent à cette arête.

Rappelons l'équation (II.27) du problème aux valeurs propres mais cette fois-ci dans l'espace discrétisé en remplaçant les fonctions tests Ψ'_e et Ψ'_m par les fonctions de base \mathbf{W}'_{i_e} avec $i_e \in I_{S_a} \setminus \Gamma_e$ et \mathbf{W}'_{i_m} avec $i_m \in I_{S_a} \setminus \Gamma_m$.

Le rotationnel étant un opérateur linéaire, nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{l}
\text{Trouver } \mathbf{E} \in E_{S_a}^0 \text{ et } \mathbf{H} \in H_{S_a}^0 \\
\sum_{i_e \in I_{S_a \setminus \Gamma_e}} \int_{S_a} \mu_r^{-1} E_{ti_e} (\nabla \times \mathbf{W}_{i_e}) \cdot (\nabla \times \mathbf{W}'_{i_e}) dS \\
-k_0^2 \sum_{i_e \in I_{S_a \setminus \Gamma_e}} \int_{S_a} \epsilon_r E_{ti_e} \mathbf{W}_{i_e} \cdot \mathbf{W}'_{i_e} dS = \\
-j\omega\gamma \sum_{i_m \in I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \int_{S_a} \mu_0 H_{ti_m} (\mathbf{u}_z \times \mathbf{W}_{i_m}) \cdot \mathbf{W}'_{i_e} dS \\
\sum_{i_m \in I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \int_{S_a} \epsilon_r^{-1} H_{ti_m} (\nabla \times \mathbf{W}_{i_m}) \cdot (\nabla \times \mathbf{W}'_{i_m}) dS \\
-k_0^2 \sum_{i_m \in I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \int_{S_a} \mu_r H_{ti_m} \mathbf{W}_{i_m} \cdot \mathbf{W}'_{i_m} dS = \\
-j\omega\gamma \sum_{i_e \in I_{S_a \setminus \Gamma_e}} \int_{S_a} \epsilon_0 E_{ti_e} (\mathbf{W}_{i_e} \times \mathbf{u}_z) \cdot \mathbf{W}'_{i_m} dS \\
\forall \mathbf{W}'_{i_e} \in E_{S_a}^0 \text{ et } \forall \mathbf{W}'_{i_m} \in H_{S_a}^0
\end{array} \right. \quad (\text{II.30})$$

Cette équation s'écrit sous la forme d'un système matriciel avec en indice les dimensions de sous-matrices R , L , C et de la sous-matrice nulle 0 :

$$\overbrace{\left(\begin{array}{cc} R_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} & 0_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \\ 0_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} & R_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \end{array} \right)}^A - k_0^2 \overbrace{\left(\begin{array}{cc} L_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} & 0_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \\ 0_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} & L_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \end{array} \right)}^B = \underbrace{-j\omega\gamma}_{\lambda} \overbrace{\left(\begin{array}{cc} 0_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} & C_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \\ C_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} & 0_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \end{array} \right)}^B \underbrace{\begin{array}{c} E_{ti_e} \\ H_{ti_m} \end{array}}_X \quad (\text{II.31})$$

où $X = [E_{ti_e} \ H_{ti_m}]^t$ est vecteur propre, $\lambda = -j\omega\gamma$ la valeur propre associée et r , l et c les termes génériques des matrices R , L et C :

$$r_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} = \int_{S_a} \mu_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{W}_{i_e}) \cdot (\nabla \times \mathbf{W}'_{i_e}) dS \quad (\text{II.32a})$$

$$r_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} = \int_{S_a} \epsilon_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{W}_{i_m}) \cdot (\nabla \times \mathbf{W}'_{i_m}) dS \quad (\text{II.32b})$$

$$l_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} = \int_{S_a} \epsilon_r \mathbf{W}_{i_e} \cdot \mathbf{W}'_{i_e} dS \quad (\text{II.32c})$$

$$l_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} = \int_{S_a} \mu_r \mathbf{W}_{i_m} \cdot \mathbf{W}'_{i_m} dS \quad (\text{II.32d})$$

$$c_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} = \int_{S_a} \mu_0 (\mathbf{u}_z \times \mathbf{W}_{i_m}) \cdot \mathbf{W}'_{i_e} dS \quad (\text{II.32e})$$

$$c_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times I_{S_a \setminus \Gamma_e}} = \int_{S_a} \epsilon_0 (\mathbf{W}_{i_e} \times \mathbf{u}_z) \cdot \mathbf{W}'_{i_m} dS \quad (\text{II.32f})$$

La matrice au second membre de l'équation (II.31) composée des 2 sous-matrices C sur la diagonale inverse exprime le couplage entre le champ électrique transverse \mathbf{E}_t et le champ magnétique transverse \mathbf{H}_t .

Pour résoudre ce problème aux valeurs propres généralisé du type $A.X = -j\omega\gamma C.X$, nous avons utilisé une méthode de résolution numérique matricielle de la puissance itérée en tenant compte du fait que la matrice de couplage C est symétrique mais pas nécessairement définie positive.

4.2 Résolution du problème 3D : calcul des paramètres S

Nous allons nous intéresser ici à la résolution du problème 3D avec une formulation en E , sachant que la résolution avec une formulation en H s'obtient de la même manière.

Nous allons calculer la matrice S telle que $B = SA$, les coefficients a_i du mode entrant dans S_a étant considérés comme des paramètres connus (excitation extérieure) et les inconnues étant le champ électrique interne \mathbf{E}^i et les réponses du système b_i .

Nous avons utilisé, ici, la méthode de résolution dite par *solutions élémentaires* [Mar90]. Pour un système hyperfréquence quelconque à n accès, il faut procéder à n résolutions élémentaires du système en excitant à tour de rôle les n accès un à un. On note ainsi Φ^i ,

$i \in [1, n]$ la solution électrique de l'équation élémentaire correspondant à $a_i = 1$ et $b_i = 0$ dans l'équation (II.21) :

$$\int_{\Omega} \mu_r^{-1} (\nabla \times \Phi^i) \cdot (\nabla \times \Psi') d\Omega - k_0^2 \int_{\Omega} \epsilon_r \Phi^i \cdot \Psi' d\Omega = \int_{S_a} \mathbf{J}_e^i \cdot \Psi' dS \quad (\text{II.33})$$

La solution \mathbf{E} de l'équation (II.21) s'écrit alors :

$$\mathbf{E} = -j\omega\mu_0 \sum_{i=1}^n (a_i - b_i) \Phi^i \quad (\text{II.34})$$

La continuité de la composante tangentielle du champ (II.13d) peut alors s'écrire aussi :

$$\mathbf{E}_{S_a} = \sum_{i=1}^n (a_i + b_i) \mathbf{E}_t^i \quad (\text{II.35})$$

Pour calculer classiquement les composantes d'un vecteur sur une base, nous pouvons multiplier cette dernière équation par les courants conjugués \mathbf{J}_{el}^* et intégrer l'équation résultante sur les accès S_a , ce qui conduit en reportant dans (II.34) à :

$$\forall l \in [1, n] \quad -j\omega\mu_0 \sum_{i=1}^n (a_i - b_i) \int_{S_a} \mathbf{J}_{el}^* \cdot \Phi^i = \sum_{k=1}^n (a_k + b_k) \int_{S_a} \mathbf{J}_{el}^* \cdot \mathbf{E}_t^k dS \quad (\text{II.36})$$

Les solutions Φ^i ainsi calculées forment une base des modes propres pour exprimer le champ interne \mathbf{E} et sont donc appelées solutions élémentaires.

L'équation (II.36) donne alors un système de n relations qui, après résolution par rapport aux inconnues b_i , conduit à la matrice S .

Nous expliciterons cette méthode au chapitre IV sur un cas concret d'un guide rectangulaire à 2 accès. Nous allons maintenant procéder à la traduction matricielle de la formulation 3D.

Le champ électrique exprimé en fonction des éléments de base de E_{Ω}^0 donne :

$$\mathbf{E} = \sum_{i \in I_{\Omega \setminus \Gamma_e}} E_i \mathbf{W}_i \quad (\text{II.37})$$

Nous utilisons le principe de Galerkin en posant les fonctions test Ψ' sur chaque arête a_i égales aux fonctions de base \mathbf{W}_i' .

En utilisant l'équation (II.37), l'équation élémentaire (II.33) se discrétise de la même manière que l'équation (II.30) :

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I_{\Omega \setminus \Gamma_e}} \int_{\Omega} \mu_r^{-1} E_i (\nabla \times \mathbf{W}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{W}'_i) d\Omega - k_0^2 \sum_{i \in I_{\Omega \setminus \Gamma_e}} \int_{\Omega} \epsilon_r E_i \mathbf{W}_i \cdot \mathbf{W}'_i d\Omega = \\ \sum_{i \in I_{S_a \setminus \Gamma_m}} \int_{S_a} (\mathbf{u}_z \times \mathbf{H}_{ti}) \cdot \mathbf{W}'_i dS \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

Cette équation se transforme sous forme d'un système matriciel :

$$(A_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \times \Omega \setminus \Gamma_e} - k_0^2 B_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \times \Omega \setminus \Gamma_e}) \Phi_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \times n} = \begin{bmatrix} 0_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \setminus I_{S_a \setminus \Gamma_e}} \\ C_{I_{S_a \setminus \Gamma_e} \times I_{S_a \setminus \Gamma_m}} H_{I_{S_a \setminus \Gamma_m} \times n} \end{bmatrix} \quad (\text{II.39})$$

où $\Phi_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \times n}$ est la matrice dont les colonnes sont les solutions électriques élémentaires.

Les termes génériques a et b des matrices respectives A et B sont :

$$a_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \times I_{\Omega \setminus \Gamma_e}} = \int_{\Omega} \mu_r^{-1} (\nabla \times \mathbf{W}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{W}'_i) d\Omega \quad (\text{II.40a})$$

$$b_{I_{\Omega \setminus \Gamma_e} \times I_{\Omega \setminus \Gamma_e}} = \int_{\Omega} \epsilon_r \mathbf{W}_i \cdot \mathbf{W}'_i d\Omega \quad (\text{II.40b})$$

L'intérêt de cette méthode est que tous les coefficients matriciels sont réels si les milieux sont sans pertes. Les matrices étant généralement plus ou moins creuses à cause de la MEF et de l'utilisation des éléments d'arêtes, le problème $A.X = S$ est résolu par la technique classique itérative des gradients conjugués (ICCG).

5 Conclusion

Nous avons défini dans ce chapitre les modèles mathématiques nécessaires à la simulation de structures hyperfréquences par la MEF. Il apparaît judicieux de choisir les fonctions tests

et les fonctions de forme dans l'espace de Hilbert $H(\text{rot}, \Omega)$ qui présente l'avantage d'imposer uniquement les continuités tangentielles des champs aux interfaces de Ω (cf. chapitre III). Nous avons vu également dans ce chapitre comment résoudre le problème 2D pour imposer une source correcte (électrique et magnétique) qui excite la structure dans le mode désiré à l'aide de la résolution d'un problème aux valeurs propres utilisant comme inconnues $(\mathbf{E}_t, \mathbf{H}_t)$. Ce solveur de modes 2D est également nécessaire aux calculs des paramètres S que nous pouvons exploiter en les comparant avec les mesures expérimentales ou avec le calcul analytique lorsque la structure est simple. La résolution du problème 3D s'effectue ensuite classiquement avec une formulation électrique ou magnétique (la plus appropriée au respect des conditions aux limites et à l'exploitation des résultats).

Nous avons décidé de choisir, après quelques autres essais, la formulation 2D de T. Angkaew et de M. Aubourg car elle permet de résoudre complètement les modes transversaux (propagatifs ou évanescent) en donnant le champ électromagnétique [Ang87, Aub91]. Le couplage avec une formulation 3D classique [Bos90] traduisant l'équation de Helmholtz s'effectue ensuite aisément car la trace tangentielle des éléments d'arêtes tridimensionnels sur les accès-sources correspond aux fonctions de forme des éléments d'arêtes bidimensionnels utilisés dans la résolution du problème aux valeurs propres. Il existe dans la littérature de nombreux articles synthétiques comparant diverses formulations hyperfréquences 2D et 3D pour la propagation guidée [Rah91, Bar93, Dav93, Dil94].

Le choix d'une formulation $\mathbf{E}_t, \mathbf{H}_t$ couplée avec une formulation en \mathbf{E} ou en \mathbf{H} en utilisant uniquement des éléments d'arêtes donne des résultats excellents mais au prix de matrices moins creuses et donc au détriment du temps de calcul et de la capacité mémoire. Nous vérifierons dans le chapitre IV sur des exemples dont on connaît les solutions analytiques la bonne corrélation entre les résultats numériques et théoriques.

Nous allons maintenant détailler dans le chapitre III suivant, les fonctions de forme de l'espace $H(\text{rot}, \Omega)$ implantées dans le logiciel *Flux3d*[©] ainsi que leurs propriétés géométriques.

Bibliographie du chapitre II

- [Aub91] M. Aubourg and P. Guillon
“A mixed finite element formulation for microwave devices problems. Application to MIS structure”
Journal of Electromagnetic Waves and Applications, vol. 5, no. 4/5, pp. 371–386, February 1991.
- [Ang87] T. Angkaew, M. Matsuhara and N. Kumagai
“Finite-element analysis of waveguide modes : a novel approach that eliminates spurious modes”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 35, no. 2, pp. 117–123, February 1987.
- [Bad93] R. Badoual, Ch. Martin and S. Jacquet
Les micro-ondes
Collection Technologies, Masson Edition, 1993.
- [Bar93] I. Bardi, O. Biro, K. Preis, G. Vrisk and K.R. Richter
“Nodal and edge element analysis of inhomogeneously loaded waveguides”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 29, no. 2, pp. 1466–1469, March 1993.
- [Bi95] N.J.L. Yao Bi
Méthode des éléments finis mixtes et conditions absorbantes pour la modélisation des phénomènes électromagnétiques hyperfréquences
Thèse de doctorat, Ecole centrale de Lyon, 1995.
- [Bos90] A. Bossavit
“Solving maxwell equations in a closed cavity, and the question of spurious modes”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 26, no. 2, pp. 702–705, March 1990.
- [Dav93] J.B. Davies
“Finite element analysis of waveguides and cavities- a review”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 29, no. 2, pp. 1578–1583, March 1993.
- [Dil94] B.M. Dillon and J.P. Webb
“A comparison of formulations for the vector finite element analysis of waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 42, no. 2, pp. 308–316, February 1994.

- [Mar90] E. Marouby
Analyse d'éléments de connectique microondes par la méthode des éléments finis
Thèse de doctorat, Université de Limoges, Avril 1990.
- [Rah91] B.M.A. Rahman and J.B. Davies
“Review of finite element methods for microwave and optical waveguides”
Proceedings of the IEEE, vol. 79, no. 10, pp. 1442–1448, October 1991.
- [Sab86] J.-C. Sabonnadière and J.-L. Coulomb
La méthode des éléments finis : Du modèle... à la CAO
Traité des nouvelles technologies, Hermes Edition, 1986.
- [Sch66] L. Schwartz
Théorie des distributions
Hermann, 1966.
- [Tou80] G. Touzot and G. Dhatt
Une présentation de la méthode des éléments finis
Maloine, 1980.

Chapitre III

Éléments finis d'arêtes

Sommaire

1	Discrétisation	83
1.1	Éléments de référence surfaciques triangulaires	87
1.1.1	Topologie	87
1.1.2	Fonctions de forme pour le triangle : ordres 0,5 et 1	88
1.1.3	Fonctions de forme pour le triangle : ordres 1,5 et 2	91
1.2	Éléments de référence surfaciques rectangulaires	94
1.2.1	Topologie	94
1.2.2	Fonctions de forme pour le rectangle : ordres 0,5 et 1	95
1.2.3	Fonctions de forme pour le rectangle : ordres 1,5 et 2	98
1.3	Conclusion sur les fonctions de forme d'arête bidimensionnelles	101
1.4	Éléments de référence volumiques tétraédriques	102
1.4.1	Topologie	102
1.4.2	Fonctions de forme pour le tétraèdre : ordres 0,5 et 1	103
1.4.3	Fonctions de forme pour le tétraèdre : ordres 1,5 et 2	103
1.5	Éléments de référence volumiques hexaédriques	104
1.5.1	Topologie	104
1.5.2	Fonctions de forme pour l'hexaèdre : ordres 0,5 et 1	106
1.5.3	Fonctions de forme pour l'hexaèdre : ordres 1,5 et 2	106
1.6	Conclusion sur les fonctions de forme d'arête tridimensionnelles	108
2	Passage des coordonnées de référence aux coordonnées réelles	110
3	Conclusion	111
	Bibliographie du chapitre III	113

La méthode des éléments finis consiste à approcher la solution \mathbf{E} d'un problème variationnel par une solution approchée \mathbf{E}_a obtenue en résolvant le problème variationnel dans un sous-espace Σ_a de dimension finie. Ce sous-espace Σ_a est construit à partir d'une subdivision ou maillage du domaine d'étude par des éléments géométriques simples sur lesquels sont définies des fonctions d'approximation. Une fois le choix de la formulation effectué, guidé par des considérations physiques, il existe 2 principales directions de recherche pour améliorer la qualité de la réponse obtenue entre deux simulations [Web99].

La première direction consiste à améliorer le maillage d'un point de vue géométrique, notamment en adaptant de manière automatique, à partir d'une première résolution avec un maillage grossier, la taille a des différents éléments en fonction d'un certain critère sur l'erreur ou le nombre d'éléments [Che94, Rem96]. Cette technique de raffinement est appelée méthode h .

La deuxième direction de recherche est la méthode dite p . Cette technique de raffinement p permet de s'affranchir de la nouvelle discrétisation que nécessite la méthode h précédente, en cherchant à augmenter plutôt l'ordre des fonctions de base des espaces d'approximation.

Nous nous sommes plutôt concentrés sur la méthode p car le remaillage d'une structure complexe peut s'avérer extrêmement coûteux en temps, surtout lorsque l'extérieur des pièces doit être maillé pour y modéliser le champ électromagnétique.

La formulation par la méthode de Galerkin établie au chapitre II de l'équation des ondes (II.15) en \mathbf{H} (respectivement \mathbf{E}) doit vérifier au sens faible les conditions d'interfaces sur le champ dual \mathbf{E} (respectivement \mathbf{H}), si les fonctions tests sont prises dans $H(\text{rot}, \Omega)$. De plus, les conditions de continuité tangentielle doivent être respectées à la traversée de milieux différents portant sur le champ principal \mathbf{E} (respectivement \mathbf{H}). Lorsque les fonctions d'approximation, généralement des polynômes de degré 1 ou 2, sont continues sur le domaine d'étude, *toutes* les composantes de \mathbf{E} deviennent continues au passage d'un élément à un autre. C'est ce qui se passe avec la méthode classique des éléments finis nodaux où les degrés de liberté sont des vecteurs [Zie71, Sab86]. Or cette continuité totale peut engendrer des aberrations physiques, comme par exemple, la continuité normale de \mathbf{E} à l'interface de deux diélectriques de permittivités différentes.

Pour éviter cette continuité abusive de toutes les composantes d'un vecteur et l'apparition de modes parasites, la communauté scientifique a alors eu recours à des éléments finis particuliers, appelés *éléments finis mixtes de Whitney*, adaptés à la possible discontinuité normale des vecteurs \mathbf{E} ou \mathbf{H} .

Nous allons décrire dans ce chapitre les éléments d'arêtes, qui font partie des *éléments finis mixtes de Whitney*, utilisés pour notre problème de propagation hyperfréquence, tout en restant bien sûr dans un contexte général.

1 Discrétisation

Les éléments finis mixtes de Whitney ont été utilisés pour la première fois en 1975 pour résoudre des problèmes bidimensionnels [Rav75]. Dans [Néd80] et [Néd86], J.C. Nédélec a introduit deux familles d'éléments finis mixtes en trois dimensions, l'une conforme dans $H(\text{div}, \Omega)$ et l'autre conforme dans $H(\text{rot}, \Omega)$.

Dans l'approximation par éléments finis mixtes, les inconnues ne sont pas prises aux nœuds comme avec la méthode des éléments finis nodaux [Sil90], mais sont reliées aux arêtes, aux facettes ou aux volumes.

Nous n'allons pas dans ce chapitre détailler le principe de construction des éléments finis mixtes. La littérature étant relativement riche et complexe dans le domaine de la géométrie différentielle [Boss88,89a,89b,90,93] pour ne citer que cet auteur, nous allons plutôt décrire le comportement géométrique (sur les frontières des éléments) des fonctions de forme utilisées.

Si $\{\mathbf{W}_i\}$ est une base de l'espace d'approximation, alors tout élément \mathbf{E} appartenant à cet espace d'approximation s'écrira de manière unique $\mathbf{E} = \sum_i E_i \mathbf{W}_i$; les E_i sont appelés les *degrés de liberté* associés aux fonctions de forme vectorielles \mathbf{W}_i .

Les éléments finis mixtes de Whitney sont donc définis à partir d'une base de fonctions vectorielles \mathbf{W} et de *degrés de liberté* qui sont associés aux arêtes, aux facettes ou au volume des éléments de référence choisis.

Nous pouvons brièvement décrire quelques espaces d'approximation du complexe de Whitney qui sont utilisés par la méthode des éléments finis pour décrire les différents variables physiques :

$$H(\text{grad}, \Omega) = \{u \in \mathbb{L}^2(\Omega); \nabla u \in \mathbf{L}^2(\Omega)\} \quad (\text{III.1a})$$

$$H(\text{rot}, \Omega) = \{\mathbf{u} \in \mathbf{L}^2(\Omega); \nabla \times \mathbf{u} \in \mathbf{L}^2(\Omega)\} \quad (\text{III.1b})$$

$$H(\text{div}, \Omega) = \{\mathbf{u} \in \mathbf{L}^2(\Omega); \nabla \cdot \mathbf{u} \in \mathbb{L}^2(\Omega)\} \quad (\text{III.1c})$$

$$\text{cod}[\text{div}, \Omega] = \{\mathbf{u} \in \mathbf{L}^2(\Omega); \nabla \cdot \mathbf{u} \neq 0\} \quad (\text{III.1d})$$

où $\mathbb{L}^2(\Omega)$ est l'espace des champs scalaires de carré intégrable sur Ω et $\mathbf{L}^2(\Omega)$ est l'espace des champs vectoriels de carré intégrable sur Ω :

$$\mathbb{L}^2(\Omega) = \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{C}; \int_{\Omega} u^2 d\Omega < \infty\} \quad (\text{III.2a})$$

$$\mathbf{L}^2(\Omega) = \{\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^3; \int_{\Omega} |\mathbf{u}|^2 d\Omega < \infty\} \quad (\text{III.2b})$$

Nous pouvons remarquer que l'espace $H(\text{grad}, \Omega)$ correspond à l'espace de Sobolev $H^1(\Omega) = \{u \in \mathbb{L}^2(\Omega); \partial u / \partial x_i \in \mathbb{L}^2(\Omega); i = 1 \dots n\}$. Cet espace est classiquement utilisé par la méthode des éléments finis pour décrire les “éléments nodaux”. Pour ces éléments, les degrés de liberté (vectoriels, ici) associés aux fonctions de forme de degré 1 (scalaire, ici) sont les valeurs ponctuelles des fonctions en chaque nœud. On dit alors que les fonctions de classe $H(\text{grad}, \Omega)$ sont *conformes*.

L'espace $H(\text{rot}, \Omega)$ correspond à l'ensemble des fonctions vectorielles dites *rot-conformes*. Les éléments finis associés à cet espace sont appelés “éléments d'arêtes” car leurs degrés de liberté correspondent, pour les fonctions de degré 0, 5, à la circulation de la fonction sur l'arête sur laquelle ils sont définis. Cet espace possède la propriété intéressante de conserver les composantes tangentielles d'un vecteur sur la face commune à deux éléments.

L'espace $H(\text{div}, \Omega)$ correspond à l'ensemble des fonctions vectorielles dites *div-conformes*. Les éléments finis associés à cet espace sont appelés “éléments de facette” car leurs degrés de liberté correspondent, pour les fonctions de plus bas degré, au flux de la fonction à travers la surface sur laquelle ils sont définis. Cet espace possède la propriété intéressante de conserver la composante normale d'un vecteur sur la face commune à deux éléments.

L'espace $\text{cod}[\text{div}, \Omega]$ est le codomaine (c'est-à-dire l'image dans l'espace d'arrivée) de l'opérateur divergence. Les éléments finis associés à cet espace sont appelés “éléments de volume” car leurs degrés de liberté correspondent, pour les fonctions de plus bas degré, à l'intégrale de la fonction sur le volume sur lequel ils sont définis.

Nous pouvons résumer, dans le tableau III.1, le type d'approximation que l'on peut conseiller en fonction de la grandeur électromagnétique que l'on veut décrire, par rapport aux propriétés intéressantes des espaces d'approximation précédents :

Nous allons nous intéresser dans ce chapitre à la deuxième classe d'éléments finis cités c'est-à-dire aux éléments *rot-conformes*. Ces éléments sont appelés “éléments d'arête” même si certains degrés de liberté sont associés à d'autres entités géométriques que les arêtes

nom de l'élément	type de continuité	domaine mathématique	approximation conseillée
éléments nodaux	totale	$H(\text{grad}, \Omega)$	potentiels V, Φ
éléments d'arête	tangentielle	$H(\text{rot}, \Omega)$	champs \mathbf{E}, \mathbf{H}
éléments de facette	normale	$H(\text{div}, \Omega)$	inductions \mathbf{D}, \mathbf{B}
éléments de volume	néant	$\text{cod}[\text{div}, \Omega]$	charges ρ_e, ρ_m

Tableau III.1 : *Approximations conseillées (Nodale/Arête/Facette/Volume)*

(comme les facettes ou le volume). La continuité de la composante tangentielle de ces fonctions doit alors être déterminée de façon unique sur chaque variété frontalière de l'élément par la seule donnée des degrés de liberté définis sur cette variété.

Les éléments finis d'arêtes doivent donc vérifier un certain nombre de critères pour être *conformes* dans $H(\text{rot}, \Omega)$, c'est-à-dire pour avoir leurs composantes tangentielles continues sur une arête (respectivement une facette) commune à deux éléments bidimensionnels (respectivement tridimensionnels) adjacents [Geu96] :

- Le produit scalaire $\mathbf{W}_i \cdot \mathbf{t}_j$ doit être nul sur les arêtes a_j , $\forall j \neq i$ et de circulation non nulle sur l'arête a_i ; on annule ainsi les degrés de liberté associés aux arêtes autres que a_i .
- L'orientation du vecteur unitaire \mathbf{t}_i doit être la même sur l'arête a_i commune à deux éléments adjacents.
- S'ils ont besoin d'être définis, les autres types de degrés de liberté (associés aux faces et aux volumes) doivent être nuls sur les variétés frontalières non concernées, et non nuls sur les éléments surfaciques ou volumiques associés.

Nous allons donc vérifier, dans la suite de ce chapitre, les propriétés des fonctions de forme des éléments de $H(\text{rot}, \Omega)$ (continuité tangentielle) tels que J.-L. Coulomb les a introduits dans le logiciel *Flux3d*[©] pour des topologies à deux ou trois dimensions.

Ces éléments d'arêtes ont été construits de façon hiérarchique c'est-à-dire que les fonctions de base pour un élément forment un sous-ensemble des fonctions de base pour n'importe quel élément d'ordre supérieur. Cette construction offre l'avantage de pouvoir utiliser des éléments d'ordres différents dans un même maillage.

Les fonctions de forme sont définies dans un élément dit de référence puis transposées dans le maillage réel par une transformation géométrique inverse que nous décrirons ultérieurement dans le paragraphe 2. Par souci de compréhension, nous allons d'abord décrire

les propriétés des fonctions de forme \mathbf{W} dans les deux types d'éléments surfaciques de référence : le triangle et le rectangle ; puis dans deux types d'éléments volumiques de référence : l'hexaèdre et le tétraèdre. Nous remarquerons que les fonctions de base en 2D sont définies de la même façon qu'en 3D ; l'opérateur gradient utilisé en 2D étant la restriction aux deux premières composantes de l'opérateur gradient en 3D. En fait, ces fonctions ont été construites de façon topologique en 2D et 3D en même temps, de manière à former une base que l'on complète au fur et à mesure, et à respecter les critères définis ci-dessus.

La représentation graphique des fonctions de forme des éléments *rot-conformes* étant plus facile en 2D qu'en 3D, nous allons commencer par décrire les éléments de référence surfaciques, les propriétés pour les éléments de référence volumiques étant facilement extrapolables.

1.1 Éléments de référence surfaciques triangulaires

Nous allons décrire dans cette section la topologie des éléments de référence surfaciques triangulaires et construire de façon hiérarchique les fonctions de base jusqu'à l'ordre 2 complet.

1.1.1 Topologie

Dans un triangle, un point P est localisé grâce à deux coordonnées globales (x, y) (cf. figure III.1). Dans l'élément de référence, le point P' correspondant à P est localisé grâce à ses coordonnées locales, (u, v) qui sont les coordonnées d'aire ou coordonnées barycentriques, définies par les rapports de surfaces suivants :

$$u = \frac{S_1}{S_1 + S_2 + S_3} \quad v = \frac{S_2}{S_1 + S_2 + S_3} \quad (\text{III.3})$$

Les trois sommets ont pour coordonnées dans l'espace de référence $P_1(1, 0)$, $P_2(0, 1)$ et $P_3(0, 0)$ que nous noterons par leur numéro local en indice pour simplifier l'écriture des fonctions de base \mathbf{W} .

Nous pouvons aussi introduire la troisième coordonnée $w = \frac{S_3}{S_1 + S_2 + S_3} = 1 - u - v$ pour symétriser le rôle des sommets.

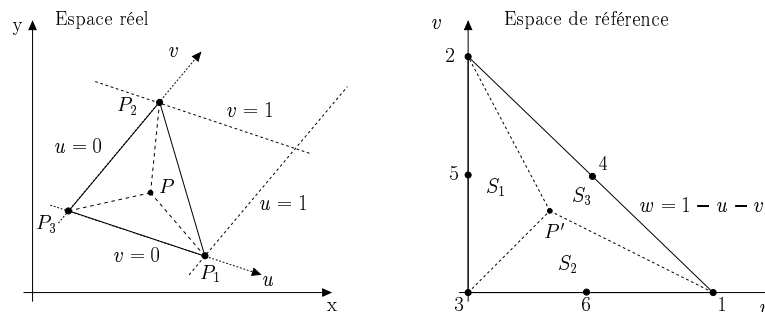


Figure III.1 : Éléments triangulaires

A chaque sommet i , associons la fonction λ_i , continue, affine par morceaux, égale à 1 au sommet i et à 0 aux autres sommets. Ces fonctions ne sont autres que les fonctions intrinsèques de Lagrange, de degré polynomial 1, associées aux trois sommets de l'élément

de référence et utilisées dans la MEF nodaux :

$$\lambda_1 = u \quad \lambda_2 = v \quad \lambda_3 = w = 1 - u - v \quad (\text{III.4})$$

Leurs gradients dans l'espace de référence s'expriment simplement de la manière suivante :

$$\nabla \lambda_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \nabla \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \nabla \lambda_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{III.5})$$

Nous avons fait allusion, jusqu'ici, aux éléments d'arêtes en les numérotant de façon symbolique. Nous référencerons dorénavant, pour donner plus de précisions aux éléments utilisés, *en indice* les arêtes ij , les facettes ijk pour les triangles ou $ijmk$ pour les rectangles et les volumes $ijmk$ d'après les numéros de sommets qui les composent et *en exposant*, le type et l'ordre de l'élément (triangle t , rectangle r , incomplet $^{1/2}$ ou $^{3/2}$, complet 1 ou 2).

1.1.2 Fonctions de forme pour le triangle : ordres 0,5 et 1

Les fonctions de Whitney mixtes incomplètes d'ordre 1 sont associées aux arêtes ij et définies à partir des fonctions de Lagrange λ_i . D'après les formulations établies dans le chapitre II, nous avons besoin de définir non seulement les fonctions vectorielles \mathbf{W} mais aussi leur rotationnel dans l'élément de référence qui s'obtient facilement :

$$\mathbf{W}_{ij}^{t1/2} = \lambda_i \nabla \lambda_j - \lambda_j \nabla \lambda_i \quad (\text{III.6a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{t1/2} = 2 \nabla \lambda_i \times \nabla \lambda_j \quad (\text{III.6b})$$

Nous pouvons alors remarquer que le sens de parcours de l'arête ij est significatif et doit être unique pour tous les éléments qui la partagent car nous avons ici $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2} = -\mathbf{W}_{ji}^{t1/2}$. Nous avons donc convenu d'orienter l'arête comme dans le mailleur Modulef c'est-à-dire dans le sens positif $P_i \rightarrow P_j$ lorsque $n^\circ(P_i) < n^\circ(P_j)$ dans l'espace réel.

Comme le montre la figure III.2, la composante tangentielle de la fonction $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ est nulle sur toutes les arêtes sauf sur l'arête ij où elle vaut 1.

De plus une simple intégration rectiligne permet de prouver que la circulation de la fonction $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ est nulle sur toutes les arêtes sauf sur l'arête ij où elle vaut 1.

Nous avons donc, d'après la construction des fonctions, généré 3 degrés de liberté. Les vecteurs $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ forment alors une base incomplète pour le degré 1 que nous pouvons développer

dans l'espace de référence :

$$\mathbf{W}_{12}^{t1/2} = \begin{vmatrix} -v \\ u \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{13}^{t1/2} = \begin{vmatrix} v-1 \\ -u \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{32}^{t1/2} = \begin{vmatrix} v \\ -u+1 \end{vmatrix} \quad (\text{III.7})$$

Afin de compléter cette base pour le degré 1, il faut ajouter 3 degrés de liberté supplémentaires aux degrés précédents :

$$\mathbf{W}_{ij}^{t1} = \lambda_i \nabla \lambda_j + \lambda_j \nabla \lambda_i = \nabla(\lambda_i \lambda_j) \quad (\text{III.8a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{t1} = \mathbf{0} \quad (\text{III.8b})$$

Nous pouvons alors souligner que le sens de parcours sur l'arête n'a ici aucun effet sur les fonctions associées qui sont identiques car $\mathbf{W}_{ij}^{t1} = \mathbf{W}_{ji}^{t1}$.

Nous avons pu compléter cette base de façon à ce que le rotationnel des fonctions de forme soit nul, ce qui permet d'annuler des termes lors de l'assemblage des matrices correspondant à la formulation faible du problème.

Nous avons donc, au total, généré 6 degrés de liberté soit 2 degrés de liberté par arête. Les vecteurs \mathbf{W}_{ij}^{t1} forment donc une base complète avec les $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ pour le degré 1 (mais non minimale et non orthogonale) que nous détaillons ici :

$$\mathbf{W}_{12}^{t1} = \begin{vmatrix} v \\ u \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{13}^{t1} = \begin{vmatrix} -2u-v+1 \\ -u \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{32}^{t1} = \begin{vmatrix} -v \\ -u-2v+1 \end{vmatrix} \quad (\text{III.9})$$

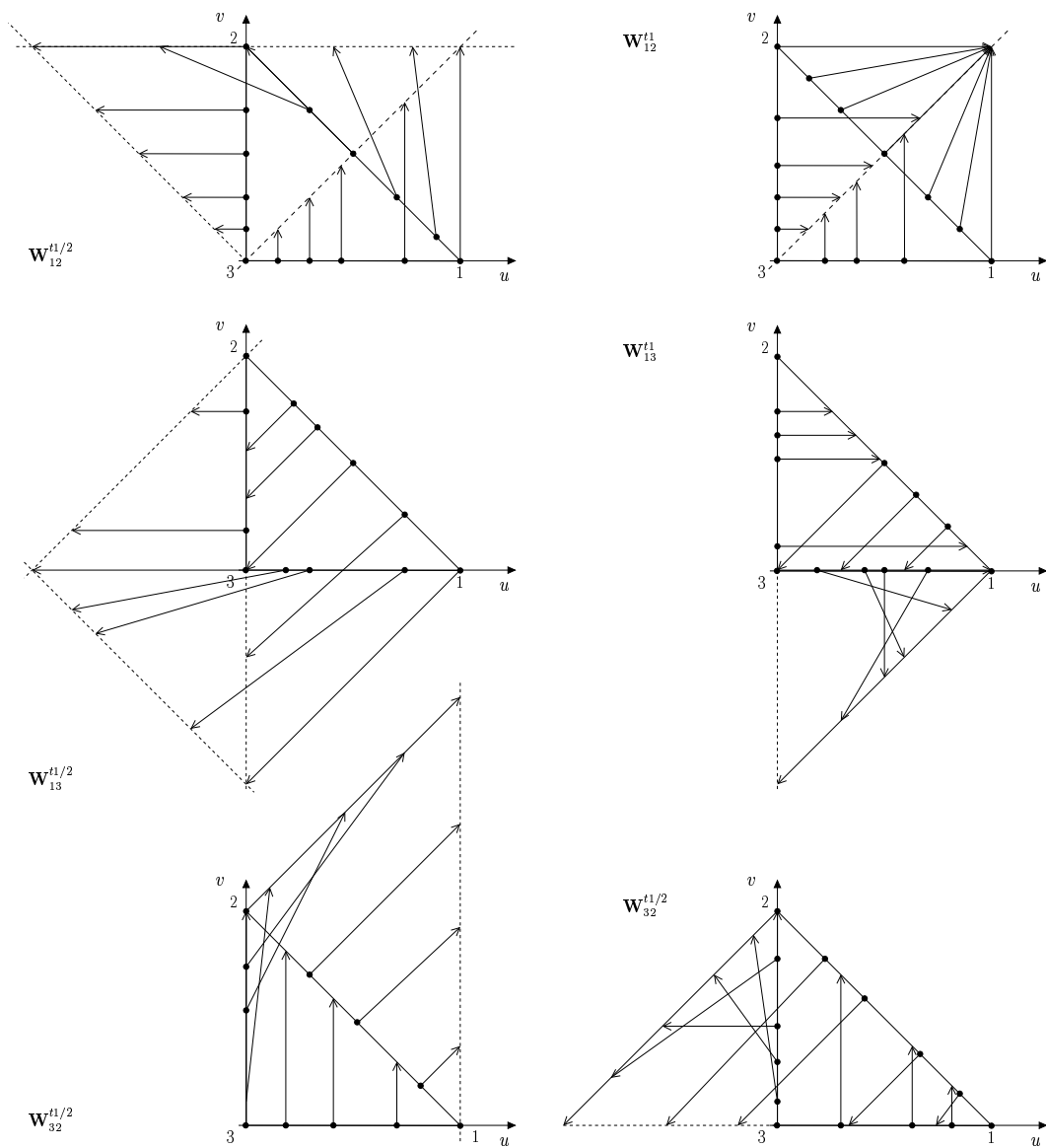


Figure III.2 : Champ de vecteurs $W_{ij}^{t1/2}$ et W_{ij}^{t1} sur les différentes arêtes ij

1.1.3 Fonctions de forme pour le triangle : ordres 1,5 et 2

Nous allons maintenant associer, pour décrire les éléments d'arêtes d'ordre 2, les fonctions de forme aux facettes notées en indice ijk . En effet, il faut ajouter à la base complète d'ordre 1 précédente, les trois fonctions vectorielles suivantes :

$$\mathbf{W}_{ijk}^{t\ 3/2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \lambda_k \quad (\text{III.10a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijk}^{t\ 3/2} = (\lambda_i \nabla \lambda_j + \lambda_j \nabla \lambda_i) \times \nabla \lambda_k = \nabla(\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \lambda_k \quad (\text{III.10b})$$

L'orientation de l'arête n'a pas d'effet sur les fonctions associées car $\mathbf{W}_{ijk}^{t\ 3/2} = \mathbf{W}_{jik}^{t\ 3/2}$.

La fonction $\mathbf{W}_{ijk}^{t\ 3/2}$ est nulle sur toutes les arêtes sauf sur l'arête ij où elle est tangentielle à la facette, entrante dans la facette, normale à l'arête et variant de façon quadratique avec les coordonnées locales (u, v) .

Nous avons alors maintenant, au total, généré *9 degrés de liberté*. Les vecteurs de base $\mathbf{W}_{ijk}^{t\ 3/2}$, avec ceux du degré 1 complet, forment maintenant une base incomplète pour le degré 2 :

$$\mathbf{W}_{123}^{t\ 3/2} = \begin{vmatrix} -uv & \mathbf{W}_{132}^{t\ 3/2} \\ -uv & \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 \\ -u^2 - uv + u \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{231}^{t\ 3/2} = \begin{vmatrix} -v^2 - uv + v \\ 0 \end{vmatrix} \quad (\text{III.11})$$

Pour compléter cette base, il faut ajouter les trois fonctions vectorielles suivantes qui sont associées aux arêtes ij :

$$\mathbf{W}_{ij}^{t\ 2} = \lambda_i(\lambda_i - 2\lambda_j)\nabla\lambda_j - \lambda_j(\lambda_j - 2\lambda_i)\nabla\lambda_i = \nabla(\lambda_i\lambda_j(\lambda_i - \lambda_j)) \quad (\text{III.12a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{t\ 2} = \mathbf{0} \quad (\text{III.12b})$$

L'orientation de l'arête est significative car $\mathbf{W}_{ij}^{t\ 2} = -\mathbf{W}_{ji}^{t\ 2}$. La composante tangentielle de la fonction $\mathbf{W}_{ij}^{t\ 2}$ est nulle sur toutes les arêtes sauf sur l'arête ij où elle dépend de façon quadratique des coordonnées locales (u, v) .

La circulation de la fonction est nulle sur toutes les arêtes. Le rotationnel de la fonction est nul.

Nous avons, au total, généré *12 degrés de liberté*. Les vecteurs de base sont les neuf précédents auxquels il faut ajouter les vecteurs $\mathbf{W}_{ij}^{t\ 2}$ qui forment maintenant une base complète pour le degré 2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{12}^{t_2} &= \begin{vmatrix} -v^2 + 2uv \\ u^2 - 2uv \end{vmatrix} & \mathbf{W}_{13}^{t_2} &= \begin{vmatrix} -5u^2 - v^2 - 5uv + 5u + 2v - 1 \\ -3u^2 - 2uv + 2u \end{vmatrix} \\ \mathbf{W}_{32}^{t_2} &= \begin{vmatrix} 3v^2 + 2uv - 2v \\ 6v^2 + u^2 + 6uv - 6v - 2u + 1 \end{vmatrix} \end{aligned} \tag{III.13}$$

Nous pouvons remarquer ici que les éléments d'ordre 2 incomplet et complet ne respectent pas la construction des sous-espaces préconisée par Nédélec [Néd86]. En effet, on trouve majoritairement dans la littérature 8 degrés de liberté pour l'ordre 1,5, c'est-à-dire uniquement 2 fonctions de forme supplémentaires attachées aux facettes à l'ordre 1, et non 3. En fait, nous avons regroupé la troisième fonction de forme attachée aux facettes, que certains auteurs attribuent à l'ordre 2, avec les 2 autres fonctions de l'ordre 1,5 qui ont le même type d'expression afin de garder des écritures cohérentes et symétriques.

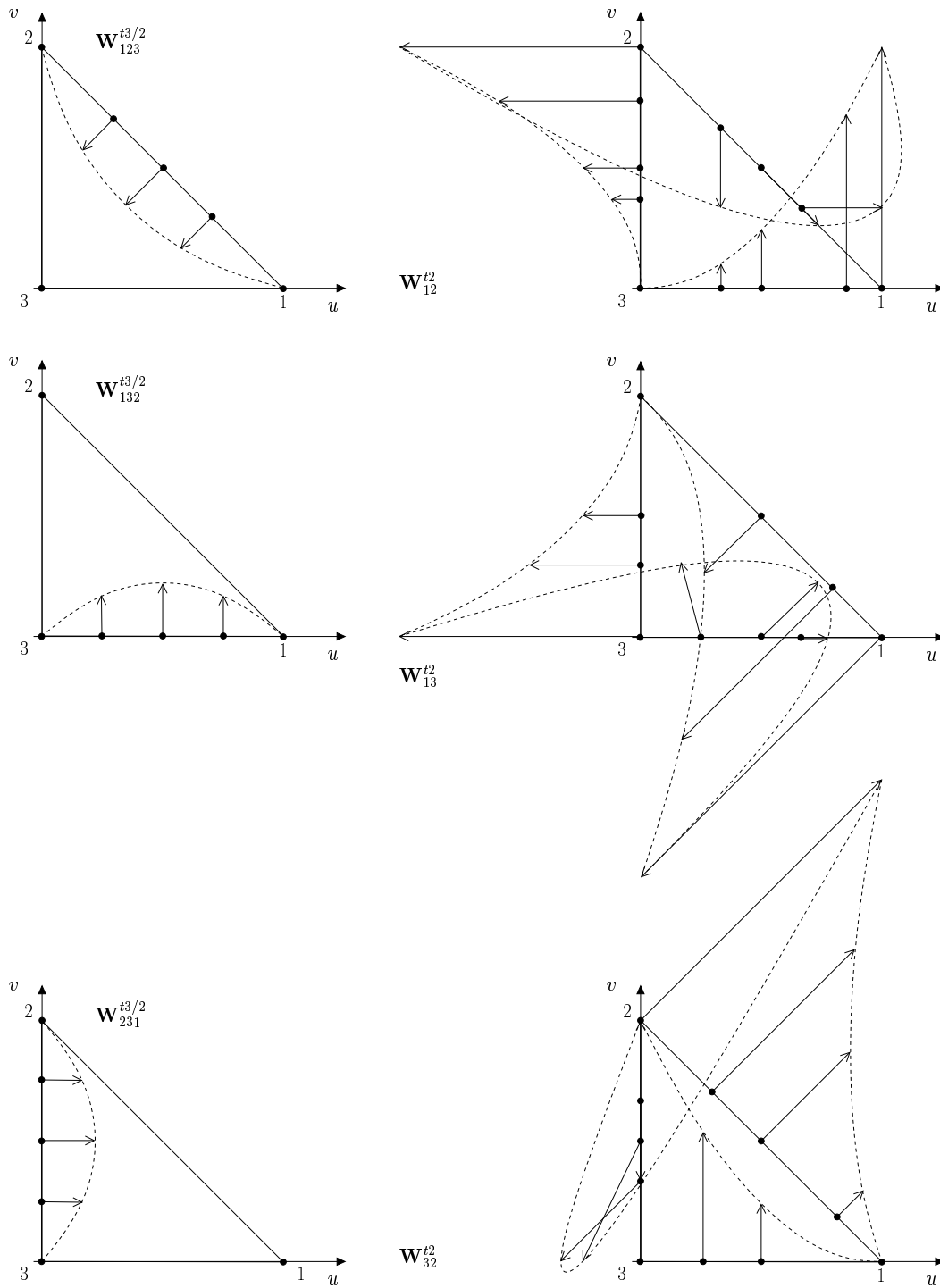


Figure III.3 : Champ de vecteurs $\mathbf{W}_{ijk}^{t3/2}$ et \mathbf{W}_{ij}^{t2} sur les différentes arêtes ij

1.2 Éléments de référence surfaciques rectangulaires

Nous allons décrire dans cette section la topologie des éléments de référence surfaciques rectangulaires et construire de façon hiérarchique les fonctions de base jusqu'à l'ordre 2 complet.

1.2.1 Topologie

Comme le montre la figure III.4, un point P' est repéré dans l'espace de référence par ses coordonnées locales $-1 \leq u \leq +1$ et $-1 \leq v \leq +1$.

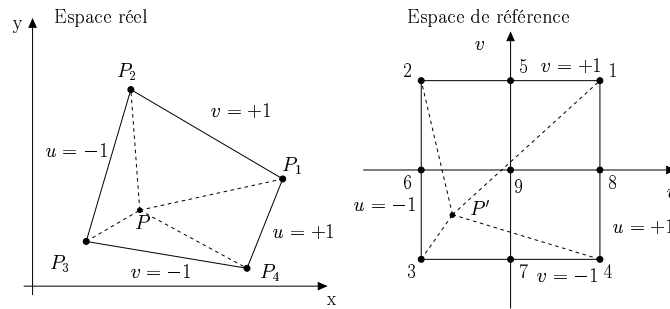


Figure III.4 : Éléments rectangulaires

Les fonctions intrinsèques de Lagrange associées aux trois sommets dans l'élément de référence sont :

$$\lambda_1 = \frac{(1+u)(1+v)}{4} \quad \lambda_2 = \frac{(1-u)(1+v)}{4} \quad \lambda_3 = \frac{(1-u)(1-v)}{4} \quad \lambda_4 = \frac{(1+u)(1-v)}{4} \quad (\text{III.14})$$

Leurs gradients dans l'espace de référence sont :

$$\nabla \lambda_1 = \begin{pmatrix} \frac{1+v}{4} \\ \frac{1+u}{4} \end{pmatrix} \quad \nabla \lambda_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1+v}{4} \\ \frac{1-u}{4} \end{pmatrix} \quad \nabla \lambda_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1-v}{4} \\ -\frac{1-u}{4} \end{pmatrix} \quad \nabla \lambda_4 = \begin{pmatrix} \frac{1-v}{4} \\ -\frac{1+u}{4} \end{pmatrix} \quad (\text{III.15})$$

Nous avons de plus besoin d'une fonction supplémentaire et de son gradient pour indiquer

une direction privilégiée constante dans l'élément de référence. Cette fonction génératrice de direction Γ_{ij} est associée aux nœuds i et j . Elle vaut ici 0 sur la facette du nœud i de départ et 1 sur la facette du nœud j d'arrivée :

$$\Gamma_{12} = \frac{1-u}{2} \quad \Gamma_{23} = \frac{1-v}{2} \quad \Gamma_{34} = \frac{1+u}{2} \quad \Gamma_{41} = \frac{1+v}{2} \quad (\text{III.16})$$

Nous nous servons surtout du gradient de ces fonctions qui définit une direction constante par arête :

$$\nabla\Gamma_{12} = \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \nabla\Gamma_{23} = \begin{vmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \end{vmatrix} \quad \nabla\Gamma_{34} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \nabla\Gamma_{41} = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \end{vmatrix} \quad (\text{III.17})$$

Nous pouvons remarquer que les gradients de deux fonctions génératrices de direction Γ_{ij} et Γ_{ji} sont de directions opposées.

1.2.2 Fonctions de forme pour le rectangle : ordres 0,5 et 1

Les fonctions de Whitney mixtes incomplètes d'ordre 1 sont associées aux arêtes ij :

$$\mathbf{W}_{ij}^{r1/2} = (\lambda_i + \lambda_j)\nabla\Gamma_{ij} \quad (\text{III.18a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{r1/2} = (\nabla\lambda_i + \nabla\lambda_j) \times \nabla\Gamma_{ij} \quad (\text{III.18b})$$

L'orientation de l'arête est significative car nous avons $\mathbf{W}_{ij}^{r1/2} = -\mathbf{W}_{ji}^{r1/2}$.

Nous avons, d'après la construction des fonctions, généré 4 *degrés de liberté*. Les vecteurs de base $\mathbf{W}_{ij}^{r1/2}$ forment donc une base incomplète pour le degré 1 :

$$\mathbf{W}_{12}^{r1/2} = \begin{vmatrix} \frac{-v-1}{4} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{23}^{r1/2} = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{u-1}{4} \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{34}^{r1/2} = \begin{vmatrix} \frac{-v+1}{4} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{41}^{r1/2} = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{u+1}{4} \end{vmatrix} \quad (\text{III.19})$$

Pour compléter cette base, il faut ajouter les 4 fonctions de base :

$$\mathbf{W}_{ij}^{r1} = (\lambda_i - \lambda_j)\nabla\Gamma_{ij} \quad (\text{III.20a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{r1} = (\nabla\lambda_i - \nabla\lambda_j) \times \nabla\Gamma_{ij} \quad (\text{III.20b})$$

Nous avons, d'après la construction des fonctions, généré 8 *degrés de liberté*. Les vecteurs de base forment maintenant une base complète pour le degré 1 :

$$\mathbf{W}_{12}^{r1} = \begin{vmatrix} \frac{-uv-u}{4} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{23}^{r1} = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{uv-v}{4} \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{34}^{r1} = \begin{vmatrix} \frac{-uv-u}{4} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \mathbf{W}_{41}^{r1} = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{-uv-v}{4} \end{vmatrix} \quad (\text{III.21})$$

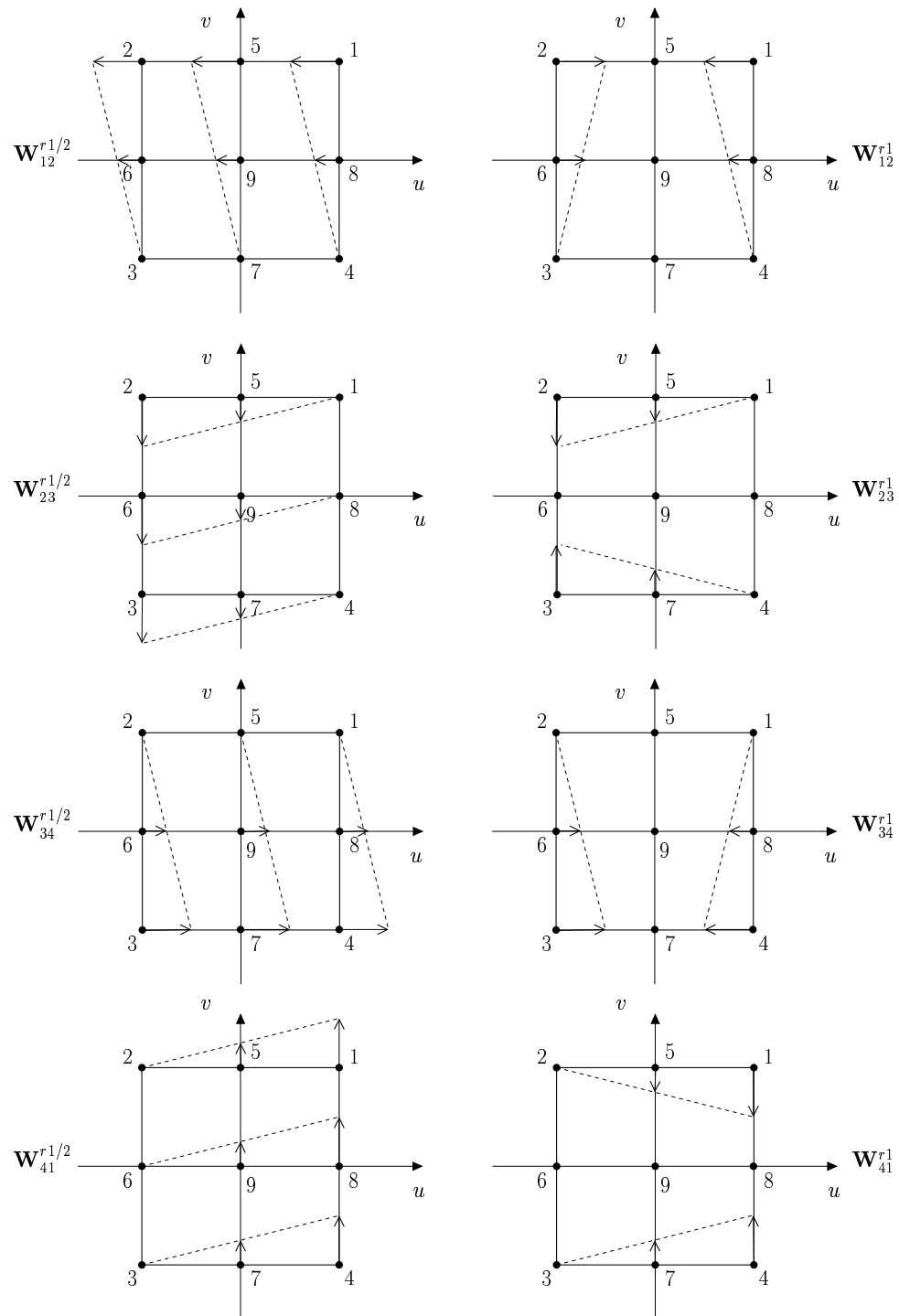


Figure III.5 : Champ de vecteurs $\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ et \mathbf{W}_{ij}^{t1}

1.2.3 Fonctions de forme pour le rectangle : ordres 1,5 et 2

Lorsqu'on passe à l'ordre 2, il faut associer les fonctions de forme aux facettes notées en indice $ijmk$ où m est le nœud milieu de l'arête ij et k le nœud milieu de l'arête opposée.

$$\mathbf{W}_{ijmk}^{r\ 3/2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.22a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijmk}^{r\ 3/2} = \nabla (\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.22b})$$

L'orientation de l'arête n'a pas d'effet sur les fonctions associées qui sont identiques car nous avons $\mathbf{W}_{ijmk}^{r\ 3/2} = \mathbf{W}_{jimk}^{r\ 3/2}$. Par contre, l'orientation de la médiane est significative car nous avons $\mathbf{W}_{ijmk}^{r\ 3/2} = -\mathbf{W}_{ijkm}^{r\ 3/2}$ et doit être unique pour tous les éléments qui la partagent. Nous conviendrons d'orienter la médiane dans le sens arête vers sommet opposé.

Nous avons, d'après la construction des fonctions, généré *12 degrés de liberté* qui forment une base incomplète pour le degré 2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{1257}^{r\ 3/2} &= \begin{vmatrix} 0 & \\ & \frac{(u^2 - 1)(1 + v)^2}{32} \end{vmatrix} & \mathbf{W}_{2368}^{r\ 3/2} &= \begin{vmatrix} \frac{(1 - v^2)(1 - u)^2}{32} & \\ & 0 \end{vmatrix} \\ \mathbf{W}_{3475}^{r\ 3/2} &= \begin{vmatrix} 0 & \\ & \frac{(1 - u^2)(1 - v)^2}{32} \end{vmatrix} & \mathbf{W}_{4186}^{r\ 3/2} &= \begin{vmatrix} \frac{(v^2 - 1)(1 + u)^2}{32} & \\ & 0 \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

Pour compléter cette base à l'ordre 2, il faut ajouter *6 degrés de liberté* supplémentaires, 4 associés aux arêtes ij et 2 associés aux facettes $ijmk$:

$$\mathbf{W}_{ij}^{r\ 2} = (\lambda_i^2 + \lambda_j^2 - 4\lambda_i \lambda_j) \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.24a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{r\ 2} = 2[(\lambda_j - 2\lambda_i) \nabla \lambda_j + (\lambda_i - 2\lambda_j) \nabla \lambda_i] \times \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.24b})$$

L'orientation de l'arête est importante car nous avons $\mathbf{W}_{ij}^{r\ 2} = -\mathbf{W}_{ji}^{r\ 2}$.

Soit i et j deux nœuds diagonalement opposés de la facette. Soit m un nœud milieu d'arête et k le nœud opposé. La fonction associée à la diagonale ij et la médiane mk est :

$$\mathbf{W}_{ijmk}^{r,2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.25a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijmk}^{r,2} = \nabla (\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.25b})$$

La fonction est indépendante du couple de nœuds diagonaux choisis. Par contre, l'orientation de la médiane est significative et doit être unique pour tous les éléments qui la partagent car $\mathbf{W}_{ijmk}^{r,2} = -\mathbf{W}_{jikm}^{r,2}$. Nous conviendrons d'orienter la première médiane dans le sens première arête vers sommet opposé, la seconde médiane, dans le sens deuxième arête vers sommet opposé.

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{12}^{r,2} &= \begin{vmatrix} \frac{(1-3u^2)(1+v)^2}{16} \\ 0 \end{vmatrix} & \mathbf{W}_{23}^{r,2} &= \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(1-3v^2)(1-u)^2}{16} \end{vmatrix} \\ \mathbf{W}_{34}^{r,2} &= \begin{vmatrix} \frac{(3u^2-1)(1-v)^2}{16} \\ 0 \end{vmatrix} & \mathbf{W}_{41}^{r,2} &= \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(3v^2-1)(1+u)^2}{16} \end{vmatrix} \\ \mathbf{W}_{1386}^{r,2} &= \begin{vmatrix} \frac{(u^2-1)(1-v^2)}{32} \\ 0 \end{vmatrix} & \mathbf{W}_{2457}^{r,2} &= \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(u^2-1)(1-v^2)}{32} \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{III.26})$$

De la même façon que pour les éléments triangulaires, on pourrait s'attendre à obtenir 2 fonctions de forme supplémentaires pour l'ordre 2 incomplet au lieu de 4. En fait, nous avons regroupé les 4 fonctions de forme attachées aux facettes de l'ordre 1, 5 qui ont la même expression mathématique afin de ne pas rompre le caractère homogène et symétrique des vecteurs de base proposés par demi-ordre.

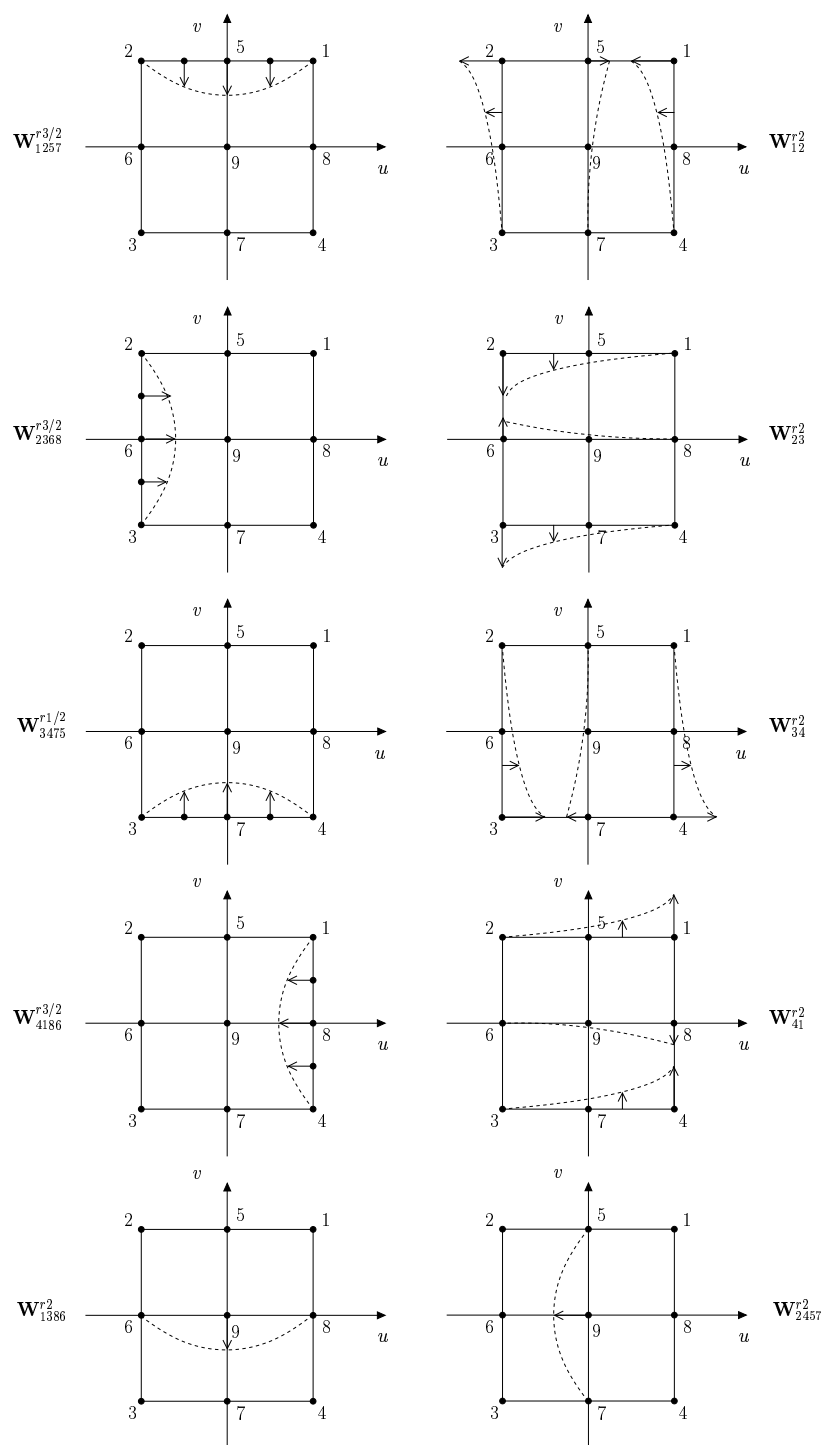


Figure III.6 : Champ de vecteurs $W_{ij}^{r3/2}$ et W_{ij}^{r2}

1.3 Conclusion sur les fonctions de forme d'arête bidimensionnelles

Pour prouver que les éléments finis d'arête bidimensionnels sont de classe $H(\text{rot}, \Omega)$, il suffit de montrer que les fonctions de forme sont continues à travers les arêtes [Geu96]. Nous pouvons vérifier cette condition suffisante sur les figures précédentes III.2, III.3, III.5, III.6. Nous avons de plus résumé le nombre de degrés de liberté et les propriétés intéressantes dans le tableau III.2 suivant.

Fonction (ddl)	Direction sur les arêtes	Circulation sur les arêtes
$\mathbf{W}_{ij}^{t1/2}$ (3)	normale aux arêtes sauf sur ij	nulle sauf sur ij
\mathbf{W}_{ij}^{t1} (6)	normale aux arêtes sauf sur ij	nulle partout
$\mathbf{W}_{ijk}^{t3/2}$ (9)	normale uniquement sur ij	nulle partout
\mathbf{W}_{ij}^{t2} (12)	normale aux arêtes sauf sur ij	nulle partout
$\mathbf{W}_{ij}^{r1/2}$ (4)	normale aux arêtes sauf sur ij	nulle sauf sur ij
\mathbf{W}_{ij}^{r1} (8)	normale aux arêtes sauf sur ij	nulle partout
$\mathbf{W}_{ijmk}^{r3/2}$ (12)	normale uniquement sur ij	nulle partout
\mathbf{W}_{ij}^{r2} (16)	normale aux arêtes sauf sur ij	nulle partout
\mathbf{W}_{ijmk}^{r2} (18)	nulle partout	nulle partout

Tableau III.2 : Propriétés des fonctions de forme \mathbf{W} sur les éléments surfaciques triangulaires et rectangulaires

1.4 Éléments de référence volumiques tétraédriques

Nous allons décrire dans cette section la topologie des éléments de référence volumiques tétraédriques et construire de façon hiérarchique les fonctions de base jusqu'à l'ordre 2 complet.

1.4.1 Topologie

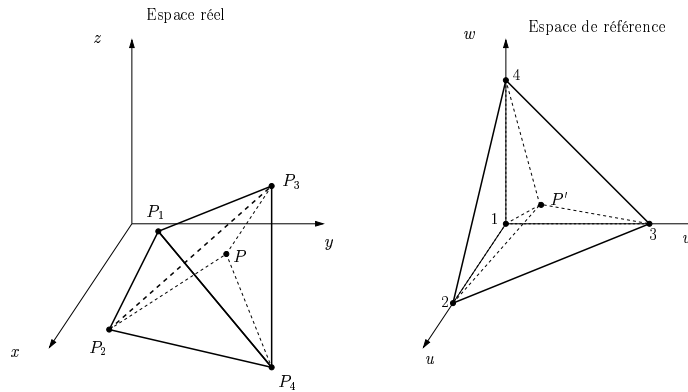


Figure III.7 : Éléments tétraédriques

Dans un tétraèdre, un point P est localisé grâce à ses trois coordonnées globales (x, y, z) . Dans l'élément de référence (cf. figure III.7), le point P' correspondant à P est localisé grâce à ses coordonnées locales (u, v, w) qui sont ses coordonnées définies par le rapport des volumes :

$$u = \frac{\text{Volume}(P, P_1, P_2, P_3)}{\text{Volume}(P_1, P_2, P_3, P_4)} \quad v = \frac{\text{Volume}(P, P_1, P_2, P_4)}{\text{Volume}(P_1, P_2, P_3, P_4)} \quad w = \frac{\text{Volume}(P, P_1, P_3, P_4)}{\text{Volume}(P_1, P_2, P_3, P_4)} \quad (\text{III.27})$$

Les quatre sommets ont pour coordonnées dans l'espace de référence $P_1 (0, 0, 0)$, $P_2 (1, 0, 0)$, $P_3 (0, 1, 0)$ et $P_4 (0, 0, 1)$.

Les fonctions intrinsèques de Lagrange associées aux quatre sommets dans l'élément de référence sont :

$$\lambda_1 = 1 - u - v - w \quad \lambda_2 = u \quad \lambda_3 = v \quad \lambda_4 = w \quad (\text{III.28})$$

Leurs gradients dans l'espace de référence sont :

$$\nabla\lambda_1 = \begin{vmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{vmatrix} \quad \nabla\lambda_2 = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \nabla\lambda_3 = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \nabla\lambda_4 = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \quad (\text{III.29})$$

1.4.2 Fonctions de forme pour le tétraèdre : ordres 0,5 et 1

Elles ont la même expression que pour le triangle mais les fonctions ont maintenant trois composantes :

$$\mathbf{W}_{ij}^{T1/2} = \lambda_i \nabla\lambda_j - \lambda_j \nabla\lambda_i \quad (\text{III.30a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{T1/2} = 2 \nabla\lambda_i \times \nabla\lambda_j \quad (\text{III.30b})$$

Nous complétons cette base de 6 vecteurs d'ordre 0, 5 de la même façon qu'avec le triangle, c'est-à-dire en ajoutant les 6 fonctions vectorielles définies de la manière suivante :

$$\mathbf{W}_{ij}^{T1} = \lambda_i \nabla\lambda_j + \lambda_j \nabla\lambda_i = \nabla(\lambda_i \lambda_j) \quad (\text{III.31a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{T1} = \mathbf{0} \quad (\text{III.31b})$$

1.4.3 Fonctions de forme pour le tétraèdre : ordres 1,5 et 2

Pour l'ordre 1,5, il faut ajouter les 12 fonctions associées aux facettes ijk suivantes, soit 3 fonctions par facettes triangulaires :

$$\mathbf{W}_{ijk}^{T3/2} = \lambda_i \lambda_j \nabla\lambda_k \quad (\text{III.32a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijk}^{T3/2} = (\lambda_i \nabla\lambda_j + \lambda_j \nabla\lambda_i) \times \nabla\lambda_k = \nabla(\lambda_i \lambda_j) \times \nabla\lambda_k \quad (\text{III.32b})$$

Pour compléter cette base, il faut ajouter les 6 fonctions vectorielles suivantes qui sont associées aux arêtes ij :

$$\mathbf{W}_{ij}^{T,2} = \lambda_i(\lambda_i - 2\lambda_j)\nabla\lambda_j - \lambda_j(\lambda_j - 2\lambda_i)\nabla\lambda_i = \nabla(\lambda_i\lambda_j(\lambda_i - \lambda_j)) \quad (\text{III.33a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{T,2} = \mathbf{0} \quad (\text{III.33b})$$

1.5 Éléments de référence volumiques hexaédriques

Nous allons décrire dans cette section la topologie des éléments de référence volumiques hexaédriques et construire de façon hiérarchique les fonctions de base jusqu'à l'ordre 2 complet.

1.5.1 Topologie

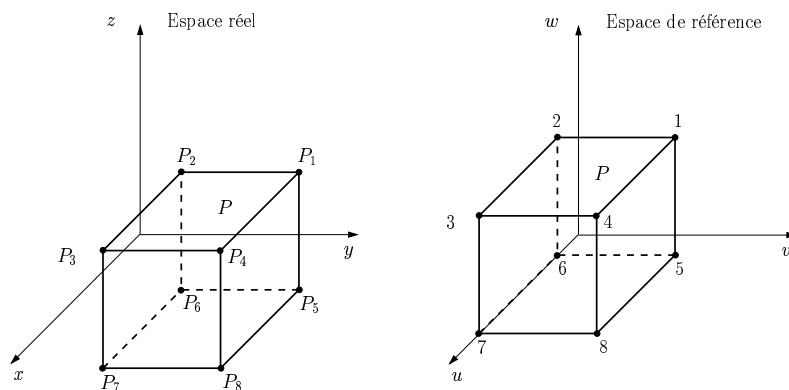


Figure III.8 : Éléments hexaédriques

Dans un hexaèdre, un point P est localisé grâce à ses trois coordonnées globales (x, y, z) . Dans l'élément de référence (cf. figure III.8), le point P' correspondant à P est localisé grâce à ses coordonnées locales (u, v, w) qui sont ses coordonnées définies par le rapport des volumes :

$$u = \frac{\text{Volume}(P, P_1, P_2, P_3)}{\text{Volume}(P_1, P_2, P_3, P_4)} \quad v = \frac{\text{Volume}(P, P_1, P_2, P_4)}{\text{Volume}(P_1, P_2, P_3, P_4)} \quad w = \frac{\text{Volume}(P, P_1, P_3, P_4)}{\text{Volume}(P_1, P_2, P_3, P_4)} \quad (\text{III.34})$$

Les huit sommets ont pour coordonnées dans l'espace de référence $P_1 (1, 1, 1)$, $P_2 (-1, 1, 1)$, $P_3 (-1, -1, 1)$, $P_4 (1, -1, 1)$, $P_5 (1, 1, -1)$, $P_6 (-1, 1, -1)$, $P_7 (-1, -1, -1)$ et $P_8 (1, -1, -1)$.

Les fonctions intrinsèques de Lagrange associées aux 8 sommets dans l'élément de référence sont :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{(1+u)(1+v)(1+w)}{8} & \lambda_2 &= \frac{(1-u)(1+v)(1+w)}{8} \\ \lambda_3 &= \frac{(1-u)(1-v)(1+w)}{8} & \lambda_4 &= \frac{(1+u)(1-v)(1+w)}{8} \\ \lambda_5 &= \frac{(1+u)(1+v)(1-w)}{8} & \lambda_6 &= \frac{(1-u)(1+v)(1-w)}{8} \\ \lambda_7 &= \frac{(1-u)(1-v)(1-w)}{8} & \lambda_8 &= \frac{(1+u)(1-v)(1-w)}{8} \end{aligned} \quad (\text{III.35})$$

Leurs gradients dans l'espace de référence sont donc :

$$\begin{aligned} \nabla \lambda_1 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} +(1+v)(1+w) \\ +(1+u)(1+w) \\ +(1+u)(1+v) \end{vmatrix} & \nabla \lambda_2 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} -(1+v)(1+w) \\ +(1-u)(1+w) \\ +(1-u)(1+v) \end{vmatrix} \\ \nabla \lambda_3 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} -(1-v)(1+w) \\ -(1-u)(1+w) \\ +(1-u)(1+v) \end{vmatrix} & \nabla \lambda_4 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} +(1-v)(1+w) \\ -(1+u)(1+w) \\ +(1+u)(1-v) \end{vmatrix} \\ \nabla \lambda_5 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} +(1+v)(1-w) \\ +(1+u)(1-w) \\ -(1+u)(1+v) \end{vmatrix} & \nabla \lambda_6 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} -(1+v)(1-w) \\ +(1-u)(1-w) \\ -(1+u)(1+v) \end{vmatrix} \\ \nabla \lambda_7 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} -(1-v)(1-w) \\ -(1-u)(1-w) \\ -(1-u)(1-v) \end{vmatrix} & \nabla \lambda_8 &= \frac{1}{8} \begin{vmatrix} -(1-v)(1-w) \\ -(1+u)(1-w) \\ -(1+u)(1-v) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

Les fonctions génératrices de direction dans l'élément de référence sont les mêmes que pour le rectangle.

1.5.2 Fonctions de forme pour l'hexaèdre : ordres 0,5 et 1

Les fonctions de Whitney mixtes incomplètes d'ordre 1 sont associées aux arêtes ij et ont la même expression que celles associées au rectangle :

$$\mathbf{W}_{ij}^{h1/2} = (\lambda_i + \lambda_j) \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.37a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{h1/2} = (\nabla \lambda_i + \nabla \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.37b})$$

Nous avons, d'après la construction des fonctions, généré *12 degrés de liberté*.

Pour compléter cette base, il faut ajouter les 12 fonctions de base :

$$\mathbf{W}_{ij}^{h1} = (\lambda_i - \lambda_j) \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.38a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{h1} = (\nabla \lambda_i - \nabla \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.38b})$$

Nous avons, d'après la construction des fonctions, généré *24 degrés de liberté*.

1.5.3 Fonctions de forme pour l'hexaèdre : ordres 1,5 et 2

Pour compléter le degré 1, nous devons faire appel maintenant aux éléments de facettes et aux éléments de volume, ce qui est nouveau par rapport au rectangle.

Pour une facette donnée, prenons une arête ij de nœud milieu m et de nœud milieu de l'arête opposée k . La fonction associée à la facette $ijmk$ qui s'appuie sur l'arête ij et la médiane mk est définie de la façon suivante :

$$\mathbf{W}_{ijmk}^{h3/2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.39a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijmk}^{h3/2} = \nabla (\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.39b})$$

Nous avons donc ici généré 4 fonctions par facette, soit 24 au total. Mais nous avons besoin également de définir les 6 fonctions associées au volume pour décrire complètement l'ordre 2 incomplet.

Considérons alors les nœuds diagonaux ij d'une facette donnée de centre m . Soit l le centre de la facette opposée. La fonction qui s'appuie sur la facette ij et la médiane ml est définie de la manière suivante :

$$\mathbf{W}_{ijml}^{h3/2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \Gamma_{ml} \quad (\text{III.40a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijml}^{h3/2} = \nabla (\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{ml} \quad (\text{III.40b})$$

Nous avons généré ici 6 fonctions associées au volume, soit une par facette du volume.

Nous pouvons également remarquer que la fonction est indépendante du couple de nœuds diagonaux choisi (ij , ji ou $i'j'$) :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{ijml}^{h3/2} &= \mathbf{W}_{jiml}^{h3/2} \\ \mathbf{W}_{ijml}^{h3/2} &= \mathbf{W}_{i'j'ml}^{h3/2} \end{aligned}$$

En revanche, l'orientation de la médiane est significative ($\mathbf{W}_{ijml}^{h3/2} = -\mathbf{W}_{ijlm}^{h3/2}$) bien qu'elle puisse être arbitraire par élément car non partagée par aucun autre élément.

Nous conviendrons donc d'orienter la médiane dans le sens facette vers volume.

Pour l'ordre 2 complet, nous retrouvons les fonctions de forme de l'élément de référence rectangulaire associées aux arêtes :

$$\mathbf{W}_{ij}^{h2} = (\lambda_i^2 + \lambda_j^2 - 4\lambda_i \lambda_j) \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.41a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ij}^{h2} = 2 [(\lambda_j - 2\lambda_i) \nabla \lambda_j + (\lambda_i - 2\lambda_j) \nabla \lambda_i] \times \nabla \Gamma_{ij} \quad (\text{III.41b})$$

Il ne faut pas oublier non plus les fonctions associées aux facettes. Pour cela, prenons 2 nœuds diagonaux i et j d'une facette. Soit m un nœud milieu d'arête et k le nœud opposé. La fonction associée à la diagonale ij et à la médiane mk est :

$$\mathbf{W}_{ijmk}^{h2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.42a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijmk}^{h2} = \nabla (\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{mk} \quad (\text{III.42b})$$

Nous avons donc généré 2 fonctions par facette (soit une par médiane de facette), c'est-à-dire 12 fonctions.

Enfin, en ce qui concerne les fonctions associées au volume, nous devons considérer 2 nœuds diagonaux ij du volume. Soit m le centre d'une facette et l le centre de la facette opposée. La fonction associée à la diagonale ij et à la médiane ml est définie comme suit :

$$\mathbf{W}_{ijml}^{h,2} = \lambda_i \lambda_j \nabla \Gamma_{ml} \quad (\text{III.43a})$$

$$\nabla \times \mathbf{W}_{ijml}^{h,2} = \nabla (\lambda_i \lambda_j) \times \nabla \Gamma_{ml} \quad (\text{III.43b})$$

Nous avons donc généré 3 fonctions associées au volume (soit une par médiane de volume). Nous pouvons également remarquer que :

La fonction est indépendante du couple de nœuds diagonaux choisi (ij , ji ou $i'j'$) :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{ijml}^{h,2} &= \mathbf{W}_{jiml}^{h,2} \\ \mathbf{W}_{ijml}^{h,2} &= \mathbf{W}_{i'j'ml}^{h,2} \end{aligned}$$

En revanche, l'orientation de la médiane est significative ($\mathbf{W}_{ijml}^{h,2} = -\mathbf{W}_{ijlm}^{h,2}$) bien qu'elle puisse être arbitraire par élément car non partagée par aucun autre élément.

Nous conviendrons d'orienter les médianes dans le sens des coordonnées locales croissantes et de les numéroter dans l'ordre de ces coordonnées.

1.6 Conclusion sur les fonctions de forme d'arête tridimensionnelles

Pour prouver que les éléments finis d'arête tridimensionnels sont de classe $H(\text{rot}, \Omega)$, il suffit de montrer que les traces tangentielles des fonctions de forme sont continues à travers les faces de 2 éléments volumiques adjacents [Web93].

Nous avons résumé le nombre de degrés de liberté et les propriétés intéressantes dans le tableau III.3 suivant.

Propriétés \mathbf{W} (ddl)	Composante tangentielle sur les fac.	Composante normale du rotationnel sur les fac.	Circulation sur les arêtes	Flux du rotationnel sur les fac.
$\mathbf{W}_{ij}^{T1/2}$ (6)	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle sauf sur ij	nul sauf sur les 2 fac. qui partagent ij
\mathbf{W}_{ij}^{T1} (12)	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	(rotationnel nul)	nulle partout	nul partout
$\mathbf{W}_{ijk}^{T3/2}$ (24)	nulle sauf la fac. ijk	nulle sur toutes les autres facettes	nulle partout	nul partout
\mathbf{W}_{ij}^{T2} (30)	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	(rotationnel nul)	nulle partout	nul partout
$\mathbf{W}_{ij}^{h1/2}$ (12)	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle sauf sur ij	nul sauf sur les 2 fac. qui partagent ij
\mathbf{W}_{ij}^{h1} (24)	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle partout	nul partout
$\mathbf{W}_{ijmk}^{h3/2}$ (48)	nulle sur toutes les autres facettes	nulle sur toutes les autres facettes	nulle partout	nul partout
$\mathbf{W}_{ijml}^{h3/2}$ (54)	nulle partout	nulle partout	nulle partout	nul partout
\mathbf{W}_{ij}^{h2} (66)	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle sauf sur les 2 fac. qui partagent ij	nulle partout	nul partout
\mathbf{W}_{ijmk}^{h2} (78)	nulle sur toutes les autres facettes	nulle sur toutes les autres facettes	nulle partout	nul partout
\mathbf{W}_{ijml}^{h2} (81)	nulle partout	nulle partout	nulle partout	nul partout

Tableau III.3 : Propriété des fonctions de forme \mathbf{W} sur les éléments volumiques tétraédriques et hexaédriques

2 Passage des coordonnées de référence aux coordonnées réelles

Nous venons de décrire dans les sections précédentes, les fonctions de forme liées à diverses topologies de référence.

Dans la méthode des éléments finis, les formulations faibles du problème font appel à des intégrales de domaines surfaciques et volumiques (voir chapitre précédent II).

Lors du maillage du domaine, chaque élément fini est défini par son élément de référence et la position géométrique de ses nœuds dans le domaine discrétisé réel. Soit \mathcal{J} la transformation géométrique permettant de passer de l'élément de référence K de forme simple à l'élément réel K' [Tou80]. Cette transformation doit être inversible et associer à tout point de coordonnées locales (u, v, w) de l'espace de référence K , un unique point de l'espace réel K' de coordonnées globales (x, y, z) .

Nous notons alors J la matrice jacobienne de la transformation \mathcal{J} . La matrice jacobienne relie les dérivées directionnelles de K et K' :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \cdot}{\partial u} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial v} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \\ \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} & \frac{\partial z}{\partial v} \\ \frac{\partial x}{\partial w} & \frac{\partial y}{\partial w} & \frac{\partial z}{\partial w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \cdot}{\partial x} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial y} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial z} \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \frac{\partial \cdot}{\partial x} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial y} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (\text{III.44})$$

Nous pouvons remarquer que les fonctions de base des éléments finis d'arête sont définies ici à partir des gradients des fonctions de Lagrange. La transformation géométrique \mathcal{J} étant bijective, J est non singulière et on note J^{-1} son inverse. Pour toute fonction de Lagrange λ , les gradients ∇_u dans l'espace de référence et les gradients ∇_x dans l'espace réel sont reliés par la matrice jacobienne J^{-1} de la manière suivante :

$$\nabla_x \lambda = J^{-1} \nabla_u \lambda \quad (\text{III.45})$$

Les intégrales (surfaiques ou volumiques) des fonctions de forme \mathbf{W} peuvent donc s'écrire dans l'espace réel Ω en fonction des intégrales (surfaiques ou volumiques) dans l'élément de référence Δ sous la forme :

$$\int_{\Omega} \mathbf{W}_x dx dy (dz) = \int_{\Delta} J^{-1} \mathbf{W}_u |J| du dv (dw) \quad (\text{III.46})$$

où $|J|$ désigne le déterminant de la matrice jacobienne.

Nous pouvons également montrer que les intégrales volumiques des rotationnels de fonctions de forme dans l'espace réel Ω et dans l'espace de référence Δ sont liées par la relation suivante :

$$\int_{\Omega} \nabla_x \times \mathbf{W}_x \, dx dy dz = \int_{\Delta} \frac{J^t \nabla_u \times \mathbf{W}_u}{|J|} |J| \, du dv dw \quad (\text{III.47})$$

où J^t désigne la transposée de la matrice jacobienne J .

Ces intégrales sont ensuite calculées numériquement par la méthode de Gauss en prenant un nombre de points d'intégration en adéquation avec le type de l'élément et le degré des fonctions de forme choisis [Sab86].

3 Conclusion

Nous avons présenté, dans ce chapitre, des éléments finis mixtes de $H(\text{rot}, \Omega)$ (à continuité tangentielle exclusive) sur les topologies de référence les plus courantes (triangle, rectangle, tétraèdre, hexaèdre) nécessaires à la MEF. Ces fonctions de base hiérarchiques ne sont pas uniques et chaque auteur peut définir ses propres fonctions pourvu qu'elles soient *conformes* dans $H(\text{rot}, \Omega)$ et qu'elles respectent le principe de complétion des bases des espaces d'approximation. Ces fonctions de base bi- et tri-dimensionnelles ont été construites de manière hiérarchique jusqu'à l'ordre 2 complet permettant ainsi d'utiliser des éléments d'ordres différents dans le même maillage d'un problème afin de réaliser une méthode efficace de raffinement p .

J.L. Coulomb a construit ses fonctions de base en 2D et 3D à partir des éléments finis de Lagrange afin de simplifier la programmation en fortran d'un logiciel déjà basé sur ce type d'élément nodal. Sa démarche originale a été de regrouper les fonctions de forme ayant la même expression mathématique ensemble afin de conserver une définition homogène et symétrique des espaces d'approximation par demi-ordre, ce qui diffère de la définition couramment répandue de Nédélec. Il a également défini des fonctions de forme pour les éléments d'arêtes pyramidaux, ce qui permet de relier au sein d'un même maillage, des éléments d'arêtes hexaédriques, prismatiques et tétraédriques [Cou97].

Par rapport aux éléments finis classiques nodaux, les éléments finis mixtes offrent alors un quadruple avantage [Bos93] :

- Les conditions aux limites sont plus faciles à prendre en compte car, pour approximer une grandeur vectorielle, nous avons à considérer 1 degré de liberté à la fois au lieu de 3 par rapport à la méthode des éléments finis nodaux. Par exemple, la condition de mur électrique est simplement imposée en annulant les degrés de liberté de l'arête et/ou de la facette se trouvant en contact de la surface sur laquelle on désire respecter la condition $\mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$.
- La continuité tangentielle (respectivement normale) est implicitement imposée par le type d'élément d'arête (respectivement de facette) choisi. Les modes parasites, que l'on voit apparaître avec la méthode des éléments finis nodaux classique (sans ajout des méthodes de pénalité [Rah84], ou de réduction [Web88], ou des multiplieurs de Lagrange [Zie71]), disparaissent donc car la condition de divergence nulle est naturellement forcée, soit par le type d'éléments finis mixtes employé, soit par l'expression de la formulation utilisée.
- A maillage égal, la précision est meilleure.
- Le conditionnement de la matrice finale est de meilleure qualité.

Les éléments finis mixtes constituent donc une première étape importante dans le développement d'un code de calcul voulant se diriger vers les techniques de raffinement p . La seconde étape serait maintenant d'implémenter un estimateur d'erreur *a posteriori* afin d'adapter automatiquement l'ordre des fonctions de forme aux exigences de précision et de temps de l'utilisateur. Nous pouvons citer quelques travaux sur les méthodes de raffinement hp (qui couplent les méthodes h et p) qui sont clairement les méthodes les plus performantes mais les plus difficiles à mettre en œuvre [Gia94, Tan94, Zho95, Rem96]. Elles procèdent généralement d'un raffinement h suivi d'une augmentation globale de l'ordre p des fonctions de base des espaces d'approximation, ce qui concerne de ce fait tous les éléments du maillage à la fois et utilise de manière indépendante les 2 techniques de raffinement.

Bibliographie du chapitre III

- [Bos88] A. Bossavit
“Whitney forms : a class of finite elements for three-dimensional computations in electromagnetism”
Proc. IEE, vol. 135A, pp. 493–500, 1988.
- [Bos89a] A. Bossavit
“A rationale for edge-elements in 3D fields computations”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 24, no. 1, pp. 74–79, June 1989.
- [Bos89b] A. Bossavit and I. Mayergoyz
“Edge-elements for scattering problems”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 25, no. 4, pp. 2816–2821, July 1989.
- [Bos90] A. Bossavit
“Solving maxwell equations in a closed cavity, and the question of spurious modes”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 26, no. 2, pp. 702–705, March 1990.
- [Bos93] A. Bossavit
Electromagnétisme, en vue de la modélisation
Springer-Verlag, 1993.
- [Che94] K.C. Chellamuthu and N. Ida
“A posteriori element by element local error estimation technique and 2D & 3D adaptative finite element mesh refinement”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 30, no. 5, pp. 3527–3530, 1994.
- [Cou97] J.-L. Coulomb, F.-X. Zgainski and Y. Maréchal
“A pyramidal element to link hexahedral, prismatic and tetrahedral edge finite element”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 33, no. 2, pp. 1362–1365, March 1997.
- [Geu96] C. Geuzaine
Développement d’éléments finis nodaux et d’arêtes hiérarchiques 2D et 3D appliqués au problème des courants induits
Mémoire de fin d’études, Université de Liège, Faculté des Sciences Appliquées, Mai 1996.

- [Gia94] D. Giannacopoulos and S. McFee
“Towards optimal hp adaptation near singularities in finite element electromagnetics”
IEEE Transactions on Magnetism, vol. 30, no. 5, pp. 3523–3526, 1994.
- [Néd80] J.C. Nédélec
Mixed finite elements in \mathbb{R}^3
Numerische mathematik, Springer-Verlag Edition, vol. 35, pp. 315–341, 1980.
- [Néd86] J.C. Nédélec
A new family of mixed finite elements in \mathbb{R}^3
Numerische mathematik, Springer-Verlag Edition, vol. 50, pp. 57–81, 1986.
- [Rah84] B.M.A. Rahman and J.B. Davies
“Penalty function improvement of waveguide solution by finite elements”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 32, pp. 922–928, August 1984.
- [Rav75] P.A. Raviart and J.M. Thomas
“A mixed finite element method for 2nd order elliptic problems”
In Springer, editor, *Proceedings of Mathematical aspects of finite element methods*, vol. 606, December 1975.
- [Rem96] J.-F. Remacle, P. Dular, C. Geuzaine and W. Legros
“Adaptative hp -refinement for finite element computations using nodal and edge elements”
In *The third international conference on electromagnetic field problems & applications proceedings*. Wuhan (China), October 1996.
- [Sab86] J.-C. Sabonnadière and J.-L. Coulomb
La méthode des éléments finis : Du modèle... à la CAO
Traité des nouvelles technologies, Hermes Edition, 1986.
- [Sil90] P.P. Silvester and R.L. Ferrari
Finite elements for electrical engineers
Cambridge Press, 1990.
- [Tou80] G. Touzot and G. Dhatt
Une présentation de la méthode des éléments finis
Maloine, 1980.
- [Tan94] Y.Q. Tang, Y.P. Liang, H.R. Wu, X.L. Meng, S.C. Xu and G.X. Fan
“An adaptative finite element computation of hp -version for magnetic field problems”
IEEE Transactions on Magnetism, vol. 30, no. 5, pp. 3519–3522, 1994.

- [Web88] J.P. Webb
“Efficient generation of divergence-free fields for the finite element analysis of 3D cavity resonances”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 24, pp. 162–165, January 1988.
- [Web93] J.P. Webb and B. Forghani
“Hierarchical scalar and vector tetrahedra”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 29, no. 2, pp. 1495–1498, March 1993.
- [Web99] J.P. Webb
“Hierarchical vector basis functions of arbitrary order for triangular and tetrahedral finite elements”
IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 47, no. 8, pp. 1244–1253, August 1999.
- [Zho95] J.M. Zhou, K.R. Shao and Z. Ren
“*hp*-version adaptive analysis of nonlinear magnetic fields with quadrilaterals”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 31, no. 3, pp. 1745–1748, 1995.
- [Zie71] O.C. Zienkiewicz
The finite element method in engineering science
Mc Graw-Hill, 1971.

Chapitre IV

Présentation des résultats numériques

Sommaire

1	Rappel théorique sur le guide rectangulaire	119
1.1	Guide rectangulaire 2D partiellement rempli de diélectrique . . .	121
1.2	Guide rectangulaire 3D rempli d'air	124
1.2.1	Calcul du coefficient de réflexion pour le mode TE_{10} . .	124
1.2.2	Calcul du coefficient de transmission pour le mode TE_{11}	126
1.3	Guide rectangulaire 3D rempli d'un diélectrique à pertes	128
2	Ligne microruban	129
2.1	Accès 2D de la ligne microruban	129
2.2	Ligne microruban contrôlée optiquement	131
3	Conclusion	133
	Bibliographie du chapitre IV	135

Nous avons regroupé dans ce dernier chapitre les simulations numériques effectuées avec le logiciel *Flux3d*[®] sur un certain nombre de structures hyperfréquences. Ces cas-tests ont permis de valider les formulations faibles 2D et 3D du chapitre II associées à l'utilisation des éléments finis d'arêtes présentés dans le chapitre III. Le calcul des paramètres S a également été testé sur ces structures. La dernière application concerne directement le cas du contrôle optique et met en œuvre le modèle simplifié de la charge photoinduite développé dans le chapitre I.

1 Rappel théorique sur le guide rectangulaire

Nous allons maintenant présenter des cas simples de résolutions 2D et 3D avec un guide rectangulaire et une ligne microruban afin de confronter les résultats numériques des formulations faibles établies dans le chapitre II avec les résultats analytiques connus.

Afin de valider notre formulation, nous avons simulé la propagation d'une onde hyperfréquence dans un guide rectangulaire dont les caractéristiques physiques sont données sur la figure IV.1.

Les plans conducteurs de ce guide d'onde sont considérés comme des murs électriques, la source 2D excitatrice du mode désiré est placée en $z = 0$ et un circuit ouvert est simulé en bout de guide en $z = L$ en n'imposant aucune contrainte surfacique dessus.

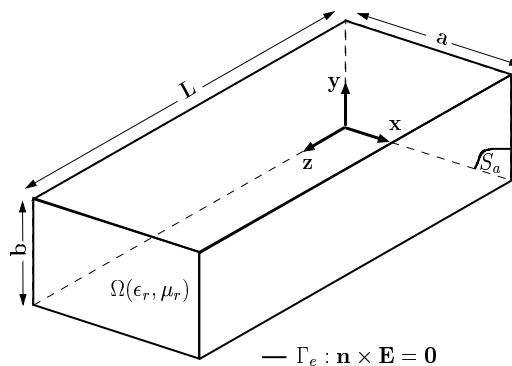


Figure IV.1 : Caractéristiques physiques du guide rectangulaire

Ce guide d'onde présente l'avantage de donner des solutions analytiques simples que nous pouvons déduire à partir des équations d'Helmholtz (II.16), des conditions aux limites et en séparant les variations en x , y et z .

Nous allons nous intéresser ici uniquement à la propagation du mode TE ($E_z = 0$), les équations pour le mode TM s'obtenant de manière analogue.

Reprenons l'équation de propagation de Helmholtz (II.16b) sans second membre (support volumique) pour le champ magnétique \mathbf{H} :

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0 \quad (\text{IV.1})$$

Cherchons maintenant \mathbf{H} de la forme $[\mathbf{H}_t(x, y) + H_z(x, y)\mathbf{u}_z] \exp(-\gamma z)$ en séparant la

variation longitudinale vers les z positifs, des variations transversales en (x, y) et se plaçant dans un repère cartésien $(0xyz)$.

L'équation (IV.1) projetée sur l'axe \mathbf{u}_z devient :

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} + (k^2 + \gamma^2)H_z = 0 \quad (\text{IV.2})$$

Posons alors le nombre d'onde de coupure k_c tel que :

$$k_c^2 = k^2 + \gamma^2 \quad (\text{IV.3})$$

Dans le cas où le système est sans pertes ($\gamma = j\beta$), la propagation existe lorsque $\gamma^2 < 0$. Si on définit $\lambda_c = 2\pi/k_c$, l'onde se propagera alors si on a $\lambda < \lambda_c$.

L'équation (IV.2) précédente devient :

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda_c}\right)^2 H_z = 0 \quad (\text{IV.4})$$

Suivant la méthode de séparation des variables, il existe des solutions de la forme :

$$H_z = H_1(k_1 x)H_2(k_2 y) \quad (\text{IV.5a})$$

$$\text{avec } k_1^2 + k_2^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda_c}\right)^2 \quad (\text{IV.5b})$$

où H_1 et H_2 désignent des fonctions harmoniques quelconques, combinaisons linéaires de $\exp(j)$ et $\exp(-j)$, que l'on précisera grâce aux conditions limites.

Les composantes transversales \mathbf{E}_t et \mathbf{H}_t sont alors obtenues en fonction de la composante longitudinale H_z qui est dite génératrice, grâce aux formules suivantes que l'on peut déduire des équations de Maxwell [Vas85] :

$$\mathbf{H}_t = -\frac{\gamma}{k_c^2} \nabla_t H_z - \frac{j\omega\epsilon_0\epsilon_r}{k_c^2} \mathbf{u}_z \times \nabla_t E_z \quad (\text{IV.6a})$$

$$\mathbf{E}_t = -\frac{\gamma}{k_c^2} \nabla_t E_z + \frac{j\omega\mu_0\mu_r}{k_c^2} \mathbf{u}_z \times \nabla_t H_z \quad (\text{IV.6b})$$

où ∇_t désigne la restriction de l'opérateur gradient ∇ aux composantes transversales.

Pour le mode TE ($E_z = 0$, $H_z \neq 0$), nous pouvons déduire le champ \mathbf{E}_t en considérant

les conditions aux limites sur les conducteurs parfaits ($E_x = 0, \forall y \in [0, b]$ et $E_y = 0, \forall x \in [0, a]$) :

$$E_x = E_{0x} \cos\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \exp(-j\beta z) \quad (\text{IV.7a})$$

$$E_y = E_{0y} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \exp(-j\beta z) \quad (\text{IV.7b})$$

$$E_z = 0 \quad (\text{IV.7c})$$

- La composante longitudinale du champ magnétique étant :

$$H_z = H_{0z} \cos\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \exp(-j\beta z) \quad (\text{IV.8})$$

- La longueur d'onde de coupure λ_{cmn} du mode mn étant déduite de l'équation (IV.5b) :

$$\lambda_{cmn} = \left[\left(\frac{m}{2a}\right)^2 + \left(\frac{n}{2b}\right)^2 \right]^{-1/2} \quad (\text{IV.9})$$

Nous pourrions calculer les premières fréquences de coupure $f_{cmn} = c/(\sqrt{\epsilon_r}\lambda_{cmn})$ du système qui ne dépendent que des caractéristiques physiques $a \times b$ du guide rectangulaire, et de la permittivité ϵ_r du milieu.

Après ces quelques rappels théoriques sur le guide rectangulaire, nous allons présenter nos résultats de simulation numérique 2D et 3D sur quelques cas-tests.

1.1 Guide rectangulaire 2D partiellement rempli de diélectrique

Afin de valider la formulation faible du problème 2D aux valeurs propres (II.27) et sa résolution, nous allons utiliser le cas-test du guide rectangulaire partiellement rempli de diélectrique, cas qui est largement répandu dans la littérature scientifique pour effectuer des comparaisons analytiques et numériques [Han84, Kos85, Hay86, Ang87, Sve89, Bar93, Dil94, Sav02].

La figure IV.2 montre le guide rectangulaire $2d \times d$ rempli à moitié d'un diélectrique de permittivité $\epsilon_r = 2, 25$ (milieu noté 1) et de l'autre moitié d'air (milieu noté 2).

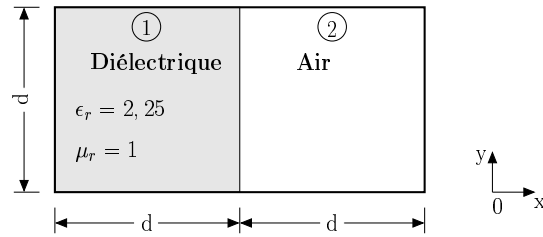


Figure IV.2 : *Caractéristiques physiques du guide rectangulaire partiellement rempli de diélectrique*

La constante de propagation γ est la même dans les 2 milieux et est imaginaire pure (quand la propagation est possible) car les milieux sont sans pertes ($\gamma = j\beta$). Les équations de dispersion et transcendantes des modes TE_{m0} étudiés ici, sont obtenues par les équations de Maxwell et les conditions de continuité [Col60] :

$$k_{x1}^2 = \epsilon_r k_0^2 - \beta^2 \quad (\text{IV.10a})$$

$$k_{x2}^2 = k_0^2 - \beta^2 \quad (\text{IV.10b})$$

$$k_{x1} \tan(k_{x2}d) = -k_{x2} \tan(k_{x1}d) \quad (\text{IV.10c})$$

où $k_0 = \omega/c_0$ est le nombre d'onde dans le vide, k_{xi} le nombre d'onde caractérisant la variation suivant l'axe x , dans le milieu $i = \{1, 2\}$.

Ce système d'équations peut se résoudre graphiquement ou numériquement en posant le changement de variables $k_{x1} = R \cosh \theta$ et $k_{x2} = R \sinh \theta$ avec $R = k_0 \sqrt{\epsilon_r - 1}$.

Nous pouvons calculer les fréquences de coupure de cette structure pour les modes TE_{m0} en annulant la constante de phase ($\beta = 0$) dans les équations (IV.10a) et (IV.10b) et en reportant les expressions des nombres d'onde caractéristiques k_{xi} dans l'équation (IV.10c).

On obtient alors l'équation :

$$\tan(\sqrt{\epsilon_r} k_{x0} d) + \sqrt{\epsilon_r} \tan(k_{x0} d) = 0 \quad (\text{IV.11})$$

Pour une largeur $d = 4 \text{ mm}$ du guide, on obtient graphiquement par l'étude des intersections des 2 tangentes, la première fréquence de coupure $f_{c10} = 14,46 \text{ GHz}$ correspondant au mode fondamental TE_{10} et la deuxième fréquence de coupure $f_{c20} = 30,92 \text{ GHz}$ qui correspond au mode TE_{20} .

Nous allons, par exemple, nous placer à une fréquence de travail $f_0 = 18 \text{ GHz}$ telle que $f_{c20} > f_0 > f_{c10}$ pour ne considérer que la propagation du mode fondamental et résoudre le système d'équations (IV.10). Nous obtenons alors une valeur théorique pour la constante de phase normalisée $\beta^{th}/k_0 = 0,7923814$ pour $k_0 d = 1,5$.

Si nous maillons cette structure avec 60 éléments triangulaires d'ordre 2 incomplet (720 équations, 768 variables), nous obtenons la constante de phase normalisée $\beta^{t3/2}/k_0 = 0,791770144$, ce qui fait une erreur relative de 0,08%. Il est possible d'améliorer ce résultat en maillant la structure avec 32 éléments rectangulaires d'ordre 2 incomplet (512 équations, 560 variables). Ce maillage donne en effet une erreur relative de 0,06% avec moins d'équations à résoudre.

Nous pouvons résumer nos essais de simulation sur cette structure 2D avec nos 2 types de maillage en augmentant l'ordre des éléments :

forme \ ordre	0,5	1	1,5	2
triangle	1,4	1,3	0,08	0,004
rectangle	1,5	0,9	0,06	0,0003

Tableau IV.1 : Taux d'erreur relative $|\beta^{simu} - \beta^{th}|/\beta^{th}$ sur la constante de phase [%]

Nous constatons que, globalement, les simulations avec des éléments d'arête rectangulaires (à part pour l'ordre 0,5) donnent de meilleurs résultats qu'avec les éléments d'arête triangulaires. Cette constatation sur la précision des résultats en fonction de la géométrie des éléments de maillage se retrouve également avec les éléments d'arête hexaédriques et tétraédriques lors de nos simulations 3D.

De plus, l'augmentation p de l'ordre des polynômes d'interpolation fait bien accroître la précision des résultats.

Après s'être assuré de la précision du calcul de la source en 2D, nous allons maintenant passer à l'étude 3D du guide rectangulaire.

1.2 Guide rectangulaire 3D rempli d'air

Reprenons le guide rectangulaire $a \times b \times L$ de la figure IV.1 que l'on remplit entièrement d'air. Nous pouvons calculer à l'aide de la relation (IV.9), les premières fréquences de coupure pour le guide rectangulaire de dimensions $a = 4 \text{ mm}$, $b = 2 \text{ mm}$ et de permittivité $\epsilon_r = 1$:

m \ n	0	1	2
0		75	150
1	37,5	83,85	154,6
2	75	106,1	167,7

Tableau IV.2 : Fréquences de coupure f_{cmn} [GHz] pour le guide rectangulaire rempli d'air

1.2.1 Calcul du coefficient de réflexion pour le mode TE_{10}

Si nous simulons le guide rempli d'air à la fréquence $f_0 = 40 \text{ GHz}$ à l'aide de la formulation E (II.19), seul le mode fondamental TE_{10} va pouvoir se propager car $f > f_{c10}$ et $f < f_{cij}, \forall (i, j) \neq (1, 0)$.

Nous vérifions alors que la surface $|E(x, z)|$ obtenue dans le plan médian horizontal $y = b/2$ et la surface $|E(y, z)|$ obtenue dans le plan médian vertical $x = a/2$ sont en accord avec la théorie (cf. figures IV.3 et IV.4).

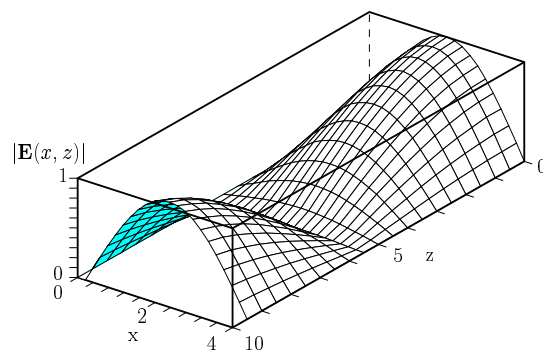


Figure IV.3 : Propagation du mode TE_{10} dans le plan $y = 1 \text{ mm}$

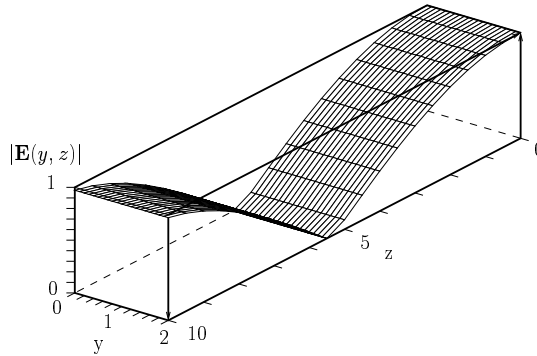


Figure IV.4 : Propagation du mode TE_{10} dans le plan $x = 2 \text{ mm}$

Dans le cas d'un guide d'onde rectangulaire, les conditions aux limites sont simples à imposer ; les parois du guide étant considérées comme des conducteurs électriques parfaits, il suffit d'y faire respecter la condition de mur électrique $\mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$, c'est-à-dire d'annuler tous les degrés de liberté se trouvant sur les éléments surfaciques correspondants.

Le plan d'accès S_a dans lequel s'effectue le calcul des valeurs propres se situe en $z = 0$ et l'onde qui se propage vers les z croissants, voit en $z = L = 10 \text{ mm}$ un circuit ouvert c'est-à-dire un coefficient de réflexion égal à 1 en module.

Le calcul du coefficient de réflexion théorique s'effectue simplement : $S_{11}^{th} = \exp(-2j\beta L) = 0,899 + j 0,437$.

La structure étant sans pertes ($|S_{11}| = 1$), il est intéressant de comparer la phase du coefficient de réflexion théorique avec celle du calcul numérique dans le tableau IV.3 :

Résultat \ Grandeur	$\angle S_{11}$	λ_g
Théorique	$25,93^\circ$	$21,55 \text{ mm}$
Numérique	$26,69^\circ$	$21,60 \text{ mm}$
Erreur	$2,9\%$	$0,2\%$

Tableau IV.3 : Comparaison théorie/simulation pour le mode TE_{10}

1.2.2 Calcul du coefficient de transmission pour le mode TE_{11}

Pour $f_0 = 100 \text{ GHz}$, nous pouvons expliciter le calcul des paramètres S de la structure dans laquelle, d'un point de vue numérique, se propage uniquement le mode TE_{11} . Comme il s'agit du calcul du coefficient de transmission, il faut définir 2 accès dans la structure et procéder à 2 résolutions élémentaires en excitant à tour de rôle chacun de ces accès.

Récrivons le système (II.36) pour une structure à deux accès ($n = 2$, $S_a = S_1 \cup S_2$) et dans laquelle seul le mode qui a la plus grande constante de phase β se propagerait :

$$\begin{cases} -j\omega\mu_0 \left[(a_1 - b_1) \int_{S_1} \mathbf{J}_{e1}^* \cdot \Phi^1 dS + (a_2 - b_2) \int_{S_1} \mathbf{J}_{e1}^* \cdot \Phi^2 dS \right] &= (a_1 + b_1) \int_{S_1} \mathbf{J}_{e1}^* \cdot \mathbf{E}_t^1 dS \\ -j\omega\mu_0 \left[(a_1 - b_1) \int_{S_2} \mathbf{J}_{e2}^* \cdot \Phi^1 dS + (a_2 - b_2) \int_{S_2} \mathbf{J}_{e2}^* \cdot \Phi^2 dS \right] &= (a_2 + b_2) \int_{S_2} \mathbf{J}_{e2}^* \cdot \mathbf{E}_t^2 dS \end{cases} \quad (\text{IV.12})$$

où Φ^i correspond à la solution i de l'équation élémentaire (II.33) lorsque l'accès S_i est excité, $\mathbf{J}_{ei}^* = \mathbf{n} \times \mathbf{H}_t^{i*}$ au conjugué du courant électrique source calculé dans l'accès S_i , \mathbf{E}_t^i au champ électrique transverse dans l'accès S_i .

Si on note les termes homogènes à des puissances $J_{ij} = \int_{S_i} \mathbf{J}_{ei}^* \cdot \Phi^j dS$ et $J_i = \int_{S_i} \mathbf{J}_{ei}^* \cdot \mathbf{E}_t^i dS$, on obtient, lorsqu'on factorise les équations précédentes par a_i et b_i , le système matriciel suivant :

$$\underbrace{\begin{bmatrix} J_1 + J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_2 + J_{22} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}}_B = \underbrace{\begin{bmatrix} J_{11} - J_1 & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} - J_2 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}}_A \quad (\text{IV.13})$$

d'où l'on extrait facilement la matrice S définie par la relation $B = S.A$ en inversant la matrice de gauche et en la multipliant par celle de droite ($S = G^{-1}.D$).

On obtient, par simulation numérique, la propagation du mode TE_{11} dans les plans médians horizontaux et verticaux, suivant les figures IV.5 et IV.6.

Le calcul du coefficient de transmission théorique s'effectue aussi simplement : $S_{21}^{th} = \exp(-j\beta L) = 0,84 - j 0,54$.

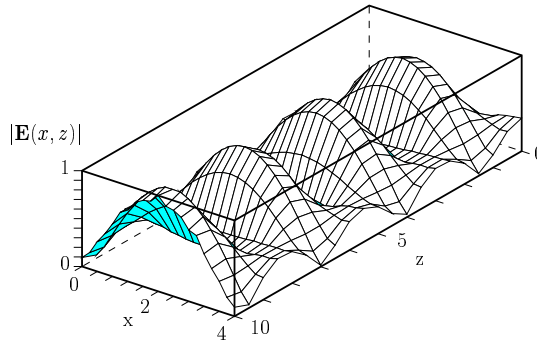


Figure IV.5 : Propagation du mode TE_{11} dans le plan $y = 1 \text{ mm}$

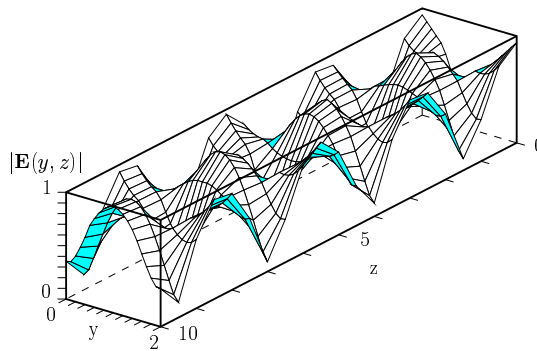


Figure IV.6 : Propagation du mode TE_{11} dans le plan $x = 2 \text{ mm}$

Résultat \ Grandeur	$\angle S_{21}$	λ_g
Théorique	$-32,41^\circ$	$3,24 \text{ mm}$
Numérique	$-33,39^\circ$	$3,23 \text{ mm}$
Erreur	3%	0,3%

Tableau IV.4 : Comparaison théorie/simulation pour le mode TE_{11}

1.3 Guide rectangulaire 3D rempli d'un diélectrique à pertes

Nous allons maintenant nous intéresser à ce même guide rectangulaire mais rempli d'un diélectrique à pertes ($\epsilon_r = \epsilon_c$).

Ce diélectrique à pertes est caractérisé par une tangente de pertes $\tan \delta = \epsilon_r'' / \epsilon_r' = 0,01$ et la partie réelle de sa permittivité $\epsilon_r' = 11,7$. On excite alors le mode TE_{10} avec une fréquence $f_0 = 12 \text{ GHz}$ et on impose sur l'accès S_a le même courant source 2D que celui calculé avec une structure sans pertes. En effet, si on considère les pertes comme faibles, on peut imposer, comme source à la structure 3D avec pertes, le courant source d'un accès correspondant à un système 2D aux valeurs propres en négligeant les pertes.

Aussi pouvons-nous calculer analytiquement la constante de propagation par la formule déduite de l'équation (IV.3) :

$$\gamma = 2\pi \left[\frac{1}{\lambda_{c10}^2} - \frac{\epsilon_c}{\lambda_0^2} \right]^{1/2} \quad (\text{IV.14})$$

ce qui donne avec $\lambda_{c10} = 8 \text{ mm}$ et $\epsilon_c = 11,7 - j 0,117$, une constante de propagation théorique : $\gamma^{th} = 10,5 + j 349,7$.

On peut alors en déduire le coefficient de réflexion théorique : $S_{11}^{th} = \exp(-2\gamma^{th}l) = 0,61 - j 0,53$.

La simulation avec 512 éléments hexaédriques d'ordre 1 incomplet (voir chapitre III pour la définition des éléments) donne comme résultat numérique $S_{11}^{num} = 0,57 - j 0,48$, ce qui fait une erreur relative de 7,7 % sur le module et 1,1 % sur la phase.

Ces résultats s'améliorent naturellement en maillant la structure plus finement (méthode h) ou en augmentant l'ordre des polynômes des vecteurs de base (méthode p). Nous constatons également que l'approximation du calcul aux valeurs propres en négligeant les pertes dans les accès 2D est valable dans la structure 3D avec pertes ; le mode correct s'établit rapidement dans la structure 3D lorsque les pertes y sont faibles. Par contre, le calcul des paramètres S nécessitant des intégrales surfaciques sur les accès sources donne de moins bons résultats en module.

Ce problème n'est d'ailleurs pas pénalisant pour notre application particulière au contrôle optique car les pertes photoinduites sont situées volumiquement en bout de ligne, loin des accès dans lesquels s'effectue le calcul approché du problème 2D aux valeurs propres et des paramètres S .

2 Ligne microruban

2.1 Accès 2D de la ligne microruban

Nous allons maintenant passer à l'étude de notre ligne microruban et vérifier que les caractéristiques 2D données par les formules empiriques de Hammerstad (I.4) et (I.5), correspondent bien avec les calculs numériques de ϵ_{eff} et Z_c .

Les caractéristiques 2D de la ligne microruban simulée sont présentées, dans un plan de coupe perpendiculaire à l'axe de propagation (z), sur la figure IV.7. La ligne microruban a une largeur $w = 377 \mu m$, une épaisseur t nulle. Le substrat (1) possède une hauteur $h = 500 \mu m$ et une permittivité $\epsilon_{r1} = 11,7$, le milieu (2) étant de l'air ($\epsilon_{r2} = 1$).

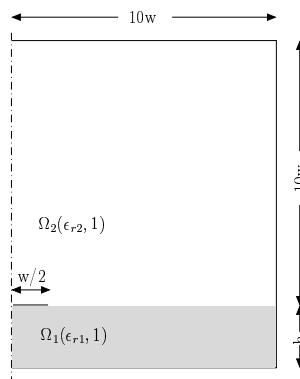


Figure IV.7 : Plan de coupe de la ligne microruban simulée

Pour raison de symétrie et de gain en temps calcul, nous n'avons simulé qu'une demi-

structure. Afin de borner le domaine maillé, nous avons placé des murs électriques suffisamment éloignés ($10w$) des phénomènes électromagnétiques se produisant au voisinage de la ligne microruban.

Si on reprend la définition de la permittivité effective ϵ_{eff} qui correspond au milieu homogène équivalent donnant la même vitesse de phase que dans le milieu inhomogène composé des milieux 1 et 2, on obtient par équipartition des énergies des ondes TEM et quasi-TEM [Aub85], la relation :

$$\epsilon_{eff} = \frac{\int_{S_1+S_2} \epsilon_i |E_i|^2 dS}{\int_{S_1+S_2} |E_i|^2 dS} \quad (\text{IV.15})$$

où S_i correspond à la surface du milieu $\Omega_i(\epsilon_i, \mu_0)$.

Les simulations donnent alors comme résultat $\epsilon_{eff}^{num} = 7,73$, ce qui correspond à une erreur relative de 0,9% si on compare ce résultat numérique avec celui empirique de Hammerstadt donnée par les équations (I.4).

Nous pouvons également calculer l'impédance caractéristique Z_c à l'aide de la vitesse de phase $v_{\phi 0}$ et de la capacité par unité de longueur C [Mar90] :

$$Z_c = \frac{1}{v_{\phi 0} C} \quad (\text{IV.16})$$

La vitesse de phase étant par définition :

$$v_{\phi 0} = \frac{\omega}{\beta} = \frac{c_0}{\sqrt{\epsilon_{eff}}} \quad (\text{IV.17})$$

et la capacité C se déduit à l'aide de l'expression de l'énergie électrique :

$$\frac{1}{2} C V^2 = \frac{1}{2} \int_{S_1+S_2} \epsilon_{eff} |E_i|^2 dS \quad (\text{IV.18})$$

où V représente la différence de potentiel entre la ligne microruban et le plan de masse, qui est calculée par la circulation du champ \mathbf{E} .

On obtient alors l'expression de Z_c :

$$Z_c = \frac{\sqrt{\epsilon_{eff}} V^2}{c_0 \int_{S_1+S_2} \epsilon_{eff} |E_i|^2 dS} \quad (\text{IV.19})$$

Les simulations donnent alors comme résultat numérique $Z_c^{num} = 52,3 \Omega$, ce qui correspond à une erreur relative de 1,4% avec le résultat empirique de Hammerstadt (I.5).

2.2 Ligne microruban contrôlée optiquement

Nous allons maintenant simuler la ligne microruban ouverte contrôlée optiquement. Le modèle simplifié de la charge photoinduite a été développé et justifié dans le chapitre I.

Nous avons résumé sur la figure IV.8 les paramètres géométriques utilisés pour la simulation.

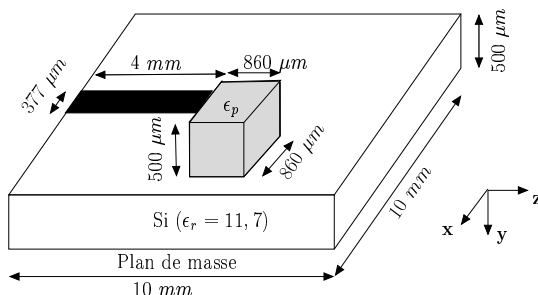


Figure IV.8 : Paramètres géométriques de la ligne microruban contrôlée optiquement

Pour les besoins de la simulation numérique et afin de ne pas travailler avec des dimensions géométriques disproportionnées suivant la direction de propagation (z), nous avons choisi de réduire la longueur de la ligne réelle $L = 16 \text{ mm}$ à 4 mm . Ce choix permet alors, sans restreindre la généralité du problème, d'obtenir des simulations numériques moins coûteuses en temps et en place mémoire et revient simplement à déplacer le plan de référence de 12 mm pour le calcul du coefficient de réflexion.

La ligne microruban et le plan de masse sont assimilés à des conducteurs électriques parfaits d'épaisseur nulle ; on y a donc imposé une condition de mur électrique. Le substrat est un diélectrique sans pertes d'épaisseur $h = 500 \mu\text{m}$ et de permittivité $\epsilon_r = 11,7$. L'injection de photons dans le semiconducteur est modélisée en 3D par une zone de permittivité plasma ϵ_p équivalente dont la valeur varie en fonction de la profondeur y et du rayon r dans

le semiconducteur. Cette zone est assimilée à un pavé de hauteur $h = 500 \mu m$ ayant une section carré de $860 \mu m$ de côté, plutôt qu'à un cylindre, afin d'obtenir un raccordement correct du maillage.

Enfin, cette ligne microruban est insérée dans une boîte métallique (non représentée sur la figure IV.8) afin de borner le domaine d'air maillé. Cette boîte possède les mêmes dimensions que le cadre englobant la structure 2D précédente qui a été extrudé suivant la direction de propagation.

Nous allons nous placer dans le cas du régime de très forte injection ($\Delta n = \Delta p \gg n_0, p_0$) où la polarisation de la ligne n'influe pas sur la longueur de diffusion ambipolaire $L_a(FI)$. Faisons alors l'application numérique dans l'expression de la permittivité plasma relative (I.19) pour une fréquence fixée f_0 [GHz] de la ligne ouverte :

$$\epsilon_p(x, y, z) = 1 - \left(7,397 \cdot 10^{-16} + j \frac{6,039 \cdot 10^{-13}}{f_0 [GHz]} \right) \Delta n(x, y, z) [cm^{-3}] \quad (IV.20)$$

où $\Delta n(x, y, z) [cm^{-3}]$ est donnée par l'équation (I.38) en régime de très forte injection que l'on peut extrapoler suivant les directions (x) et (z) :

$$\Delta n(x, y, z) = 1,369 \cdot 10^{17} \exp\left(-\frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{12}\right) \exp\left(-\frac{y}{83}\right) \quad (IV.21)$$

si les variations en (x, y, z) sont exprimées en [μm] et la concentration des porteurs en excès en [cm^{-3}].

On obtient alors, pour la fréquence $f_0 = 5 GHz$ de la ligne ouverte, la variation spatiale de la permittivité plasma relative :

$$\epsilon_p(x, y, z) = 11,7 - (94 + 15577j) \exp\left(-\frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{12}\right) \exp\left(-\frac{y}{83}\right) \quad (IV.22)$$

Nous avons simulé cette structure avec un maillage fin hexaédrique. En l'absence d'éclairement, la ligne étant sans pertes, le module du coefficient de réflexion vaut 1. Lorsque nous nous plaçons ensuite dans le régime de très forte injection, la charge photoinduite représentée par le pavé de permittivité plasma équivalente absorbe l'onde hyperfréquence incidente et le calcul numérique du module du coefficient de réflexion donne $|S_{11}| = 1,2 \cdot 10^{-2}$, ce qui correspond à des pertes de 19 dB. Ces pertes sont comparables aux résultats expérimentaux. Ce premier résultat numérique n'est malheureusement que qualitatif car il dépend fortement

des paramètres choisis (durée de vie des porteurs, dopage, niveau d'injection) et ajustés pour le calcul simplifié de la permittivité plasma équivalente.

3 Conclusion

Nous avons validé dans ce chapitre les formulations faibles 2D et 3D associées aux éléments finis d'arête en comparant les résultats des simulations numériques avec les résultats analytiques connus dans des guides rectangulaires (avec ou sans pertes, partiellement rempli ou non) dans un premier temps, puis dans la ligne microruban dans un second temps. Ces simulations ont également permis de valider le calcul des paramètres S dans des accès en réflexion ou en transmission mais ne comportant pas de pertes ou ayant des pertes faibles. Le calcul aux valeurs propres ne permet pas pour le moment de traiter le cas général complexe dans des accès à pertes non négligeables.

Bibliographie du chapitre IV

- [Ang87] T. Angkaew, M. Matsuhara, and N. Kumagai
“Finite-element analysis of waveguide modes : a novel approach that eliminates spurious modes”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 35, no. 2, pp. 117–123, February 1987.
- [Aub85] M. Aubourg
Méthode des éléments finis appliquée à des problèmes de propagation d'ondes électromagnétiques guidées
Thèse de doctorat, Université de Limoges, Juillet 1985.
- [Bar93] I. Bardi, O. Biro, K. Preis, G. Vrisk, and K.R. Richter
“Nodal and edge element analysis of inhomogeneously loaded waveguides”
IEEE Transactions on Magnetics, vol. 29, no. 2, pp. 1466–1469, March 1993.
- [Col60] R.E. Collin
Field Theory of guided waves
McGraw-Hill, 1960.
- [Dil94] B.M. Dillon and J.P. Webb
“A comparison of formulations for the vector finite element analysis of waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 42, no. 2, pp. 308–316, February 1994.
- [Han84] M. Hano
“Finite-element analysis of dielectric-loaded waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 32, no. 10, pp. 1275–1279, October 1984.
- [Hay86] K. Hayata, M. Koshihara, M. Eguchi, and M. Suzuki
“Vectorial finite-element method without any spurious solutions for dielectric waveguiding using transverse magnetic-field component”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 34, no. 11, pp. 1120–1124, November 1986.

- [Kos85] M. Koshiha, K. Hayata, and M. Suzuki
“Improved finite-element formulation in terms of the magnetic field vector for dielectric waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 33, no. 3, pp. 227–233, March 1985.
- [Mar90] E. Marouby
Analyse d’éléments de connectique microondes par la méthode des éléments finis
Thèse de doctorat, Université de Limoges, Avril 1990.
- [Sav02] P. Savi, I-L Gheorma, and R.D. Graglia
“Full-wave high-order fem model for lossy anisotropic waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 50, no. 2, pp. 495–500, February 2002.
- [Sve89] J.A.M. Svedin
“A numerically efficient finite-element formulation for the general waveguide problem without spurious modes”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 37, no. 11, pp. 1708–1715, November 1989.
- [Vas85] C. Vassalo
Théorie des guides d’ondes électromagnétiques
Eyrolles, 1985.

Conclusion générale

LE fort développement des composants microondes contrôlés optiquement ces dix dernières années a contribué à créer un besoin spécifique d'outils de simulation, capables de décrire différents aspects physiques en même temps. Plus précisément, il s'agit ici, de pouvoir simuler conjointement la répartition du champ électromagnétique source dans les accès, la propagation de l'onde hyperfréquence résultante, l'injection optique de porteurs dans le substrat semiconducteur et l'interaction optomicroonde. D'excellents logiciels commerciaux capables de simuler l'une ou l'autre des physiques mises en jeu dans le contrôle optique existent, mais les simulations s'effectuent encore de façon séparée ou quasi-séparée et ne permettaient pas, en tout cas il y a trois ans, de faire une étude globale de composants hyperfréquences contrôlés optiquement. Ce travail de thèse avait alors pour but de pouvoir modéliser avec le même logiciel des structures hyperfréquences passives contrôlées optiquement afin de comparer les résultats numériques avec ceux issus de l'expérimentation.

Nous avons commencé par étudier le comportement de la charge photoinduite à partir de résultats expérimentaux. Pour cela, nous avons imaginé un nouveau dispositif de positionnement du faisceau émis par la diode laser par rapport à l'extrémité de la ligne microruban et nous avons réfléchi au problème de la reproductibilité de l'expérience. Cette charge photoinduite est créée dans le semiconducteur par l'injection optique puis la diffusion des porteurs. Nous avons apparenté le milieu ainsi créé à un plasma dont la permittivité équivalente varie en fonction de nombreux paramètres que l'on peut plus ou moins bien déterminer : la puissance lumineuse, le niveau du dopage du semiconducteur, la durée de vie des porteurs, les états de surface... La permittivité équivalente de ce plasma variant donc en fonction de la concentration des porteurs photoinduits, nous avons choisi de décrire cette variation par un modèle de diffusion ambipolaire.

Nous sommes ensuite partis d'un logiciel éléments finis dédié aux applications basses fréquences et nous l'avons étendu aux applications hautes fréquences en développant :

- une formulation 3D prenant en compte les courants de déplacement,
- une formulation 2D traduisant un problème aux valeurs propres et permettant de réaliser un solveur de modes précis,
- un calcul de paramètres S pour un système quelconque à N accès sans pertes.

Nous avons validé ces trois étapes de mise à niveau du logiciel par des simulations numériques sur des structures hyperfréquences simples dont on connaît la réponse analytique. L'étude des variations des différents paramètres effectuée lors de précédents travaux de thèse sur le contrôle optique à l'IMEP confirme le modèle développé de la charge photoinduite ainsi que son comportement hyperfréquence équivalent. Il existe encore des incertitudes concernant la détermination précise des valeurs réelles de ces paramètres pour le silicium que nous avons utilisé dans nos expérimentations. Nous avons donc pris des valeurs moyennes pour ces paramètres afin d'effectuer nos premières simulations numériques pour une structure microonde simple contrôlée optiquement, en se plaçant dans le cas particulier de la très forte injection. Ces premiers résultats numériques sont encourageants.

Perspectives

Le modèle développé de la charge photoinduite basé sur l'équation de diffusion ambipolaire dans un milieu que l'on peut assimiler à un plasma a été validé lors de précédents travaux de recherche à l'IMEP et à l'UCL. Il faudrait poursuivre les simulations en faisant varier les différents paramètres, afin de confronter les différents résultats numériques avec les résultats expérimentaux et affiner ainsi notre modèle.

Pour l'instant, le problème généralisé aux valeurs propres ne peut se résoudre que pour des accès sans pertes, linéaires et isotropes, par la méthode du sous-espace. L'algorithme de calcul du problème généralisé aux valeurs propres pourrait être complété en l'étendant aux milieux à pertes, mais toujours en prenant en compte le fait que la deuxième matrice de couplage est symétrique mais pas définie positive. Nous pouvons citer, à ce sujet, les travaux de J-F. Lee [Lee94] proposant une méthode de Lanczos modifiée par un changement de variables sur les composantes transversales du champ, ou encore les travaux de P. Savi [Sav02] pour résoudre les problèmes de propagation guidée avec pertes et anisotropie. Il existe également de nombreux sites internet mettant à disposition libre ou payante, des routines en C ou Fortran pour la résolution du problème aux valeurs propres [Nag, Eis]. Les ouvrages de F. Chatelin [Cha88], M. Sibony [Sib84], N. Gastinel [Gas66], R. Théodor et P. Lascaux [Las86], la thèse de C. Lajaunie [Laj80] ainsi que le *Numerical recipes* [Pre02] sont aussi des références dans le domaine de la résolution numérique de problèmes généralisés aux valeurs propres.

La formulation 3D choisie est classique et met en œuvre toutes les composantes du champ vectoriel inconnu. Elle donne de bons résultats grâce à l'utilisation des éléments finis d'arêtes mais, en contre partie, les matrices assemblées étant moins creuses qu'avec des éléments finis nodaux classiques, il faudrait améliorer l'algorithme actuel de résolution ICCG ou bien opter pour une autre méthode de résolution, afin d'obtenir une convergence numérique plus rapide.

En ce qui concerne la discrétisation par éléments finis dans *Flux3d*[®], les éléments finis d'arêtes ont été développés jusqu'à l'ordre 2 pour les triangles, rectangles, hexaèdres, tétraèdres, prismes et pyramides. Des développements sont actuellement en cours pour réaliser des jauges par arbre pour éviter les systèmes surconditionnés dus à l'utilisation de nos éléments finis d'arêtes. Un axe de recherche intéressant serait également de développer un

mailleur auto-adaptatif en couplant les méthodes h et p .

Enfin, il serait judicieux, dans un premier temps, de ne plus traduire le comportement de l'injection optique d'un point de vue microonde par une permittivité équivalente mais par un courant "optique équivalent". De plus nous n'avons pas traduit dans nos simulations le problème de la charge d'espace lié à l'interaction entre le métal et le semiconducteur. L'idéal serait donc, à plus long terme, de développer une formulation éléments finis décrivant le problème de diffusion ambipolaire et de charge d'espace avec l'équation de Poisson en la couplant avec les formulations hyperfréquences déjà développées.

Bibliographie de la conclusion générale

- [Cha88] F. Chatelin
Valeurs propres de matrices
Masson, 1988.
- [Eis] B.T. Smith
Matrix eigensystem routines—EISPACK guide, <http://www.netlib.org/eispack>
New York, 1976.
- [Gas66] N. Gastinel
Analyse numérique linéaire
Hermann, 1966.
- [Laj80] C. Lajaunie
Problèmes liés à l'utilisation des méthodes d'éléments finis pour le calcul des valeurs propres
Thèse de doctorat, Université scientifique et médicale de Grenoble et INPG, Juin 1980.
- [Las86] P. Lascaux and R. Théodor
Méthodes itératives : Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur
Dunod, vol. 2, 1986.
- [Lee94] J-F Lee
“Finite element analysis of lossy dielectric waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 42, no. 6, pp. 1025–1031, June 1994.
- [Nag] Numerical Algorithm Group Fortran Library
<http://www.nag.co.uk>
Oxford, England.
- [Pre02] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery
Numerical recipes in C. The art of scientific computing
Cambridge University Press, second edition Edition, 2002.
- [Sav02] P. Savi, I-L Gheorma and R.D. Graglia
“Full-wave high-order fem model for lossy anisotropic waveguides”
IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 50, no. 2, pp. 495–500, February 2002.

- [Sib84] M. Sibony and J.-C. Mardon
Analyse numérique : Systèmes linéaires et non linéaires
Hermann, vol. 1, 1984.

Publications de l'auteur sur le sujet

J.-D. Arnould, A. Vilcot and G. Meunier

“Simulation of an optically controlled stub”

In *Microwaves and Optics Interaction Workshop*. Budapest (Hungary), March 2001.

J.-D. Arnould, A. Vilcot and G. Meunier

“Towards a simulation of an optically controlled microwave microstrip line at 10 GHz”

In *The Compumag conference proceedings*. Evian (France), June 2001, publiée sous forme d'un article étendu dans *IEEE Transactions on Magnetics*.

J.-D. Arnould, A. Vilcot and G. Meunier

“Towards a simulation of an optically controlled microwave microstrip line at 10 GHz”

IEEE Transactions on Magnetics, vol. 38, no. 2, pp. 681–684, March 2002.

J.-D. Arnould, A. Vilcot, G. Meunier, J.-L. Coulomb, M. Aubourg and P. Labie

“Edge elements to solve eigenvalue problems applied to high frequency structures”

In *The tenth biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation proceedings*, p. 161. Perugia (Italy), June 2002.

J.-D. Arnould, A. Vilcot, G. Meunier, J.-L. Coulomb and P. Labie

“Hexahedral edge elements for high frequency problem simulation”

In *The sixth international workshop on finite elements for microwave engineering — Antennas, circuits and devices*. Chios (Greece), June 2002.

RÉSUMÉ

La simulation numérique de composants microondes passifs contrôlés optiquement pose le double problème des comportements hyperfréquence et optique du semiconducteur éclairé par un faisceau laser. Les modélisations proposées sont basées sur la méthode des éléments finis qui permet une discrétisation des équations d'ondes et la prise en compte de l'injection optique par une zone de permittivité équivalente. Des formulations bi- et tri-dimensionnelles des problèmes aux valeurs propres et de propagation hyperfréquence sont présentées, ainsi que le couplage optique.

L'essentiel des travaux porte sur la modélisation de l'injection de porteurs dans un substrat semiconducteur soumis à une onde hyperfréquence. Le substrat éclairé se comporte comme un plasma ayant une variation de la concentration des porteurs régie par un modèle simplifié de diffusion ambipolaire. Afin d'éviter l'apparition de phénomènes non physiques liés aux méthodes numériques utilisant les éléments finis nodaux et d'obtenir des résultats précis, nous avons choisi d'utiliser des éléments finis d'arêtes d'ordre supérieur.

Les développements réalisés sont appliqués et vérifiés sur des structures hyperfréquences simples et sur le cas particulier de la ligne microruban ouverte éclairée par un laser de longueur d'onde appropriée et de forte puissance.

TITLE

Contribution to model with the finite element method high frequency optically controlled devices

ABSTRACT

The numerical simulation of optically controlled microwave passive components raises the double problem of the high frequency and optical behaviors of the semiconductor enlightened by a laser beam. Suggested modellings are based on the finite element method which allows a discretization of the wave equations and the taking into account of the optical injection by an equivalent permittivity area. Bi- and three-dimensional formulations of the eigenvalues problem and high frequency propagation are presented, as well as the optical coupling.

The main part of the work concerns the carriers injection modelling in the semiconductor substrate subjected to a high frequency wave. The enlightened substrate behaves like a plasma having a carriers concentration variation governed by a simplified model of ambipolar diffusion. In order to avoid the nonphysical phenomena appearance called spurious modes, related to the numerical methods using the classical nodal finite element method and to obtain accurate results, we choose to use edge finite elements of a higher order.

The carried out developments are applied and checked on simple high frequency structures and on the particular case of the open microstrip line enlightened by a suitable wavelength and strong power laser.

SPÉCIALITÉ

Optique, Optoélectronique et Microondes

MOTS-CLÉS

Contrôle optique, Hyperfréquences, Modélisation numérique, Éléments finis

INTITULÉ ET ADRESSE DU LABORATOIRE

Institut de Microélectronique, Électromagnétisme et Photonique
23, rue des Martyrs - BP257
F-38016 GRENOBLE Cedex 1
FRANCE