



Modélisation multiphysique de structures nanométriques résonantes

Fadhil Mezghani

► To cite this version:

Fadhil Mezghani. Modélisation multiphysique de structures nanométriques résonantes. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université de Technologie de Troyes, 2016. Français. NNT : 2016TROY0026 . tel-03361955v2

HAL Id: tel-03361955

<https://theses.hal.science/tel-03361955v2>

Submitted on 4 Oct 2021

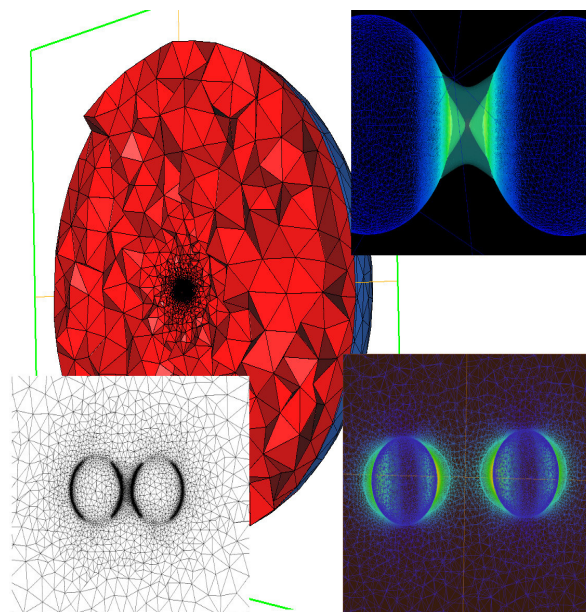
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

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.

Thèse
de doctorat
de l'UTT

Fadhil MEZGHANI

Modélisation multiphysique de structures nanométriques résonantes



Spécialité :

Matériaux, Mécanique, Optique et Nanotechnologie

2016TROY0026

Année 2016

THESE

pour l'obtention du grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITE DE TECHNOLOGIE DE TROYES

Spécialité : MATERIAUX, MECANIQUE, OPTIQUE ET NANOTECHNOLOGIE

présentée et soutenue par

Fadhil MEZGHANI

le 26 septembre 2016

Modélisation multiphysique de structures nanométriques résonantes

JURY

M. T. GHARBI	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Président
M. D. BARCHIESI	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Directeur de thèse
M. H. BOROUCAKI	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Examineur
M. A. CHEROUAT	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Directeur de thèse
M. A. EL HAMI	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Rapporteur
M. M. LAMY DE LA CHAPELLE	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Rapporteur

Remerciements

Le travail de recherche présenté dans ce manuscrit a été effectué à l'Université de Technologie de Troyes (UTT) au sein de l'équipe-projet GAMMA₃ (UTT-INRIA) au pôle ROSAS.

En préambule de ce mémoire, je désire exprimer mes sincères remerciements aux nombreuses personnes qui m'ont apporté leur aide et participé à mener cette thèse à son terme.

En premier lieu, je voudrais remercier tout d'abord Monsieur Dominique BARCHIESI et Monsieur Abel CHEROUAT qui ont dirigé ma thèse. Ils ont toujours été disponibles, à l'écoute de mes nombreuses questions, et se sont toujours intéressés à l'avancement de mes travaux.

Je remercie également Monsieur Marc LAMY DE LA CHAPELLE, Professeur à l'Université Paris 13, et Monsieur Abdelkhalak EL HAMI, Professeur à l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, d'avoir accepté d'être rapporteurs de cette thèse.

Je remercie autant Monsieur Tijani GHARBI, Professeur à l'Université de Franche-Comte et Monsieur Houman BOROUCHAKI, Professeur à l'Université de Technologie de Troyes d'avoir accepté d'examiner ces travaux.

Résumé

La simulation multiphysique de l'interaction rayonnement-matière, des effets thermiques et mécaniques induits dans un matériau nanostructuré à un intérêt notamment lorsqu'il s'agit d'élaborer des capteurs voire de les optimiser. En effet, les effets thermiques peuvent être utilisés pour des applications chimiques ou biologiques et les dilatations mécaniques peuvent influencer sur la durabilité du capteur et sur son efficacité.

A l'échelle nanométrique, les longueurs caractéristiques des effets thermo-électromagnétique-mécaniques ne sont pas du même ordre de grandeur et la simulation éléments finis doit être adaptée à chaque problème avec un contrôle adapté à l'erreur de la solution physique. Une procédure utilisant un remailleur adaptatif 3D Optiform et Comsol Multiphysics permet une relaxation du maillage ou un raffinement adapté afin d'accélérer la résolution (RAM et CPU) et améliorer la solution physique.

Des simulations numériques des nano-objets de formes simples et des nanoantennes pour lesquelles l'exaltation du champ électromagnétique est localisée dans des zones de quelques nanomètres, alors que le gradient de température est beaucoup plus homogène dans le domaine de calcul et les dilatations sont nanométriques sont effectuées.

Mots clés : Physique mathématique ; Nanotechnologie ; Modèles mathématiques ; Thermique ; Électromagnétisme ; Mécanique ; Éléments finis, Méthode des ; Calcul adaptatif.

Abstract

Multiphysics simulation of light-matter interaction, induced temperature and dilation in nanostructures is of interest especially when it comes to develop or optimize sensors.

Indeed, thermal effects can be used for chemical or biological applications, and mechanical dilation can affect the durability of the sensor and its effectiveness. However, the characteristic lengths of electromagnetic fields, temperature and dilation are not of the same magnitude and the mesh used in a finite element multiphysics model must be adapted to each problem. An efficient numerical model for controlling the error in the computational domain is necessary while allowing the relaxation or the refinement of the mesh, in order to decrease the computational time and memory.

The purpose of this thesis is to show that the adaptation loop of the mesh for solving a multiphysics 3D problem using Comsol Multiphysics in OPTIFORM mesher, based on the error estimation of the physical solution, is more efficient than a conventional remeshing process.

The proposed procedure is applied to simulate nano-objects with simple shapes and to nanoantennas for which the confinement of the electromagnetic field is localized on a few nanometers, while the gradient of the temperature is much smoother in the computational domain but leading to nanoscale dilation.

Keywords : Mathematical physics ; Nanoscience ; Mathematical models ; Heat engineering ; Electromagnetis ; Mechanics ; Finite element method ; Adaptive computation.

Table des matières

Introduction générale	1
1 MODÉLISATION MULTIPHYSIQUE	5
1.1 Introduction	6
1.2 Modèle électromagnétique	7
1.3 Modélisation thermique	25
1.4 Modèle mécanique	38
1.5 Conclusion : mode de couplage utilisé	47
2 SIMULATION NUMÉRIQUE	49
2.1 Introduction	50
2.2 Modélisation numérique	50
2.3 Description et approximation des problèmes par la MEF	58
2.4 Tests et validation de l'approche numérique	63
2.5 Génération de maillage	71
2.6 Adaptation de maillage	77
2.7 Conclusion	83
3 CALCUL DE L'AMÉLIORATION DU CHAMP ÉLECTROMAGNÉTIQUE PAR PETIT FACETTE, DE PETIT ANGLE, DE NANOPARTICULE MÉTALLIQUE	85
3.1 Introduction	85
3.2 Formulation du problème électromagnétique pour la méthode des éléments finis	87
3.3 Comparaison des méthodes d'adaptation de maillage et résultats numériques	88
3.4 Étude de l'influence des paramètres de la méthode d'adaptation de maillage	98
3.5 Conclusion	100
4 MÉTHODES D'OPTIMISATION DU PROCESSUS D'ADAPTATION DE MAILLAGE POUR LA SIMULATION DU CHAUFFAGE PLASMONIQUE DES NANOPARTICULES D'OR	101
4.1 Introduction	101
4.2 Formulation numérique du problème thermo- électromagnétique	102
4.3 Le remaillage et les stratégies d'adaptation	105
4.4 Résultats numériques et discussions	110
4.5 Conclusion	124
5 APPLICATION À UNE LOI DE COMPORTEMENT THERMO-GÉOMÉTRIQUE BASÉE SUR LE COUPLAGE PHOTO-THERMIQUE POUR UNE NANOANTENNE	127

5.1	Introduction	127
5.2	Loi de comportement thermo-géométrique pour les nanoantennes illuminées par un laser	138
5.3	Conclusion	143
6	ETUDE DE LA DILATATION THERMIQUE DES NANOPARTICULES	145
6.1	Introduction	145
6.2	Simulation des dilatations de nano-sphères métalliques, induites par éclairage laser	146
6.3	Dilatation d'une nanoantenne : couplage plasmonique sphère-sphère .	156
6.4	Conclusion	160
	Conclusion générale	161
	BIBLIOGRAPHIE	163

Table des figures

FIGURE 1.1	Nanoparticule métallique illuminée par un champ électromagnétique.	8
FIGURE 1.2	Domaine et interfaces considérés pour la résolution de l'équation de Helmholtz	12
FIGURE 1.3	Représentation schématisée d'une oscillation de plasmon dans une nanoparticule sphérique sous l'action d'une excitation électromagnétique incidente E	17
FIGURE 1.4	Maximum de l'intensité dans tout le domaine de calcul et efficacités d'absorption Q_{abs} et de diffusion Q_{sca}	25
FIGURE 1.5	fig1	30
FIGURE 1.6	Module de Young (E) de l'or en fonction de la température à différentes échelles.	46
FIGURE 2.1	Éléments surfaciques de base.	52
FIGURE 2.2	Éléments volumiques de base.	53
FIGURE 2.3	Élément linéique linéaire.	54
FIGURE 2.4	Élément quadratique de Lagrange.	55
FIGURE 2.5	Élément cubique de type Hermite.	55
FIGURE 2.6	Coupe selon le plan médian : une vue 3D du maillage (a), coupe suivant le plan (xz)(b).	64
FIGURE 2.7	Coupe selon le plan médian $y=0$: de la distribution de l'intensité du champ électrique $\ E\ ^2$ calculé par la MEF (a), la théorie de MIE (b), de l'erreur absolue (c) et de l'erreur relative (d)	65
FIGURE 2.8	Intensité du champ électrique $\ E\ ^2$ calculé par la MEF selon l'axe des x (a), l'axe des z (b), l'erreur relative par rapport à la solution de Mie selon x (c) et l'erreur relative par rapport à la solution de Mie selon z (d)	66
FIGURE 2.9	Coupe selon le plan médian $y=0$: de la distribution du champ de température T calculé par la MEF.	67
FIGURE 2.10	Élévation de la température en fonction du rayon du domaine extérieur : solution de l'équation de la chaleur dans le cas 1 (conduction + bain), cas 2 (conduction + convection) (avec $h = 5$ et $h = 25$) et cas 3 (conduction + convection + rayonnement) (avec $h = 5$ et $h = 25$).	69
FIGURE 2.11	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution du champ des déplacements $\ U\ $ calculé par la MEF.	70
FIGURE 2.12	Triangle de référence et sa projection dans l'espace réel.	72
FIGURE 2.13	Tétraédre de référence et sa projection dans l'espace réel	73

FIGURE 2.14	Critère vérifié (a), critère non vérifié (b).	76
FIGURE 2.15	Représentation de l'erreur d'interpolation dans le cas 1D.	80
FIGURE 2.16	Schéma de principe d'une boucle d'adaptation	81
FIGURE 3.1	Images TEM des nanoparticules d'or de forme polygone sphérique (Source [1].)	86
FIGURE 3.2	Représentation du modèle d'une nanoparticule illuminé par une onde plane.	87
FIGURE 3.3	Coupe selon le plan médian (xz) (a), une vue 3D du maillage (b).	88
FIGURE 3.4	Coupe selon le plan médian (xz) (a), une vue 3D du maillage (b) après adaptation de maillage par le technique de raffinement S_1	93
FIGURE 3.5	Coupe selon le plan médian (xz) (a), une vue 3D du maillage (b) après adaptation de maillage par le technique de remaillage S_2	93
FIGURE 3.6	Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule avant (a) et après (b) adaptation par le technique de raffinement S_1	94
FIGURE 3.7	Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la technique de remaillage S_2 (a,b,c,d,e,f), évolution de nombre d'éléments correspondant (g).	95
FIGURE 3.8	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\ E\ ^2$ calculé avant (a), et après adaptation (b) par la méthode de raffinement S_1	96
FIGURE 3.9	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\ E\ ^2$ calculée à chaque étape d'adaptation par le technique de remaillage S_2	97
FIGURE 3.10	Zoom sur la coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\ E\ ^2$ calculé avant (a), et après adaptation (b) par la méthode de raffinement S_1	98
FIGURE 3.11	Zoom sur la coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\ E\ ^2$ calculé à chaque étapes d'adaptation par le technique de remaillage S_2	98
FIGURE 3.12	Étude paramétrique sur la valeur de la taille minimale d'éléments h_{min}	99
FIGURE 3.13	Étude paramétrique sur la valeur de l'erreur d'interpolation maximale toléré ε	100
FIGURE 4.1	Nanoparticule métallique immergée dans l'air et illuminée par une onde plane monochromatique.	103
FIGURE 4.2	Algorithme de la stratégie de remaillage adaptatif séquentiel A_1	106
FIGURE 4.3	Algorithme de la stratégie de remaillage adaptatif séquentiel A_2	108
FIGURE 4.4	Algorithme de la stratégie de remaillage adaptatif séquentiel A_3	110

FIGURE 4.5	Evolution relative de la valeur maximale de la température $\max_{\Omega} T$ (a) en utilisant la méthode de remaillage adaptatif et les stratégies A_1 , A_2 et A_3	112
FIGURE 4.6	Evolution relative de l'intensité du champ électrique $\max_{\Omega} \ \mathbf{E}\ ^2$ (b), en utilisant la méthode de remaillage adaptatif et les stratégies A_1 , A_2 et A_3	112
FIGURE 4.7	Répartition de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2 / \ \mathbf{E}_0\ ^2$ et de la température T après adaptation avec la stratégie A_2	114
FIGURE 4.8	Évolution du temps de calcul pour chaque étape d'adaptation avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3 . Le temps de calcul est cumulent environ 11 heures pour A_1 , 2 heures pour A_2 , et 3 heures pour A_3	115
FIGURE 4.9	Évolution de la RAM pour le calcul du champ électrique $\mathbf{E}$ (a), de la température T (b) avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3 . . .	116
FIGURE 4.10	Évolution du nombre total de degrés de liberté pour le calcul du champ électrique $\mathbf{E}$ (a), de la température T (b) avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3	117
FIGURE 4.11	Evolution du nombre de noeuds (a), et d'éléments (b) à chaque itération avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3	118
FIGURE 4.12	Coupe selon le plan médian (xz) du maillage initiale.	119
FIGURE 4.13	Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la stratégie A_1	119
FIGURE 4.14	Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la stratégie A_2	120
FIGURE 4.15	Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la stratégie A_3	121
FIGURE 4.16	Iso-surfaces associées au maillage initial ($N_{\text{lement}} = 289\,605$). . .	121
FIGURE 4.17	Iso-surfaces, après remaillage avec A_1 ($N_{\text{tetrahedra}} = 3\,380\,792$), de $\ \mathbf{E}\ ^2$ (a) T(b), après remaillage avec A_2 ($N_{\text{tetrahedra}} = 1\,097\,595$) de $\ \mathbf{E}\ ^2$ (c) T(d) et après remaillage avec A_3 ($N_{\text{tetrahedra}} = 2\,586\,902$) de $\ \mathbf{E}\ ^2$ (e) T(f)	123
FIGURE 5.1	Représentation du modèle d'illumination des deux nanoparticules sphérique illuminées par un source laser.	129
FIGURE 5.2	Maillage initial et maillage adapté.	131
FIGURE 5.3	Coupe selon le plan median $y = 0$, zoom sur le maillage au voisinage des nanoparticules à chaque iteration.	132
FIGURE 5.4	Iso-surfaces de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2$ à chaque itération de remaillage.	133
FIGURE 5.5	Iso-surfaces de température T (b,d) à chaque itération de remaillage.	134

FIGURE 5.6	Coupe selon le plan médiant $y = 0$ de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2$ (a,b) et de la température T (c,d) avant remaillage ($N_{tetrahedra} = 181\,431$) et après remaillage ($N_{tetrahedra} = 2\,954\,752$)	136
FIGURE 5.7	Évolution de la RAM pour le calcul du champ électrique et de température (a), et l'évolution du temps de calcul (b) pour chaque itération de remaillage adaptatif	137
FIGURE 5.8	Évolution du nombre d'éléments et des noeuds à chaque itération de remaillage adaptatif	137
FIGURE 5.9	Évolution de l'intensité du champ électrique (a) et de l'augmentation de la température (b) en fonction de la distance inter-particulaire s pour deux nanoparticules sphériques de diamètre $D = 50$ nm.	139
FIGURE 5.10	Comparaison de l'augmentation de la température en fonction de la distance inter-particulaire s pour le modèle qui tient compte au couplage électromagnétique - thermique (modèle 2) et pour le modèle qui utilise une approximation de source ponctuelle (modèle 1).	140
FIGURE 5.11	Évolution de l'augmentation de température en fonction du rapport $\frac{s}{D}$	141
FIGURE 5.12	Évolution de l'augmentation de température en fonction du rapport $\frac{s}{D}$	142
FIGURE 5.13	Evolution de l'augmentation de température en fonction du rapport $\frac{s}{D}$	143
FIGURE 6.1	Représentation du modèle numérique d'une nanoparticule illuminé par un source laser.	146
FIGURE 6.2	Processus d'optimisation de remaillage séquentiel.	148
FIGURE 6.3	Coupe selon le plan médian (xz), vue 3D du maillage initial (a), et du maillage final après adaptation.	149
FIGURE 6.4	Coupe selon le plan médian (xz), zoom au voisinage du nanoparticule sur le maillage initial (a), après adaptation sur $\ \mathbf{E}\ ^2$ (b), après adaptation sur T (c), et après adaptation sur $\mathbf{U}$ (d).	150
FIGURE 6.5	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2$ (a), et de la température T (b) après adaptation de maillage.	151
FIGURE 6.6	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition du champ de déplacement $\ \mathbf{U}\ $ après adaptation du maillage.	151
FIGURE 6.7	Zoom au voisinage du nanoparticule des maillages adaptés	154
FIGURE 6.8	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2$ (a), et de la température T (b) après adaptation de maillage.	155
FIGURE 6.9	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition du champ de déplacement $\ \mathbf{U}\ $ après adaptation de maillage	155
FIGURE 6.10	Représentation d'une nanoantenne illuminée par une onde plane	156

FIGURE 6.11	Zoom des maillages adaptés au voisinage des nanoparticules. .	157
FIGURE 6.12	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2$ (a), et de la température T (b) après adaptation de maillage.	159
FIGURE 6.13	Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition du champ de déplacement U après adaptation de maillage	159

Liste des tableaux

TABLEAU 3.1	Nombre des noeuds, tétraèdres, $\max \ \mathbf{E}\ ^2$, RAM, et le temps de calcul de la stratégie de raffinement S_1	92
TABLEAU 3.2	Nombre des noeuds, tétraèdres, h_{min} , ε , $\max \ \mathbf{E}\ ^2$, RAM, et le temps de calcul de la stratégie de remaillage S_2	92
TABLEAU 4.1	Résumé de l'efficacité des stratégies A_1 , A_2 et A_3 en fonction du critère choisi.	124
TABLEAU 6.1	Caractéristique des maillage à chaque itération du processus d'adaptation.	152
TABLEAU 6.2	Nombre des noeuds, éléments (tétraèdres), h_{min} , ε , pour chaque itération du processus d'adaptation de maillage	153
TABLEAU 6.3	Caractéristiques d'adaptation des maillage pour chaque itération	158

Introduction générale

Après une période de recherches intenses, rendues possibles par le développement d'appareils permettant de « voir » la matière et de fabriquer des objets à l'échelle de l'Angström et du nanomètre, des applications technologiques ont vu le jour. La miniaturisation et le contrôle de phénomènes à ces échelles ont permis un nouvel essor dans différents secteurs d'activité tels que l'électronique, la médecine, l'opto-électronique, les matériaux pour la mécanique etc. En effet, à l'échelle nanométrique, des phénomènes physiques différents de ceux observables à l'échelle micrométrique apparaissent. En particulier, le confinement du champ électromagnétique à l'échelle nanométrique lié au confinement spatial des électrons est décrit par un phénomène de résonance [2, 3, 4]. Les propriétés optiques, liées au concept de plasmon-polariton, ont été étudiées dès les années 60 et sont maintenant bien connues. La maîtrise de ces phénomènes pour produire de nouveaux composants, capteurs ou dispositifs ouvrent des perspectives mais nécessite l'adaptation des processus de fabrication industrielle et un accompagnement par une recherche fondamentale. Le développement d'objets fonctionnels à l'échelle nanométrique demande un contrôle de la fabrication qui s'accompagne de méthodes numériques d'optimisation. En physique, il est parfois possible de se contenter d'ordres de grandeurs et de tendances données par des modèles simples. À l'inverse, la technologie nécessite des modèles réalistes, des calculs précis, notamment lorsqu'il s'agit d'optimiser des dispositifs en évitant des plans d'expérience complexes et coûteux. L'objectif de cette thèse est de développer des modèles numériques précis et rapides dans le domaine scientifique complexe des phénomènes multiphysiques. En effet, l'utilisation de nanostructures pour induire des effets thermiques locaux sous éclairage laser est une application récente. De plus, les effets thermiques induits provoquent des dilatations qui peuvent dérégler des composants comme les nanoantennes, dont l'efficacité repose sur le maintien précis d'une distance entre deux nanostructures. Il est donc nécessaire de produire des modèles numériques précis, permettant d'évaluer ces dilatations.

L'étude de l'échauffement induit par absorption d'énergie électromagnétique dans les nanoparticules est récent [5, 6], même si cet effet physique est déjà utilisé en médecine et a été modélisé dans des cas particuliers [7, 8]. Le principe en est le suivant : une nanoparticule optiquement excitée absorbe une partie de l'énergie électromagnétique qui peut non seulement chauffer la particule elle-même mais aussi son environnement [5, 7, 8, 6]. L'élévation de température dépend de la fréquence de l'onde électromagnétique excitatrice et un lien fort est attendu avec la fréquence de résonance de plasmon de la nanoparticule [9, 10]. Ce induit par un « chauffage plasmonique » à l'échelle nanométrique, utilisé pour le traitement de cancer (en utilisant une nécrose thermique des cellules tumorales [11, 8, 6]) est

également mis en œuvre pour l'administration des médicaments avec libération localisée des médicament, à partir d'une capsule contenant des nanoparticules d'or, déclenchée à distance lorsqu'elle est excitée par une source laser [12, 13, 14]. Des capteurs et des composants dont la partie sensible est de taille nanométrique sont également développés [15]. Parmi ces capteurs on trouve des structures périodiques de type réseau et des objets souvent appelés dimères ou nanoantennes composés de deux nanostructures tête-bêche, dont la partie active, nanométrique, est l'intervalle entre ces objets. Ici se pose le problème des éventuelles dilatations des nanostructures qui peuvent avoir un impact sur l'efficacité du capteur liée à la fois au désaccord de résonance plasmon, sensible à la géométrie, mais aussi sur sa durée de vie : la dilatation peut induire un décollement des nanostructure du substrat sur lequel elles sont déposées. Le design, l'optimisation et la caractérisation de ces capteurs est grandement aidée par les simulations, les plans d'expérience nécessitant de faire varier un nombre de paramètres souvent supérieur à la dizaine. Le calcul de l'échauffement avait déjà été réalisé en éléments finis 2D dans la thèse d'Eric Kremer [16] et le problème en 3D avait été ébauché dans la thèse de Sameh Kessentini, en utilisant la méthode des dipôles couplés [17], dans le cadre du projet européen *Nanonatenna* (Project reference : 241818 Funded under : FP7-HEALTH). Cette dernière méthode pose des problèmes de convergence, d'évaluation précise de l'exaltation du champ électrique qui nous ont poussé à revenir à la méthode des éléments finis, cette fois en 3D. Pour simuler une élévation de température ou une dilatation à l'échelle nanométrique, il est nécessaire d'élaborer un modèle multiphysique cohérent et un schéma numérique stable, qui fournit des résultats dimensionnés. Des valeurs en unités arbitraires n'est pas suffisant, il s'agit de calculer des grandeurs dimensionnées. La question de recherche principale peut être formulée à ce stade : « Le phénomène de chauffage plasmonique par une source de lumière, peut-il provoquer une modification de la géométrie ? »

Cette thèse a donc pour objectif le calcul multiphysique (électro-thermo-mécanique) à l'échelle nanométrique. Les contraintes sont les suivantes, en ayant pour cible l'utilisation des codes numériques dans un processus d'optimisation :

- limiter l'espace mémoire nécessaire ;
- limiter le temps de calcul ;
- calculer des grandeurs dimensionnées avec précision.

La description des phénomènes nécessite une modélisation des lois de comportement électromagnétique, thermique et mécanique avec la prise en compte des caractéristiques modifiées des matériaux à l'échelle nanométrique (géométrie et constantes matérielles). Ce problème peut être décrit de deux manières, en faisant intervenir soit un couplage faible soit un couplage fort des équations aux dérivées partielles décrivant les problèmes électromagnétiques, thermique et mécaniques. La première étape consiste à produire un modèle numérique stable sous une hypothèse de couplage faible. Même si le modèle physique choisi correspond à une description physique de la matière à l'échelle macro (équations aux dérivées partielles classiques), l'objectif de contrôler la précision du calcul tout en obéissant aux contraintes ci-dessus, peut être atteint par différents schémas numériques qu'il

convient de comparer. Le choix technique repose sur l'interfaçage du logiciel de remaillage OPTIFORM adapté à notre problème, avec le solveur de Comsol multiphysics. L'optimisation des codes de calcul est toujours recherchée, ainsi que le contrôle de la précision de calcul. Les applications proposées dans ce manuscrit concernent :

- le champ électromagnétique au voisinage de nanoparticules facettées ;
- la température au voisinage de nanoparticules, induite par un éclairage laser ;
- la dilatation de nanostructures ainsi chauffées.

La première partie de cette thèse présente la partie théorique notamment les lois physiques choisies en électromagnétisme, en thermique et en mécanique et leur couplage. Elle est composée de deux chapitres.

Le chapitre 1 sera consacré à la modélisation multiphysique des effets photothermo-mécaniques dans des structures plasmonique. Successivement seront modélisés : l'interaction de la lumière (source laser) avec des nanoparticules d'or, l'élévation de température puis la dilatation induite. Les équations aux dérivées partielles, les paramètres utilisés et les inconnues calculées seront précisés. Le couplage entre ces problèmes sera décrit. Dans le chapitre 2, nous présenterons les outils utilisés pour la résolution numérique des équations aux dérivées partielles relatives aux problèmes électro-thermo-mécaniques. Nous rappellerons les étapes de base de la méthode des éléments finis et le principe des schémas d'adaptation de maillage. Les résultats numériques seront comparés à ceux obtenus par des modèles analytiques pour des géométries simples.

La seconde partie de cette thèse est consacrée aux applications de l'approche numérique proposée aux problèmes multiphysiques. Elle est composée de quatre chapitres.

Dans le chapitre 3, l'objectif sera de valider le calcul du champ électromagnétique, origine de l'élévation de température et des dilatations. La théorie de Mie sera utilisée comme référence. Une application au contrôle de la précision du champ électrique calculé au voisinage de nanoparticules facettées sera proposée [1, 18]. Ce problème ne peut être traité correctement avec les logiciels de maillage classiques intégrés dans Comsol.

Dans le chapitre 3, nous développerons une méthode optimisée du processus d'adaptation de maillage pour la simulation de l'élévation de température de nanoparticules d'or. Nous comparerons trois stratégies d'optimisation du maillage qui se distinguent par la solution physique utilisée pour le processus s'adaptation de maillage. Les comparaisons se feront suivant trois critères : le coût de calcul (RAM et temps CPU), la précision des solutions numériques et la convergence de la méthode.

Dans le chapitre 6.1, les résultats du chapitre précédent seront utilisés pour évaluer l'influence de la distance entre deux nanoparticules d'or sur la réponse thermique du système sous excitation par une source laser.

Le chapitre 6 présentera l'application de l'adaptation de maillage en éléments finis au calcul de la dilatation thermique dans les nanostructures pour des puissances

laser compatibles avec l'expérience. Nous commencerons par décrire des objets de forme simple (sphère) pour évaluer l'ordre de grandeur de la dilatation que nous comparerons aux résultats 2D effectués par Eric Kremer [16]. Ensuite nous présentons les résultats pour une nanoantenne comportant deux nanostructures séparées par un espace nanométrique. Cette étude s'ouvrira sur une conclusion et des perspectives.

Modélisation multiphysique

1

Sommaire

1.1	Introduction	6
1.2	Modèle électromagnétique	7
1.2.1	Formulation du problème électromagnétique pour les éléments finis	8
1.2.2	Synthèse du problème électromagnétique pour les éléments finis	14
1.2.3	Propriétés optiques des nanoparticules de métaux nobles et résonance plasmon	15
1.2.3.1	Permittivité relative des nanoparticules métalliques	15
1.2.3.2	Résonance plasmon localisée	16
1.2.4	Modèle électromagnétique de référence : la théorie de Lorentz-Mie-Debye	18
1.2.4.1	Harmoniques sphériques vectorielles : base du développement	18
1.2.4.2	Développements des champs incident, diffusé et intérieur	21
1.2.5	Résumé et algorithmes	23
1.2.5.1	Calcul des dépendances angulaires	23
1.2.5.2	Calcul des dépendances radiales	23
1.2.5.3	Limitation de la série	23
1.2.6	Résonance de l'exaltation de l'intensité du champ électrique	24
1.3	Modélisation thermique	25
1.3.1	Les modes de transferts thermiques	26
1.3.1.1	La conduction thermique	26
1.3.1.2	La convection thermique	27
1.3.1.3	Le rayonnement thermique	29
1.3.1.4	Synthèse	31
1.3.2	Équation de la chaleur et conduction	31
1.3.3	Temps et longueur caractéristique	31
1.3.3.1	Onde thermique	32
1.3.3.2	Séparation des variables	33
1.3.4	Source de chaleur	34
1.3.5	Synthèse du problème thermique pour les éléments finis . .	35

1.3.5.1	Conditions aux limites	36
1.4	Modèle mécanique	38
1.4.0.2	Introduction	38
1.4.0.3	Modélisation du comportement élastique linéaire	39
1.4.0.4	Approche en contraintes	42
1.4.0.5	Approche en déplacements : équations de Lamé-Navier	43
1.4.0.6	Contrainte thermique	44
1.4.1	Synthèse du problème mécanique avec échauffement thermique	44
1.4.2	Influence de température sur les constantes mécaniques	46
1.4.2.1	Module d'élasticité	46
1.4.2.2	Coefficient de dilatation thermique	46
1.5	Conclusion : mode de couplage utilisé	47

1.1 Introduction

La modélisation multiphysique est nécessaire lorsque plusieurs phénomènes physiques, décrits par des grandeurs dépendantes, interviennent dans le problème à résoudre. Le couplage des problèmes contribue à compliquer l'interprétation directe mais est nécessaire pour une description complète et fine. Le principe de base de la modélisation mutiphysique consiste à faire appel à plusieurs équations aux dérivées partielles, couplées soit par des termes sources, soit par des paramètres. Le problème multiphysique traité dans cette thèse repose sur les équations de Maxwell pour l'électromagnétisme. L'inconnue est le champ électromagnétique, dont l'intensité intervient dans le terme source de l'équation de la chaleur. La résolution de l'équation de la chaleur donne l'élévation de température, qui intervient explicitement dans le problème mécanique de la dilatation thermique ou du champ de déplacement (équation aux dérivées partielles de Navier-Duhamel). De manière générale, la dilatation peut modifier les paramètres électromagnétiques et thermiques (propriétés physiques : indice de réfraction, conductivité thermique, chaleur massique. . .) et donc le problème général est fortement couplé. Si ces dilatations sont négligeables, le problème est considéré comme faiblement couplé. Dans ce cas, les paramètres matériels sont indépendants des inconnues du problème : le champ électromagnétique, la température et la dilatation. Chaque problème, électromagnétique, thermique, mécanique peut alors être résolu de manière séquentielle. Même dans le cas du couplage faible, se pose la question du remaillage. En effet les constantes spatiales caractéristiques des variations des inconnues dans le domaine de calcul peuvent être de différents ordres de grandeur et donc un maillage adapté pour le problème électromagnétique peut ne pas l'être pour le thermique (par exemple). La description précise de chaque problème physique, l'identification des paramètres physiques dimensionnés et les caractéristiques des

inconnues sont l'objet de ce chapitre. En éléments finis, dans le cas d'un problème dépendant du temps, le problème spatial est résolu à chaque étape de temps discrétisé. Il est donc nécessaire de contrôler la précision du calcul spatial. Nous nous focaliserons sur ce dernier problème, sous une hypothèse statique, correspondant à un éclairage continu.

L'interaction de la lumière (source laser) avec la matière (nanoparticule d'or) sera décrite dans le cadre de l'électromagnétique classique avec une prise en compte élémentaire des spécificités de l'échelle nano. Le calcul du champ électrique dans tout l'espace de calcul permettra d'évaluer la puissance électromagnétique absorbée par les nanoparticules, source de l'élévation de température (effet Joule). La distribution de température pourra alors être calculée, la nanoparticule jouant le rôle de source de chaleur (statique). Nous présenterons le cadre théorique et les différents mécanismes thermiques mis en jeu. L'influence de la dimension nanométrique des objets sur les paramètres physique sera discutée. Une fois chauffée la nanoparticule se dilate. Nous cherchons à comprendre le cadre théorique de la mécanique des milieux déformable afin de modéliser le calcul des déplacements provoqué par les contraintes thermiques.

Ce chapitre est organisé comme suit : **La section 1.2** présente le modèle électromagnétique. Dans un premier lieu, les notions de base de l'interaction de la lumière avec la matière. Ensuite, les propriétés optiques des nanoparticules de métaux nobles en particulier la résonance plasmon. Finalement, les lois et équations qui permettent de modéliser le phénomène en commençant par les équations de Maxwell jusqu'au l'apparition de l'équation de Helmholtz. Nous terminons cette section par présenter une méthode de résolution analytique connue sous le nom de la théorie de Mie qui va nous servir comme une référence pour évaluer la précision du résultat éléments finis. **La section 1.3** présente le modèle thermique. Les différents modes de transfert thermique seront cités afin de préciser notre modèle physique. Ensuite nous discutons les conditions aux limites associés. **La section 1.4** présente le modèle mécanique. Le comportement élastique linéaire permettra d'établir l'équation d'élasticité. Avant de conclure, nous terminons ce chapitre par présenter la forme du couplage entre problèmes choisie pour cette étude.

1.2 Modèle électromagnétique

L'objectif de cette section est d'introduire brièvement les notions de base de l'électromagnétisme, les notations qui interviennent dans la modélisation de la réponse optique des nanoparticules des métaux nobles illuminés, notamment dans des conditions de résonance plasmon. Les paramètres physiques seront identifiés.

1.2.1 Formulation du problème électromagnétique pour les éléments finis

Lorsqu'un rayonnement électromagnétique rencontre une nanoparticule, une fraction de l'énergie de l'onde incidente est absorbée par la nanoparticule, une fraction est diffusée, la dernière est transmise (Figure 1.1). La partie absorbée va être dissipée sous forme de chaleur dans la nanoparticule par effet Joule. Cet effet contribuera à l'élévation de température de la particule et de son environnement [19, 10, 20, 21, 22]. Seule la diffusion élastique est considérée dans cette thèse [19, 23]. L'intensité du rayonnement électromagnétique incident est atténuée à la fois par l'absorption et par la diffusion. Cette atténuation au passage d'un nuage de particules par exemple, s'appelle l'extinction : (extinction = absorption + diffusion). De nombreux ouvrages présentent l'étude de l'interaction rayonnement-nanostructures de manière classique, sans l'introduction de la mécanique quantique [24, 25, 26]. Ceci est justifié lorsque les nanostructures comportent plus de quelques centaines d'atomes.

Une onde électromagnétique est caractérisée par un couple de fonctions vectorielles dépendant du temps et des variables d'espace : le champ électrique $\vec{E}$ (en $V.m^{-1}$ dans le SI) et le champ magnétique $\vec{H}$ (en $A.m^{-1}$ dans le SI). Nous choisissons ici les appellations et notations en électromagnétisme, recommandées par le BIPM¹. Dans les milieux LHI, en tout point de l'espace, le champ électromagnétique est tel que le champ électrique, le champ magnétique et le vecteur d'onde forment un trièdre direct. La figure 1.1 synthétise les phénomènes mentionnés et les notations.

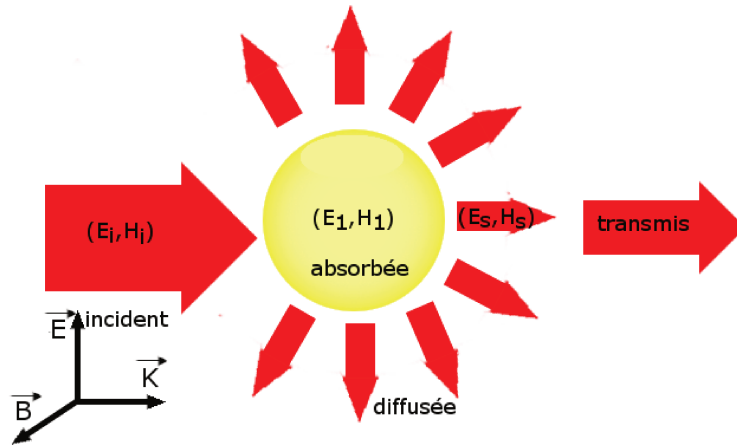


FIGURE 1.1: Nanoparticule métallique illuminée par un champ électromagnétique.

Équations de Maxwell

Les équations de Maxwell régissent les variations spatio-temporelle des champs électrique $\vec{E}$ et magnétique $\vec{H}$ [19, 27]. Dans le problème traité, aucune charge ex-

1. <http://www.bipm.org/fr/publications/si-brochure/download.html>.

térieure n'est apportée aux matériaux, de même, aucun courant électrique n'est appliqué. Seuls les porteurs de charge de la matière sont considérés. Les notations $\nabla \times$ et $\nabla \cdot$ sont utilisées pour signifier rotationnel et divergence, les courants induits dans les matériaux par le champ électromagnétique sont notés $\mathbf{j}_l$ (charges libres), la densité volumique de charge correspondante est notée ρ_l :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \tilde{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \underline{\mu} \tilde{\mathbf{H}}}{\partial t} \\ \nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{j}_l + \frac{\partial \underline{\varepsilon} \tilde{\mathbf{E}}}{\partial t} \\ \nabla \cdot (\underline{\varepsilon} \tilde{\mathbf{E}}) = \rho_l \\ \nabla \cdot (\underline{\mu} \tilde{\mathbf{H}}) = 0 \end{array} \right. \quad (1.1)$$

Dans le cas général, les propriétés optiques des milieux se présentent par des tenseurs pour les milieux anisotropes. Les matériaux considérés sont linéaire, homogènes, isotropes (LHI) et non magnétiques. La perméabilité magnétique se réduit donc à un scalaire $\mu = \mu_r \mu_0$ où $\mu_r = 1$ est la perméabilité magnétique relative, μ_0 est la perméabilité du vide². La permittivité électrique est notée $\underline{\varepsilon} = \varepsilon_0 \underline{\varepsilon}_r$, avec $\underline{\varepsilon}_r$ la permittivité relative, $\varepsilon_0 = \mu_0^{-1} \cdot c_0^{-2}$ est la permittivité du vide³. Les courants de charges libres $\mathbf{j}_l$ sont reliés au champ électrique $\tilde{\mathbf{E}}$ qui les met en mouvement, par la loi d'Ohm locale :

$$\mathbf{j}_l = \sigma_l \tilde{\mathbf{E}}, \quad (1.2)$$

où σ_l est la conductivité électrique du matériau (en S.m^{-1} dans le SI ou $\text{A.V}^{-1}.\text{m}^{-1}$)

Équations de Maxwell harmoniques et permittivité électrique complexe

Soulignons que les équations de Maxwell sont des équations aux dérivées partielles linéaires, les milieux considérés étant linéaires, la transformée de Fourier temporelle permet l'étude spectrale (dans le domaine fréquentiel). Un faisceau limité dans le temps, d'énergie finie, admet une transformée de Fourier temporelle. En conséquence, il est possible sans diminuer la généralité, de considérer une seule pulsation ω et donc une onde monochromatique. Un élément de la base de Fourier des solutions des champs électromagnétiques peuvent se présenter sous la forme harmonique suivante, avec $\iota^2 = -1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-\iota \omega t} \\ \tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-\iota \omega t} \end{array} \right. \quad (1.3)$$

2. $\mu_0 = 1,256\,637\,061\,44(86) \cdot 10^{-6} \text{ H.m}^{-1}$ (ou N.A^{-2}).

3. $\varepsilon_0 \approx 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F.m}^{-1}$, $c_0 = 299\,792\,458 \text{ m.s}^{-1}$ est la célérité des ondes électromagnétiques dans le vide.

avec $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ les amplitudes des champs électrique et magnétique respectivement, qui ne dépendent plus que des variables d'espace. Les dérivées temporelles s'algèbrisent et les équations de Maxwell deviennent (en éliminant la dépendance explicite des variables d'espace) :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \\ \nabla \times \mathbf{H} = \sigma_l\mathbf{E} - \varepsilon_0\underline{\varepsilon_r}i\omega\mathbf{E} \\ \nabla \cdot (\underline{\varepsilon_r}\mathbf{E}) = \rho_l \\ \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

Le second terme de la deuxième équation peut être factorisé :

$$-i\omega \underbrace{\left(i\frac{\sigma_l}{\varepsilon_0\omega} + \underline{\varepsilon_r} \right)}_{\varepsilon_r} \mathbf{E} \quad (1.5)$$

La permittivité relative complexe est introduite sous l'hypothèse harmonique. On notera que le signe de la partie imaginaire dépend de la notation arbitraire choisie dans la notation de la dépendance temporelle harmonique des champs (équations 1.3), ceci est important à identifier lorsqu'on utilise un logiciel commercial de calcul de champs électromagnétiques :

$$\varepsilon_r = \underline{\varepsilon_r} + i\frac{\sigma_l}{\varepsilon_0\omega} \quad (1.6)$$

$\varepsilon_r = \varepsilon' + i\varepsilon''$ où la partie imaginaire ε'' caractérise les pertes d'énergies par effet Joule, induites par l'absorption du rayonnement électromagnétique. Ces propriétés matérielles sont indépendantes du temps à l'échelle de la période de l'onde électromagnétique, par contre elles dépendent de la pulsation ω . Les équations de Maxwell harmoniques s'écrivent en fonction de ce paramètre physique :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \\ \nabla \times \mathbf{H} = i\varepsilon_0\varepsilon_r(\omega)\omega\mathbf{E} \\ \nabla \cdot (\varepsilon_r(\omega)\mathbf{E}) = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \end{cases} \quad (1.7)$$

On notera la disparition explicite de la densité de charges libres dans la troisième équation, justifiée par l'équation de conservation de la charge en régime harmonique, sous l'hypothèse donnée dans les équations (1.3) :

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_l - i\omega\rho_l = 0 \quad (1.8)$$

Équations de Helmholtz

Pour calculer les champs électromagnétiques, il est possible de découpler les équations de Maxwell. On obtient alors des équations aux dérivées partielles d'ordre deux, que l'on pourra résoudre analytiquement ou numériquement suivant la complexité des systèmes étudiés :

$$\begin{cases} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) - \frac{\omega^2}{c_0^2} \varepsilon_r \mathbf{E} = 0 \\ \nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} \right) - \frac{\omega^2}{c_0^2} \mathbf{H} = 0 \end{cases} \quad (1.9)$$

Rappelons les hypothèses utilisées pour écrire ces équations aux dérivées partielles :

- milieux linéaires, homogènes, isotropes, non magnétiques et sans charge extérieure apportée ;
- dépendance harmonique des champs électromagnétique ;
- milieux isolants ε_r est réel, ou conducteurs ε_r est complexe.

Les inconnues sont les trois composantes de chaque champ $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ (fonctions complexes de l'espace) et le paramètre matériel est la permittivité relative $\varepsilon_r(\mathbf{r}, \omega)$ (sans dimension), fonction complexe de la pulsation ω et de l'espace puisqu'elle change d'un matériau à l'autre.

Dans ce qui suit nous nous intéresserons principalement à l'équation de Helmholtz pour le champ électrique parce que ce dernier est la grandeur d'intérêt qui va nous permettre de calculer directement la quantité de chaleur absorbé par les nanoparticules, terme source permettant de calculer l'élévation de température. Rappelons que pour obtenir la totalité des champs électromagnétiques, il suffit de résoudre l'équation de Helmholtz pour le champ électrique $\mathbf{E}$ et de déduire le champ magnétique $\mathbf{H}$ à l'aide des équations de Maxwell est vice-versa.

Conditions de passage

Les conditions de passage d'un matériau à un autres sont contenues dans les équations de Maxwell écrites au sens des distributions. Les équations en rotationnel donnent la continuité des composantes tangentielles des champs, les équations en divergence donnent la continuité des composantes normales, $\mathbf{n}$ étant le vecteur local normal à la surface de séparation entre deux milieux non magnétiques :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{E} \times \vec{n} \text{ continu} \\ \nabla \times \mathbf{H} = i\varepsilon_0\varepsilon_r(\omega)\omega\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{H} \times \vec{n} \text{ continu} \\ \nabla \cdot (\varepsilon_r\omega\mathbf{E}) = 0 \rightarrow \varepsilon_r\mathbf{E} \cdot \vec{n} \text{ continu} \\ \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \rightarrow \mathbf{H} \cdot \vec{n} \text{ continu} \end{cases} \quad (1.10)$$

Le champ magnétique est donc continu mais seules les composantes tangentielles du champ électrique à la surface de séparation de deux matériaux sont continues [28] :

$$\begin{cases} \mathbf{n}_{\Gamma_1} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0} \\ \mathbf{n}_{\Gamma_1} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.11)$$

où $\mathbf{n}_{\Gamma_1}$ est le vecteur unité normal localement à l'interface de séparation Γ_1 (figure 1.2).

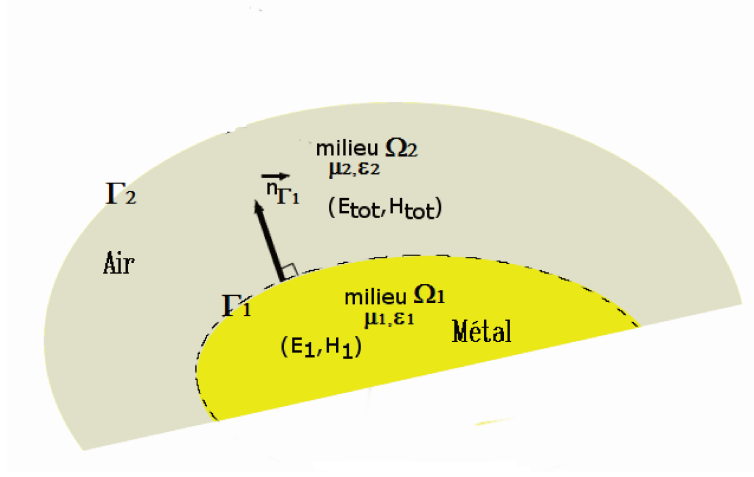


FIGURE 1.2: Domaine et interfaces considérés pour la résolution de l'équation de Helmholtz

Conditions aux limites, champ incident, champ diffusé

La résolution de toute équation aux dérivées partielles oblige à définir des conditions aux limites pour garantir l'unicité de la solution, lorsqu'elles ne sont pas intégrées initialement dans la formulation mathématique du problème. On parle ainsi d'un problème bien posé [29].

En éléments finis, pour un problème ouvert constitué de structures matérielles bornées (dont la géométrie est limitée dans l'espace de calcul), un domaine de calcul Ω extérieur à ces structures matérielles, souvent constitué d'air, est défini (figure 1.2). C'est un problème de diffusion ou de diffraction qui est ainsi posé. À la frontière du domaine extérieur, il n'y a pas de changement de milieu. On parle alors de propagation libre. Le champ électromagnétique incident entre dans le domaine et le champ diffusé en sort.

Condition de champ incident

Le champ incident qui éclaire la nanostructure est supposé être une onde plane polarisée linéairement, monochromatique (une seule pulsation ω), d'amplitudes constantes $\mathbf{E}_i^0$ et $\mathbf{H}_i^0$ et de vecteur d'onde $\mathbf{k}_0$:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \\ \mathbf{H}_i = \mathbf{H}_i^0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \end{cases} \quad (1.12)$$

Aux frontières du domaine extérieur, le champ incident est connu. En conséquence :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = i\mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}_i(\mathbf{r}) = i\mathbf{k}_0 \times \mathbf{H}_i(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (1.13)$$

Condition de champ diffusé

Aux frontières du domaine extérieur Γ_2 , on peut imposer une condition approchée pour le champ diffusé, faisant intervenir la normale locale à cette frontière $\vec{n}_{\Gamma_2}$:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) = ik_0 \vec{n}_{\Gamma_2} \times \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}_s(\mathbf{r}) = ik_0 \vec{n}_{\Gamma_2} \times \mathbf{H}_s(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (1.14)$$

Cette condition approchée est d'autant plus rigoureuse que le domaine extérieur est grand et donc que le système matériel est caractérisé par une symétrie sphérique, concentrique avec le domaine extérieur, sphérique.

Condition de champ total

Le champ total, somme du champ diffusé et du champ incident vérifie donc :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i(\mathbf{k}_0 + k_0 \vec{n}_{\Gamma_2}) \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = i(\mathbf{k}_0 + k_0 \vec{n}_{\Gamma_2}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (1.15)$$

Le problème numérique peut consister à calculer le champ électromagnétique diffusé ou total.

vecteur d'onde, relation de dispersion, vecteur de Poynting

Les milieux étant linéaires, les vecteurs d'onde pourront être définis en tout point de l'espace de calcul, dans la direction et le sens de $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r})$ et vérifieront la relation de dispersion :

$$\mathbf{k}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{k}(\mathbf{r}) = \varepsilon_r \left(\frac{2\pi}{\lambda_0} \right)^2 = \varepsilon_r \frac{\omega^2}{c_0^2} \quad (1.16)$$

Les milieux étant linéaires, homogènes et isotropes, en tout point de l'espace, la direction de propagation de l'énergie, définie par le vecteurs de Poynting $\mathbf{S}(\mathbf{r} = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r})$ (en V.A.m⁻² ou W.m⁻²) est colinéaire au vecteur d'onde $\mathbf{k}(\mathbf{r})$.

1.2.2 Synthèse du problème électromagnétique pour les éléments finis

Pour le problème électromagnétique, les inconnues sont les trois composantes de chaque champ $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ (électrique) et $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ (magnétique). Chaque composante est une fonctions complexes de l'espace. et le paramètre matériel est la permittivité relative $\varepsilon_r(\mathbf{r}, \omega)$ (sans dimension), fonction complexe de la pulsation ω et de l'espace puisqu'elle change d'un matériau à l'autre.

Le problème traité est défini sous les hypothèses suivantes :

- tous les milieux sont linéaires, homogènes, isotropes, non magnétiques et sans charge extérieure apportée ;
- les champs électromagnétiques ont une dépendance temporelle harmonique et sont donc monochromatiques (pulsation ω) ;
- les milieux considérés sont isolants (le paramètres matériel ε_r est réel, c'est la permittivité relative), ou conducteurs ε_r est complexe.
- Le champ incident qui excite la nanostructure est une onde plane polarisée linéairement, monochromatique (une seule pulsation ω), d'amplitudes constantes $\mathbf{E}_i^0$ et $\mathbf{H}_i^0$ et de vecteur d'onde $\mathbf{k}_0$:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \\ \mathbf{H}_i = \mathbf{H}_i^0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \end{cases} \quad (1.17)$$

La valeur de l'amplitude du champ incident est obtenue à partir des caractéristiques P et D du source laser :

$$\mathbf{E}_i^0 = \sqrt{\frac{4P}{c_0 \varepsilon_0 \pi D^2}} \quad (1.18)$$

Avec P est la puissance du faisceau laser et D son diamètre.

Le vecteur d'onde incident, $\mathbf{k}_0$ dans le vide a pour carré scalaire :

$$\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{k}_0 = \left(\frac{2\pi}{\lambda_0} \right)^2 = \frac{\omega^2}{c_0^2}. \quad (1.19)$$

Le problème de simulation consistera à résoudre numériquement les équations de Helmholtz, dans lesquelles la dépendance des variables d'espace est mentionnée :

$$\begin{cases} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) - k_0^2 \varepsilon_r(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \\ \nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) - k_0^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.20)$$

Les conditions naturelles de continuité aux interfaces matérielles s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathbf{n}_{\Gamma_1} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0} \\ \mathbf{n}_{\Gamma_1} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.21)$$

Les conditions au bord du domaine de calcul sont :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \imath(\mathbf{k}_0 + k_0 \vec{n}_{\Gamma_2}) \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \imath(\mathbf{k}_0 + k_0 \vec{n}_{\Gamma_2}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (1.22)$$

Résumons maintenant les caractéristiques de la résonance plasmon.

1.2.3 Propriétés optiques des nanoparticules de métaux nobles et résonance plasmon

1.2.3.1 Permittivité relative des nanoparticules métalliques

Dans les simulations numériques les valeurs de la permittivité relative $\varepsilon(\omega)$ sont souvent extraites d'articles et de manuels de référence [30, 31, 32, 33, 34]. Les mesures y ont été effectuées pour les matériaux massifs. Les méthodes d'ajustement permettant de déduire les valeurs manquantes de la permittivité relative, hors des points de mesure, sont basées sur l'ajustement de fonctions mathématiques (splines, polynômes) ou de fonctions déduites de modèles physiques. Parmi ceux-ci, citons le modèle de Drude [27, 24] souvent inadapté pour les métaux, le modèle de Drude-Lorentz (permettant de décrire la résonance plasmon de volume), le modèle des points critiques [35, 36, 37, 38, 39, 40] ou toute combinaison de ces modèles. Néanmoins, les données expérimentales pour les nanoparticules ont montré des différences remarquables, notamment par rapport aux valeurs mesurées pour les matériaux massifs, surtout sur la partie imaginaire [41, 42].

L'utilisation des propriétés optiques des matériaux massifs induit de possibles erreurs dans l'évaluation des champs électromagnétiques en interaction avec des nanoparticules mais les mesures pour ce type de structures sont rares. La permittivité relative des nanoparticules peut être modifiée par un effet taille lorsque ces dernières sont du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen des électrons de conduction du métal. En outre, elle est affectée aussi par l'effet de collisions des électrons de surface de métal. Lorsque ce sera possible, dans cette étude, nous utiliserons les données expérimentales des valeurs de permittivité électrique des nanoparticules.

1.2.3.2 Résonance plasmon localisée

Une caractéristique fascinante de l'interaction lumière matière à l'échelle nanométrique est la résonance plasmon. Ce phénomène physique a été utilisé dès l'antiquité pour la coloration des verres [43]. De nos jours, mieux comprise, elle constitue un élément important en nanophotonique [2, 26, 24, 6].

Illuminée par une onde électromagnétique, une nanostructure métallique de dimension beaucoup plus faible que la longueur d'onde, peut voir les électrons de la bande de conduction excités par le champ électrique osciller de manière cohérente. Sous l'hypothèse de sa petite taille, les variations spatiales du champ incident sont faibles au niveau de la nanostructure et on peut considérer que les électrons de conduction subissent le même champ (approximation électrostatique) mais une description plus rigoureuse est préférable. Le confinement géométrique des électrons liée à la taille nanométrique de la nanostructure permet d'imaginer que le nuage se comporte comme un résonateur, excité par le champ électrique. La résonance plasmon localisée dépend donc à la fois de la géométrie de la particule et de sa composition [44]. En conséquence, ce nuage d'électrons oscille créant ainsi un excès de charge négative alternativement sur chacune des surfaces de la nanostructure. En revanche, la surface opposée va être chargée positivement à cause de la migration des électrons. Si les électrons sont parfaitement libres, il résulte une oscillation collective et en phase des électrons de conduction le long de la direction du champ électrique incident (figure 1.1). En outre, lorsque la fréquence de l'onde excitatrice correspond à la fréquence propre du nuage électronique confiné, on parle de résonance plasmon.

La résonance plasmon localisée conduit à une amplification locale des champs absorbés et des champs diffusés au voisinage immédiats de la nanostructure. Cette résonance se produit à une ou plusieurs longueurs d'ondes dans le spectre de visible pour l'argent, l'or, le cuivre, le titane etc. Ce phénomène, peut être décrit en général par la physique classique pour des nanostructures de quelques dizaines de nanomètres. Lorsque certaines distances ou tailles sont inférieures à la dizaine de nanomètres, des effets quantiques peuvent apparaître.

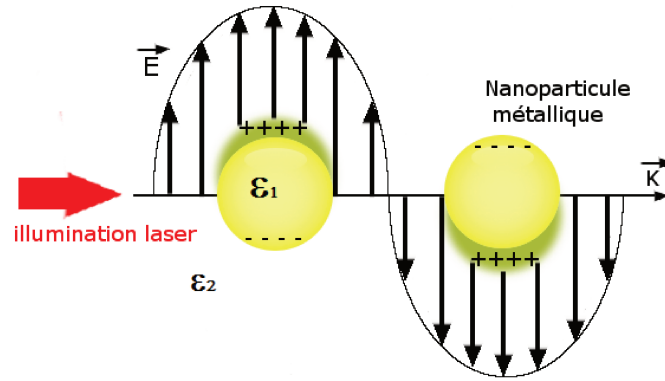


FIGURE 1.3: Représentation schématique d'une oscillation de plasmon dans une nanoparticule sphérique sous l'action d'une excitation électromagnétique incidente E .

La variation de la taille des nanoparticules entraîne la variation de la fréquence de résonance plasmon. Cette propriété est mise à profit pour accorder la résonance plasmon, afin notamment de s'adapter à des applications bio-médicales (biocapteurs). Lorsque la taille de nanoparticule augmente on remarque un décalage vers le rouge et on observe l'apparition des modes multipolaires..

Plusieurs études ont montré que même un petit changement de forme peut avoir un impact significatif sur la quantité d'énergie électromagnétique absorbée et diffusée ainsi que sur le spectre de résonance [45]. Par exemple, la concentration des porteurs de charge dans les parties étroites et facettées de la nanostructure provoque une exaltation des champs électromagnétique au voisinage de ces surfaces. Au cours de ces dernières années, une évolution des procédés de synthèse des nanoparticules fournit une large gamme de forme spécifique pour différentes applications pratiques.

Le milieu environnant des nanoparticules modifie aussi la réponse optique. En effet, une augmentation de l'indice optique du milieu environnant entraîne en général un décalage du spectre de résonance vers le rouge. Les supports des nanostructures ou substrats aussi ont une influence sur leur réponse optique.

Une analyse plus mathématique assimile la résonance plasmon à un pôle dans l'espace complexe. La fonction de la variable considérée est par exemple l'intensité maximale du champ électrique au niveau de la surface de la nanoparticule qui dépend directement de la partie réelle et de la partie imaginaire de la permittivité relative. La représentation de cette fonction montre alors des pics dont la position peut être plus ou moins éloignée des valeurs connues des permittivités d'un matériau. Pour un matériau donné, la courbe représentant la permittivité dans le plan (ϵ', ϵ'') projetée sur la surface correspondant à la fonction, une courbe qui montre la distance au pôle et explique l'élargissement de la résonance [46, 47, 48]. Dans le cas de modèles analytiques, comme celui des multicouches matériels ou celui donné par la théorie de Mie, l'identification des pôles est facilitée.

1.2.4 Modèle électromagnétique de référence : la théorie de Lorentz-Mie-Debye

Dans la partie précédente, nous avons formulé les hypothèses générales et défini le modèle de l'interaction lumière-nanostructures pour une résolution en éléments finis. Nous avons identifié les paramètres physiques et introduit les notations qui seront reprises ici. Pour tester notre méthode numérique de remaillage, il est nécessaire de disposer d'une référence analytique. La solution analytique exacte est connue que pour des structures sphériques et quelques autres géométries simples telles que des sphéroïdes, des coquilles et des cylindre infinis [49, 45]. La théorie de Mie, publiée par l'Allemand Gustav Mie en 1908, fournit une solution exacte de l'interaction d'une particule sphérique homogène de taille arbitraire entourée par un milieu non absorbant et une onde plane monochromatique [49]. Cette théorie permet d'obtenir l'expression des champs absorbés, incident et diffusés sous la forme d'une série infinie d'harmoniques sphériques par la méthode de séparation des variables. Résumons les étapes clés du calcul. Nous avons besoin de calculer la champ partout autour de la sphère et dans la sphère, aussi, il ne suffit pas de calculer les sections efficaces comme dans la majorité des codes libres, il faut évaluer numériquement les harmoniques sphériques (vecteurs de base, solutions de l'équation de Helmholtz en coordonnées sphériques) et le champ électrique. L'objectif est de le calculer aux noeuds d'un maillage, afin de comparer la solution analytique avec celle obtenue par éléments finis. Donnons quelques détails du calcul.

On considère une sphère métallique de rayon R , d'indice de réfraction $N_1 = \varepsilon_r^{1/2}$ (nombre réel ou complexe) immergée dans un milieu diélectrique d'indice N (réel, souvent de l'air donc $N = 1$). Comme dans ce qui précède, les milieux sont linéaires homogène isotrope et non absorbant en interaction avec onde monochromatique plane. Comme on a vu précédemment ce problème est modélisé par l'équation de Helmholtz (équation d'onde). Les vecteurs de base du développement du champ seront calculés, puis les conditions de passage permettront d'exprimer les coefficients du champ diffusé et du champ intérieur à la sphère matérielle.

1.2.4.1 Harmoniques sphériques vectorielles : base du développement

$$\begin{cases} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) - k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \\ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})) - k^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.23)$$

avec $k^2 = \omega^2 \varepsilon_r / c_0^2$ est le nombre d'onde de l'onde incidente. Cette écriture a été exprimée en coordonnées cartésiennes par défaut : $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Ces équations peuvent être réécrites en faisant intervenir le laplacien, les divergences des champs considérés dans chaque milieu étant nulles :

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{E}(x, y, z) + k^2 \mathbf{E}(x, y, z) = \mathbf{0} \\ \nabla^2 \mathbf{H}(x, y, z) + k^2 \mathbf{H}(x, y, z) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.24)$$

Pour simplifier le calcul, l'équation d'onde est résolue pour une fonction scalaire, puis la base de solutions (harmoniques sphériques vectorielles) sera déduite. Le passage naturel en coordonnées sphériques centrées en l'origine de la particule sphérique et la méthode de séparation des variables permet de déduire trois équations différentielles pour les dépendances radiales ($R(r)$), azimutale ($\Theta(\theta)$) et pour la longitude ($\Phi(\phi)$). Ces trois fonctions sont donc indépendantes et sont solutions des trois équations différentielles [49]. Dans la suite, les solutions paires (even e) et impaires (odd o) seront distinguées pour des raisons pratiques.

1. Equation pour la longitude :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + m^2 \Phi = 0 \quad (1.25)$$

La solution de cette est : $\Phi_e = \cos(m\phi)$ et $\Phi_o = \sin(m\phi)$, avec m entier relatif.

2. Equation azimutale :

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (1.26)$$

Où n est un entier naturel et m un entier relatif. Les solutions de cette equation sont les fonctions de Legendre de première espèce $P_n^m(\cos \theta)$. Les fonctions suivantes seront utiles dans le développement [49, p. 94-95] :

$$\pi_n = \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} \quad (1.27)$$

$$\tau_n = \frac{dP_n^1(\cos \theta)}{d\theta} \quad (1.28)$$

Ces fonctions sont calculées par récurrence montante à partir de relations de récurrence, avec $\pi_0 = 0$ et $\pi_1 = 1$ pour initialisation :

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} \cos \theta \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \cos \theta \pi_{n-2}, \quad (1.29)$$

avec $\pi_0 = 0$ et $\pi_1 = 1$.

$$\tau_n = n \cos \theta \pi_n - (n+1) \pi_{n-1}. \quad (1.30)$$

3. Equation radiale :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + [k^2 r^2 - n(n+1)] R = 0 \quad (1.31)$$

avec n est un entier.

La solution de cette équation est la fonction de Riccati-Bessel $Z_n(\rho = kr)$.

De manière générale, ces fonctions de « Bessel sphériques » [49, p. 86] sont définies à partir des fonctions de Bessel d'ordre demi-entier, de première et de seconde espèce respectivement, J_ν et Y_ν :

$$j_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{n+1/2}(\rho) \quad (1.32)$$

$$y_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} Y_{n+1/2}(\rho) \quad (1.33)$$

Les fonctions de Hankel (fonctions de Bessel de troisième espèce) sont également solutions de l'équation différentielle radiale [49, p. 87] :

$$h_n(\rho) = j_n(\rho) + iy_n(\rho) \quad (1.34)$$

À partir de cette solution de l'équation d'onde scalaire, on peut déduire une base des vecteurs harmoniques sphériques [49, p. 100-102], sur laquelle le champ électromagnétique pourra être développé :

$$\mathbf{M}_{emn} = \frac{-m}{\sin \theta} \sin(m\phi) P_n^m(\cos \theta) Z_n(\rho) \vec{e}_\theta - \cos(m\phi) \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} Z_n(\rho) \vec{e}_\phi \quad (1.35)$$

$$\mathbf{M}_{omn} = \frac{m}{\sin \theta} \cos(m\phi) P_n^m(\cos \theta) Z_n(\rho) \vec{e}_\theta - \sin(m\phi) \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} Z_n(\rho) \vec{e}_\phi \quad (1.36)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{emn} = & \frac{Z_n(\rho)}{\rho} \cos(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos \theta) Z_n(\rho) \vec{e}_r \\ & + \cos(m\phi) \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial [\rho Z_n(\rho)]}{\partial \rho} \vec{e}_\theta - m \sin(m\phi) \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial [\rho Z_n(\rho)]}{\partial \rho} \vec{e}_\phi \end{aligned} \quad (1.37)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{omn} = & \frac{Z_n(\rho)}{\rho} \sin(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos \theta) Z_n(\rho) \vec{e}_r \\ & + \sin(m\phi) \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial [\rho Z_n(\rho)]}{\partial \rho} \vec{e}_\theta + m \cos(m\phi) \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial [\rho Z_n(\rho)]}{\partial \rho} \vec{e}_\phi \end{aligned} \quad (1.38)$$

Le harmoniques sphériques constituant donc une base pour le développement du champ électromagnétique, appliquons les conditions de passage pour calculer les coordonnées du champ électromagnétique, sous éclairage par une onde plane polarisée linéairement et monochromatique.

1.2.4.2 Développements des champs incident, diffusé et intérieur

Champ incident

Comme dans la formulation pour les éléments finis, considérons un éclairage sous forme d'une onde incident plane monochromatique polarisée suivant l'axe x et se propage suivant l'axe z . Le vecteur d'onde est donc précisé en coordonnées cartésiennes :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_i = E_i^0 \exp(ikz) \exp(-i\omega t) \mathbf{e}_x \\ \mathbf{H}_i = H_i^0 \exp(ikz) \exp(-i\omega t) \mathbf{e}_y \end{cases} \quad (1.39)$$

Le champ électrique incident s'écrit en coordonnées sphériques [49, p. 89] :

$$E_i = E_i^0 \exp(ikr \cos(\theta)) \exp(-i\omega t) [\sin \theta \cos \phi \mathbf{e}_r \cos \theta \cos \phi \mathbf{e}_\theta - \sin \phi \mathbf{e}_\phi] \quad (1.40)$$

Les notations sont adaptées à celles de la formulation éléments finis précédente.

Le champ électrique incident est développé sur la base des harmoniques sphériques [49, p. 92] :

$$\mathbf{E}_i = E_i^0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i\mathbf{N}_{e1n}^{(1)}) \quad (1.41)$$

Le coefficient $E_n = E_i^0 i^n \frac{2n+1}{n(n+1)}$ se retrouvera naturellement en facteur des coefficients du champ diffusé et intérieur.

En appliquant les conditions de passage (continuité des composantes tangentielles) au niveau de la surface de la sphère, le champ intérieur à la sphère $\mathbf{E}_1$ et le champ diffusé $\mathbf{E}_s$ sont déduites.

Champ intérieur à la sphère

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - id_n \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right) \quad (1.42)$$

La notation $^{(1)}$ signifie que seules les fonction de Bessel de première espèce sont les harmoniques sphériques vectorielles. En effet, les fonctions de seconde espèce admettant une singularité en l'origine, point du domaine où le champ doit être défini, ici avec $\rho = \varepsilon_1^{1/2} k_0 r$, ε_1 étant la permittivité relative de la sphère (nombre complexe si elle est conductrice, métallique). Les vecteurs de base mobilisés pour le champ intérieur à la sphère sont :

$$M_{o1n}^{(1)} = \cos(\phi) \pi_n(\cos \theta) j_n(\rho) \vec{e}_\theta - \sin(\phi) \tau_n j_n(\rho) \vec{e}_\phi \quad (1.43)$$

$$N_{e1n}^{(1)} = \cos(\phi)n(n+1)\sin\theta\pi_n(\cos\theta)\frac{j_n\rho}{\rho}\vec{e}_r + \cos(\phi)\tau_n(\cos\theta)\frac{[\rho j_n(\rho)]'}{\rho}\vec{e}_\theta - \sin(\phi)\pi_n(\cos\theta)\frac{[\rho j_n(\rho)]'}{\rho}\vec{e}_\phi \quad (1.44)$$

Les coefficients du développement de ce champ sont :

$$\begin{cases} c_n = \frac{\mu_1 j_n(x)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x)[xj_n(x)]'}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]'} \\ d_n = \frac{\mu_1 m j_n(x)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 m h_n^{(1)}(x)[xj_n(x)]'}{\mu m^2 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]'} \end{cases}, \quad (1.45)$$

où $x = k_0 R = N \frac{2\pi R}{\lambda_0}$ est le paramètre taille, et $m = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N}$.

Champ diffusé

Le champ diffusé obtenu à partir des conditions de passage s'écrit [49, p. 94] :

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (a_n \mathbf{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{o1n}^{(3)}), \quad (1.46)$$

avec les harmoniques sphériques et les notations introduites ci-dessus pour les diverses fonctions impliquées :

$$M_{o1n}^{(3)} = \cos(\phi)\pi_n(\cos\theta)h_n(\rho)\vec{e}_\theta - \sin(\phi)\tau_n h_n(\rho)\vec{e}_\phi \quad (1.47)$$

$$N_{e1n}^{(3)} = \cos(\phi)n(n+1)\sin\theta\pi_n(\cos\theta)\frac{h_n\rho}{\rho}\vec{e}_r + \cos(\phi)\tau_n(\cos\theta)\frac{[\rho h_n(\rho)]'}{\rho}\vec{e}_\theta - \sin(\phi)\pi_n(\cos\theta)\frac{[\rho h_n(\rho)]'}{\rho}\vec{e}_\phi \quad (1.48)$$

Les coefficients du développement du champ diffusé s'écrivent :

$$\begin{cases} a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu_1 j_n(x)[mxj_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]'} \\ b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu j_n(x)[mxj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]'} \end{cases}, \quad (1.49)$$

où $x = k_0 R = N \frac{2\pi R}{\lambda_0}$ est le paramètre taille, et $m = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N}$, avec N_1 l'indice de réfraction de la particule ($N_1 = \varepsilon_r^{1/2}$), N l'indice optique du milieu ambiant, non absorbant. R est le rayon de la particule.

Soulignons que le calcul via la théorie de Mie fournis des solutions sous forme de série infinie, pour des particules de taille arbitraire. Les résultats au premier

ordre $n = 1$ correspondent au mode dipolaire et les ordres supérieurs $n > 1$ correspondent aux modes multipolaires.

1.2.5 Résumé et algorithmes

Pour calculer le champ électrique en tout nœud d'un maillage repéré en coordonnées cartésiennes, il est d'abord nécessaire de convertir les coordonnées cartésiennes en coordonnées sphériques. Ceci permet de définir r, θ, ϕ pour chaque point. Ensuite, les harmoniques sphériques doivent être calculées pour chaque domaine. Le calcul de chaque fonction impliquée dans ces vecteurs de base est indépendant.

1.2.5.1 Calcul des dépendances angulaires

Les fonctions π_n et τ_n d'origine les fonctions de Legendre, sont calculées par récurrence montante, avec $\pi_0 = 0$ et $\pi_1 = 1$ pour initialisation :

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} \cos \theta \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \cos \theta \pi_{n-2}, \quad (1.50)$$

avec $\pi_0 = 0$ et $\pi_1 = 1$.

$$\tau_n = n \cos \theta \pi_n - (n+1) \pi_{n-1}. \quad (1.51)$$

1.2.5.2 Calcul des dépendances radiales

Les fonctions de Bessel sont implémentées dans nombre de bibliothèques. Suivant la version de Matlab, il est nécessaire de se méfier du calcul direct des fonctions de Hankel qui est étonnamment moins stable que celui de chaque fonction de Bessel. Il est nécessaire de calculer le paramètre de taille $x = 2\pi R/\lambda_0$, R étant le rayon de la particule et λ_0 la longueur d'onde du rayonnement incident ($\lambda_0 = 2\pi c_0/\omega$). À plusieurs reprises, aussi bien dans l'expression des harmoniques sphériques que dans les coefficients des développements, apparaît une dérivée qui doit être exprimée en fonction des fonctions de Bessel [49, p. 86]

$$[\rho Z_n(\rho)]' = Z_n(\rho) + \rho Z_n'(\rho) = Z_n(\rho) + \rho \left(\frac{n}{2n+1} Z_{n-1} - \frac{n+1}{2n+1} Z_{n+1} \right) \quad (1.52)$$

1.2.5.3 Limitation de la série

La série obtenue pour calculer le champ doit être limitée en nombres de termes pour effectuer une évaluation numérique. Le nombre de termes évalués numériquement est directement relié à la taille des particules. Les critères de troncature de Wiscomb peuvent être utilisés [50], $E[]$ étant la fonction partie entière :

$$\begin{cases} n_{stop} = E[x + 4x^{\frac{1}{3}} + 1] & 0.002 \leq x \leq 8 \\ n_{stop} = E[x + 4.05x^{\frac{1}{3}} + 2] & 8 \leq x \leq 2400 \\ n_{stop} = E[x + 4x^{\frac{1}{3}} + 2] & 2400 \leq x \leq 20000 \end{cases} \quad (1.53)$$

Notons que le calcul d'un champ avec une précision contrôlée est plus exigeant en nombre de termes que le calcul des sections efficaces, que l'on trouve dans nombre de programmes disponibles sur internet. Pour le développement du champ incident, un critère d'arrêt peut être défini en fonction de la précision sur l'amplitude de l'intensité qui doit être égale à $\|E_i^0\|^2$, dans tout le domaine de calcul. Cette méthode est également applicable au maximum du champ total qui est localisé, si la particule est de rayon suffisamment petit, dans la direction de polarisation (direction du champ électrique incident) et au niveau de la surface de la particule [51]. Il est possible d'évaluer cette exaltation de champ à l'aide du modèle de Mie.

1.2.6 Résonance de l'exaltation de l'intensité du champ électrique

Dans la suite de ce manuscrit, une particule d'or, sphérique de rayon 20 nm sera considérée. La figure 1.4 montre le maximum de l'intensité, les efficacités d'absorption Q_{abs} et de diffusion Q_{sca} comme définies dans la référence [49]. Les données de permittivité relative de Johnson et Christy sont utilisées pour ce calcul [32]. La résonance du maximum de l'intensité correspond à $\lambda_0 = 520$ nm, celle de l'absorption à 500 nm et celle de la diffusion à 515 nm. La dynamique de la résonance en intensité n'est que de 53% sur tout le spectre visible. En conséquence, la longueur d'onde importe peu dans ce domaine et $\lambda_0 = 632,8$ nm sera choisie dans la suite de ce travail (raie rouge du laser He-Ne). La discontinuité de la composante normale du champ électrique et l'effet géométrique lié à la courbure de la nanoparticule priment sur l'effet lié aux variations de la permittivité relative. De plus, les incertitudes sur les valeurs de cette propriété matérielle, notamment induite par la nanostructuration, nous encouragent à faire ce choix qui permettra de ne pas surévaluer l'élévation de température et les dilatations.

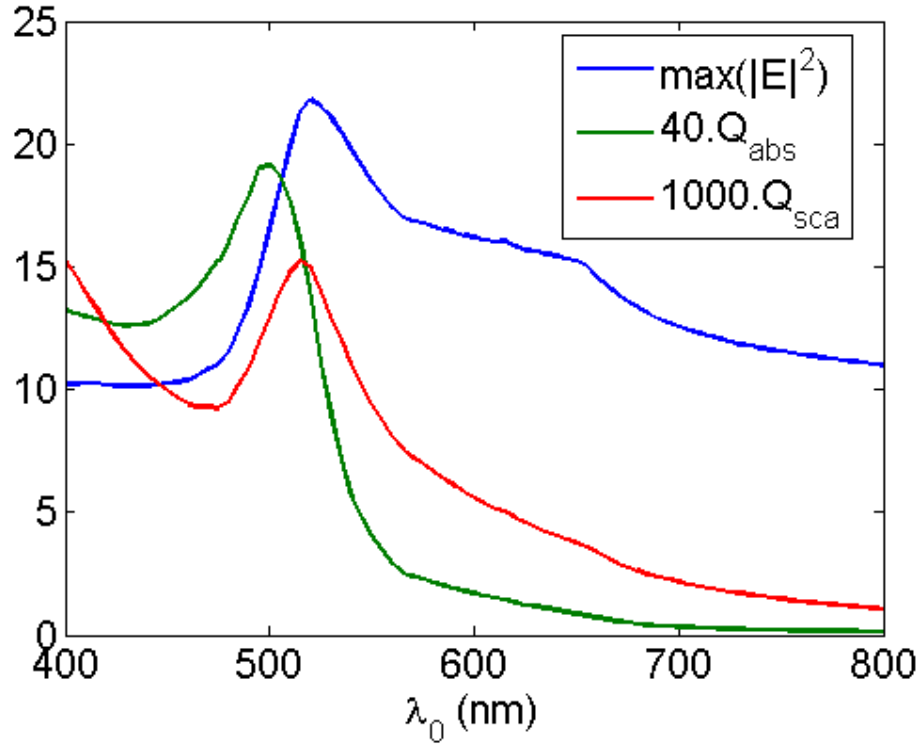


FIGURE 1.4: Maximum de l'intensité dans tout le domaine de calcul et efficacités d'absorption Q_{abs} et de diffusion Q_{sca} .

La section suivante est dédiée à la présentation du modèle d'échauffement de la nanoparticule.

1.3 Modélisation thermique

La description thermique du problème nécessite la compréhension du cadre théorique des lois physiques et équations mathématiques qui traitent les échanges thermique dans un système matériel [52, 53, 25, 54, 55, 56, 57].

La physique de transfert thermique dans des nanostructures a été étudiée depuis que la fabrication de tels objets a été contrôlée [53, 25, 58, 59]. Le modèle classique et macroscopique des phénomènes thermiques repose sur la loi de Fourier qui permettra d'établir l'équation aux dérivées partielles à résoudre, dont l'inconnue est la température. Les conditions de validité de cette loi dans le domaine nanométrique doivent être rappelées. Les divers modes de transfert thermique (conduction, convection, rayonnement) méritent ensuite d'être précisés, puisqu'ils conditionnent les conditions de passage et les conditions aux limites qui devront être choisies pour résoudre le problème éléments finis. L'équation de la chaleur résolue dans cette thèse sera ensuite présentée et discutée.

1.3.1 Les modes de transferts thermiques

Trois modes de transferts thermiques seront successivement décrits : la conduction, la convection et le rayonnement. Ces modes de transfert pourront être utilisés pour décrire les conditions frontières imposées au bord du domaine de calcul ou au passage d'un matériau à un autre, à l'intérieur du domaine de calcul.

1.3.1.1 La conduction thermique

La conduction thermique est le mode de transfert de chaleur dans un système matériel (solide, liquide, ou gaz) dans lequel il existe un gradient de température. A l'échelle microscopique, il se traduit par l'interaction entre les atomes ou molécules constituant un matériau [52]. L'énergie thermique est transportée dans les solides ou les fluides de proche en proche sans déplacement macroscopique de la matière. Pour les solides ces échanges résultent des vibrations du réseau cristallin des électrons libres, alors que pour les fluides ils sont en relation avec l'agitation moléculaire [25, 56, 57].

Dans le cas des solides, la conduction est assurée par deux processus couplés, le premier est dû à la contribution des électrons et l'autre à la contribution des phonons. On trouve alors deux composantes dans la conductivité thermique qui représentent ces deux contributions. Cependant, dans le cas de métaux, la contribution des phonons est négligeable devant celle des électrons en raison de forte concentration des électrons de conduction. Alors que, pour les matériaux non métalliques la conductivité thermique est dominée par la contribution des phonons. Dans le cadre de cette étude, nous intéressons à l'élévation de température dans les métaux nobles émergés dans un fluide. La théorie de la cinétique permet de définir une expression analytique de la conductivité thermique d'un métal [59]. Elle est définie pour les macromatériaux par la loi de Wiedmann-Franz :

$$\lambda_b(T) = \frac{k_B^2 \pi^2 n_e l_{eb}}{3m_e V_F} \cdot T \quad (1.54)$$

Où k_B est la constante de Boltzmann, n_e est le nombre d'électrons libres par atomes, l_{eb} est le libre parcours moyen des électrons et V_F la vitesse de Fermi. L'équation (1.54) montre que la conductivité thermique est influencée par la température selon une loi linéaire. Cependant, pour les grandes variations de température, il faut prendre en considération la modification du paramètre thermique.

La principale limitation de l'approche macroscopique en régime continu, apparaît à l'échelle nanométrique lorsque la taille caractéristique des nanostructures est du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen des électrons [60, 25]. En conséquence, à l'échelle nanométrique une correction de la valeur de la conductivité thermique en fonction de la taille caractéristique est nécessaire à fin de tenir compte des limitations dues au facteur d'échelle [25, 59] :

$$\lambda_p = \frac{\lambda_b}{1 + \frac{l_{eb}}{L}} \quad (1.55)$$

La substitution de la valeur de la conductivité thermique macroscopique en fonction de la température dans l'équation (1.55) conduit à une relation qui traduit la dépendance de la température :

$$\lambda_p(T) = \frac{k_B^2 \pi^2 n_e l_{eb}}{3m_e V_F (1 + \frac{l_{eb}}{L})} \cdot T \quad (1.56)$$

Avec une taille caractéristique L qui tend vers l'infini la valeur de la conductivité thermique tend vers celle du macromatériau. Suivant le cas considéré les conductivités thermiques ci-dessus pourront être utilisées. Nous noterons à présent λ^t la conductivité thermique. La densité de flux de chaleur Φ_{cond} (en W.m^{-2}) correspondant à la conduction s'écrit à partir de la loi de Fourier :

$$\Phi_{\text{cond}} = -\lambda^t \nabla T \quad (1.57)$$

Elle caractérise le sens de propagation spontané de la chaleur selon la direction de température élevée vers la région de température plus basse. ∇ étant l'opérateur vectoriel gradient. λ^t (en $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) représente la conductivité thermique. En général elle est un tenseur qui se réduit à un scalaire dans le cas d'un milieu isotrope. Pour un milieu isotrope la conductivité thermique est une constante positive qui dépend de la nature, la taille et la température d'un matériau. Dans le cas des solides, la conduction est assurée par deux processus couplés, le premier est dû à la contribution des électrons et l'autre à la contribution des phonons. On trouve alors deux composantes dans la conductivité thermique qui représentent ces deux contributions. Cependant, dans le cas de métaux, la contribution des phonons est négligeable devant celle des électrons en raison de forte concentration des électrons de conduction. Pour les matériaux non métalliques la conductivité thermique est dominée par la contribution des phonons. Dans le cadre de cette étude, nous intéressons à l'élévation de température dans les métaux nobles émergés dans un fluide.

L'ordre de grandeur du flux thermique lié à la conduction est, pour un gradient de température de 100 K sur une centaine de nanomètres, et une particule en or ($\lambda^t \approx 315 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$), est voisin de $3.10^{11} \text{ W.m}^{-1}$.

Un deuxième mode de transfert thermique peut être considéré, notamment lorsque l'on considère les nanoparticules dans l'air ou dans l'eau : la convection.

1.3.1.2 La convection thermique

La convection thermique est un mode de transfert de chaleur spécifique aux fluides en mouvements. Dans le cas d'un fluide, les molécules ou atomes qui constituent la matière sont faiblement liés. Sous l'effet d'un flux de chaleur, la modifica-

tion locale de la masse volumique entraîne les mouvements des particules constituant le fluide [52, 54, 61, 25]. À la différence de la conduction, ce mode de transfert se produit avec un déplacement macroscopique de la matière. On le trouve souvent couplé au phénomène de conduction dans le milieu extérieur d'un corps solide et engendre un changement de la température du corps solide et du voisinage immédiat de sa paroi.

Lors d'un écoulement d'un fluide à une température T_f autour d'une surface d'un corps solide de température T_s , un échange d'énergie se produit. La loi fondamentale de base qui décrit ce phénomène d'une manière analogue à la loi de Fourier est la loi de Newton qui correspond à une relation linéaire entre la densité de flux et l'écart de température du solide T_s et celle du fluide T_f [52] :

$$\Phi_{conv} = h(T_s - T_f), \quad (1.58)$$

où Φ_{conv} s'appelle la densité de flux de chaleur et h en $\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ est le coefficient d'échange thermique par convection, c'est une constante physique qui dépend de la nature du couple solide-fluide.

On classe généralement deux types de convection en fonction du régime d'écoulement : la convection naturelle et la convection forcée. La convection naturelle est obtenue lorsque les mouvements des fluides sont engendrés uniquement par la force d'Archimède, induite par la différence de masse volumique au sein du fluide. La convection forcée est obtenue lorsque les mouvements du fluide est conséquence d'un écoulement extérieur imposé. Dans ce cas, ces écoulements impliquent la force qui engendre les mouvements des molécules ou atomes constituant le fluide. Les forces d'Archimède sont négligeables dans ce cas.

Pour ces deux types de convection, la résolution du problème nécessite de connaître le coefficient d'échange thermique h . Cependant, l'importance de flux de chaleur échangé dépend d'une manière complexe de la géométrie, des propriétés physiques du fluide (conductivité, chaleur, viscosité), de la température du couple fluide solide et de la vitesse d'écoulement du fluide. En conséquence, la difficulté réside toujours dans l'évaluation de la bonne valeur de h . Ce coefficient peut être soit estimé par calcul (analytique ou numérique) dans des cas limités et très simples (haut degré de symétrie), soit à travers des relations empiriques mesurées expérimentalement. Soulignons que dans les deux cas, des variations sont liées au type de convection, à la vitesse imposée du fluide, à la forme des objets et à la température. *A priori*, les données empiriques de h pourront être utilisées pour le milieu extérieur à la nanoparticule et donc aux frontières du domaine de calcul. Nous étudierons la sensibilité du modèle numérique à ce paramètre. Dans la littérature on trouve la gamme des valeurs de h pour les deux types de fluides utilisé dans cette étude, l'eau et l'air.

	Convection libre	Convection forcée
	$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$	$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$
Air	5-25	10-500
Eau	100-500	100-1500

Donnons quelques bases sur les modèles permettant de prendre en compte la vitesse du fluide. La modélisation mathématique du phénomène de convection est relativement complexe. En effet, elle fait appel aux équations des bilans de masse (1), de quantité de mouvement (2) et d'énergie (3). La synthèse des équations bilan est donnée par le système d'équations suivant, dans un matériau [57] :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \\ \rho_0 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\nabla P + \mu \Delta \mathbf{U} \end{cases} \quad (1.59)$$

où $\mathbf{U}$ désigne le vecteur vitesse des particules des fluides, P la pression (en Pa), μ est le coefficient de viscosité dynamique (en Pa.s) et ρ_0 est la masse volumique à T_0 et P_0 du fluide.

La résolution analytique du problème lors de l'étude d'un corps solide immergé dans un fluide est souvent quasi impossible. Une méthode de simplification du problème thermique consiste à poser le flux de la chaleur à la paroi du corps solide de la façon suivante [62, 63] :

$$\Phi = h(T_s - T_f) \cdot \vec{n} \quad (1.60)$$

Où T_s est la température de la surface du corps solide, T_f étant la température du fluide extérieur, $\vec{n}$ étant le vecteur normal dirigé du solide vers le fluide. Avec cette condition, le coefficient d'échange thermique est le paramètre qui traduit les échanges de température entre le corps solide et le fluide.

L'ordre de grandeur du flux de chaleur est voisin de 10^4 W.m^{-2} pour une différence de température de 100 K.

Le dernier mode de transfert thermique est le rayonnement. Un corps chauffé émet un rayonnement électromagnétique.

1.3.1.3 Le rayonnement thermique

Le phénomène de rayonnement constitue le troisième mode de transfert thermique. Contrairement aux autres modes, le porteur d'énergie n'est plus un support matériel, l'énergie est transférée par émission d'ondes électromagnétiques. Le rayonnement thermique se situe principalement dans l'infrarouge, le visible et une partie de l'ultraviolet (0.1 à $100 \mu\text{m}$). Ce phénomène peut se produire dans un milieu transparent au rayonnement ou encore dans le vide. La puissance thermique issue du rayonnement est gouvernée par des lois semblables à celles présentées dans le chapitre précédent. Dans le cas général, pour un objet de volume Ω délimité par une surface S , on note Φ_i le flux radiatif incident sur S , Φ_r le flux radiatif

réfléchi par S , Φ_a le flux absorbé par Ω , Φ_{tr} le flux transmis dans Ω et Φ_e le flux émis par Ω .

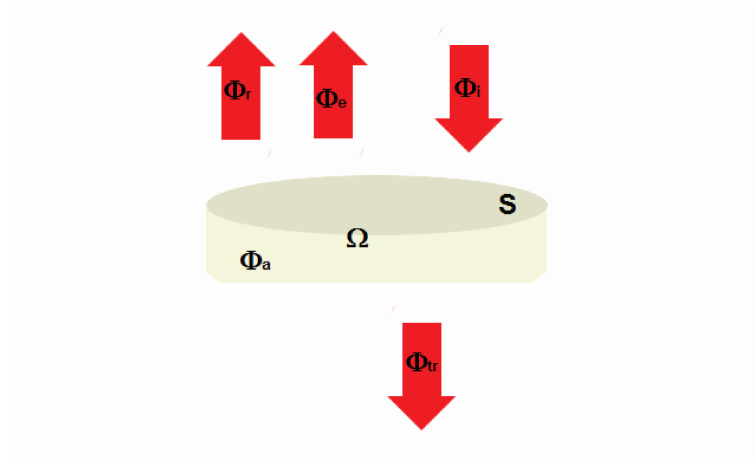


FIGURE 1.5: fig1

Ce rayonnement diminue l'énergie thermique interne d'un corps chaud. Ce mode de transfert a une grande importance en présence de convection naturelle à température ambiante. Il contribue à l'équilibrage thermique. Son effet devient dominant pour les températures élevées. Le flux radiatif échangé entre deux corps à des températures différentes, placés en face l'un de l'autre, est issue de la loi de Stephan-Boltzmann (corps noir) [25, 57] :

$$\Phi_e = \epsilon \sigma (T_1^4 - T_2^4) \vec{n}, \quad (1.61)$$

avec $\sigma = 5,670373 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$, la constante de Stephan-Boltzmann, ϵ étant le coefficient d'émissivité du rayonnement thermique (grandeur sans dimension qui caractérise la capacité d'un matériau à émettre, elle est comprise entre 0 et 1, pour l'or elle vaut 0.9) .

Dans notre cas, l'élévation de la température de la nanoparticule d'or peut engendrer une émission radiative vers le milieu environnant d'où le refroidissement de la nanoparticule. Il est intéressant donc, d'étudier l'influence de ce phénomène sur notre modèle thermique en imposant un flux de chaleur à la surface extérieure de la nanoparticule sous la forme suivante :

$$\Phi_e = \epsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^4) \cdot \vec{n} \quad (1.62)$$

Où T représente la température à la surface du nanoparticule et T_{amb} la température ambiante. L'ordre de grandeur de ce flux est, pour une différence de température de 100 K par rapport à la température ambiante, et pour l'or : $3 \cdot 10^{-4} \text{ W.m}^{-2}$.

1.3.1.4 Synthèse

Les résultats numériques donnés pour une élévation de température de 100 K de la nanoparticule pour les trois modes de transfert précédents montrent la prédominance du mode de conduction sur le mode de convection, et de ce dernier sur le transfert par rayonnement. Bien évidemment, suivant les conditions d'illumination, l'élévation de température pourra être plus grande et les différents modes de transfert de chaleur devront être comparés, en situation de résolution de l'équation de la chaleur.

1.3.2 Équation de la chaleur et conduction

L'équation de chaleur, est une équation aux dérivées partielles de type parabolique permettant de déterminer le champ de température d'un système thermalisé par conduction. Elle est établie en appliquant le premier principe de la thermodynamique, la loi de conservation d'énergie, sur un système matériel [52]. L'équation de la chaleur permet de relier la variation temporelle de la température et sa variation spatiale, elle s'écrit en l'absence de convection :

$$\frac{\partial(T)}{\partial t} = D\Delta T + \frac{Q}{\rho C_s}. \quad (1.63)$$

Cette équation aux dérivées partielles, de type parabolique, fait intervenir des constantes propres au matériau : D le coefficient de diffusivité thermique (en $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$), ρ la masse volumique (en $\text{kg}.\text{m}^{-3}$), C_s la chaleur spécifique massique (en $\text{J}.\text{K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$). Q est la densité volumique de puissance en $\text{W}.\text{m}^3$, terme source de l'échauffement.

Dans le cas du transfert de chaleur dans les matériaux, sans déplacement de matière macroscopique (sans convection), ce qui est le cas sans approximation dans un solide, la loi de Fourier fait intervenir la conductivité thermique λ^t (en $\text{W}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$), nombre positif pour un matériau isotrope. Le flux thermique ou flux de température est alors défini :

$$\Phi_c = -\lambda^t \nabla T. \quad (1.64)$$

Dans ce cas, l'équation de la chaleur s'écrit :

$$\frac{\partial(T)}{\partial t} - \nabla \lambda^t \nabla T = \frac{Q}{\rho C_s}. \quad (1.65)$$

1.3.3 Temps et longueur caractéristique

L'équation de la chaleur dans un matériaux homogène et isotrope (dans lequel la conductivité thermique λ^t est une constante) est une équation de conservation de l'énergie. Elle peut s'écrire de manière à déduire la diffusivité thermique :

$$\frac{\rho C_s}{\lambda^t} \frac{\partial(T)}{\partial t} - \Delta T = Q, \quad (1.66)$$

d'où $D = \frac{\lambda^t}{\rho C_s}$. La dimension de cette constante matérielle est celle du carré d'une longueur divisé par un temps. Pour évaluer la pertinence d'une simplification de l'équation de la chaleur (suppression de la dérivée temporelle) dans nos applications, il est possible d'utiliser les ordres de grandeur caractéristiques des problèmes traités. À l'échelle nanométrique, lorsque l'échauffement est produit par une onde électromagnétique dans le domaine du visible, la longueur caractéristique est de l'ordre de 10^{-9} m et la période des oscillations de la source de chaleur est de l'ordre de 10^{-14} s. Le rapport des variations de la dérivée temporelle à la variation spatiale de la température est alors voisin de $10^{-4} \text{ m}^{-2} \cdot \text{s}^1$.

On pourrait dès à présent considérer que le problème pourrait être considéré comme statique. Cependant, pour s'en convaincre, il est possible de faire une hypothèse de dépendance harmonique de la source de chaleur et de déduire la température.

1.3.3.1 Onde thermique

Si on suppose, dans un problème unidimensionnel :

$$Q(x, t) = Q_0 \exp(i\omega t) \exp(i\omega_L x), \quad (1.67)$$

la solution de l'équation aux dérivées partielles peut être trouvée en la supposant de la même forme que la source (onde thermique) :

$$T(x, t) = T_0 \exp(i\omega t) \exp(i\omega_L x). \quad (1.68)$$

La remplacer dans l'équation de la chaleur donne :

$$\frac{\rho C_s}{\lambda^t} \frac{\partial(T)}{\partial t} - \Delta T = T_0 \left(-\omega_L^2 + i\omega \frac{\rho C_s}{k} \right). \quad (1.69)$$

La source de chaleur étant une fonction réelle, il est nécessaire que :

$$\omega \frac{\rho C_s}{\lambda^t} \ll k^2, \quad (1.70)$$

donc que la longueur d'onde thermique λ_T soit très petite devant la période des oscillations thermique T_T donc que [53] :

$$\lambda_T \ll \sqrt{2\pi D T_T}. \quad (1.71)$$

Si on considère que la période des oscillations thermiques est celle de l'onde électromagnétique, en considérant $D \approx 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ pour un métal, on trouve : $\lambda_T \ll 8 \cdot 10^{-10}$. Ceci permet de justifier le fait que l'on puisse, à l'échelle nanométrique, considérer une valeur moyenne de la source et donc négliger le caractère

ondulatoire de l'onde thermique. Cet ordre de grandeur montre également que les phénomènes à l'échelle atomique devraient être considérés (phonons et électrons).

L'hypothèse de source thermique menant à une onde thermique peut être cependant considérée comme restrictive. Une dépendance harmonique temporelle et la méthode de séparation des variables peut suffire au raisonnement.

1.3.3.2 Séparation des variables

Considérons un problème mono-dimensionnel et une source de chaleur sous la forme :

$$Q(t) = Q_0 \exp(i\omega t). \quad (1.72)$$

L'équation de la chaleur s'écrit :

$$\frac{\rho C_s}{\lambda^t} \frac{\partial(T)}{\partial t} - \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = Q(t), \quad (1.73)$$

Supposons $T(x, t) = T_0 T_{sd}(x) \cdot T_{sd}(t)$, avec $T_{sd}(t)$ sous forme harmonique, le remplacement de cette expression dans l'équation de la chaleur donne :

$$T_0 \left[\frac{\rho C_s}{\lambda^t} i\omega T_{sd}(x) - \frac{\partial^2 T_{sd}(x)}{\partial x^2} \right] T_{sd}(t) = Q_0 \exp(i\omega t). \quad (1.74)$$

La solution de l'équation aux dérivées partielles entre crochets est de la forme :

$$T_{sd}(x) = \exp \left(\sqrt{\frac{\rho C_s}{\lambda^t} \frac{1+i}{\sqrt{2}}} \sqrt{\omega} x \right). \quad (1.75)$$

La solution générale pour la température s'écrit donc :

$$T(x, t) = T_0 \exp \left(\sqrt{\frac{\rho C_s}{\lambda^t} \frac{1+i}{\sqrt{2}}} \sqrt{\omega} x \right) \exp(i\omega t) - \frac{1}{i\omega} \frac{\rho C_s}{\lambda^t} Q_0 \exp(i\omega t). \quad (1.76)$$

Même si cette solution ne vérifie pas les conditions aux limites attendues, elle permet de déduire une longueur caractéristique du phénomène thermique :

$$L_T = \sqrt{\frac{\lambda^t}{\rho C_s}} \frac{1}{\sqrt{\omega} \sqrt{2\pi}} = \sqrt{D} \frac{1}{\sqrt{\omega} \sqrt{2\pi}} \quad (1.77)$$

La diffusivité thermique D pour l'or étant voisine de $127,2 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ et de $20 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ pour l'air, il est possible d'évaluer L_T pour des pulsations d'ondes électromagnétiques dans le domaine du visible ($\omega \approx 3 \cdot 10^{15} \text{ rad/s}$) : $L_T \approx 10^{-11} \text{ m}$. Il est alors évident qu'une valeur moyenne peut être considérée, même à l'échelle

nanométrique et qu'il serait nécessaire de considérer les phénomènes à l'échelle atomique (électrons et phonons).

À l'inverse, à l'échelle nanométrique, l'équation (1.77) peut permettre de déduire un temps caractéristique des phénomènes thermiques :

$$T_T = \frac{(\pi 10^{-9})^2}{D} \approx 10^{-14} \text{s} \quad (1.78)$$

Cette valeur est environ dix fois plus grande que la période de l'onde électromagnétique. Ceci permet de justifier la valeur moyenne considérée dans l'équation (1.84) et le fait que l'on puisse négliger la dérivée temporelle dans l'équation de la chaleur et donc considérer dans la suite une formulation statique :

$$\nabla \cdot (\lambda^t \nabla T) = -\frac{Q}{\rho C_s} \quad (1.79)$$

Dans une formulation éléments finis, il est nécessaire de fixer des conditions au bord du domaine de calcul et donc de choisir parmi les différents modes de transfert thermique. De plus, une correction de la conductivité thermique est proposée pour tenir compte du confinement des charges lié à la taille nanométrique des objets considérés. Précisons la source de chaleur.

1.3.4 Source de chaleur

L'absorption de la lumière par la matière produit son échauffement [64, 10, 58, 22, 6, 2]. Pour évaluer cette transformation d'énergie, il est nécessaire d'introduire des considérations énergétiques des ondes électromagnétiques à l'intérieur des matériaux absorbant. Dans le cas d'une onde monochromatique plane, la densité d'énergie électromagnétique moyenne sur une période peut s'exprimer sur un élément de domaine défini par Ω et sa surface S comme suit [24] :

$$U = \iint_S \Re(-\vec{n} \cdot P) dS = \iiint_{\Omega} \Re(-\vec{n} \cdot P) d\tau, \quad (1.80)$$

$P = \frac{E \times H^*}{2}$ étant le vecteur de Poynting complexe exprimé en V.A.m^{-2} , Ω désigne le volume d'un matériau fermé par une surface S . En utilisant les équations de Maxwell :

$$\nabla \times E = i\omega B \nabla \times H^* = i\omega D^*. \quad (1.81)$$

Et encore, en exploitant l'identité vectorielle suivante :

$$\nabla \cdot (E \times H^*) = -i\omega E \cdot D^* + i\omega H^* \cdot B, \quad (1.82)$$

On obtient :

$$U = \frac{1}{2} \iiint_{\Omega} \Re(i\omega E \cdot D^*) d\tau + \frac{1}{2} \iiint_{\Omega} \Re(-i\omega H^* \cdot B) d\tau \quad (1.83)$$

Cette énergie est à l'origine de la chaleur dans les matériaux lors de son interaction avec la lumière. Elle correspond aux pertes électromagnétiques à l'intérieur d'un matériau. Compte tenue à l'hypothèse des milieux non magnétique ($\mu = 1$) utilisé dans le cadre de cette étude, on peut éliminer la perte magnétique. On définit alors, la quantité volumique Q exprimé en W.m^{-3} qui désigne la perte électromagnétique ou encore le source de chaleur thermique.

$$Q = \frac{\omega \varepsilon_0}{2} \varepsilon'' ||\mathbf{E}(\mathbf{r})||^2, \quad (1.84)$$

La partie imaginaire de la permittivité électrique, caractérise donc la nature d'un matériau et sa capacité d'absorption. Les nanoparticules de métaux nobles peuvent absorber efficacement l'énergie électromagnétique incidente. s'exprime en fonction du champ électrique et de la partie imaginaire de la permittivité relative du métal ε'' et de la valeur moyenne de l'intensité du champ électrique $\mathbf{E}$, pour les raisons évoquées ci-dessus. L'unité SI de Q est $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-3}$ ou W.m^{-3} . Cette densité volumique de puissance absorbée contribue à l'élévation de température par effet Joule de la particule, qui devient une source de chaleur pour le milieu extérieur à la nanoparticule.

1.3.5 Synthèse du problème thermique pour les éléments finis

La conséquence directe des trois modes fondamentaux de transfert thermique est toujours la variation de température des systèmes matériels. La puissance du chauffage laser sera supposée suffisamment faible pour ne pas induire de changement d'état des matériaux, notamment des nanostructures d'or. En effet, dans les différentes études expérimentales les nanostructures restent solides sous l'effet de chauffage induit par l'éclairage avec un laser continu. Dans la plupart des applications, ces nanostructures sont immergées dans l'air ou dans un milieu biologique (fluide). Sous ces conditions, les nanostructures métalliques et les fluides sont le lieu du phénomène de conduction. Le contact du solide (l'or) chauffé avec le fluide produit une convection naturelle et la présence d'une nanostructure d'or chauffée dans un milieu transparent (fluide) peut produire un rayonnement thermique. En général, tous les modes de transfert thermiques doivent être considérés, même si la comparaison des valeurs des flux thermiques de ces trois modes de transfert après une élévation de température de quelques centaines de degrés, la conduction domine [16] .

La mise en équation de tous ces modes de transfert thermique peut sembler complexe. Si on considère le transfert par conduction comme dominant, les phénomènes de rayonnement et de convection peuvent être seulement appliqués comme conditions de passage ou aux limites [62, 63]. Dans ce cas, nous n'avons plus qu'à résoudre l'équation de chaleur de conduction dans les nanostructures ainsi que dans le milieu environnement, on appliquant des conditions aux limites qui traduisent la contribution du rayonnement et de convection au problème thermique. Il nous faut alors résoudre ce système d'équations :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\lambda_1^t \nabla T) + \frac{Q}{\rho C_s} = 0 & \text{à l'intérieur du nanoparticule} \\ \nabla \cdot (\lambda_2^t \nabla T) = 0 & \text{dans le milieu environnement} \\ Q = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \omega \Im(\varepsilon) \|\mathbf{E}(\mathbf{r})\|^2 \end{cases} \quad (1.85)$$

1.3.5.1 Conditions aux limites

En général, les conditions aux limites peuvent garantir l'unicité des solutions lors de la résolution des équations aux dérivées partielles. En conséquence, le bon choix des conditions aux limites est très important à la résolution de l'équation de chaleur. Typiquement, il existe trois types des conditions aux limites possibles [57]. Afin de modéliser le problème thermique, les conditions aux limites doivent avoir un sens physique [62] :

- Conditions de bord type Dirichlet dans laquelle la valeur de la température est imposée.

$$T = T_s \quad (1.86)$$

- Conditions de bord type Neumann dans laquelle la valeur du flux thermique est imposée.

- Condition de convection :

$$-\mathbf{n} \cdot (\lambda^t \nabla T) = h(T_p - T_f), \quad (1.87)$$

avec T_f est la température de fluide et T_p est la température de la paroi de la nanoparticule. Cette condition traduit la contribution de la convection naturelle dans le fluide au transfert thermique.

- Condition de rayonnement :

$$-\mathbf{n} \cdot (\lambda^t \nabla T) = \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_{amb}^4) \quad (1.88)$$

Avec T_s est la température à la surface de la nanoparticule et T_{amb} est la température ambiante. Cette condition traduit la contribution du rayonnement au transfert thermique.

- Conditions de bord type Mixte dans laquelle la valeur de la température et la valeur du flux thermique sont imposées.

En général, en formulation forte, il est nécessaire d'imposer les conditions de continuité naturelle à l'interface entre deux matériaux de nature différente (1-2) :

- La continuité de flux :

$$\mathbf{n} \cdot (\lambda^t \nabla \mathbf{T})_1 = \mathbf{n} \cdot (\lambda^t \nabla \mathbf{T})_2 \quad (1.89)$$

- La continuité de température :

$$T_1 = T_2 \quad (1.90)$$

Parfois, une discontinuité de la température est envisageable, c'est la température de contact.

Le problème thermique peut maintenant être résolu numériquement. La sensibilité de la solution pour les différentes conditions de bord présentées ci-dessus sera étudiée numériquement. Abordons maintenant le dernier problème de la modélisation multiphysique : le problème mécanique qui va permettre de décrire la dilatation des nanoparticules chauffées.

1.4 Modèle mécanique

1.4.0.2 Introduction

Une fois que la nanostructure est chauffée, elle se dilate sous l'effet de la variation de la température. Le calcul de la variation de la géométrie de la nanostructure en fonction de la variation de la température nécessite la compréhension des bases théorique de la mécanique des solides déformable afin d'établir les lois est les équations qui décrivent ce phénomène [65, 66, 67, 68] .

Tout matériau est constitué par des molécules et des atomes reliés par des forces d'interaction desquelles résultent une énergie potentielle d'interaction. Les matériaux solides peuvent être structurés sous forme amorphe (les atomes sont désordonnés) ou sous forme cristalline. Les matériaux métalliques notamment l'or sont souvent structurés sous forme cristalline.

Lorsqu'un solide est soumis à des efforts extérieurs, les forces de liaison agissent afin d'équilibrer le système. En conséquence, les variation des distances interatomiques par rapport à ces valeurs initiales d'équilibre. À l'échelle macroscopique, ce changement se traduit par la déformation, un changement de la forme géométrique de l'objet. La distance entre deux points arbitraires A_1 et A_2 au sein du corps solide varie, ce qui donne naissance à la notion de déplacement [65] .

Dans cette étude l'origine des déformations sont les contraintes thermiques, ce qui nous conduit à la notion de la dilatation thermique (thermoélasticité). Sous l'effet d'une variation de température ΔT une variation relative de volume ΔV se produit selon une loi linéaire :

$$\frac{\Delta V}{V} = \alpha(T)\Delta T, \quad (1.91)$$

avec α (K^{-1}) le coefficient de dilatation thermique.

L'origine physique de cette dilatation thermique est l'énergie d'agitation thermique qui s'oppose à l'énergie potentielle d'interaction et engendre une modification des forces interatomiques. Ces deux énergies sont complémentaires afin de maintenir le système en équilibre, ce qui engendre une augmentation de la distance moyenne entre les atomes qui constituent le solide [66]. En général, la variation du volume des corps solides due à la dilatation thermique est faible. Nous sommes alors sous l'hypothèse des faibles déformations, ce qui nous ramène dans le domaine élastique linéaire. En outre, le volume des nanostructures est très faible, ce qui permet de négliger l'influence de la contrainte mécaniques sur les constantes optiques et thermiques.

Rappelons que l'illumination laser est continue et donne lieu à un problème thermique stationnaire pour lequel la température n'est qu'une fonction des variables d'espace. Par conséquent, le temps n'intervient pas dans le calcul des déplacements, on s'intéresse alors aux déformations statiques des solides.

Afin d'évaluer la pertinence du modèle théorique à une telle petite échelle, il est

primordial de se référer à des travaux qui décrivent les déformations des nanostructures soumises à des contraintes [65, 69, 70, 71, 72, 73, 74].

1.4.0.3 Modélisation du comportement élastique linéaire

La relation entre le couple contrainte-déformation définit le comportement d'un matériau. En effet, un matériau est dit élastique s'il retrouve toujours sa forme et sa taille initiale si l'on supprime les contraintes extérieures. Un comportement plastique correspond à une déformation permanente lorsque les contraintes exercées sont supérieures à un point critique appelé limite élastique. Cette déformation plastique est caractérisée par une réponse non linéaire. Dans notre cas, une conséquence de l'hypothèse de faible déformation est que les matériaux à un comportement élastique linéaire.

La description formelle de la théorie pour les solides élastiques linéaires a été établie par Robert Hooke en 1676. La loi de Hooke est une relation de proportionnalité régissant la déformation élastique en fonction des contraintes :

$$\sigma_{ij} = \Lambda_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (1.92)$$

Avec $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes de coefficients σ_{ij} , $\underline{\underline{C}}$ est le tenseur des rigidités élastique de coefficient Λ_{ijkl} , et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ est le tenseur de déformation de coefficient ε_{kl} .

Le tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$ est un tenseur d'ordre 2 symétrique. Par conséquent, il existe seulement 6 valeurs indépendantes parmi les valeurs de ces coefficients.

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (1.93)$$

où les termes ε_1 , ε_2 et ε_3 décrivent les élongations relatives suivant les directions $\vec{x}$, $\vec{y}$, et $\vec{z}$ respectivement. Les termes ε_4 , ε_5 et ε_6 décrivent les déformations angulaires (cisaillement) relatives dans les plans $(\vec{y}, \vec{z})$, $(\vec{x}, \vec{z})$ et $(\vec{x}, \vec{y})$ respectivement. Les coefficients de $\underline{\underline{\varepsilon}}$ définissent les composantes des champ de déplacements U qui est notre inconnue pour cette étude mécanique. Dans le cas général, la relation entre la déformation et le déplacement est définie par la relation non linéaire suivante, avec ∇ l'opérateur gradient :

$$\varepsilon = \frac{1}{2} [(\vec{\nabla} U + \vec{\nabla}^T U) + \vec{\nabla} U \cdot \vec{\nabla}^T U]. \quad (1.94)$$

Sous sa forme indicielle, la relation s'écrit :

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_k}{\partial l} + \frac{\partial U_l}{\partial k} \right) + \frac{\partial U_k}{\partial l} \cdot \frac{\partial U_l}{\partial k}, \quad (1.95)$$

avec $k, l \in \{x, y, z\}$.

Sous l'hypothèse de faible déplacement la partie non linéaire est négligeable. Le tenseur de déformation est défini alors par :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\vec{\nabla} U + \vec{\nabla}^T U) \quad \text{ou} \quad \varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_k}{\partial l} + \frac{\partial U_l}{\partial k}\right) \quad (1.96)$$

Le tenseur $\underline{\underline{\varepsilon}}$ de déformation s'écrit alors en coordonnées cartésiennes :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_x}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_y}{\partial x} + \frac{\partial U_x}{\partial y}\right) & \frac{\partial U_y}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_z}{\partial x} + \frac{\partial U_x}{\partial z}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_z}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial z}\right) & \frac{\partial U_z}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (1.97)$$

Le tenseur des contraintes de Cauchy noté $\underline{\underline{\sigma}}$ est un tenseur d'ordre 2 symétrique. Les coefficients de $\underline{\underline{\sigma}}$ modélisent les efforts extérieurs exercés sur le système matériel. Il existe 6 valeurs indépendantes parmi les valeurs des coefficients de $\underline{\underline{\sigma}}$. Le tenseur $\underline{\underline{\sigma}}$ se présente sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{23} & \sigma_{13} \\ \sigma_{23} & \sigma_{22} & \sigma_{12} \\ \sigma_{13} & \sigma_{12} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (1.98)$$

Le tenseur de rigidité élastique $\underline{\underline{\underline{C}}}$ est un tenseur d'ordre 4 traduisant les propriétés du comportement mécanique du matériau selon la relation de Hooke (Eq.(1.92)) est représenté par $3^4 = 81$ termes indépendants Λ_{ijkl} dans le cas général. Cependant, compte tenue de la symétrie du tenseur des déformations $\underline{\underline{S}}$ et du tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$, les coefficients Λ_{ijkl} sont symétriques aussi. Par conséquent, une inversion des indices i et j aussi bien que k et l conserve les valeurs de Λ_{ijkl} . Le nombre de paramètres indépendants se réduit alors de 81 à 36. On peut alors noter les coefficients Λ_{ijkl} en fonction de deux indices Λ_{om} avec o désigne le couple (i, j) et m désigne le couple (k, l) . En exploitant certaines propriétés des matériaux, des réductions supplémentaires peuvent être réalisées pour la matrice de rigidité élastique.

Nous nous plaçons maintenant dans le cas plus général d'un matériau isotrope. Un matériau est dit isotrope lorsqu'il conserve ses propriétés physiques par changement de direction. Autrement dit, son tenseur de rigidité élastique est indépendant du repère choisi. Dans ce cas le tenseur de rigidité s'écrit sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{C}} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (1.99)$$

Seuls deux coefficients sont indépendants : $C_{44} = \frac{C_{11}-C_{12}}{2}$. Dans cette étude, nous nous intéressons à l'or, qui est le matériau le plus utilisé en nanotechnologie, il possède une structure cristalline cubique à face centrée. En conséquence, c'est un matériau isotrope.

L'hypothèse d'isotropie conduit à restreindre le nombre des composantes indépendants à 2 dans le tenseur de rigidité élastique. Les deux paramètres caractéristiques qui décrivent le tenseur de rigidité ont été introduits par Gabriel Lamé, et ils portent son nom. En utilisant les coefficients de Lamé λ et μ le tenseur de rigidité élastique $\underline{\underline{C}}$ devient :

$$\underline{\underline{C}} = \begin{bmatrix} 2\mu + \lambda & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 2\mu + \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & 2\mu + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (1.100)$$

Les coefficients de Lamé ne sont pas mesurés directement, mais dépendent du module de Young E (en Pa) et du coefficient de Poisson ν (sans dimension). Cette dépendance est donnée par les relations suivantes :

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad (1.101)$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2\lambda + 2\mu}. \quad (1.102)$$

Inversement :

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (1.103)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (1.104)$$

La loi de Hooke présenté par l'équation 1.92 exprime les contraintes en fonction des déformations. Néanmoins, dans cette étude nous nous intéressons au calcul des

déformations dans les nanostructures chauffées par illumination laser. Il s'agit de toute évidence d'une relation inverse qui peut exprimer la déformation en fonction des contraintes en utilisant la matrice inverse de rigidité élastique :

$$S_i = \Lambda'_{ij} \cdot \sigma_j \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{C}}^{-1} \quad (1.105)$$

$\underline{\underline{C}}^{-1}$ est la matrice inverse de $\underline{\underline{C}}$ de coefficients Λ'_{ij} , avec $\Lambda'_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{\det(M_{ij})}{\det(\underline{\underline{C}})}$, M_{ij} étant la matrice mineure de $\underline{\underline{C}}$ obtenue en supprimant la ligne i et la colonne j .

Jusqu'à présent, nous avons présenté les relations liant les déformations aux contraintes ainsi que les déformations aux déplacements pour un solide homogène et isotrope. Afin de résoudre le problème élastique, les champs des déplacements et des contraintes doivent vérifier l'équation d'équilibre locale établie en appliquant le principe fondamental de la dynamique [66] :

$$\nabla \cdot \sigma_{ij} + f_i = 0 \quad \text{avec } i, j \in \{x, y, z\}, \quad (1.106)$$

et f_i les composantes de l'ensemble des forces volumiques extérieures qui agissent sur le volume du matériau.

Il existe deux approches de résolution, en choisissant le champ de déplacement ou le champ de contrainte comme inconnue principale : on trouve l'approche en contrainte et l'approche en déplacement.

1.4.0.4 Approche en contraintes

Comme on a vu précédemment, le couple $(\sigma, \mathbf{U})$ doit vérifier la loi de comportement élastique (loi de Hooke : Eq. (1.92)), la relation cinématique liant les déformations aux déplacements (1.96), ainsi que l'équation d'équilibre (1.106). Par conséquent, le problème élastique revient à un système de 9 équations, auxquelles on ajoute les conditions aux limites :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \varepsilon_1 & = & \frac{\partial U_x}{\partial x} = \frac{1}{E}(\sigma_{11} - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33})) \\ \varepsilon_2 & = & \frac{\partial U_y}{\partial y} = \frac{1}{E}(\sigma_{22} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{33})) \\ \varepsilon_3 & = & \frac{\partial U_z}{\partial z} = \frac{1}{E}(\sigma_{33} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})) \\ \varepsilon_4 & = & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y}\right) = \frac{2(1+\nu)}{E}\sigma_{12} \\ \varepsilon_5 & = & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) = \frac{2(1+\nu)}{E}\sigma_{31} \\ \varepsilon_6 & = & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x}\right) = \frac{2(1+\nu)}{E}\sigma_{23} \\ \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial z} + f_x & = & 0 \\ \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial z} + f_y & = & 0 \\ \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z} + f_z & = & 0 \end{array} \right. \quad (1.107)$$

Cette méthode consiste à rechercher les contraintes σ , ensuite il sera alors possible d'intégrer le champ de déformations ε et d'obtenir le déplacement U . Le

champ de déplacement doit satisfaire les conditions aux limites. Soulignons que la méthode des contraintes est lourde au niveau des calculs dans laquelle l'intégration des déformations est assez compliquée. Par conséquent, la méthode en déplacements est préférée dans la résolution de ce type de problème.

1.4.0.5 Approche en déplacements : équations de Lamé-Navier

Une méthode alternative de résolution permet d'obtenir les équations aux dérivées partielles qui décrivent les composantes de champ de déplacements en fonction des forces extérieures seulement. Ceci évite le recours aux tenseurs des contraintes et des déformations. Dans le cas d'un matériau isotrope, la loi de comportement peut prendre la forme suivante en utilisant les coefficients de Lamé :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{\varepsilon}} + \lambda \text{Tr}[\underline{\underline{\varepsilon}}]\underline{\underline{I}} \quad (1.108)$$

avec $\underline{\underline{I}}$ est le tenseur identité d'ordre 2, ou encore, en utilisant le module de Young E et le coefficient de Poisson ν :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{E}{2(1+\nu)}\underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{Tr}[\underline{\underline{\varepsilon}}]\underline{\underline{I}} \quad (1.109)$$

En combinant la loi de comportement (1.92) et l'équation d'équilibre locale (1.106) on obtient :

$$\nabla \cdot (2\mu\underline{\underline{\varepsilon}} + \lambda \text{Tr}[\underline{\underline{\varepsilon}}]\underline{\underline{I}}) + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (1.110)$$

Les propriétés de l'analyse vectorielle permettent d'obtenir, avec $\vec{\nabla}$ l'opérateur gradient :

$$\nabla \cdot (\text{Tr}[\underline{\underline{\varepsilon}}]\underline{\underline{I}}) = \nabla \cdot (U\underline{\underline{I}}) = \vec{\nabla} \cdot (\nabla U) \quad (1.111)$$

En introduisant maintenant la relation cinématique on obtient :

$$\lambda \vec{\nabla}(\nabla \cdot U) + \mu \nabla(\vec{\nabla} \cdot U) + \nabla \cdot (\vec{\nabla}^T \cdot U) + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (1.112)$$

Nous déduisons alors en utilisant $\nabla(\vec{\nabla}^T \cdot U) = \vec{\nabla}^T(\nabla \cdot U)$, l'équation de déplacement de Navier :

$$\mu \nabla^2 U + (\lambda + \mu) \vec{\nabla}(\nabla \cdot U) + \mathbf{f} = \mathbf{0}, \quad (1.113)$$

avec $\nabla^2 = \Delta$ est l'opérateur Laplacien.

La formulation de Navier est une représentation compacte du problème mécanique. En effet, elle modélise le problème par trois équations aux dérivées partielles du second ordre dont les inconnues sont les composantes de champ des déplacements. Il est important de rappeler que cette équation n'est valable que pour un matériau isotrope dans le cadre d'élasticité linéaire.

1.4.0.6 Contrainte thermique

Dans notre étude nous examinons la dilatation des nanostructures sous l'effet de la variation de température $\Delta T = T - T_0$, par rapport à la température de bain T_0 . La loi de comportement dans le cas où le matériau est soumis à une variation de température devient [67] :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{C}} \underline{\underline{\alpha}} \Delta T, \quad (1.114)$$

$\underline{\underline{\alpha}}$ étant le tenseur des dilatations thermiques. Sous sa forme indicielle, on peut écrire :

$$\sigma_i = \Lambda_{ij} \varepsilon_j + \alpha_i \Delta T \delta_{ij}, \quad (1.115)$$

où δ_{ij} est symbole de Kronecker :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{if } i \neq j \\ 1 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (1.116)$$

Dans le cas d'un matériau isotrope la loi de comportement prend la forme suivante en utilisant les coefficients de Lamé :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu \underline{\underline{S}} + \lambda \text{Tr}[\underline{\underline{S}}] \underline{\underline{I}} - (3\lambda + 2\mu) \underline{\underline{\alpha}} \Delta T \underline{\underline{I}} \quad (1.117)$$

1.4.1 Synthèse du problème mécanique avec échauffement thermique

Le problème mécanique s'écrit en utilisant le module de Young et le coefficient de Poisson, sous l'hypothèse linéaire, homogène et isotrope pour les matériaux en présence : (le système de 9 équations (1.107) qui résume la loi de comportement, la relation cinématique et l'équation locale) subit un changement dans ces trois premières équations afin de traduire la déformation engendrée par la dilatation thermique ($\varepsilon = \varepsilon^{meca} + \varepsilon^{the}$).

$$\begin{cases} \varepsilon_1 &= \frac{\partial U_x}{\partial x} &= \frac{1}{E}(\sigma_{11} - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33})) + \alpha \Delta T \\ \varepsilon_2 &= \frac{\partial U_y}{\partial y} &= \frac{1}{E}(\sigma_{22} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{33})) + \alpha \Delta T \\ \varepsilon_3 &= \frac{\partial U_z}{\partial z} &= \frac{1}{E}(\sigma_{33} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})) + \alpha \Delta T \end{cases} \quad (1.118)$$

En combinant la nouvelle loi de comportement (1.117) et la relation cinématique (1.96) dans l'équation d'équilibre locale (1.106), nous obtenons l'équation de Navier-Duhamel :

$$\mu \nabla^2 U + (\lambda + \mu) \vec{\nabla}(\nabla \cdot U) - (3\lambda + 2\mu) \alpha \vec{\nabla}(\Delta T) + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (1.119)$$

On obtient alors avec cette forme compacte, trois équations aux dérivées partielles qui donnent les composantes des champs de déplacement par contrainte thermique.

Les nanostructures sont libres de se dilater, la force extérieure appliquée au volume du matériau est la force thermique qui est prise en compte par le terme $-(3\lambda + 2\mu)\alpha\nabla(\Delta T)$.

L'équation aux dérivées partielles 1.119 décrit le problème de déformation élastique linéaire par contrainte thermique pour un matériau linéaire, homogène et isotrope. Pour résoudre ce problème nous devons ajouter à ces équations les conditions de bord afin de garantir l'unicité de la solution. D'une façon générale, on distingue trois catégories classiques de conditions de bord [66].

1. Conditions de bord de Dirichlet : les déplacements sont imposés sur la frontière externe Γ du matériau Ω :

$$U(M) = U_0(M) \quad \forall M \in \Gamma \quad (1.120)$$

2. Conditions de bord de Neumann : les contraintes sont imposées sur la frontière externe Γ du matériau Ω :

$$\sigma(M) \cdot \mathbf{n}(M) = \sigma_0 \quad \forall M \in \Gamma \quad (1.121)$$

avec $\mathbf{n}(M)$ est le vecteur normal à la surface Γ .

3. Conditions de bord mixtes : les déplacements et les contraintes sont imposées chacun sur une partie de la frontière externe Γ du matériau Ω :

$$\begin{aligned} U(M) &= U_0(M) \quad \forall M \in \Gamma' \\ \sigma(M) \cdot \mathbf{n}(M) &= \sigma_0(M) \quad \forall M \in \Gamma'', \end{aligned} \quad (1.122)$$

avec $\Gamma' \cap \Gamma'' = \emptyset$ et $\Gamma' \cup \Gamma'' = \Gamma$.

Dans notre étude les nanostructures sont immergées dans un milieu fluide et elles sont libres de se déformer sous l'effet de la variation de température. Si le domaine est suffisamment grand, il nous suffit de définir une condition aux limites en déplacement (encastrement) sur le contour du milieu extérieur sous la forme :

$$U(M) = 0 \quad \forall M \in \Gamma_2 \quad (1.123)$$

En outre, les conditions de passage d'un matériau à un autre s'imposent à la surface Γ_1 , il y a donc une continuité des déplacements sur Γ_1 . Les constantes mécaniques dépendent en général de la température.

1.4.2 Influence de température sur les constantes mécaniques

1.4.2.1 Module d'élasticité

La variation de température engendre un changement de la valeur du module de Young E . De nombreuses études ont étudié la valeur de E expérimentalement pour des structures à de petites échelles [75, 73]. Ils ont montré une forte dépendance du module de Young en fonction de la température. En outre, la valeur de E des nanostructures sont bien inférieures à celle des matériaux macroscopiques à des faibles températures. En revanche, à des températures élevées, la valeur de E se rapproche de celle du matériau macroscopique. On considère alors la loi d'évolution du module de Young en fonction de la température pour les nanostructures d'or [75] :

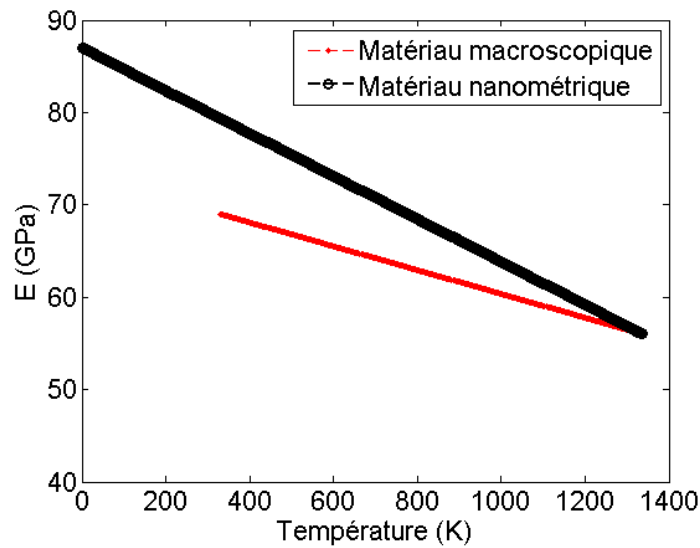


FIGURE 1.6: Module de Young (E) de l'or en fonction de la température à différentes échelles.

1.4.2.2 Coefficient de dilatation thermique

La variation de la température engendre un changement de la valeur du coefficient de dilatation thermique pour les métaux. L'évolution de α en fonction de la température peut être décrite par la loi suivante [76] :

$$\alpha(T) = \frac{2\sqrt{2}}{(3\pi)^2} \cdot T_f^{-\frac{5}{4}} \cdot T^{\frac{1}{4}}, \quad (1.124)$$

avec T_f la température de fusion ($T_f = 1337.15$ K pour l'or).

1.5 Conclusion : mode de couplage utilisé

Dans ce chapitre nous avons présenté le problème multiphysique couplé. Le problème électromagnétique est modélisé par une équation aux dérivées partielles (équation de Helmholtz) associée à des conditions aux limites. L'inconnue champ électrique $\mathbf{E}$ de l'équation de Helmholtz est exportée vers l'équation de chaleur qui modélise le problème thermique. L'équation de chaleur est aussi une équation aux dérivées partielles associées à des conditions aux limites. L'inconnue température T donnée par l'équation de chaleur est introduite dans les équations des déplacements par contraintes thermique qui nous permet de calculer les déformations des nanostructures. Les différents phénomènes physiques étudiés (électromagnétique, thermique et mécanique) sont donc liés par des termes sources (couplage faible). Le couplage est principalement piloté par les termes source Q (source de chaleur) et T (source des déplacements). Nous pouvons résumer le couplage par le système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$\begin{aligned}
 \nabla^2 \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} &= \mathbf{0} \\
 \Downarrow \\
 \nabla \cdot (\lambda^t \nabla T) + \frac{1}{2} \epsilon_0 \omega \Im(\epsilon) \|\mathbf{E}\|^2 &= 0 \\
 \Downarrow \\
 \mu \nabla^2 \mathbf{U} + (\lambda + \mu) \vec{\nabla} (\nabla \cdot \mathbf{U}) - (3\lambda + 2\mu) \alpha \vec{\nabla} (\Delta T) &= \mathbf{0}
 \end{aligned} \tag{1.125}$$

Si l'on introduit la dépendance des constantes caractéristiques des matériaux, le couplage devient fort (problème non linéaire). Dans ce dernier cas le problème devient complexe à résoudre surtout dans le cas 3D (temps de calcul, mémoire, convergence de calcul).

Dans le cadre de cette étude nous considérons un couplage faible en négligeant en particulier l'influence de la dilatation sur les constantes physiques de l'électromagnétique et de la thermique. De plus, nous négligerons la dépendance des constantes physiques en fonction de la température. Ainsi, nous pourrions résoudre le système de manière séquentielle en exportant/important le terme source pour chaque phénomène. Nous prendrons en compte les lois de dépendance des paramètres matériels en fonction de la température et du facteur échelle a posteriori.

Dans les prochains chapitres, on va intéresser à la résolution numérique de ce modèle multiphysique pour des structures tridimensionnelles.

Sommaire

2.1	Introduction	50
2.2	Modélisation numérique	50
2.2.1	Discrétisation spatiale du domaine : maillage	51
2.2.2	Fonctions d'interpolation	53
2.2.2.1	Fonction d'interpolation linéaire	54
2.2.2.2	Fonction d'interpolation quadratique	55
2.2.2.3	Fonction d'interpolation cubique	55
2.2.3	Formulation variationnelle	55
2.2.4	Discrétisation	57
2.2.5	Résolution du système d'équations	57
2.3	Description et approximation des problèmes par la MEF	58
2.3.1	Simulation électromagnétique	58
2.3.2	Simulation thermique	60
2.3.3	Simulation mécanique	61
2.4	Tests et validation de l'approche numérique	63
2.4.1	Électromagnétisme	64
2.4.2	Thermique	66
2.4.3	Mécanique	70
2.5	Génération de maillage	71
2.5.1	Validité et la qualité en forme des éléments de maillage	71
2.5.1.1	Les éléments surfaciques : condition de validité	71
2.5.1.2	Les éléments volumiques : condition de validité	73
2.5.2	Généralités sur la génération de maillage	74
2.6	Adaptation de maillage	77
2.6.1	Stratégies d'adaptation	78
2.6.1.1	h-Adaptation	78
2.6.1.2	p-Adaptation	78
2.6.1.3	h p-Adaptation	79
2.6.1.4	r-Adaptation	79
2.6.2	Estimateurs d'erreur	79
2.6.3	Schémas de principe d'adaptation	80
2.6.4	Méthode utilisée : remaillage de l'unité et estimateur d'erreur d'interpolation	81

2.6.4.1	Estimateur d'erreur d'interpolation	81
2.6.4.2	Marche unité	82
2.7	Conclusion	83

2.1 Introduction

Dans ce chapitre sont introduites les méthodes numériques nécessaire à la résolution des équations aux dérivées partielles et à la simulation des problèmes multiphysiques couplés. La méthode des éléments finis est reconnue pour son efficacité à résoudre des problèmes dans lesquels la géométrie des objets est complexe, par une discrétisation de l'espace. L'adaptation du maillage de l'espace est une méthode d'amélioration de la qualité des éléments finis qui permet de produire des résultats de haute précision en minimisant les ressources de calcul (RAM et temps CPU). Compte-tenu de la complexité des méthodes numériques appliquées aux problèmes multiphysique couplés, il est utile d'introduire les bases théoriques qui vont nous permettre de mieux juger la qualité des résultats obtenus. Ce chapitre est organisé comme suit : la **section 2.2** introduit les différentes étapes de base de la méthode des éléments finis. La **section 2.3** présente une première résolution du problème multiphysique avec un maillage classique. Une validation du modèle électromagnétique par la solution exacte de la théorie de Mie est produite (**section 2.4**). Ainsi, une interprétation des résultats nous a permis d'évaluer la qualité de la solution et de détecter les faiblesses du mailleur classique inclus dans Comsol. Les **sections 2.5 et 2.6** présente le principe de schémas d'adaptation de maillage par l'approche itérative et détaille les différentes étapes qui interviennent dans ce processus. Enfin la méthode de remaillage adaptatif est utilisée. À chaque étape, des définitions en lien avec les possibilités de choix disponibles dans Comsol seront rapidement expliquées.

2.2 Modélisation numérique

La méthodes des éléments finis (MEF) est une méthode numérique qui permet de fournir une solution approximative à tous problèmes qui peuvent être modélisés par des équations aux dérivées partielles, accompagnées de conditions aux limites. Elle a été introduite en 1950 pour résoudre les problèmes d'élasticité dans des structures mécaniques complexes. Aujourd'hui, elle s'applique à une large classe de problèmes physiques, incluant notamment les problèmes d'électromagnétisme [28], de transfert de chaleur [77], et d'élasticité mécanique [78]. La méthode des éléments finis repose sur les bases mathématiques de la formulation variationnelle. L'idée fondamentale consiste à discrétiser le domaine de calcul Ω en sous domaines Ω_i de formes géométriques simples (tétraèdre, triangle, quadrangle...). La famille des sous domaines Ω_i doit être une partition de Ω , autrement dit :

$$\Omega = \cup_i \Omega_i, \quad \forall i \neq j \implies \Omega_i \cap \Omega_j = 0 \quad (2.1)$$

En appliquant la méthode variationnelle sur tous les Ω_i , un espace d'approximation E peut être défini sur tous les sous domaines Ω_i . Les fonctions de l'espace E sont généralement choisies sous forme d'un polynôme. Elles définissent à la fois la position des nœuds de calcul dans les Ω_i et l'évaluation des champs locaux sur chaque segment du sous domaine en fonction des valeurs sur les nœuds constituant le segment. Si on résume, le problème initial de dimension infinie est présenté maintenant en dimension finie. En d'autres termes, la solution recherchée (champ) dans un sous domaine est évaluée à partir de la valeur du champ sur un nombre fini des nœuds de calcul, ensuite une interpolation permet de déterminer le champ local sur les arêtes d'un sous domaine. Le problème est présenté alors par un système matriciel qui a comme inconnues les valeurs aux nœuds. Il reste à résoudre ce système matriciel pour obtenir les champs locaux sur tous les sous domaines de l'espace de calcul. Par assemblage de ces champs locaux, une solution approchée du champ global U de la solution de l'équation aux dérivées partielles est obtenue, elle est définie par morceaux sur les sous domaines Ω_i . Par conséquent, la précision de la solution dépend fortement de la qualité de la discrétisation du domaine.

Au niveau pratique, ces différentes étapes sont automatisées à travers des logiciels spécialisés. Cependant, l'analyse des solutions pour garantir des solutions réalistes en minimisant les erreurs d'approximation, oblige à la compréhension et à la maîtrise des bases théoriques de la méthode des éléments finis. La résolution d'un problème par la méthode des éléments finis repose essentiellement sur différentes étapes successives [28, 77, 77] :

- discrétisation du domaine : maillage ;
- choix des fonctions d'interpolation ;
- formulation variationnelle du problème ;
- formulation du système matriciel : discrétisation des équations ;
- résolution du problème discret.

2.2.1 Discrétisation spatiale du domaine : maillage

L'étape de la discrétisation du domaine Ω est une étape clé dans la résolution numérique par élément finis. En effet, c'est une discrétisation spatiale du domaine en petits objets géométriques simples appelés mailles, le champ inconnu est calculé par la suite à chaque nœuds des éléments composant le maillage. Par conséquent, la précision de la solution calculée et le temps de calcul sont fortement liés à la qualité et à la taille du maillage.

De manière générale, il existe trois types de domaines qui correspondent à un objet à modéliser selon la dimension de l'espace considéré.

- Dans le cas « 1D », le domaine Ω est un segment de droite plongé dans $\mathbb{R}^1$, $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$, les éléments de base qui discrétisent un tel domaine sont des segments de droites.
- Le cas « 2D » correspond à un domaine surfacique plongé dans $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$, les éléments de base qui discrétisent un tel domaine sont des surfaces. Deux types d'éléments (figure 2.1) sont envisageables : le triangle et le quadrilatère.

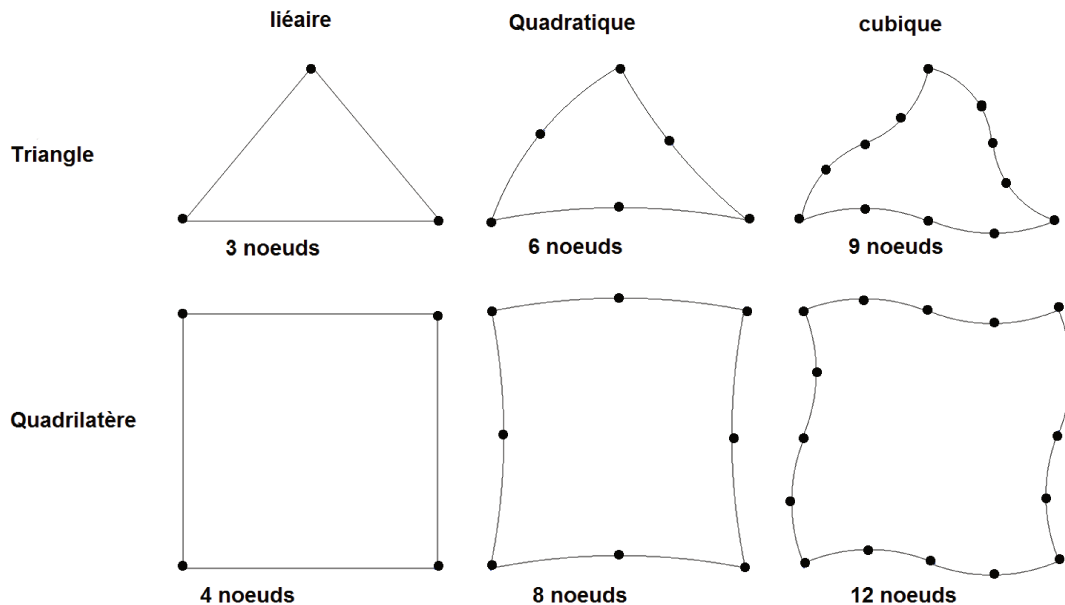


FIGURE 2.1: Éléments surfaciques de base.

- Le cas « 3D », le plus général, correspond à un domaine volumique plongé dans $\mathbb{R}^3$, les éléments de base sont des volumes (figure 2.2). Ce sont les tétraèdres : généralisation des triangles en 2D, les hexaèdres : généralisation des quadrilatères 2D, les prismes et les pyramides. Ces derniers sont des éléments de connexion qui permettent de connecter les tétraèdres et les hexaèdres.

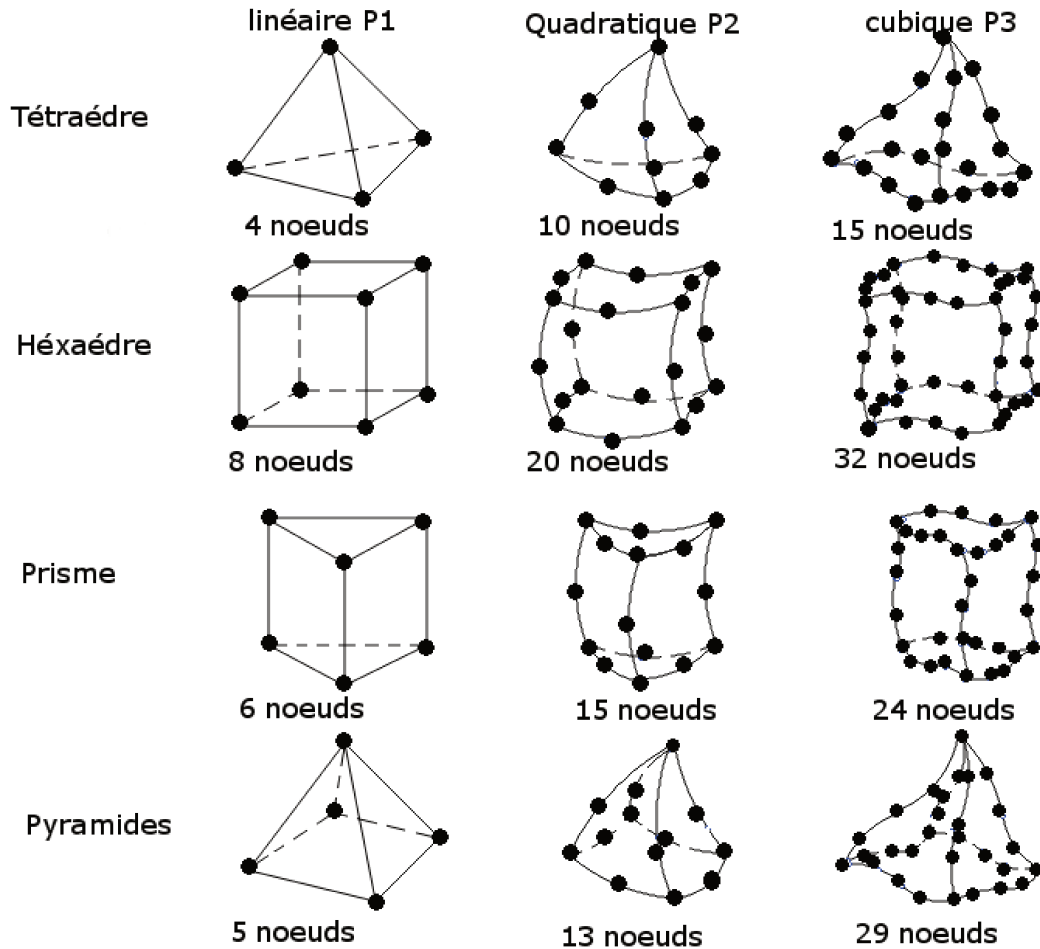


FIGURE 2.2: Éléments volumiques de base.

Donnons maintenant quelques détails sur les fonctions d'interpolation.

2.2.2 Fonctions d'interpolation

Dans la MEF, la solution approchée U_{EF} est une interpolation entre les valeurs du champ inconnu calculé sur les noeuds de chaque élément. Après avoir discrétisé le domaine, les positions des noeuds sont fixées. En choisissant le degré des éléments utilisés dans le maillage, la deuxième étape consiste à choisir le type de fonction d'interpolation pour calculer un champ approché du champ inconnu U sur les arêtes de chaque élément en se basant sur les valeurs aux noeuds. Par ailleurs, le nombre des composantes scalaires sur chaque noeud dépend de la nature vectorielle ou scalaire de la fonction inconnue U . Le nombre total de composantes inconnues sur tous les noeuds du domaine est appelé « nombre de degré de liberté » (NDL ou DOF en anglais). Dans le cas vectoriel, il faut construire une interpolation pour chaque composante inconnue. Par la suite, on ne va considérer qu'une seule composante du champ U par noeud à titre d'illustration.

En général, le champ inconnu U est continu en passant d'un élément à un autre. C'est pourquoi les noeuds de calcul sont placés généralement sur la frontière des éléments.

D'une manière analogue à la méthode de vérification de la validité des éléments (section 2.5.1.1), la construction de l'ensemble des fonctions d'interpolations se fait dans un premier temps sur des éléments de référence ensuite on ramène ces fonctions aux éléments réels.

En pratique, les fonctions d'interpolations sont généralement des polynômes de degré 1,2 ou plus élevé, dont le nombre des monômes dépend du type d'éléments (linéique, surfacique ou volumique) des éléments. La forme générale de la fonction inconnue U sur un élément de référence est définie par :

$$U^e(x_j) = \sum_1^n U_i N_i(x_j), \quad (2.2)$$

où x_j représente les coordonnées des noeuds de calcul, U_i sont les valeurs du champ inconnu au noeuds, $N_i(x_j)$ sont les fonctions d'interpolation polynomiale et n désigne le nombre des noeuds.

À titre d'illustration nous prenons le cas 1D et nous représentons les types des fonctions d'interpolations les plus connues.

2.2.2.1 Fonction d'interpolation linéaire

: élément à deux noeuds.

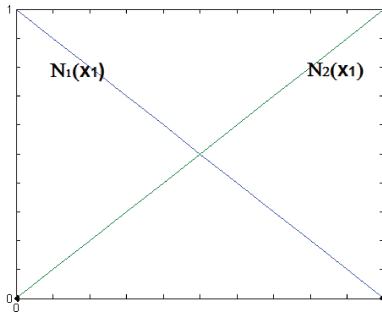


FIGURE 2.3: Élément linéique linéaire.

$$N_1(x_1) = 1 - x_1 \quad (2.3)$$

$$N_2(x_1) = x_1 \quad (2.4)$$

2.2.2.2 Fonction d'interpolation quadratique

: élément à trois noeuds.

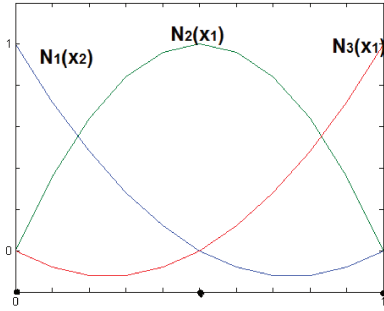


FIGURE 2.4: Élément quadratique de Lagrange.

$$N_1(x_1) = 2x_1^2 - 3x_1 + 1 \quad (2.5)$$

$$N_2(x_1) = 4x_1 - 4x_1^2 \quad (2.6)$$

$$N_3(x_1) = 2x_1^2 - x_1 \quad (2.7)$$

2.2.2.3 Fonction d'interpolation cubique

: élément à deux noeuds.

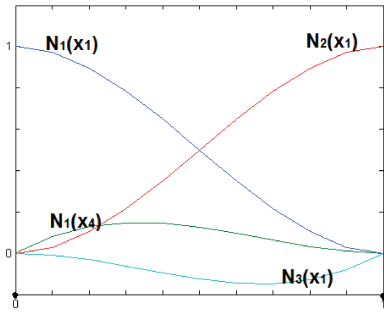


FIGURE 2.5: Élément cubique de type Hermite.

$$N_1(x_1) = 1 - 3x_1^2 + 2x_1^3 \quad (2.8)$$

$$N_2(x_1) = x_1 - 2x_1^2 + x_1^3 \quad (2.9)$$

$$N_3(x_1) = 3x_1^2 - 2x_1^3 \quad (2.10)$$

$$N_4(x_1) = -x_1^2 + x_1^3 \quad (2.11)$$

En pratique le choix de l'espace des fonctions d'interpolations se fait sur la base du choix du degré des éléments (figure 2.2) du maillage. Avec un degré plus élevé, la qualité du champ approché calculé est meilleure, mais une explosion du coût de calcul accompagne cette précision. C'est pourquoi, dans cette étude, les éléments et les fonctions d'interpolation les plus utilisées sont de type linéaire.

2.2.3 Formulation variationnelle

La formulation variationnelle est la première étape de résolution d'un problème physique régi par des équations aux dérivées partielles associées à des conditions de bord (aux frontières du domaine de calcul) et de passage d'un matériau à un autre. Sous cette forme, le théorème de Lax-Milgram a montré l'existence et l'unicité d'une solution approchée définie par morceaux sur une partition d'un domaine. Pour cela, la MEF utilise ce passage par la forme variationnelle au lieu de

résoudre le système différentiel directement. La forme mathématique générale de la plupart des problèmes physiques est définie par [28] :

$$D : U(x, y, z) \longrightarrow -\left(\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_x \frac{\partial U}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_y \frac{\partial U}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_z \frac{\partial U}{\partial z})\right) + \beta U - g \quad (2.12)$$

$$C : U(x, y, z) \longrightarrow \begin{cases} U - p \text{ sur } \Gamma_1 \\ (\alpha_x \frac{\partial U}{\partial x} \vec{x} + \alpha_y \frac{\partial U}{\partial y} \vec{y} + \alpha_z \frac{\partial U}{\partial z} \vec{z}) \cdot \vec{n} + \gamma U - q \text{ sur } \Gamma_2 \end{cases}, \quad (2.13)$$

avec $U(x, y, z)$ le champ recherché en chaque point du domaine. Ω , α_x , α_y , α_z et β désignent des paramètres physiques, g la source d'excitation (elle peut être de type thermique, mécanique, électrique...), p et q sont des constantes, D désigne un opérateur qui symbolise l'équation différentielle, C désigne un opérateur qui symbolise les conditions de bord, et $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ désigne la frontière du domaine Ω tel que $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$.

Le problème considéré consiste à :

- évaluer $U(M)$ telle que : $D(U(M)) = 0 \quad \forall M(x, y, z) \in \Omega$,
- avec : $C(U(N)) = 0 \quad \forall N \in \Gamma$.

En appliquant les propriétés de l'analyse fonctionnelle, on peut montrer que la résolution de système 2.2.3 est équivalent à résoudre :

- évaluer $U(M)$ telle que : $\int_{\Omega} P(M) \cdot D(U(M)) = 0 \quad \forall P(M)$,
- avec : $C(U(N)) = 0 \quad \forall N \in \Gamma$.

Où $P(M)$ est une fonction quelconque définie sur le domaine Ω appelée fonction test.

Cette écriture est une forme préliminaire de formulation variationnelle. Cependant, cette forme n'a pas de grand avantage comparé à la formulation différentielle initiale (Equation (2.12)). Une éventuelle transformation permet de faire apparaître des intégrales dans cette première formulation variationnelle, correspondant à tout ou à une partie des conditions de bord sur la frontière en transformant cette équation par intégration par partie ou encore en appliquant le théorème d'Ostrogradsky. De plus, si la frontière Γ est partitionnée en plusieurs parties avec différents types de conditions aux limites (Dirichlet, Neumann, ou mixte), nous pouvons réécrire l'intégrale de bord et obtenir plusieurs termes correspondants. Par conséquent, cette formulation minimise le nombre de conditions aux limites. Une formulation faible du problème aux limites initial peut s'écrire sous la forme :

- évaluer $U(M)$ telle que : $\int_{\Omega} P(M) \cdot D'(U(M)) + \int_{\Gamma_1} B_1(U(M)) + \int_{\Gamma_2} B_2(U(M)) = 0 \quad \forall P(M)$,
- avec : $C'(U(N)) = 0 \quad \forall N \in \Gamma$

Avec D' désigne un opérateur qui symbolise une équation différentielle, B_1 et B_2 désignent des opérateurs qui symbolisent une partie des conditions frontières sur Γ_1 et Γ_2 respectivement et C' désigne un opérateur qui symbolise le reste des

conditions de bord.

Nous allons voir que, à partir des grandeurs locales, la simulation des phénomènes physiques font la plupart du temps intervenir des expressions intégrées des équations de la physique. Le problème électromagnétique est régi par l'équation de Helmholtz, décrivant la répartition et l'évolution des champs électromagnétiques, et par les conditions de bord (conservation du flux). Les conditions de passage sur les surfaces des matériaux (continuité des composantes tangentielles) sont automatiquement vérifiées en formulation faible. Le problème thermique est régi par l'équation de la chaleur, permettant de décrire la répartition et l'évolution de la température, et par les conditions de bord (convection, rayonnement ou conduction, température de bain). Les conditions de passage (conservation du flux) sont automatiquement vérifiées. Il est possible de rajouter des conditions de passage supplémentaires comme celle de rayonnement. Le problème mécanique est régi par l'équation d'équilibre, permettant de décrire l'évolution et la répartition des contraintes et des déformations, et par les conditions de bord (dilatation, frontière fixe, déformation nulle...)

La formulation variationnelle faible étant établie, décrivons rapidement sa forme discrétisée.

2.2.4 Discrétisation

En utilisant l'interpolation de U sur tout le domaine Ω , nous pouvons reformuler le problème (équation (2.2.3)) par :

- Évaluer $f(M)$ tel que : $\int_{\Omega} P(M) \cdot D'(U^e(M)) + \int_{\Gamma_1} B_1(U^e(M)) + \int_{\Gamma_2} B_2(U^e(M)) = 0 \quad \forall P(M)$ où $U^e(x_j) = \sum_1^n U_i N_i(x_j)$
- Avec : $C'(f(N)) = 0 \quad \forall N \in \Gamma$

Cet assemblage représente le principe de la discrétisation. La discrétisation est une étape clé qui va nous permet de mettre le problème sous une forme discrète ou matricielle grâce aux méthodes de Galerkin ou de Ritz [28, 78]. Après cette étape le problème initial peut s'écrire sous sa forme matricielle :

$$[K] \cdot [U] = [B], \quad (2.14)$$

où $[K]$ est appelé la matrice rigidité et $[U]$ la matrice solution. La taille des matrices dépend du nombre de degrés de liberté du problème. En général, elles sont de grande taille.

2.2.5 Résolution du système d'équations

Une fois le problème présenté sous sa forme matricielle, la dernière étape consiste à résoudre le système linéaire. On distingue deux catégories de méthodes.

La méthode directe : cette méthode est généralement inutilisable pour des problèmes de taille importante (grand NDL). En effet, le temps de calcul et la taille mémoire utilisée pour le stockage des matrices est très sensible au NDL. En revanche, elle est plus précise. Parmi les algorithmes connus on cite notamment la méthode « d'élimination de Gauss-Jordan » et la « décomposition LU ».

La méthode itérative : cette méthode est généralement moins précise mais elle est plus pratique pour les problèmes de grande taille. En effet, elle part d'une solution initiale approchée et elle cherche ensuite à améliorer cette solution par itération successives. Cette méthode transforme le système (2.14) en :

$$\|R\| = \|[K] \cdot [U_i] - [B]\|, \quad (2.15)$$

avec $[U_i]$ la solution à l'étape i . Le critère d'arrêt dépend de la précision souhaitée. En effet, le calcul s'arrête lorsque qu'on estime que $\|[U_{i+1} - U_i]\|$ est très faible. Parmi les algorithmes utilisés on cite notamment la méthode « du gradient conjugué CG » et la méthode de « généralisation de la méthode de minimisation du résidu GMRES ». Nous allons maintenant préciser les points importants des formulations électromagnétiques, thermiques et mécaniques pour la MEF.

2.3 Description et approximation des problèmes par la MEF

2.3.1 Simulation électromagnétique

La résolution du problème électromagnétique consiste à résoudre l'équation de Helmholtz associée aux conditions de passage et à la condition de bord. Elle correspond à une onde plane entrante dans le domaine et une condition approchée de sortie du champ diffracté. Cette condition est d'autant plus précise que l'objet diffractant est petit et situé au centre d'un grand domaine sphérique. Suite à l'étude théorique, le problème revient à :

- évaluer $E(M)$ tel que :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad \forall M(x, y, z) \in \Omega \quad (2.16)$$

- avec : $\nabla \times \mathbf{E} = i[k_0 \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E} - \mathbf{E}_i) + \mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i]$ sur Γ

Pour appliquer la méthode des éléments finis au système d'équation précédent, nous utilisons la méthode de Galerkin. En formulation faible, avec E^{test} la fonction test, résoudre le système (2.16) est équivalent à :

- évaluer $E(M)$ tel que :

$$\int_{\Omega} [\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E}] \cdot \mathbf{E}^{test} d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{E}^{test}, \quad (2.17)$$

– avec : $\nabla \times \mathbf{E} = \iota[k_0 \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E} - \mathbf{E}_i) + \mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i]$ sur Γ

La condition de bord peut également s'écrire :

$$\nabla \times \mathbf{E} = \iota k_0 \mathbf{n}_{12} \times \mathbf{E} + \iota(\mathbf{k}_0 - \mathbf{n}_{12} k_0) \times \mathbf{E}_i = \mathbf{f} \times \mathbf{E} + \Phi \quad (2.18)$$

Avec $\mathbf{f} = \iota k_0 \mathbf{n}_{12}$ et $\Phi = \iota(\mathbf{k}_0 - \mathbf{n}_{12} k_0) \times \mathbf{E}_i$

En appliquant le premier théorème de Green pour les vecteurs et en integrant la condition frontière, le système d'équation (2.17) devient :

$$\int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{E}^{\text{test}} \nabla \times \mathbf{E} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{E}^{\text{test}} (\mathbf{f} \times \mathbf{E} + \Phi) \cdot \mathbf{n}_{12} d\Gamma - \int_{\Omega} k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^{\text{test}} d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{E}^{\text{test}} \quad (2.19)$$

Cette formulation est appelé formulation intégrale faible du problème électromagnétique.

Avec la discrétisation spatiale du domaine Ω en sous domaine Ω^e (avec $e \in 1, 2, 3, \dots, n$), chaque composante du champ électrique a pour expression :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \sum_{j=0}^n N_j \mathbf{E}_j = [N(x, y, z)] \{\mathbf{E}\} \quad (2.20)$$

Où n est le nombre de noeuds dans le maillage, $N_j(x, y, z)$ sont les fonctions d'interpolations, $[N(x, y, z)]$ est la matrice de rigidité et $\{\mathbf{E}\}$ est la composante du champ évaluée aux nœuds. En utilisant les relations :

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^n \left(\frac{\partial N_{j,z}}{\partial y} - \frac{\partial N_{j,y}}{\partial z} \right) E_j \\ \sum_{j=0}^n \left(\frac{\partial N_{j,x}}{\partial z} - \frac{\partial N_{j,z}}{\partial x} \right) E_j \\ \sum_{j=0}^n \left(\frac{\partial N_{j,y}}{\partial x} - \frac{\partial N_{j,x}}{\partial y} \right) E_j \end{bmatrix} = [\partial N] \{\mathbf{E}\}, \quad (2.21)$$

et :

$$\nabla \times \mathbf{E}^{\text{test}} = [\partial N] \{\mathbf{E}^{\text{test}}\} = \{\mathbf{E}^{\text{test}}\}^T [\partial N]^T, \quad (2.22)$$

la formulation intégrale faible (2.19) devient :

$$\{\mathbf{E}^{\text{test}}\} ([K] \{\mathbf{E}\} - \{\mathbf{F}\}) = 0 \quad \forall \{\mathbf{E}^{\text{test}}\}, \quad (2.23)$$

où $[K] = \int_{\Omega} [\partial N] [\partial N]^T d\Omega - \int_{\Omega} k_0^2 \epsilon_r [N] [N]^T d\Omega - \int_{\Gamma} [N] [\gamma] [N]^T d\Gamma$
et $\{\mathbf{F}\} = \int_{\Gamma} \Phi d\Gamma = \iota \int_{\Gamma} (\mathbf{k}_0 - \mathbf{n}_{12} k_0) \times \{\mathbf{E}_i\} d\Gamma$.

Il ne reste maintenant qu'à résoudre le système matricielle suivant :

$$[K] \{\mathbf{E}\} = \{\mathbf{F}\} \quad (2.24)$$

Où $[K]$ est une matrice carré $n \times n$ et $\{\mathbf{E}\}$ le vecteur solution.

Notons que pour satisfaire les conditions de passage, on peut subdiviser le domaine en deux sous domaines (telque $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ et $\Omega_1 \cap \Omega_2 = 0$) et faire apparaître les termes correspondantes aux conditions de passage dans la formulation faible.

2.3.2 Simulation thermique

La résolution du problème thermique consiste à résoudre l'équation de la chaleur stationnaire associée aux conditions de passage et à la condition frontière.

Suite à l'étude théorique, le problème à résoudre consiste à :

- évaluer $T(M)$ telle que :

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q = 0 \quad \forall M(x, y, z) \in \Omega, \quad (2.25)$$

- avec : $T = T_0$ sur Γ

La condition frontière est une condition de bain : la température au bord du domaine est fixée à la valeur de la température à l'infini. Pour appliquer la méthode des éléments finis au système d'équation précédent, nous utilisons la méthode de Galerkin. Avec la formulation faible, résoudre le système (2.25) revient à :

- évaluer $T(M)$ telle que :

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q] T^{test} d\Omega = 0 \quad \forall T^{test}(M), \quad (2.26)$$

- avec : $T = T_0$ sur Γ

La fonction T^{test} désigne la fonction test. En appliquant la théorème de Green-Ostrogradski, le problème devient :

- évaluer $T(M)$ telle que :

$$\int_{\Omega} \lambda \nabla T^{test} \nabla T d\Omega - \int_{\Omega} T^{test} Q d\Omega = 0 \quad \forall T^{test}, \quad (2.27)$$

- avec : $T = T_0$ sur Γ

C'est une formulation intégrale faible. Après discrétisation du domaine Ω en sous domaine Ω^e (avec $e \in 1, 2, 3, \dots, n$), le champ de température a pour expression :

$$T(x, y, z) = \sum_{i=0}^n N_i T_i = [N(x, y, z)] \{T\}, \quad (2.28)$$

où n est le nombre de noeuds dans le maillage, $N_i(x, y, z)$ sont les fonctions d'interpolations, $[N(x, y, z)]$ est la matrice d'interpolation, $\{T\}$ est le vecteur des températures aux noeuds du maillage. En utilisant les relations :

$$\nabla T = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_i}{\partial x} T_i \\ \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_i}{\partial y} T_i \\ \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_i}{\partial z} T_i \end{bmatrix} = [\partial N] \{T\}, \quad (2.29)$$

et :

$$T^{test} = [N]\{T^{test}\} = \{T^{test}\}^T [N]^T \quad \text{et} \quad \nabla T^{test} = \{T^{test}\}^T [\partial N]^T, \quad (2.30)$$

la formulation intégrale faible () devient :

$$\{T^{test}\}([K]\{T\} - \{F\}) = 0 \quad \forall \{T^{test}\}, \quad (2.31)$$

avec : $T = T_0$ sur Γ , où $[K] = \int_{\Omega} [\partial N]^T [\lambda] [\partial N] d\Omega$ est la matrice de conductivité thermique, $\{F\} = \int_{\Omega} [N]^T Q d\Omega$ est le vecteur des flux aux nœuds. Il ne reste maintenant qu'à introduire la condition frontière de température dans l'écriture matricielle en modifiant les valeurs correspondantes aux nœuds situés sur Γ . Le problème à résoudre devient alors :

$$[K']\{T\} = \{F\}. \quad (2.32)$$

$[K']$ est une matrice carrée $n \times n$ qui inclut les modifications correspondantes à la condition frontière et $\{T\}$ est le vecteur des températures solutions du problème. Notons que pour satisfaire les conditions aux passages, on peut subdiviser le domaine en deux sous-domaines (tels que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ et $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$) et faire apparaître le terme $\int_{\Gamma_d} (n_{12}(\lambda_1 \nabla T_1) + n_{21}(\lambda_2 \nabla T_2)) d\Gamma_d$ dans la formulation faible.

2.3.3 Simulation mécanique

Pour le problème mécanique, il existe deux approches de résolution : on trouve l'approche en contrainte et l'approche en déplacement. Ici nous présentons l'approche en déplacement. Cette méthode consiste à choisir le champ de déplacement $\mathbf{U}$ comme inconnue principale. La résolution consiste à résoudre l'équation de déplacement associée aux conditions de passage et à la condition frontière. Suite à l'étude théorique, le problème consiste à :

- Évaluer $\mathbf{U}(\mathbf{M})$ telle que :

$$\mu \nabla^2 \mathbf{U} + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}) - (3\lambda + 2\mu) \alpha \nabla (\Delta T) = 0 \quad \forall \mathbf{M}(x, y, z) \in \Omega \quad (2.33)$$

- Avec : $\mathbf{U} = \mathbf{0}$ sur Γ

Pour appliquer la méthode des éléments finis au système d'équation précédent, nous utilisons la méthode de Galerkin. En formulation faible, résoudre le système (2.33) équivaut à :

- évaluer $\mathbf{U}(\mathbf{M})$ telle que :

$$\int_{\Omega} [\mu \nabla^2 \mathbf{U} + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}) - (3\lambda + 2\mu) \alpha \nabla (\Delta T)] \mathbf{U}^{test} d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{U}^{test}(\mathbf{M}), \quad (2.34)$$

- avec : $\mathbf{U} = \mathbf{0}$ sur Γ

La fonction $\mathbf{U}^{test}$ désigne la fonction test. En appliquant la théorème de Green, on peut écrire le problème en formulation intégrale faible :

– évaluer $\mathbf{U}(\mathbf{M})$ telle que :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mu(\nabla \cdot \mathbf{U})(\nabla \cdot \mathbf{U}^{\text{test}}) d\Omega + \int_{\Omega} (\lambda + \mu)(\nabla \cdot \mathbf{U})(\nabla \cdot \mathbf{U}^{\text{test}}) d\Omega \\ - \int_{\Omega} (3\lambda + 2\mu)\alpha \nabla(\Delta T) \mathbf{U}^{\text{test}} d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{U}^{\text{test}}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

– avec : $\mathbf{U} = \mathbf{0}$ sur Γ

Après discrétisation du domaine Ω en sous domaine Ω^e (avec $e \in 1, 2, 3, \dots, n$), le champ de déplacement a pour expression :

$$\mathbf{U}(x, y, z) = \sum_{i=0}^n N_i \mathbf{U}_i = [N(x, y, z)] \{\mathbf{U}\}, \quad (2.36)$$

où n est le nombre de noeuds dans le maillage, $N_i(x, y, z)$ sont les fonctions d'interpolations, $[N(x, y, z)]$ est la matrice d'interpolation, $\{\mathbf{U}\}$ est le vecteur des déplacements nodaux.

En utilisant la relation :

$$\nabla U = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_i}{\partial x} U_i \\ \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_i}{\partial y} U_i \\ \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_i}{\partial z} U_i \end{bmatrix} = [\partial N] \{\mathbf{U}\}, \quad (2.37)$$

et :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}^{\text{test}} = \{\mathbf{U}^{\text{test}}\}^T [\partial N]^T, \quad (2.38)$$

avec :

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,x}}{\partial x} U_i & \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,x}}{\partial y} U_i & \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,x}}{\partial z} U_i \\ \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,y}}{\partial x} U_i & \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,y}}{\partial y} U_i & \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,y}}{\partial z} U_i \\ \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,z}}{\partial x} U_i & \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,z}}{\partial y} U_i & \sum_{i=0}^n \frac{\partial N_{i,z}}{\partial z} U_i \end{bmatrix} = [\partial N] \{\mathbf{U}\}^T \quad (2.39)$$

et :

$$\nabla \mathbf{U}^{\text{test}} = [\partial N] \{\mathbf{U}^{\text{test}}\}^T = \{\mathbf{U}^{\text{test}}\} [\partial N]^T, \quad (2.40)$$

la formulation intégrale faible () revient à :

– évaluer $\mathbf{U}(\mathbf{M})$ tel que :

$$\{\mathbf{U}^{\text{test}}\}^T ([K] \{\mathbf{U}\} - \{F\}) = 0 \quad \forall \{\mathbf{U}^{\text{test}}\}, \quad (2.41)$$

– avec : $\mathbf{U} = \mathbf{0}$ sur Γ

Où $[K] = \int_{\Omega} \mu [\partial N] \cdot [\partial N]^T d\Omega + \int_{\Omega} (\lambda + \mu) [\partial N]^T \cdot [\partial N] d\Omega$

et $\{F\} = \int_{\Omega} (3\lambda + 2\mu)\alpha [\partial N] \cdot \{\Delta T\} d\Omega$.

Il ne reste maintenant qu'à introduire la condition frontière de déplacement nul

dans l'écriture matricielle. Cela se fait par modification des valeurs correspondantes aux noeuds situé sur Γ . Le problème à résoudre s'écrit alors sous forme matricielle :

$$[K']\{\mathbf{U}\} = \{\mathbf{F}\} \quad (2.42)$$

Où $[K']$ est une matrice carré $n \times n$ qui inclut les modifications correspondantes au condition frontière et $\{\mathbf{U}\}$ le vecteur solution.

Notons que pour satisfaire les conditions aux passage, on peut subdivisé le domaine en deux sous domaines (telque $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ et $\Omega_1 \cap \Omega_2 = 0$) et faire apparaître les termes correspondants dans la formulation faible.

Les trois formulations correspondant aux problèmes électromagnétiques, thermiques et mécaniques étant données, le choix des paramètres dans Comsol est possible en toute connaissance de cause. Un test numérique est maintenant possible.

2.4 Tests et validation de l'approche numérique

Pour évaluer la validité du modèle numérique considéré, il est recommandé de comparer les résultats de calcul à des solutions analytiques, dans le cas d'objets de forme géométrique simple. Une fois le modèle est validé, une généralisation sur des formes géométriques complexes ou sur un ensemble de plusieurs nanoparticules est possible. La résolution du problème multiphysique est séquentielle : l'énergie de la source laser est absorbée par la nanoparticule, ceci constitue une source de chaleur qui conduit à une élévation de température à l'intérieur de la particule et par conséquent, conduit à une dilatation de la nanoparticule. Les champs inconnus sont donc successivement, le champ électrique $\mathbf{E}$, le champ de température T et le champ des déplacements $\mathbf{U}$. Dans cette approche séquentielle, les paramètres physiques sont supposés être des constantes et ne dépendent pas des champs inconnus, notamment de la température. Une étape clé de la modélisation numérique par élément finis est celle du maillage qui exige un raffinement dans les zones de discontinuité et dans les zones de forte variation des champs inconnus tout en gardant un nombre d'éléments raisonnable. Les logiciels commerciaux proposent généralement des mailleurs classiques (section 2.5.2) qui ne permettent pas de contrôler finement la taille du maillage dans des régions fixes de l'espace de calcul, même dans une boucle de remaillage. En effet, l'erreur par rapport une solution de référence permet d'analyser la qualité du maillage. Néanmoins, cette solution de référence n'existe pas *a priori* pour la plupart des cas surtout en 3D. Le principe d'OPTIFORM est de fabriquer une solution de référence à partir de l'interpolation du champ obtenu à l'étape précédente de remaillage et de l'utiliser comme estimateur d'erreur.

Illustrons notre propos par la modélisation d'une nanoparticule sphérique d'or de rayon $r = 20$ nm immergé dans un milieu diélectrique qui est l'air de rayon

$R = 100$ nm et illuminé par une onde monochromatique plane polarisée linéairement suivant l'axe des x .

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t) \quad (2.43)$$

Avec $\mathbf{E}_0 = 8.10^6(1,0,0)$ V.m⁻¹ et $\lambda_0 = 632.8$ nm. Les paramètres numériques spécifiques aux matériaux, considérés linéaires, homogènes et isotropes sont :

Électromagnétisme : $\epsilon_{air} = 1$, $\epsilon_{or} = -11 + 1,3i$

Thermique : $\lambda_{air} = 0.026$ W.K⁻¹.m⁻¹, $\lambda_{or} = 131.33$ W.K⁻¹.m⁻¹

Mécanique : $\alpha_{air} = 1/273.15$ K⁻¹, $\alpha_{or} = 14,6.10^{-6}$ K⁻¹, $E_{air} = 142.10^3$ Pa, $E_{or} = 70.10^9$ Pa, $\nu_{air} = 0$ et $\nu_{or} = 0,44$

Le maillage initial est présenté sur la figure 2.6. Elle permet de respecter la géométrie sphérique de la nanoparticule. Il est basé sur la triangulation de Delaunay et il contient 36 184 éléments.

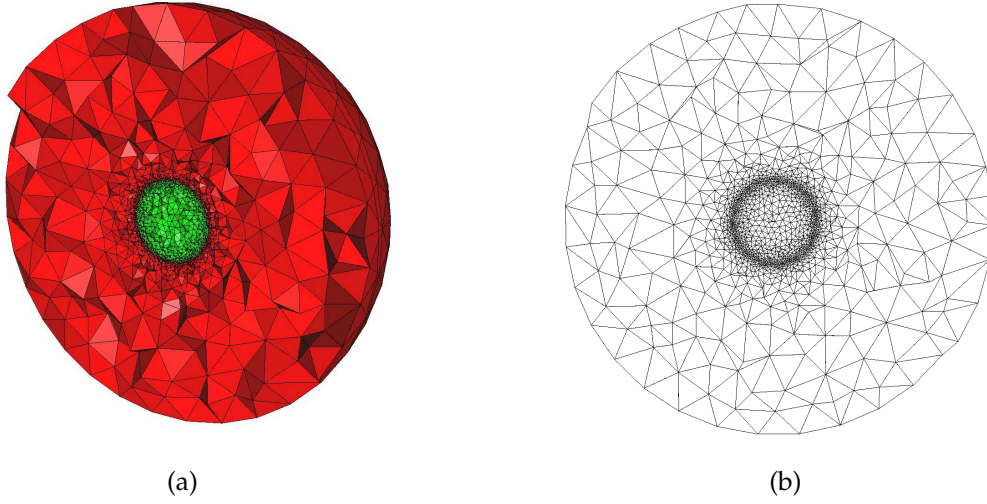


FIGURE 2.6: Coupe selon le plan médian : une vue 3D du maillage (a), coupe suivant le plan (xz)(b).

2.4.1 Électromagnétisme

Les figures 2.7(a-b) montrent l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ calculé par la MEF et à partir de la solution exacte de MIE, on observe clairement une exaltation de l'intensité du champ électrique au voisinage de la nanoparticule métallique et l'effet sur l'intensité de la discontinuité de la composante normale à l'interface Γ_0 du champ, entre les deux matériaux. La calcul de référence par la théorie de Mie est réalisé aux noeuds du maillage [79].

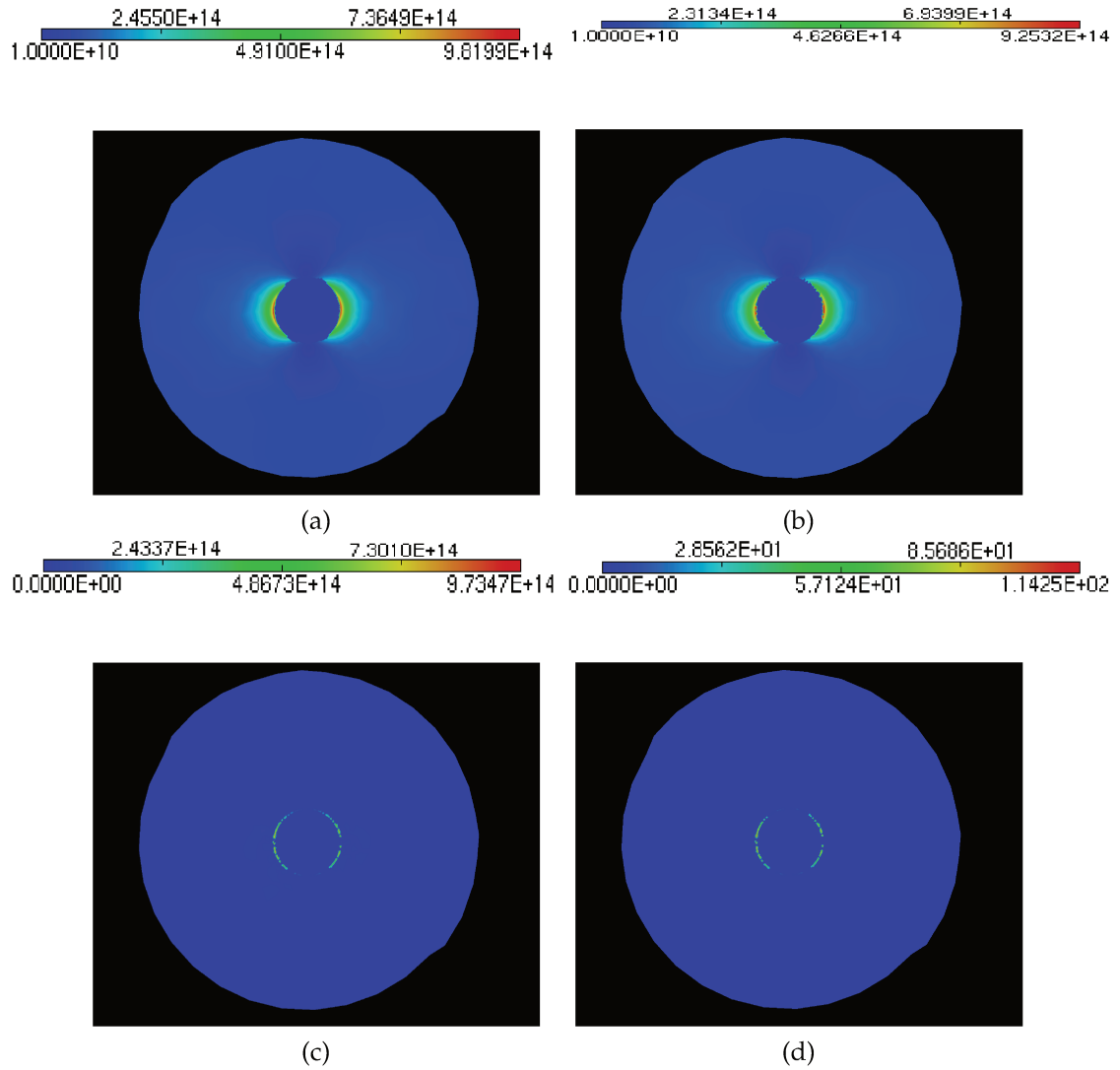


FIGURE 2.7: Coupe selon le plan médian $y=0$: de la distribution de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ calculé par la MEF (a), la théorie de Mie (b), de l'erreur absolue (c) et de l'erreur relative (d)

Les figures 2.7(c-d) montrent l'erreur et l'erreur relative entre la solution élément finis et la solution exacte de Mie. On observe un accord global des résultats mais une erreur importante à l'interface particule-air est liée à la discontinuité de la composante normale du champ électrique. L'erreur relative atteint 50%. D'où la nécessité de raffinement de maillage dans cette partie afin de minimiser cette erreur. La figure 2.8 montre la représentation de l'intensité du champ $\|E\|^2$ selon l'axe des x et l'axe des z ainsi que les erreurs relatives correspondantes. L'erreur relative ne dépasse pas les 5%.

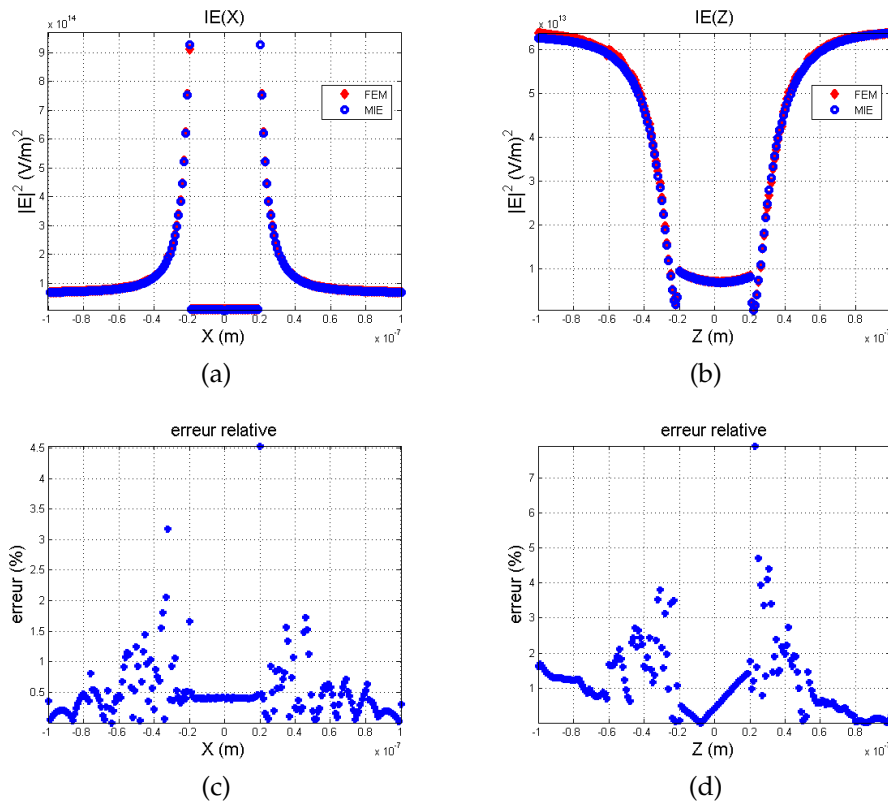


FIGURE 2.8: Intensité du champ électrique $\|E\|^2$ calculé par la MEF selon l'axe des x (a), l'axe des z (b), l'erreur relative par rapport à la solution de Mie selon x (c) et l'erreur relative par rapport à la solution de MIE selon x (d)

2.4.2 Thermique

La deuxième étape est la résolution de l'équation de chaleur. La figure 2.9 montre la représentation graphique de la température. On observe une localisation spatiale homogène à l'intérieur de la nanoparticule d'or qui conduit au chauffage de l'environnement au voisinage de la nanoparticule. Une comparaison avec une solution analytique exacte aurait été utile, mais nous n'en avons pas développé dans ce travail. La brisure de symétrie sphérique de la source de chaleur demanderait un développement sur une base adéquate non calculé ici.

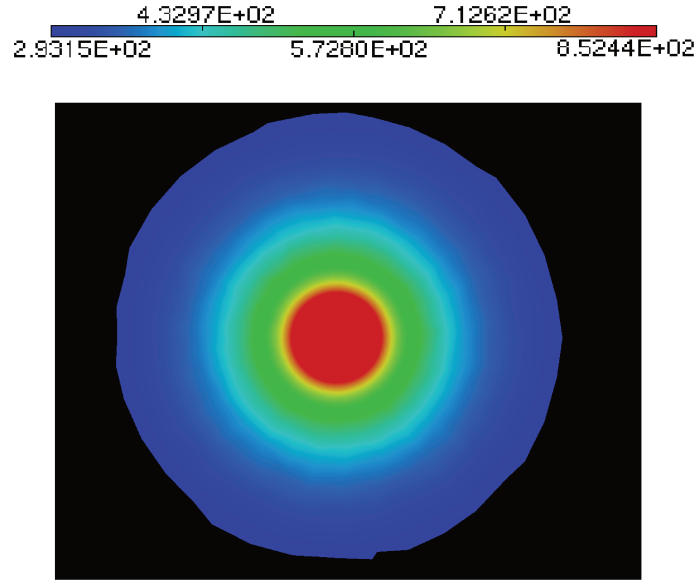


FIGURE 2.9: Coupe selon le plan médian $y=0$: de la distribution du champ de température T calculé par la MEF.

Afin de résoudre correctement le problème thermique, il est nécessaire de bien poser le problème notamment bien choisir les conditions aux limites. En effet le champ de température est extrêmement sensible à ces conditions. Sans solution analytique de référence, nous proposons d'étudier la sensibilité de la solution MEF pour différentes conditions aux limites qui peuvent être appliquées. Trouver une zone de stabilité de la solution permet d'au moins assurer que la limitation du domaine extérieur qui devrait être infini et les conditions frontières fixées sont pertinentes.

Comme il est présenté dans le chapitre précédent, il existe trois types de conditions aux limites possibles en pratique pour résoudre l'équation de chaleur. Nous entamons notre raisonnement par appliquer ces trois types de conditions sur le problème thermique.

1. **Cas 1** : conduction et bain.

- Sur la frontière extérieure Γ_1 du domaine de calcul Ω :

$$T = T_{amb} = T_0, \quad (2.44)$$

où T_{amb} est la température ambiante à l'extérieur (température de bain).

- À l'interface entre deux matériaux Γ_0 , les conditions naturelles de continuité s'écrivent :

$$n(\lambda \nabla T)_1 = n(\lambda \nabla T)_2 \quad (2.45)$$

$$T_1 = T_2 \quad (2.46)$$

2. **Cas 2** : conduction et convection.

- Sur la frontière extérieure Γ_1 du domaine de calcul Ω , la condition de flux de chaleur par convection :

$$-n(-\lambda \nabla T) = h(T_{amb} - T) = h(T_0 - T) \quad (2.47)$$

h est le coefficient de transfert de chaleur par convection. La valeur de h est généralement déterminée par l'expérience. Pour l'air, sa valeur varie de 5 à 25 W.m⁻².K⁻¹.

- À l'interface entre deux matériaux Γ_0 , les conditions naturelles de continuité s'acrivent :

$$n(\lambda \nabla T)_1 = n(\lambda \nabla T)_2 \quad (2.48)$$

$$T_1 = T_2 \quad (2.49)$$

3. *Cas 3* : rayonnement, convection et conduction.

- Sur la frontière extérieure Γ_1 du domaine de calcul Ω :

$$-n(-\lambda \nabla T) = h(T_{amb} - T) \quad (2.50)$$

- À l'interface entre deux matériaux Γ_0 :

$$n(\lambda \nabla T)_1 = n(\lambda \nabla T)_2 \quad (2.51)$$

$$T_1 = T_2 \quad (2.52)$$

$$-n(-\lambda \nabla T) = \varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T_1^4), \quad (2.53)$$

où T_1 est la température à la surface de la nanoparticule, T_{amb} est la température de la zone à l'extérieur, qui est l'air dans notre cas et ε est l'émissivité, $\varepsilon = 0,9$ pour l'or.

Si l'élévation de la température est très importante, il est plus logique de considérer le phénomène du rayonnement thermique à la surface des nanoparticules d'or. Ce phénomène est modélisé comme une condition aux limites sur la surface extérieure de la nanosphère d'or. Il peut participer au refroidissement de la nanoparticule avec les conditions imposées sur le domaine extérieur. C'est le rayonnement de la surface vers le milieu ambiant.

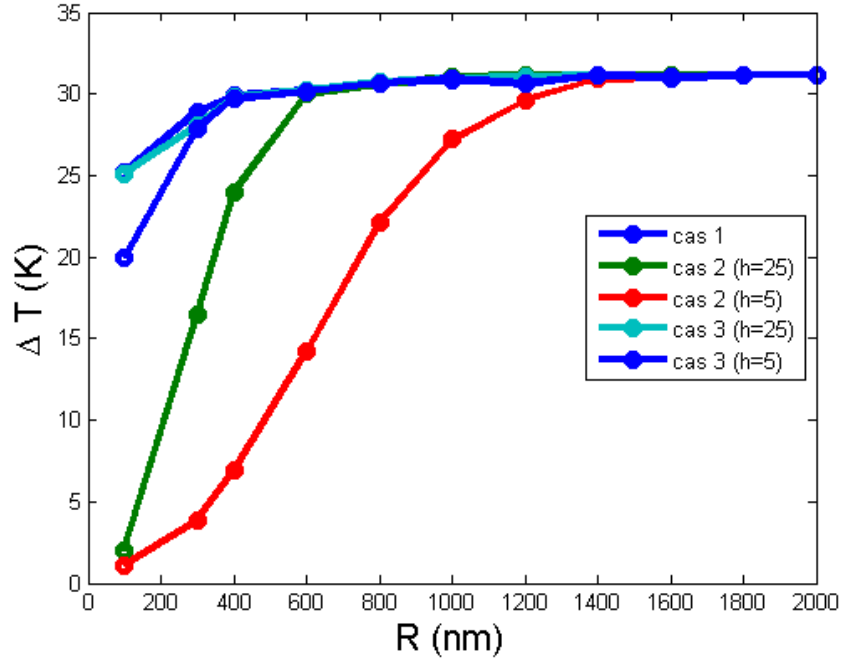


FIGURE 2.10: Élévation de la température en fonction du rayon du domaine extérieur : solution de l'équation de la chaleur dans le cas 1 (conduction + bain), cas 2 (conduction + convection) (avec $h = 5$ et $h = 25$) et cas 3 (conduction + convection + rayonnement) (avec $h = 5$ et $h = 25$).

L'évolution de la température en fonction du rayon du domaine extérieur R_Ω , pour les différents cas présentés ci-dessus, figure. 2.10, montre qu'à partir de $R_\Omega = 1400$ nm, la variation de température est la même pour les différents choix de conditions frontières. Même l'influence du coefficient de transfert de la chaleur par convection h est sans importance. Pour généraliser, avec un rapport d'aspect $\frac{r}{R_\Omega} = \frac{20}{1400} = 0,014$ (1,4%) le choix des conditions frontières n'a pas d'influence sur la précision de l'évolution de la température calculée. Dans ce qui suit, nous utilisons la condition de Dirichlet, $T = 293.15$ K (température ambiante) à la frontière extérieure Γ_1 et la continuité du flux et de la température à l'interface entre deux matériaux Γ_0 . Le rayon du milieu extérieur R_Ω est fixé à 1400 nm et celui de la nanoparticule d'or étudiée est $r = 20$ nm.

Compte tenu de l'importance de la taille du domaine de calcul par rapport à la taille du nanoparticule, en plus de la forte variation du champ électrique dans les régions proche de la nanoparticule, la génération d'un maillage de qualité qui peut garantir des solutions précises est compliquée. En effet, avec les méthodes de maillage classique, la précision des solutions nécessite un très grand nombre d'élément et par suite une consommation énorme de mémoire RAM et un temps de calcul excessivement long. Par conséquent, l'utilisation des nouvelles techniques de maillage et de remaillage adaptatif, qui sont rarement disponibles dans les logi-

ciels commerciaux, est indispensable pour une bonne modélisation numérique des problèmes physiques étudiés (OPTIFORM).

2.4.3 Mécanique

La dernière étape est la résolution de l'équation de déplacement. La figure 2.11 montre le champ de déplacement $\|U\|$. On remarque la validité de l'approximation des faibles déformations. La faible déformation de la nanoparticule nécessite plus de raffinement dans les zones proche du contour de la nanoparticule afin de bien représenter la déformation et de pouvoir générer la géométrie déformée.

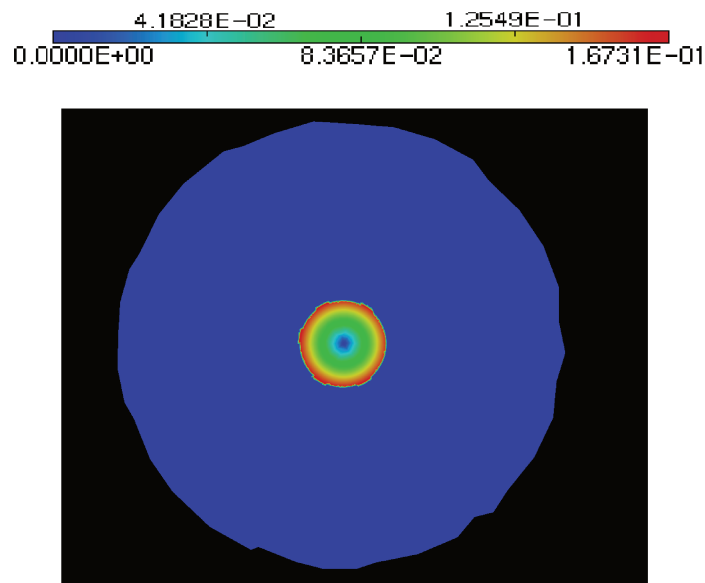


FIGURE 2.11: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution du champ des déplacements $\|U\|$ calculé par la MEF.

Durant tous les étapes de modélisation, électromagnétique, thermique et mécanique, on a remarqué la nécessité d'adapter le maillage. Chaque problème nécessite un raffinement du maillage dans des zones différentes. Considérer la résolution du problème global avec un unique maillage n'est donc pas envisageable. Des méthodes de remaillage adaptatif avancées ont fait la preuve de leur efficacité à générer un maillage de bonne qualité produisant des résultats numériques précis avec le minimum d'éléments possible. C'est pourquoi un interfaçage entre le mailleur adaptatif OPTIFORM et un solveur élément fini a été développé pour cette thèse. Par la suite la méthode de remaillage adaptatif sur laquelle est basée OPTIFORM est détaillée.

2.5 Génération de maillage

2.5.1 Validité et la qualité en forme des éléments de maillage

Lorsqu'on parle d'un élément de maillage, il faut toujours vérifier deux critères très importants : la validité de l'élément et sa qualité [80]. Pour vérifier la validité d'un élément, il faut paramétrer l'élément en utilisant les fonctions forme sur chaque noeud de l'élément dans l'espace de référence. Ensuite, en utilisant la technique de Lagrange, on définit une application F qui envoie cet élément dans l'espace réel. Une fois que la fonction F est définie, on calcule le Jacobien de F (déterminant de la matrice des dérivées partielles premières). Par la suite, l'analyse est simple : un élément est valide lorsque le Jacobien est strictement positif. En effet, cette condition sur le Jacobien provient du fait qu'en élément finis, on intègre les fonctions sur un élément dans l'espace de référence :

$$\int_k G \, dx \, dy \quad (2.54)$$

$$\Downarrow$$

$$\int_{\hat{k}} G \, J(F) \, d\hat{x} \, d\hat{y} \quad (2.56)$$

Pour calculer l'intégrale il faut que le Jacobien soit strictement positif.

Le deuxième critère de qualité est une vérification de l'aspect géométrique d'un élément. Pour cela on mesure la quantité Q_k qui représente l'écart de l'élément par rapport à l'élément idéal qui est connu pour chaque type d'élément. En effet, l'utilisation d'un élément idéal assure la convergence du calcul et la précision de la solution [80]. On a donc intérêt à ce que tous les éléments soient les plus proches que possible des éléments idéaux.

2.5.1.1 Les éléments surfaciques : condition de validité

À titre d'illustration, nous discutons le cas d'un triangle de degré 1 (P_1) puisque c'est l'élément utilisé pour mailler les surfaces dans le cadre de cette thèse. Nous introduirons ainsi les fonctions formes, le Jacobien et la qualité Q_k .

Soit le triangle $\hat{K}$ dans l'espace de référence $(o, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, qui envoie le triangle k dans l'espace réel (o, x, y, z) (figure 2.12).

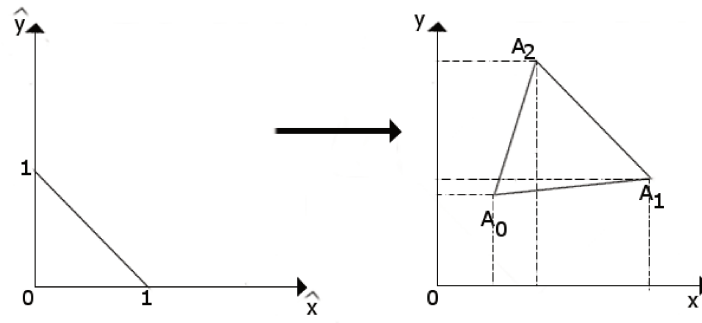


FIGURE 2.12: Triangle de référence et sa projection dans l'espace réel.

Ce triangle est défini par trois noeuds, par conséquent, il existe donc trois fonctions forme φ_0 , φ_1 et φ_2 qui sont les suivantes :

$$\varphi_0(\hat{x}, \hat{y}) = 1 - \hat{x} - \hat{y} \quad (2.57)$$

$$\varphi_1(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{x} \quad (2.58)$$

$$\varphi_2(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{y}. \quad (2.59)$$

La fonction F est définie par :

$$F(\hat{x}, \hat{y}) = \sum_i \varphi_i(\hat{x}, \hat{y}) A_i = (1 - \hat{x} - \hat{y}) A_0 + \hat{x} A_1 + \hat{y} A_2. \quad (2.60)$$

Le Jacobien est :

$$J(F) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F}{\partial \hat{x}} & \frac{\partial F}{\partial \hat{y}} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -A_0 + A_1 & -A_0 + A_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \overrightarrow{A_0 A_1} & \overrightarrow{A_0 A_2} \end{vmatrix} \quad (2.61)$$

Par la suite, on dit que le triangle est valide si et seulement si $J(F) > 0$.

Pour les élément triangulaires, l'élément idéal est le triangle équilatéral. La mesure de l'écart d'un triangle k par rapport l'élément idéal peut être défini par la mesure de la qualité suivante [80] :

$$Q_k = 2\sqrt{3} \frac{l_k}{h_k}, \quad (2.62)$$

avec h_k et l_k respectivement le plus grand coté et le rayon de plus grand cercle inscrit dans le triangle k . La mesure Q_k varie de 0 à 1, 0 est le mesure pour le plus mauvaise élément, le triangle plat, et 1 pour l'élément idéal, le triangle équilatéral. Il faut que $Q_k > \frac{1}{2}$ pour garantir la qualité en forme.

2.5.1.2 Les éléments volumiques : condition de validité

Dans le cas d'un tétraèdre de degré 1 (P_1), élément utilisé pour mailler les volumes dans le cadre de cette thèse, nous introduisons les fonctions de forme, le Jacobien et la qualité Q_k .

Soit le tétraèdre $\hat{K}$ dans l'espace de référence $(o, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, qui envoie le tétraèdre k dans l'espace réel (o, x, y, z) . (figure 2.13)

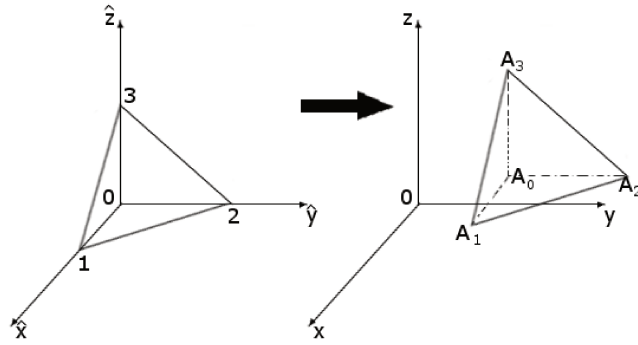


FIGURE 2.13: Tétraèdre de référence et sa projection dans l'espace réel

Ce tétraèdre est défini par quatres noeuds, par conséquent, il existe quatre fonctions forme φ_0 , φ_1 , φ_2 et φ_3 :

$$\varphi_0(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = 1 - \hat{x} - \hat{y} - \hat{z} \quad (2.63)$$

$$\varphi_1(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \hat{x} \quad (2.64)$$

$$\varphi_2(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \hat{y} \quad (2.65)$$

$$\varphi_3(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \hat{z} \quad (2.66)$$

La fonction F est définie par :

$$F(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \sum_i \varphi_i(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) A_i = (1 - \hat{x} - \hat{y} - \hat{z}) A_0 + \hat{x} A_1 + \hat{y} A_2 + \hat{z} A_3 \quad (2.67)$$

Le Jacobien est :

$$J(F) = \left| \frac{\partial F}{\partial \hat{x}} \quad \frac{\partial F}{\partial \hat{y}} \quad \frac{\partial F}{\partial \hat{z}} \right| = \left| \overrightarrow{A_0 A_1} \quad \overrightarrow{A_0 A_2} \quad \overrightarrow{A_0 A_3} \right| \quad (2.68)$$

Le tétraèdre est valide si et seulement si $J(F) > 0$. L'élément idéal est le tétraèdre régulier. La mesure de l'écart entre le tétraèdre k et l'élément idéal est défini par la mesure de la qualité suivante :

$$Q_k = 2\sqrt{6} \frac{l_k}{h_k}, \quad (2.69)$$

avec h_k et l_k le plus grand coté et le rayon de la plus grande sphère inscrite dans le tétraèdre k respectivement.

La mesure Q_k varie de 0 à 1, 0 est le mesure pour le plus mauvaise élément, le tétraèdre plat, et 1 est celle pour l'élément idéal, le tétraèdre régulier. Il faut que $Q_k > \frac{1}{2}$ pour garantir la qualité en forme.

La qualité des éléments étant définie, il est utile d'introduire les spécificités du mailleur OPTIFORM, afin de comprendre la différence avec les mailleurs classiques.

2.5.2 Généralités sur la génération de maillage

Dans le cas général, pour définir un maillage on utilise souvent la notion de métrique, ou distance. Nous allons tout d'abord rappeler la notion de métrique définie dans $\mathbb{R}^3$ ainsi que celle de longueur relative à une métrique donnée [62, 81, 82].

Métriques $\mathcal{M}$: Soit P un point d'un domaine Ω fermé borné dans $\mathbb{R}^3$, la forme générale d'un métrique ou encore d'un tenseur métrique est une matrice (3×3) symétrique définie positive $\mathcal{M}(P)$.

$$\mathcal{M}(P) = \begin{bmatrix} a(P) & b(P) & c(P) \\ b(P) & d(P) & e(P) \\ c(P) & e(P) & f(P) \end{bmatrix} \quad (2.70)$$

Pour que $\mathcal{M}(P)$ soit définie positive, il faut que $a(P) > 0$, $a d - b^2 > 0$ et $\det(\mathcal{M}(P)) > 0$. Les coefficients a, b, c, d, e et f sont proportionnels à l'unité de mesure $h(P)$ qui peut changer suivant une direction donné.

Longueur dans la métrique $\mathcal{M}$: Soit P et Q deux points de Ω , la distance de A à B dans l'espace euclidien muni d'une métrique $\mathcal{M}$ est définie par [80] :

$$d_{\mathcal{M}}(P, Q) = \|\vec{PQ}\|_{\mathcal{M}} = \sqrt{\langle \vec{PQ}, \vec{PQ} \rangle_{\mathcal{M}}} = \sqrt{\vec{PQ}^T \cdot \mathcal{M} \cdot \vec{PQ}} \quad (2.71)$$

Avec $\langle \vec{PQ}, \vec{PQ} \rangle_{\mathcal{M}}$ désigne le produit scalaire dans la métrique $\mathcal{M}$. À la différence de l'espace euclidien classique où la métrique $\mathcal{M}$ n'est que la matrice identité I_d autrement dit l'unité de mesure est constante dans toutes les directions, la métrique riemannienne sur Ω où l'unité de mesure change dans chaque direction. Par la suite, le domaine Ω muni de la métrique $\mathcal{M}$ sera désigné par

$(\Omega, \mathcal{M})$.

Avec la métrique riemannienne, la longueur $L_{\mathcal{M}}$ entre P et Q est donnée par :

$$L_{\mathcal{M}} = d_{\mathcal{M}}(P, Q) = \int_0^1 \sqrt{\vec{PQ}^T \cdot \mathcal{M}(P + t\vec{PQ}) \cdot \vec{PQ}} dt \quad (2.72)$$

Avec $t \in [0, 1]$. Le terme $\mathcal{M}(P + t\vec{PQ})$ englobe les distances pour chaque point $X_i \in [P; Q]$.

Maillage classique : uniforme ou géométrique [83] : Par définition, le maillage du (Ω, M) est une triangulation de Ω . Typiquement, un maillage de qualité idéale est un maillage équilatéral : tous les éléments qui composent le maillage sont équilatéraux. En pratique, la réalisation d'un tel maillage est impossible pour un géométrique quelconque. Par conséquent, on cherche le meilleur maillage possible. Ceci reste un problème d'optimisation ouvert et très complexe.

En toute généralité, il existe deux approches de discrétisation de domaine envisageables pour générer un maillage de qualité. La première approche est dite *maillage uniforme* dans laquelle la longueur de toutes les arêtes est de taille constante h dans une métrique $\mathcal{M}$. Cette approche permet de fournir un maillage de qualité proche de celle du maillage équilatéral. D'autre part, la discrétisation d'un domaine qui présente des courbures transforme généralement ce domaine en polygones dans le cas 2D ou en polyèdres dans le cas 3D. Par conséquent, une bonne représentation des frontières d'un domaine lors du maillage uniforme nécessite un très grand nombre d'éléments parce qu'il faut que la taille h soit plus petite que la taille nécessaire pour le calcul élément finis ou nécessite des éléments de degrés élevés (quadratique, cubique) car ces éléments respectent mieux la géométrie notamment les courbures. Le coût du respect de la géométrie par cette approche est l'augmentation importante du nombre des noeuds ce qui va augmenter la place en mémoire nécessaire et le temps de calcul élément finis d'où l'intérêt d'une deuxième approche de maillage dite *géométrique*. L'idée de base du maillage géométrique est d'utiliser des éléments de taille variable afin de raffiner les zones qui présentent une forte courbure et de déraffiner ailleurs. Dans ce cas, la taille h de la longueur des arêtes est proportionnelle au rayon du courbure des frontières d'où un meilleur respect de la géométrie. En revanche, cette approche peut générer un maillage avec de grandes variations locales de taille h des éléments ce qui engendre la diminution de la qualité du maillage.

Indépendamment de ce classement, on peut définir deux types de spécification du maillage : *isotrope* et *anisotrope*. Dans le cas le plus classique, du maillage isotrope, la taille des arêtes en tout point P du maillage est indépendante de la direction des arêtes autour du point P . En revanche, dans le cas du maillage anisotrope, la taille des arêtes autour d'un point P quelconque du maillage dépend de la direction considérée. Ce dernier est plus efficace pour capter les variations rapides

des solutions tout en minimisant le nombre d'éléments, ce qui est utile pour le problème électromagnétique.

En résumé, la construction d'un maillage doit satisfaire un certain nombre de critères. En effet, il doit être suffisamment raffiné afin de respecter la géométrie et afin de garantir une précision raisonnable de la solution surtout pour les problèmes avec une forte variation du champ. Toutefois, le nombre d'élément ne doit pas être inutilement grand. Aussi faut-il que les éléments de base qui constituent le maillage respectent au mieux les deux critères présentés précédemment : la validité et la qualité en forme. Différentes méthodes de génération des maillages peuvent satisfaire ces spécifications. Parmi les méthodes les plus connues, citons les techniques de génération de maillage non structuré.

1. *La méthode de Delaunay* : c'est un algorithme basé sur la triangulation de Delaunay qui repose sur un critère fort. Une triangulation est dite de Delaunay si les sphères (disque en 2D) circonscrits aux éléments sont vides (ne contiennent aucun point) (figure 2.14).

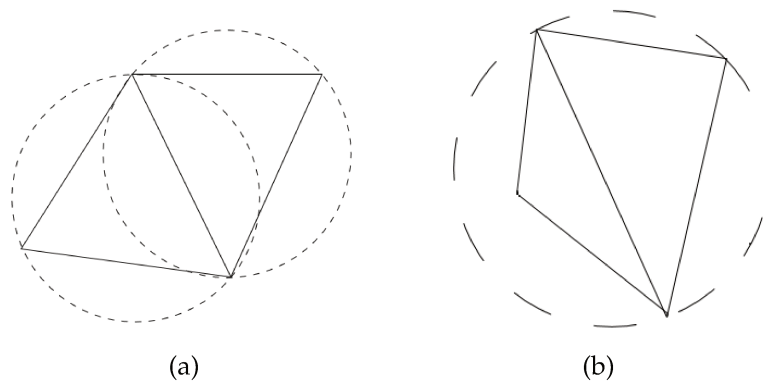


FIGURE 2.14: Critère vérifié (a), critère non vérifié (b).

La construction de la triangulation de Delaunay se fait généralement par l'approche incrémentale de construction de maillage. En respectant le critère de Delaunay, la génération de maillage consiste en première lieu à l'insertion des points aux frontières dans le maillage puis à régénérer les frontières ensuite introduire successivement un nuage unique de point interne qui représente les sommets d'éléments afin de générer des tétraèdres en 3D ou des triangles en 2D. Cette méthode offre la possibilité de raffiner les frontières afin de respecter la géométrie et de contrôler la taille des éléments du domaine. Le critère de Delaunay garantit la génération d'éléments valides seulement. En revanche, il arrive que les éléments générés soient de mauvaise qualité. Aussi, il est parfois difficile de régénérer la frontière. Par conséquent, un autre critère de qualité en forme est parfois imposé. Certaines versions de cette méthode sont améliorées par combinaison avec d'autre approche [81].

2. *La méthode frontale* : à l'opposé de la méthode de Delaunay cette méthode ne repose pas sur des propriétés mathématiques. Elle est fondée sur une approche itérative de construction de maillage. Le principe de base est de discrétiser la frontière (front initial) et ensuite de mailler le domaine en propageant ce front vers l'intérieur du domaine par itération successive jusqu'à l'obtention du maillage final. L'avantage de cette méthode est que le front initial est respecté durant tout le processus de maillage cela permet de garder un bon maillage des frontières. Aussi en utilisant une métrique anisotrope, on peut inclure l'anisotropie lors de l'insertion des noeuds internes. En revanche, la difficulté majeure vient du caractère intuitif de la méthode notamment lors de la rencontre du front final où la validité des éléments n'est pas assurée.
3. *La méthode Octree ou encore quatree* : le principe de cette méthode consiste à subdiviser le domaine à mailler puis générer le maillage du domaine ainsi que des frontières simultanément. Les éléments du maillage généré sont généralement de qualité acceptable à l'intérieur du domaine. En revanche, dans les régions proches des frontières, où on trouve une grande variation du champ pour la plupart des problèmes physiques, la qualité des éléments n'est pas garantie. L'avantage majeur de cette méthode réside dans la convergence rapide. Néanmoins, avec cette méthode on ne peut pas imposer un maillage sur les frontières car il y a un risque de non respect ou de trop grand nombre d'éléments. En outre, il est presque impossible d'avoir un maillage anisotrope en utilisant cette méthode.

Le maillage initial, quelle que soit la méthode utilisée, doit être adapté afin de contrôler la précision du calcul.

2.6 Adaptation de maillage

La génération d'un maillage de qualité pour la résolution d'un problème physique, par les méthodes classiques, nécessite une intuition de la solution afin de fixer les zones de raffinement et de déraffinement. Sans cette intuition, le maillage peut être inutilement fin ce qui augmente le coût de calcul ou dans le cas contraire il peut être relativement grossier ce qui affecte la précision de la solution. L'adaptation de maillage aux solutions cherchées est une technique puissante qui a montré son efficacité de générer des maillages qui garantissent des solutions de haute précision avec un nombre minimum d'éléments [84, 85, 86, 87, 88]. L'idée de base est de détecter automatiquement, en se basant sur la nature de la solution physique du problème considéré, les zones qui nécessitent un raffinement là où apparaissent de fortes variations ou des discontinuités des champs. Ensuite, il s'agit de générer un nouveau maillage plus adapté au problème en raffinant les zones captées et dé-raffiné ailleurs. L'adaptation de maillage est basée alors sur un estimateur d'erreur qui permet de détecter les zones de raffinement ou de déraffinement et sur un mailleur adaptatif qui permet de générer le nouveau maillage contrôlé par la carte

fournie par l'estimateur d'erreur [89, 89, 88]. La technique est basée alors sur une approche itérative.

Il existe quatre catégories de stratégie d'adaptation : *h*-Adaptation, *p*-Adaptation, *r*-Adaptation et le *h-p* Adaptation. Ces différentes méthodes offrent la possibilité de jouer sur plusieurs paramètres tels que la position des noeuds, la taille et les fonctions forme des éléments. Le maillage adaptatif peut se faire alors par raffinement et déraffinement des éléments maillage en subdivisant ou fusionnant des éléments. Il s'agit de remaillage local. Quant au deuxième type de remaillage dit global, le maillage optimal est entièrement généré en respectant la carte de l'estimateur d'erreur.

Il existe deux types d'estimateurs d'erreurs : les estimateurs d'erreurs physiques et les estimateurs d'erreurs géométriques. Le premier type se base sur l'analyse de la solution physique tandis que le second s'appuie sur l'analyse de la forme géométrique de la solution. Ce dernier est universel pour tous les problèmes physiques, par contre les estimateurs d'erreurs physiques présentent des limitations pour les problèmes non linéaires.

Décrivons d'abord les stratégies d'adaptation.

2.6.1 Stratégies d'adaptation

L'application d'une telle stratégie d'adaptation est une question clé dans le processus d'adaptation de maillage. En effet, il est parfois très complexe d'appliquer une telle stratégie surtout lors d'une combinaison de méthodes. Le choix d'une stratégie reste limité par les capacités du mailleur et de son algorithme de maillage. Nous rappelons, brièvement, les stratégies les plus importantes.

2.6.1.1 *h-Adaptation*

Cette stratégie est basée sur la manipulation de la taille des éléments en subdivisant ou en combinant des éléments. Par conséquent, elle engendre une variation des nombre des éléments. Elle peut se faire par raffinement uniforme sur tout le domaine ou par raffinement/déraffinement local selon les critères de précision fixé. Cette méthode est adaptée aux géométries complexes dans le cas tridimensionnels.

2.6.1.2 *p-Adaptation*

Cette stratégie conserve la taille et la position des noeuds du maillage initial mais elle manipule le degré des fonctions forme des éléments en fonction des exigences de précision. Cette adaptation peut être uniforme sur tout le domaine ou locale pour certaines zones du domaine. L'application de cette stratégie exige une compatibilité des éléments voisins et une bonne discrétisation des courbures par le maillage initial. Généralement, cette méthode est difficile à concevoir dans le cas tridimensionnel pour les géométries complexes.

2.6.1.3 *h p-Adaptation*

Cette approche est la combinaison la plus utilisée. Il s'agit de combiner les deux stratégies h-adaptation et p-adaptation. Par conséquent, cette méthode offre la possibilité de manipuler à la fois la taille des éléments et l'ordre des fonctions formes.

2.6.1.4 *r-Adaptation*

Cette stratégie redistribue les positions des noeuds des éléments déjà existant dans le maillage initial. Le nombre d'éléments est conservé par contre la validité des éléments lors d'une déformation importante peut être dégradée. Par conséquent, l'intérêt de cette méthode apparaît lorsque le maillage initial est très dense.

Les estimateurs d'erreur sont utilisés par chacune de ces stratégies d'adaptation.

2.6.2 Estimateurs d'erreur

L'étape principale pour mettre en place une boucle d'adaptation de maillage est l'estimation de l'erreur. En effet, cette étape analyse la solution numérique pour fixer les zones de grande erreur *a posteriori*. Par la suite, elle génère la carte qui va gouverner la génération du nouveau maillage. Par conséquent, un mauvais estimateur d'erreur peut conduire à un maillage qui possède inutilement un trop grand nombre d'éléments ou un ordre de fonction de forme trop grand, ce qui peut augmenter le coût de calcul. Il peut aussi générer un maillage avec un nombre insuffisant d'éléments ou avec des fonctions de forme de degré trop faible pour corriger les erreurs numérique. Dans ce cas, la précision de calcul est affectée. En général, un bon estimateur d'erreur doit respecter le seuil d'erreur fixé (tolérance) sans augmenter trop le coût de calcul.

Il existe essentiellement deux types d'estimateur d'erreur qui peuvent être utilisés comme base pour l'adaptation.

- Les *estimateurs d'erreur physique* utilisent les opérateurs différentiels afin d'estimer l'écart entre la solution exacte et la solution calculée. Il faut donc un estimateur pour chaque problème physique. Parmi les estimateurs d'erreurs physiques, on trouve [89] :
 - l'estimation résiduelle ;
 - les solutions des problèmes locaux ;
 - la méthode de calcul des moyennes.
- Les *estimateurs d'erreur géométrique* sont beaucoup plus simples, ils analysent la forme géométrique de la solution afin d'estimer l'erreur. Ce type d'estimateur est universel pour tous les problèmes physiques. Ces estimateurs sont *a posteriori* car ils n'exigent pas la solution exacte pour déterminer l'ordre d'erreur. Les estimateurs d'erreur géométrique les plus utilisés sont basés sur l'erreur d'interpolation géométrique. Les estimateurs d'erreurs d'interpolation géométriques sont basés sur les erreurs calculées à partir [83] :

1. du hessien de la solution ;

2. de la courbure de la surface de la solution ;
3. de la déformation locale de la surface de la solution.

Erreur d'interpolation : à titre d'illustration, considérons un problème 1D représenté figure 2.15. On désigne par U la forme géométrique de la solution exacte et U_{EF} la forme géométrique de la solution élément finis calculée sur un maillage initial. L'erreur d'interpolation $\varepsilon_{EF} = U - U_{EF}$ représente l'écart entre les deux courbes. Les estimateurs d'erreur d'interpolation cherchent à générer un nouveau maillage qui fournit une solution élément finis la plus douce possible afin de minimiser l'écart entre les deux courbes.

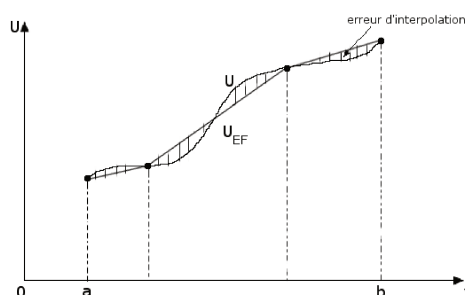


FIGURE 2.15: Représentation de l'erreur d'interpolation dans le cas 1D.

Les stratégies d'adaptation et les estimateurs d'erreurs ayant été décrits, l'algorithme d'adaptation du maillage doit être présenté.

2.6.3 Schémas de principe d'adaptation

En général, le processus de remaillage adaptatif suit un algorithme (figure 2.16) qui permet à quatre types de code de communiquer ensemble. En effet, si on considère un objet à modéliser Ω , la première étape est la modélisation géométrique de l'objet. Cette étape se fait par un logiciel de CAO qui est généralement inclus dans le logiciel éléments finis. Ensuite, le deuxième code (mailleur) permet la construction du maillage initial $M_i(\Omega)$ par les méthodes classiques, purement géométrique. L'idéal pour le remaillage adaptatif est que $M_i(\Omega)$ respecte la carte de taille métrique géométrique $\mathcal{H}_g(\Omega)$. Par la suite, un premier calcul élément finis par un solveur permet de fournir un champ de solution $\Phi(\Omega)$. Un estimateur d'erreur (quatrième code) permet d'analyser la solution $\Phi(\Omega)$ afin de capter les zones qui présentent un seuil d'erreur supérieur au seuil fixé. Si cette tolérance n'est pas respectée, l'estimateur d'erreur génère une carte de taille métrique physique $\mathcal{H}_\Phi(\Omega)$ permettant de gouverner la génération du nouveau maillage adapté. Le maillage adapté $M_a(\Omega)$ est généré par le mailleur, qui doit être adaptatif, en se basant sur $\mathcal{H}(\Omega) = \mathcal{H}_g(\Omega) \cap \mathcal{H}_\Phi(\Omega)$. Enfin, on entre dans une boucle avec le maillage $M_a(\Omega)$ jusqu'à ce que la solution vérifie la tolérance sur l'erreur, partout dans le domaine de calcul.

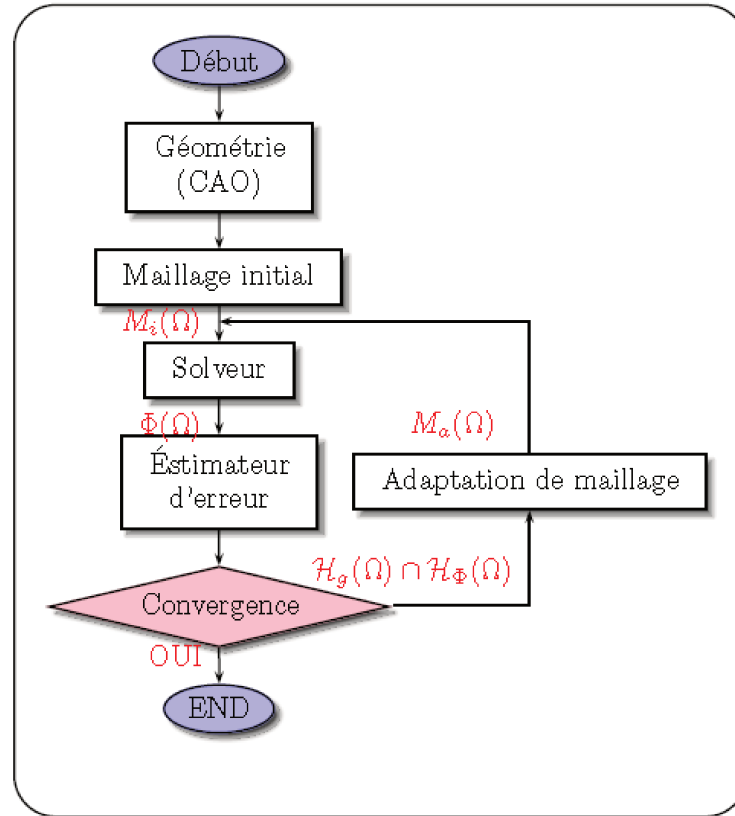


FIGURE 2.16: Schéma de principe d'une boucle d'adaptation

La présentation générale étant faite, détaillons maintenant les spécificités d'OPTIFORM.

2.6.4 Méthode utilisée : remaillage de l'unité et estimateur d'erreur d'interpolation

Dans le cadre de cette étude nous utilisons une méthode de remaillage adaptatif basée sur la stratégie h-Adaptation et qui utilise l'approche de Delaunay. Cette méthode, appelée *marche unité*, permet le raffinement et le déraffinement local du maillage en se basant sur le noyau de Delaunay. L'estimateur d'erreur utilisé est un estimateur d'erreur d'interpolation basé sur la hessien de la solution. Ce type d'estimateur d'erreur est anisotrope par suite il est bien adapté à la h-Adaptation. Détaillons spécifiquement l'estimateur d'erreur d'interpolation basé sur le hessien de la solution et la *marche unité*.

2.6.4.1 Estimateur d'erreur d'interpolation

Considérons une discrétisation $M(\Omega)$ d'un domaine Ω . On désigne par U la solution exacte du problème utilisé, U_h la solution numérique calculée et $\Pi_h u$ le champ d'interpolation de U . Le rôle d'un estimateur d'erreur *a posteriori* est d'évaluer l'erreur exacte entre U et U_h sur chaque élément K du maillage. La solution

exacte U est généralement inconnue d'où l'intérêt de la majoration de cette erreur qui apparaît dans la relation suivante [85] :

$$\|U - U_h\| \leq C \|U - \Pi_h u\| \quad (2.73)$$

Avec C est une constante qui dépend de Ω mais est indépendante de $M(\Omega)$. Cette relation 2.73 permet alors de simplifier le problème. En effet, le contrôle de l'erreur d'interpolation $\|U - \Pi_h u\|$ permet le contrôle de l'erreur numérique exacte $\|U - U_h\|$.

En d'autre terme, pour contrôler l'erreur d'interpolation, on peut utiliser le hessien de la solution pour majorer l'erreur d'interpolation $\|U - \Pi_h u\|$. En effet, sur chaque élément K du maillage $M(\Omega)$, on a :

$$\forall x \in k, \|U(x) - \Pi_h u(x)\|_\infty \leq \frac{9}{32} M h_k^2, \quad (2.74)$$

avec h_k le plus grand coté de K et M donné par la relation suivante, $H_u(x)$ étant le hessien de la solution exacte U en x et $\langle, \rangle$ le produit scalaire usuel dans $\mathbb{R}^3$:

$$M = \max_{x \in k} (\max_{\|v\|=1} |\langle v, H_u(x) v \rangle|). \quad (2.75)$$

v est un vecteur unité dans K et de direction quelconque. Généralement, la solution exacte U est inconnue donc son hessien $H_u(x)$ l'est également. En pratique $H_u(x)$ est approché par le hessien de la solution élément finis obtenue. Finalement, pour contrôler l'erreur d'interpolation avec la taille des éléments K_i du maillage $M(\Omega)$, on a :

$$h_k \leq \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{M}} \varepsilon \implies \forall x \in k, \|U(x) - \Pi_h u(x)\|_\infty \leq \varepsilon. \quad (2.76)$$

Par conséquent, ε représente le maximum d'erreur de la solution physique, toléré sur chaque élément K . L'estimation d'erreur d'interpolation par les différentes équations ci-dessus permet de générer la carte de taille physique $\mathcal{H}_\Phi(\Omega)$ que nous allons décrire dans les paragraphes suivants.

2.6.4.2 Marche unité

La carte de taille $\mathcal{H}(\Omega)$ générée par l'estimateur d'erreur d'interpolation définit la taille h et la direction v de chaque arrête d'un élément quelconque du maillage. Par ailleurs, la stratégie de remaillage sert à générer un maillage qui respecte au mieux ces spécifications. De plus, on utilisant la marche unité le nouveau maillage généré est dit « un maillage unité ». Un maillage unité d'un domaine muni d'une métrique riemannienne $(\Omega, \mathcal{M})$ (page 74) est un maillage dans laquelle la longueur de toutes les arrêtes est égale à l'unité dans la métrique $\mathcal{M}$.

$$L_{\mathcal{M}} = d_{\mathcal{M}}(P, Q) = \int_0^1 \sqrt{\vec{PQ}^T \cdot \mathcal{M}(P + t\vec{PQ}) \cdot \vec{PQ}} dt = 1 \quad (2.77)$$

Dans la pratique, nous considérons des longueurs proches de un qui vérifient :

$$\frac{1}{\sqrt{(2)}} < L_{\mathcal{M}} < \sqrt{(2)} \quad (2.78)$$

Nous utilisons la méthode de remaillage d'OPTIFORM [84, 83] qui permet de générer un maillage unité pour un domaine Ω de $\mathbb{R}^3$ associé à une métrique riemannienne $\mathcal{M}$ tout en respectant les exigences de la carte de taille $\mathcal{H}(\Omega)$. Le schéma principal de cette méthode peut être présenté en deux étapes :

1. la discrétisation unité du frontière Γ de Ω ,
2. la discrétisation du domaine Ω en utilisant la discrétisation du Γ .

La discrétisation du domaine se fait en premier lieu par la méthode de génération classique de Delaunay puis une modification locale de la topologie de maillage par insertion des points internes, afin que toutes les arêtes soient de mesure proche de l'unité afin d'améliorer la qualité de forme. Le placement des points internes se fait par une approche itérative. À chaque itération, une amélioration d'un ensemble d'éléments du maillage est possible afin de former des arêtes unité sur la base du maillage de l'itération précédente. L'insertion des points dans le maillage utilise le noyau de Delaunay modifié.

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les méthodes numériques utilisées. La méthode des éléments finis permet de résoudre en aveugle les différentes équations aux dérivées partielles liées à des conditions aux limites, c'est pourquoi elle est adaptée aux problèmes multiphysiques. Nous avons commencé par une première modélisation élément finis en utilisant les techniques de maillage classique. Ce premier calcul nous a permis de valider globalement le modèle physique et la méthode numérique utilisés. Cependant, il nous a permis d'identifier la faiblesse du remaillageur classique de Comsol et de connaître les spécificités des différents champs inconnus du problème multiphysique. Nous avons également présenté la technique de remaillage adaptatif en détaillant les différentes étapes telles que les techniques de remaillage et les estimateurs d'erreur.

Les prochains chapitres sont dédiés à la mise en place de la technique de remaillage adaptatif qui nécessite un interface avec le solveur élément finis. Par la suite, des applications physiques seront présentées. Nous terminons par le but ultime de cette étude, c'est à dire le calcul des dilatations des structures métalliques de taille nanométriques.

Calcul de l'amélioration du champ électromagnétique par petit facette, de petit angle, de nanoparticule métallique

Sommaire

3.1	Introduction	85
3.2	Formulation du problème électromagnétique pour la méthode des éléments finis	87
3.3	Comparaison des méthodes d'adaptation de maillage et résultats numériques	88
3.3.1	Méthode de raffinement S_1	89
3.3.2	Remaillage S_2	90
3.3.3	Comparaison entre les méthodes de raffinement et de re-maillage	91
3.4	Étude de l'influence des paramètres de la méthode d'adaptation de maillage	98
3.5	Conclusion	100

3.1 Introduction

Les excellentes propriétés optiques des nanoparticules métalliques sont largement utilisés en nanoscience [45]. Cet intérêt est en particulier lié à l'importance du champ électrique local généré sous excitation par un champ électromagnétique (source laser). En effet, cette amélioration du champ, due à la résonance de plasmon dans les nanoparticules métalliques, produit une source de lumière de taille nanométrique qui trouve des applications en biologie, en médecine (thérapie du cancer, administration de médicaments...) et en physique (fluorescence, spectroscopie locale...). Cependant, la réponse optique dépend fortement de la taille et de la forme de la nanoparticule [45, 8]. Par conséquent, le contrôle de la taille et de la forme des nanoparticules lors de leur synthèse est un objectif de recherche scientifique et technologique. Les choix de méthodes de synthèse sont guidés par les résultats de simulation numérique. Cependant, dans certains cas expérimentaux, la forme des nanoparticules d'or présente des facettes (figure 3.1) qui sont liées à leur mode d'élaboration [1, 90, 91]. Par conséquent, une méthode précise de calcul du champ autour de ces nanostructures pourrait contribuer à leur optimisation.

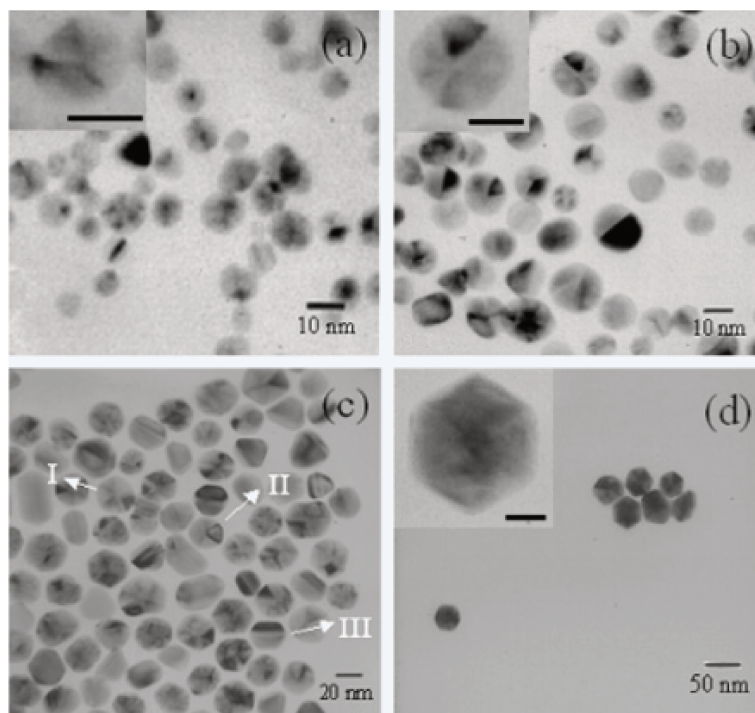


FIGURE 3.1: Images TEM des nanoparticules d'or de forme polygone sphérique (Source [1].)

Le premier objectif de cette partie, est d'évaluer le champ électrique produit par le sommet constituée par deux facettes adjacentes (effet de « pointe »). L'angle entre les facettes est de 5° , ce qui rend difficile la captation de l'exaltation locale du champ électrique par un calcul éléments finis [18]. Notons que ce problème ne peut pas être résolu ni avec la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD), ni avec la méthode d'approximation dipolaire discrète (DDA), ni avec les méthodes de tenseur de Green parce qu'ils ne sont pas en mesure de décrire les facettes avec précision, et le champ local. Le deuxième objectif est de prouver l'efficacité de la méthode d'adaptation de maillage proposée dans le chapitre précédent (OPTIFORM) par rapport à la méthode du logiciel commercial Comsol. Nous utilisons un estimateur d'erreur géométrique d'interpolation avec une stratégie h-Adaptation alors que le mailleur de Comsol utilise un estimateur d'erreur physique de type résiduelle avec une stratégie de type h-Adaptation.

Dans ce qui suit, nous rappellerons la description du modèle électromagnétique utilisé et de sa formulation pour la méthode élément finis. Ensuite, nous comparerons les résultats des deux schémas de raffinement et de remaillage adaptatif en se basant sur la détection de l'amélioration de l'intensité du champ et le coût de calcul (RAM et temps CPU).

3.2 Formulation du problème électromagnétique pour la méthode des éléments finis

Nous considérons une nanoparticule d'or globalement sphérique de rayon $r = 20$ nm, mais de forme polyédrique (figure 3.2). La nanoparticule métallique d'or est de permittivité relative complexe $\epsilon_1 = -11 + 1.33i$ (la longueur d'onde est $\lambda_0 = 632.8$ nm) et elle est immergée dans un milieu diélectrique (domaine de rayon $R_\Omega = 1400$ nm, $\omega \approx 3.10^{15}$ rad/s) de permittivité relative $\epsilon_2 = 1$. Les deux milieux sont linéaires, homogènes et isotropes. Cette nanoparticule est illuminée par une onde monochromatique plane polarisée linéairement :

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t), \quad (3.1)$$

avec $\mathbf{E}_0 = 8.10^6(1,0,0)$ V/m le long de l'axe des x . Le système est représenté figure 3.2.

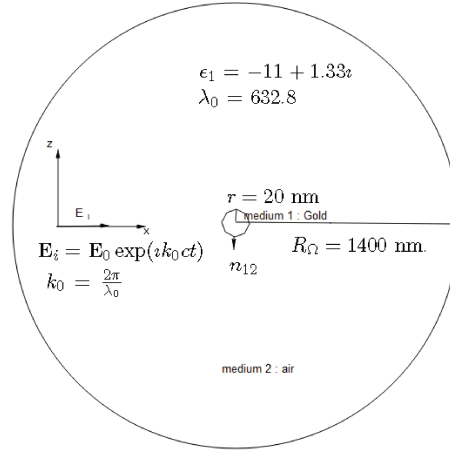


FIGURE 3.2: Représentation du modèle d'une nanoparticule illuminée par une onde plane.

Le problème consiste donc à résoudre l'équation de Helmholtz 3D dans chaque matériau linéaire, homogène, isotrope, non magnétique (page 11) :

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \epsilon_i \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (3.2)$$

En plus des conditions de passage correspond à la continuité de la composante tangentielle du champ électrique, on applique à la frontière extérieure du domaine de calcul Ω la condition de rayonnement correspond à la propagation libre du champ diffusé et à l'onde plane incidente (1.15) :

$$\nabla \times \mathbf{E}_2 = i[k_0 n_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_i) - \mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i] \quad (3.3)$$

3.3 Comparaison des méthodes d'adaptation de maillage et résultats numériques

La première étape de toute méthode d'adaptation de maillage est la génération du maillage initial qui respecte la géométrie du domaine, notamment la position des surfaces limitant les matériaux (figure 3.3). Le résultat de calcul avec le maillage initial est représentée sur les figures 3.8 (a), 3.10 (a). Le petit angle entre les facettes n'est pas capté par la simulation numérique et le champ n'e présente pas d'exaltation locale près du sommet entre deux facettes adjacentes. Par conséquent, l'adaptation de maillage est nécessaire pour capter cette propriété de champ électrique.

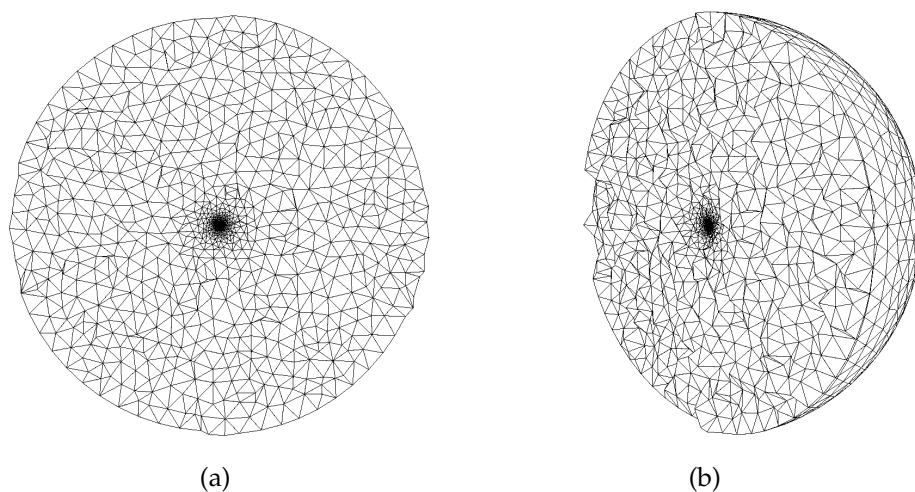


FIGURE 3.3: Coupe selon le plan médian (xz) (a), une vue 3D du maillage (b).

La précision des solutions calculées par MEF dépend de la qualité du maillage du domaine [85, 88, 87]. L'adaptation du maillage consiste en conséquence à générer un maillage adapté à la solution physique et notamment à la captation des forts gradients de champ. Dans le cas présent, les noeuds placés sur la surface de la particule doivent rendre compte de sa forme polyédrique, en respectant la carte de taille géométrique et en utilisant la qualité des éléments conformes. Le maillage doit cependant être assez fin pour capter les variations locale du champ près du sommet entre deux facettes adjacentes. Il ne doit cependant pas être trop fin afin de garantir la convergence dans un temps raisonnable et en optimisant l'utilisation des ressources informatiques. Parmi les diverses méthodes présenté dans le chapitre précédent 2, la stratégie la plus utilisée est la h-adaptation qui manipule la taille des éléments sur le maillage initial déjà existant [83]. A ce stade, deux approches sont généralement utilisées :

- le *raffinement des mailles* qui consiste à ajouter des noeuds aux mailles initiales en se basant sur les propriétés géométriques de l'objet et sur le champ de solution calculé. Le raffinement de maillage conduit alors à une forte augmentation

du nombre d'éléments et donc nécessite plus de mémoire et de temps de calcul pour obtenir la solution à chaque étape de la boucle de raffinement.

- À l'opposé, des procédés avancés de remaillage permettent d'améliorer la qualité des solutions par minimisation de l'erreur globale des solutions obtenues sur le nouveau maillage, avec la possibilité d'augmenter ou de diminuer localement la densité de noeuds. Dans ce cas, l'augmentation du nombre d'éléments est optimisé ce qui permet de minimiser le mémoire et le temps de calcul pour obtenir la solution à chaque étape de la boucle d'adaptation, tout en contrôlant l'erreur.

De même, parmi les divers types d'estimateur d'erreur, que nous avons présentés précédemment (chapitre 2), on trouve l'estimateur d'erreur physique de type résiduelle (Comsol) et l'estimateur géométrique de type interpolation (OPTIFORM). Pour atteindre une précision donnée, l'estimateur d'erreur indique si la densité du maillage est trop fine ou trop grossière. Un estimateur d'erreur efficace ne doit pas être coûteux en mémoire et en temps CPU. La génération d'un maillage adapté peut être considérée comme un problème d'optimisation qui consiste à minimiser une fonction de norme (norme L2 ou H1-norme) liée à l'écart entre la nouvelle et les précédentes solutions.

Dans la suite, le premier maillage géométrique (#0) est le même pour les deux méthodes. Par la suite, les deux méthodes S_1 (raffinement) et S_2 (remaillage) sont appliquées sur le modèle physique présenté ci-dessus. Le même solveur, pour le calcul par éléments finis du champ électrique, est utilisé dans les deux cas.

Dans cette partie de notre étude, nous comparerons le raffinement S_1 couplé avec un estimateur d'erreur de type résiduel et notre approche de remaillage S_2 couplée avec un estimateur d'erreur d'interpolation dont les algorithmes d'adaptation sont précisés.

3.3.1 Méthode de raffinement S_1

La méthode de raffinement S_1 , qui est une partie du logiciel Comsol Multiphysics est un algorithme d'adaptation de maillage choisi sur la base des travaux de synthèse de R. Verfurth [89]. Elle est basée sur un estimateur d'erreur de type résiduel basé sur le L2-norme combiné avec une technique de raffinement de maillage qui utilise le h-adaptation.

1. Estimateur d'erreur résiduel : l'estimateur d'erreur *a posteriori* de type résiduel est un estimateur d'erreur physique (page 79) qui peut être appliqué à des problèmes elliptiques en 2D ou 3D. Cet estimateur explicite, provient des résidus dans l'équation afin d'estimer l'erreur de discrétisation dans chaque élément du maillage. Sa précision dépend de l'ordre de l'approximation, du type de norme et du type de l'EDP à résoudre [92]. Dans cette méthode,

implémentée dans le logiciel Comsol Multiphysics, la norme L_2 est adoptée pour déterminer l'erreur d'approximation, e_l :

$$e_l = U - U_{EF}. \quad (3.4)$$

La solution exacte U n'étant pas disponible, l'erreur est majorée par la relation suivante : [93] :

$$\|e_l\|_{L_2} \leq C \|h^{q_l} \rho_l\|_{L_2}, \quad (3.5)$$

avec C une constante indépendante de la maille, q_l est l'ordre de la dérivation de l'estimateur de stabilité (par défaut $q_l = 2$), h est la taille de la maille et ρ_l est le résidu de l'équation d'équilibre d'ordre l . L'indicateur d'erreur global avec la norme L_2 ($\|\cdot\|$) correspond à :

$$\|e_l\|_{L_2} = \left(\int_{\Omega} D \, dA \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.6)$$

où D est l'indicateur local d'erreur :

$$D = \sum_l S_l^{-2} h^{2q_l} \tau_l^2 A, \quad (3.7)$$

avec S_l le facteur d'échelle (par défaut =1), A le volume d'élément de maillage et $\tau_l = |\rho_l|$. En utilisant cette estimation, il est possible d'augmenter la précision du calcul élément finis suivant la valeur de l'indicateur d'erreur local calculé dans chaque élément du maillage.

2. Raffinement de maillage : en se basant sur l'indicateur local de maillage, l'algorithme du logiciel Comsol multiphysics raffine localement au voisinage de la maille qui présente une forte valeur d'indicateur locale d'erreur. Pour cela il intègre une technique de raffinement [89] qui utilise la stratégie de h-Adaptation. Le nombre de nœuds augmente à chaque étape de remaillage.

En résumé, les étapes de base pour cette méthode sont [93] :

- résoudre le problème sur le maillage ;
- évaluer le résidu de la PDE sur tous les éléments de maillage ;
- précisez un sous-ensemble des éléments en fonction de leur taille ou des indicateurs d'erreur locaux (les tailles minimale et maximale de l'élément sont réglées automatiquement) ;
- répétez ces étapes jusqu'à ce que le nombre requis de raffinements ou le nombre maximum d'éléments soit atteint.

3.3.2 Remaillage S_2

La deuxième méthode de remaillage S_2 utilise l'estimateur d'erreur d'interpolation avec la stratégie de raffinement ou de dé-raffinement de maillage de type h-adaptation. Il s'agit bine ici d'un remaillage (nouveau maillage à chaque itération

de la boucle de remaillage) et non, un raffinement pur comme dans la méthode précédente. Les étapes de base pour cette méthode sont (chapitre 2) :

- résolution du problème sur le maillage ;
- calcul de l'estimateur d'erreur d'interpolation pour générer une métrique de l'unité sur la carte de taille physique ;
- génération d'un maillage adapté qui répond aux exigences de la carte physique métrique et la géométrie métrique pour le respect de la géométrie initiale (h_{min} et h_{max} sont les tailles minimales et maximales des éléments respectivement, ε est l'erreur d'interpolation maximale qui est tolérée dans la solution) ;
- répétez ces étapes jusqu'à ce que l'erreur d'interpolation soit partout inférieure à ε . Ce critère d'arrêt n'est jamais atteint lorsque le champ à calculer est une grandeur potentiellement discontinue comme la composante normale aux interfaces du champ électrique. Lorsque h_{min} est atteint dans ces zones, on peut sortir de la boucle de remaillage. Une solution est acceptable si l'erreur locale ne dépasse pas ε , et si la taille des éléments h respecte $h_{min} \leq h_k \leq h_{max}$ dans chaque élément du maillage. Nous avons choisi la stabilité du nombre d'éléments comme critère d'arrêt. Le calcul cesse lorsque l'évolution relative δ du nombre d'éléments N_i à partir d'une étape i à la suivante devient inférieure à 10% :

$$\delta = \frac{N_{i+1} - N_i}{N_i} < 0.1 \quad (3.8)$$

Ce critère exige la convergence du processus de remaillage pour être utilisé. Cette méthode permet d'économiser du temps de calcul et de la mémoire.

3.3.3 Comparaison entre les méthodes de raffinement et de remaillage

Les critères de comparaison entre S_1 et S_2 sont la précision de la solution, la mémoire vive (RAM) et le temps CPU nécessaires au calcul complet. Les tableaux 3.1 et 3.2 donnent les résultats des deux méthodes S_1 et S_2 : pour chaque étape de raffinement ou de remaillage, le nombre de noeuds et d'éléments, les paramètres de la méthode et le maximum de l'intensité calculée ($\max \|\mathbf{E}\|^2$) qui correspond à l'exaltation de l'intensité de champ.

TABLEAU 3.1: Nombre des noeuds, tétraèdres, $\max \|E\|^2$, RAM, et le temps de calcul de la stratégie de raffinement S_1 .

<i>Raffinement</i> étapes	0	1	
Noeuds	49 285	208 934	
Tétraèdres	289 609	1 148 123	
max E ² [V/m] ²	9,3.10 ¹⁴	9,28.10 ¹⁴	
RAM [GB]	10.48	71	divergence (RAM > 96 GB)
Temps [s]	213	7 381	

TABLEAU 3.2: Nombre des noeuds, tétraèdres, h_{min} , ϵ , $\max \|E\|^2$, RAM, et le temps de calcul de la stratégie de remaillage S_2 .

Remaillage étapes	0	1	2	3	4	5
Noeuds	48 781	51 851	76 796	317 642	377 681	404 107
Tétraèdres	289 605	308 333	459 179	1 922 512	2 277 531	2 432 568
h_{min}		0.35	0.35	0.35	0.35	0.35
ϵ		0.1	0.05	0.01	0.01	0.01
$\max \ E\ ^2$ [V/m] ²	$9.88.10^{14}$	$1.06.10^{15}$	$1.14.10^{15}$	$1.22.10^{15}$	$1.22.10^{15}$	$1.22.10^{15}$
RAM [GB]	8.72	9.57	12.89	54.53	65.95	66.14
Temps [s]	214	208	292	1 568	1 942	1 932

La méthode S_1 est efficace dans le cas 2D, mais nous avons rencontré des difficultés lorsqu'elle est appliquée à un problème 3D en raison du coût de calcul. Dans le cas étudié, de grande domaine avec petit objet (le rapport du rayon moyen de particules à celle de l'ensemble du domaine de calcul est de 1,4%), un seul raffinement est possible avant la divergence de calcul en raison de l'énorme augmentation du nombre d'éléments. Le temps de calcul à l'étape #1 de S_1 est environ quatre fois supérieur à celui de chaque étape de S_2 . Une illustration des maillages obtenus est présentée figures 3.4 et 3.5.

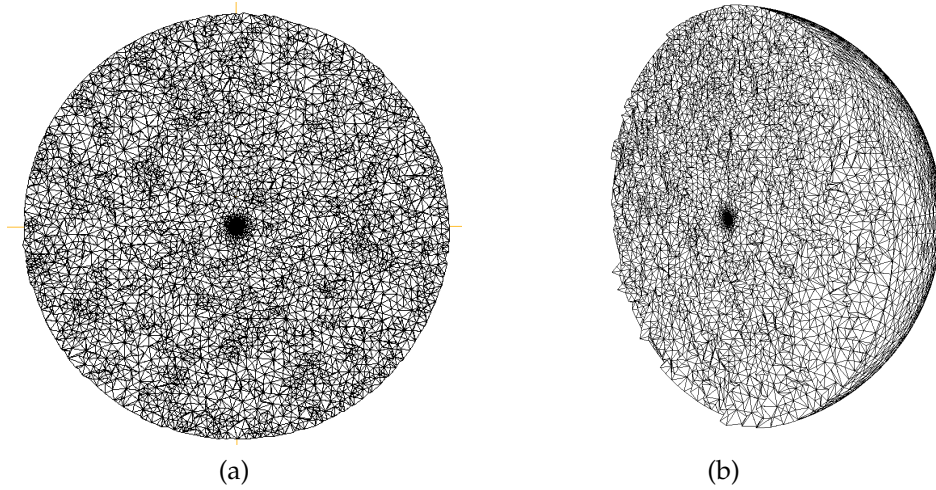


FIGURE 3.4: Coupe selon le plan médian (xz) (a), une vue 3D du maillage (b) après adaptation de maillage par le technique de raffinement S_1 .

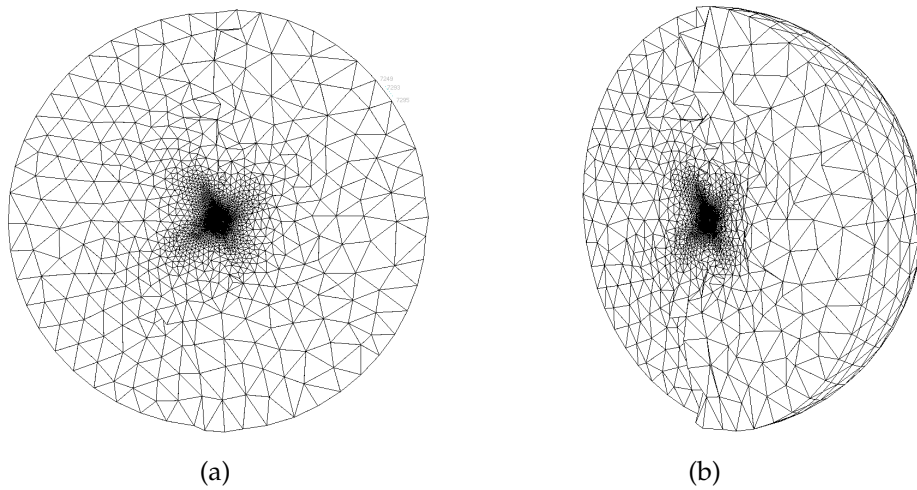


FIGURE 3.5: Coupe selon le plan médian (xz) (a), une vue 3D du maillage (b) après adaptation de maillage par le technique de remaillage S_2 .

S_2 produit cinq nouveaux maillages pour atteindre une convergence vers l'erreur maximale tolérée ε à 1%. La première itération a été effectuée pour atteindre h_{min} . Le temps de calcul reste environ une demi-heure et le nombre de noeuds obtenus à partir de raffinement (étape #1 de S_1) est atteinte après deux étapes de remaillage avec S_2 . La valeur de l'amélioration de l'intensité du champ est stable à partir du maillage #3. L'augmentation correspondante du nombre d'éléments est d'environ 10%. Un illustration des résultats est donnée figures 3.6 et 3.7.

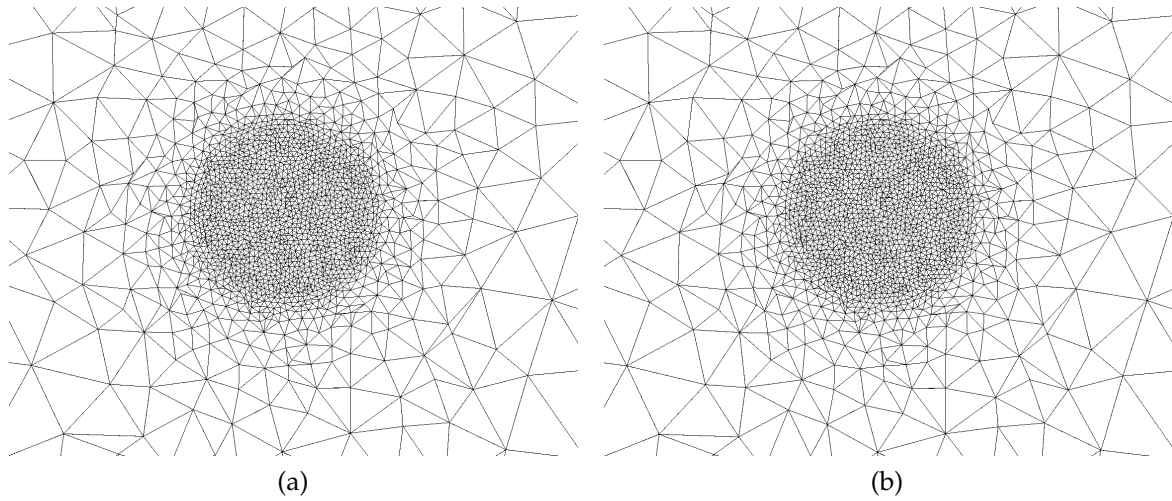


FIGURE 3.6: Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule avant (a) et après (b) adaptation par le technique de raffinement S_1

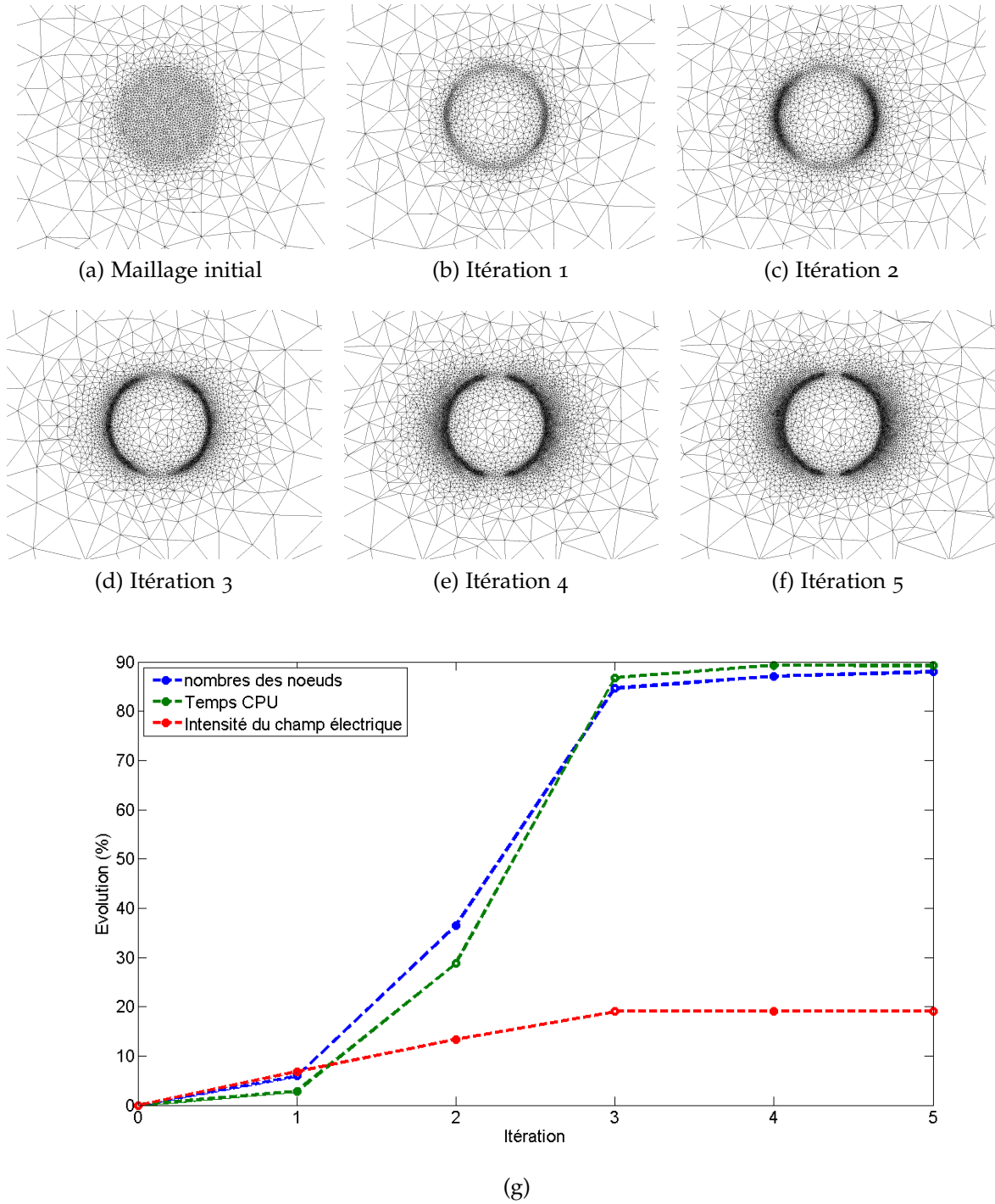


FIGURE 3.7: Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la technique de remaillage S_2 (a,b,c,d,e,f), évolution de nombre d'éléments correspondant (g).

Le raffinement S_1 guidé par l'estimateur d'erreur physique de type résiduelle, augmente le nombre d'éléments dans les régions éloignées de la nanoparticule malgré un gradient de champ solution beaucoup plus faible que dans le voisinage

de la nanoparticule (Fig. 3.4 à comparer à la Fig. 3.5). Ceci explique l'énorme augmentation du nombre des noeuds dans la méthode de raffinement qui pourtant ne révèle pas l'exaltation du champ aux sommets des facettes. Examinons l'intensité au voisinage des facettes. Si un comportement global de l'intensité du champ est nécessaire, les figures 3.8 et 3.9 montrent que l'adaptation du maillage n'est pas nécessaire. Par contre, si un calcul précis est requis, les zooms au voisinage des facettes montrent que S_2 est plus performante que S_1 : l'exaltation locale du champ est captée par S_2 (figure 3.11) contrairement au résultat donné par S_1 (figure 3.10).

En effet, la performance de S_2 est illustrée par la figure 3.11. L'amélioration de champ apparaît dans la figure 3.11(c) en utilisant S_2 . Près des sommets, la taille h correspondant à la taille minimale de l'élément h_{min} , il est d'environ 0,35 nm et l'erreur de la solution interpolée dans chaque élément est en dessous du seuil de 0,01. Le maillage est plus grossier dans les régions éloignées de la nanoparticule (Fig. 3.5) et donc le calcul nécessite moins de temps de calcul et de mémoire. Le processus de remaillage donne un nouveau maillage à chaque itération, avec des positions optimisées des noeuds. Par conséquent, S_2 révèle que le petit angle au niveau des jonctions entre deux facettes produit une augmentation de la valeur de l'intensité de champ électrique d'environ 23% pour un angle d'inclinaison entre les deux facettes de 5° figures 3.10 et 3.11).

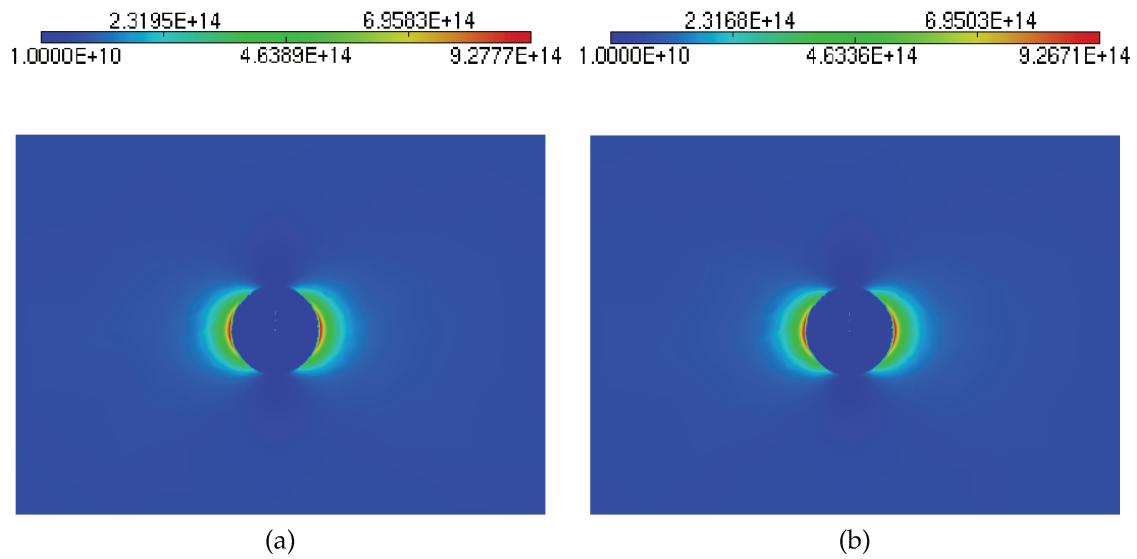


FIGURE 3.8: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ calculé avant (a), et après adaptation (b) par la méthode de raffinement S_1

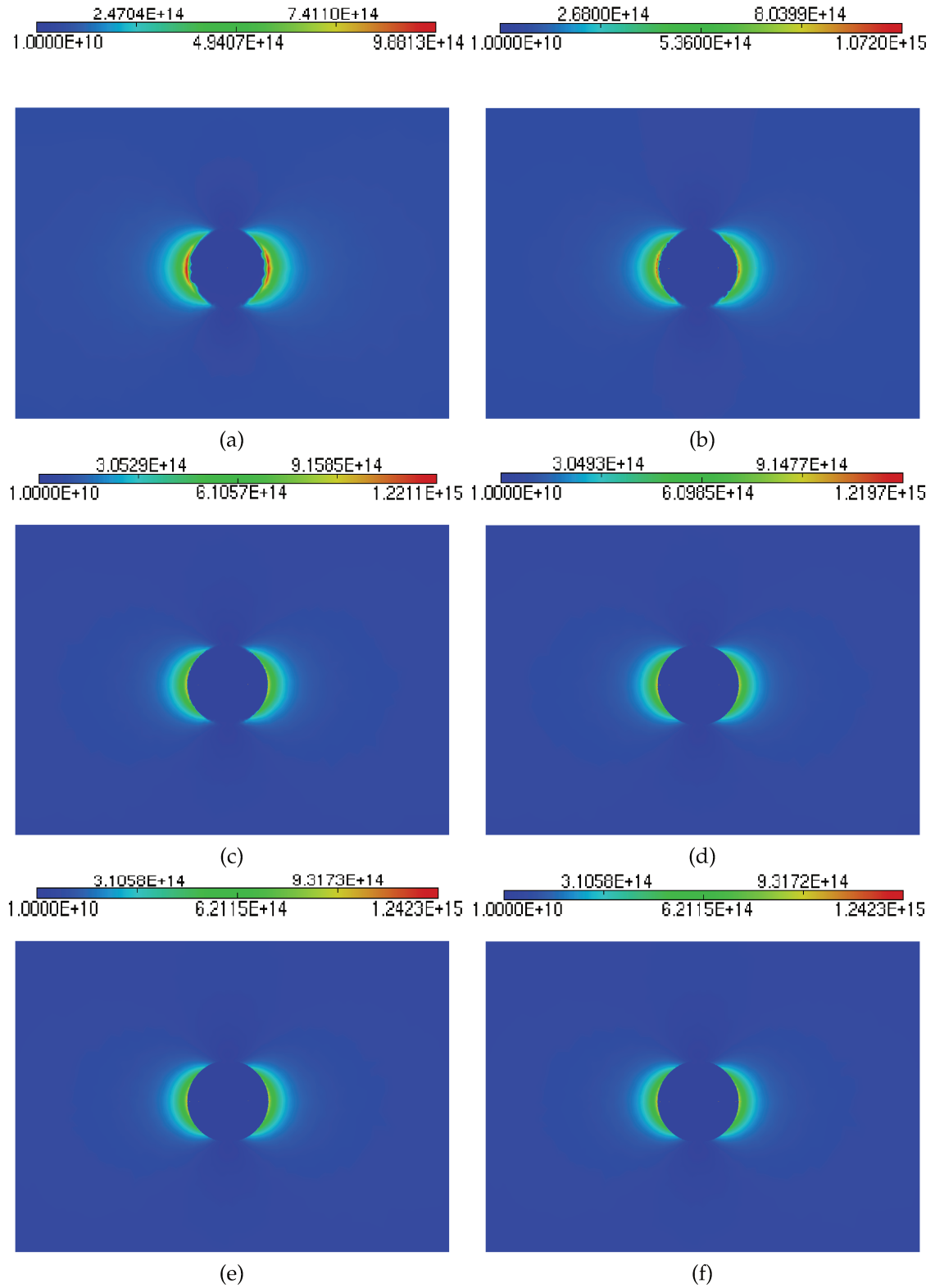


FIGURE 3.9: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ calculée à chaque étape d'adaptation par le technique de remaillage S_2 .

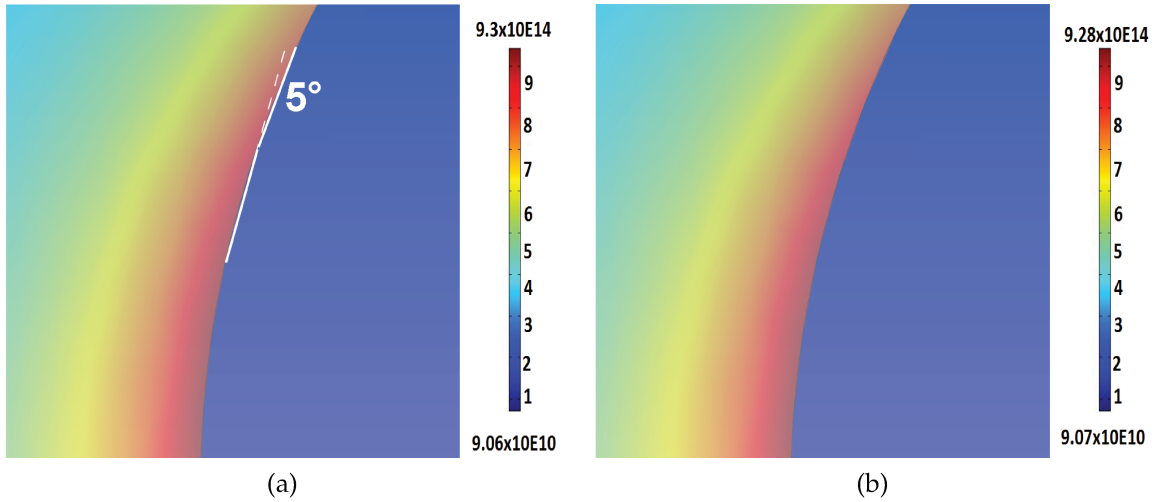


FIGURE 3.10: Zoom sur la coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ calculé avant (a), et après adaptation (b) par la méthode de raffinement S_1

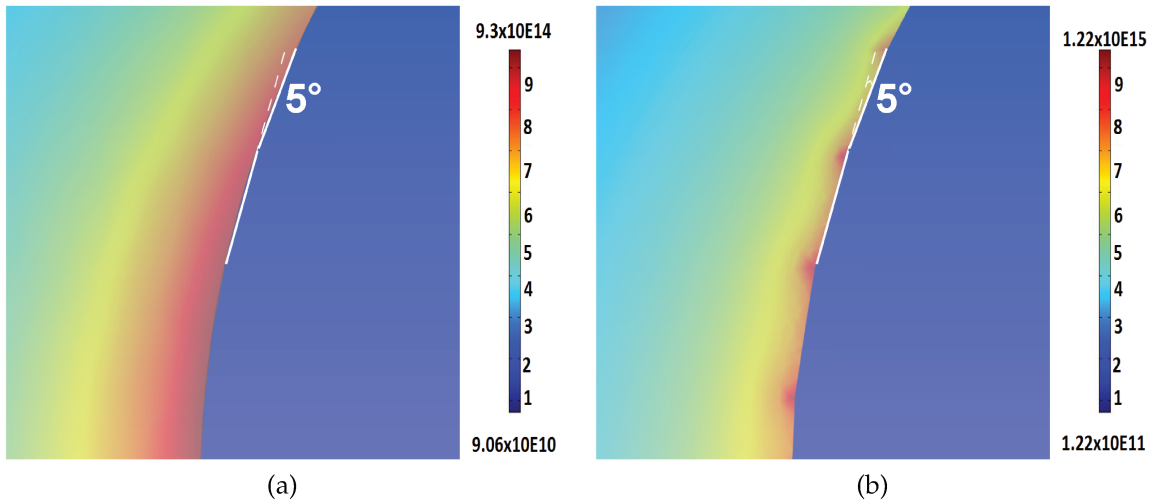


FIGURE 3.11: Zoom sur la coupe selon le plan médian $y = 0$ de la distribution de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ calculé à chaque étapes d'adaptation par le technique de remaillage S_2

3.4 Étude de l'influence des paramètres de la méthode d'adaptation de maillage

Après avoir prouvé la performance du processus de remaillage (S_2), il est utile d'optimiser le choix des paramètres de la méthode. La figure 3.12 montre l'influence de la taille minimale d'éléments h_{min} ($h = 0,25; 0,35; 0,5; 0,75; 1$). On remarque la forte influence de h_{min} sur le nombre total d'éléments. Par conséquent,

il peut être choisi de considérer la valeur de h_{min} la plus grande que possible si le temps de calcul doit être réduit, ainsi que l'utilisation de la mémoire.

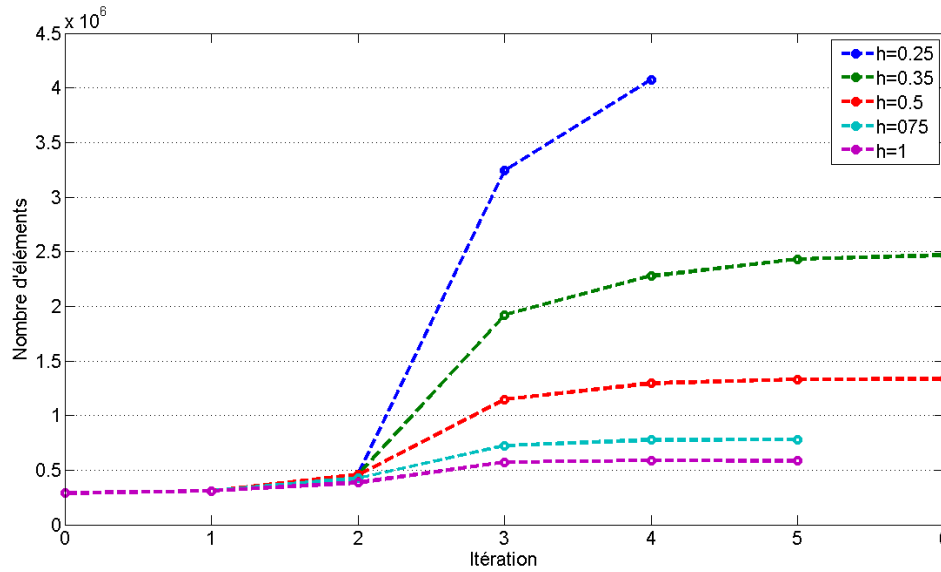


FIGURE 3.12: Étude paramétrique sur la valeur de la taille minimale d'éléments h_{min}

Cependant, en électromagnétisme, pour capter les variations spatiales des ondes, la taille minimale h_{min} doit être plus petite qu'une fraction de la longueur d'onde. En outre, la discontinuité du champ électrique à la surface séparant deux matériaux oblige à prendre la valeur de h_{min} la plus petite que possible pour minimiser l'erreur d'interpolation. En revanche, l'exigence sur h_{min} pour la thermique ne sera pas la même. Par contre, pour le calcul des dilatations parfois inférieures à quelques nanomètres, h_{min} devra être plus petit. De nombreux essais nous encouragent à choisir la même valeur pour les trois physiques afin de ne pas affecter le maillage adapté sur le champ électrique au cours des itérations. D'après cette étude paramétrique, avec notre ressource limitées de calcul (RAM=100GB), la valeur de h_{min} limite est de 0,35 nm.

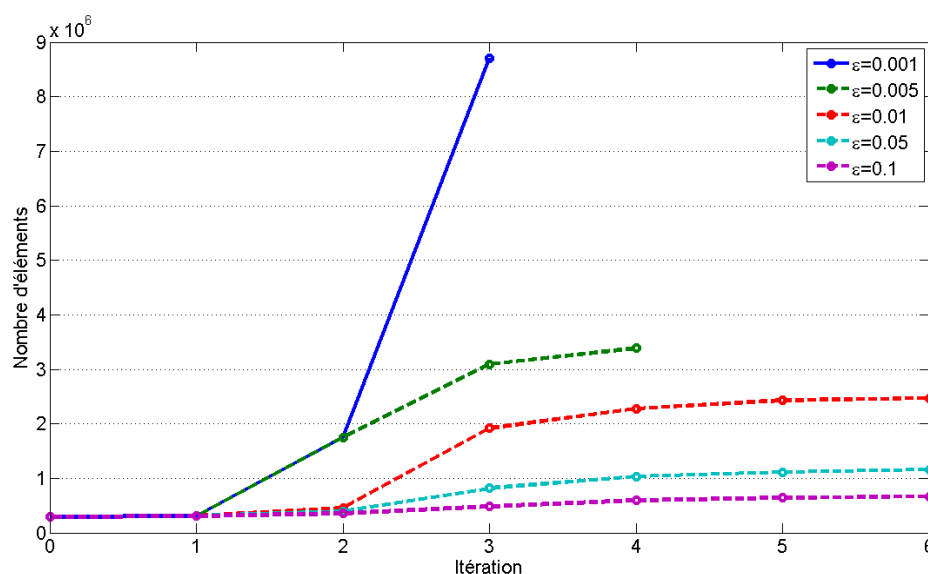


FIGURE 3.13: Étude paramétrique sur la valeur de l'erreur d'interpolation maximale tolérée ϵ

La figure 3.13 montre l'influence de la valeur de l'erreur d'interpolation maximale ϵ tolérée ($\epsilon = 0,001; 0,005; 0,01; 0,05; 0,1$). Ce paramètre est critique pour fixer le nombre d'éléments générés après remaillage. En effet, la valeur $\epsilon = 0,001$ utilisable pour des calculs 2D, ne l'est plus en 3D (avec une mémoire RAM de 100GB). D'après cette étude paramétrique, la valeur $\epsilon = 0,005$ est la valeur minimale utilisable pour le calcul 3D. Nous avons choisi de travailler avec $\epsilon = 0,01$ afin de pouvoir utiliser la valeur de h_{min} la plus faible que possible.

3.5 Conclusion

La méthode de remaillage proposée dans OPTIFORM interfacée avec Comsol Multiphysics a montré sa capacité à détecter les effets des petits angles dans la jonction entre deux facettes dans les nanostructures. Le remaillage donne une solution précise à la différence du raffinement qui échoue : un angle de 5° entre deux facettes adjacentes peuvent augmenter la valeur locale de l'intensité du champ électrique de 23% . Le remaillage adaptatif permet d'augmenter la précision et la convergence vers une solution ayant un sens physique. Cette méthode peut être appliquée à toutes autres formes de nanostructures, qui présentent des facettes avec un angle quelconque ou des rugosités. Les résultats de ce travail ont été publiés dans la référence [18] (PIERS Guangzhou, China, Aug. 25-28, 2014). L'étude paramétrique de la méthode de remaillage permet d'envisager la résolution du problème multiphysique, objectif de cette thèse.

Méthode d'optimisation du processus d'adaptation de maillage pour la simulation du chauffage plasmonique des nanoparticules d'or

Sommaire

4.1	Introduction	101
4.2	Formulation numérique du problème thermo- électromagnétique .	102
4.3	Le remaillage et les stratégies d'adaptation	105
4.3.1	Stratégie d'optimisation A_1 : Contrôle séquentiel de l'intensité du champ électrique $\ \mathbf{E}\ ^2$ et de la température T .	106
4.3.2	Stratégie d'optimisation A_2 : contrôle unique de la température	107
4.3.3	Stratégie d'optimisation A_3 : contrôle d'une combinaison linéaire de l'intensité et de la température	108
4.4	Résultats numériques et discussions	110
4.4.1	Convergence du processus de remaillage	111
4.4.2	Temps de calcul (CPU) du processus de remaillage	115
4.4.3	Utilisation de la mémoire (RAM) du processus de remaillage	116
4.4.4	Propriétés des maillages du processus de remaillage	117
4.5	Conclusion	124

4.1 Introduction

Comme évoqué précédemment, les nanoparticules de métaux nobles, en particulier les nanoparticules d'or, sont connues comme des absorbeurs efficaces de l'énergie lumineuse [2, 3, 4]. Leurs propriétés optiques ont été étudiées de manière intensive, notamment depuis les années 90. Récemment, la production de chaleur par ces nanoparticules sous éclairage optique a également suscité beaucoup d'intérêt [6]. En effet, une nanoparticule optiquement excitée absorbe une partie de l'énergie électromagnétique qui peut non seulement chauffer la particule elle-même mais aussi son environnement [5]. Cet effet de chauffage devient particulièrement important si la fréquence de l'onde électromagnétique incident est proche de la fréquence de résonance plasmon de la nanoparticule [9, 94]. L'élévation de température dans les nanoparticules d'or est appliquée notamment en médecine : dans

le traitement photo-thermique du cancer en produisant une nécrose thermique des cellules tumorales) [11, 95, 8, 17, 6] et pour l'administration des médicaments avec la libération à distance des médicaments à partir d'une capsule, contenant des nanoparticules d'or, lorsqu'il est excité par une source laser [12, 13, 14].

Des études numériques précises du chauffage de la nanoparticule d'or, induite par une source laser, deviennent donc pertinentes. Ce problème ainsi que celui des dilatations avait été résolu en 2D dans la thèse d'Eric Kremer [16], avant 2009.

Le problème consiste à résoudre deux équations aux dérivées partielles (EDP) correspondant aux deux phénomènes physiques (problème électromagnétique : calcul du champ électrique et problème thermique : calcul de l'élévation de température). La méthode des éléments finis est largement utilisée pour la résolution des équations aux dérivées partielles, notamment l'équation de Helmholtz [28], et l'équation de chaleur [96]. L'adaptation du maillage permet l'optimisation et le contrôle de l'exactitude des solutions numériques et du coût de calcul (RAM et temps CPU) [97, 84]. Elle produit un nouveau maillage à chaque itération de la boucle de remaillage afin de répondre aux exigences de précision grâce à un estimateur d'erreur. Dans cette thèse, nous utilisons un processus de remaillage adaptatif basé sur un estimateur d'erreur d'interpolation des solutions physiques *a posteriori* pour augmenter la précision de la solution tout en assurant la convergence de calcul en un temps raisonnable et avec une taille mémoire acceptable. Un tel estimateur utilise l'interpolation de la solution physique calculée à l'étape précédente pour construire un nouveau maillage qui respecte la géométrie des objets définis dans le problème physique et la carte d'erreur sur les champs physiques. L'optimisation du maillage est alors gouvernée par le choix de la solution physique d'entrée pour l'estimateur d'erreur.

Trois stratégies gouvernant le remaillage sont proposées. Chaque stratégie se distingue par la solution physique d'adaptation des cartes d'erreurs pour le processus de remaillage. Les grandeurs physiques considérées pour l'adaptation sont le champ électrique, la température ou une combinaison linéaire des deux, ce qui conduit à un comportement différent des algorithmes de remaillage. La section 4.2 présente la description du modèle multiphysique de photo-thermique et sa formulation pour la méthode des éléments finis. La section 4.3 est consacrée à la fois à la méthode d'adaptation de maillage éléments finis et aux stratégies d'optimisations en utilisant trois différents choix de solutions physiques. Dans la section 4.4, les trois stratégies d'adaptation de maillage sont discutées et comparées, en simulant le chauffage plasmonique, avant de conclure.

4.2 Formulation numérique du problème thermo- électromagnétique

Dans cette étude, nous considérons une nanoparticule sphérique d'or de permittivité relative ϵ_1 (nombre complexe) et de conductivité thermique λ_1^t . La nanoparti-

cul est immergée dans un milieu diélectrique uniforme (Air) avec une permittivité relative ϵ_2 et une conductivité thermique λ_2^t (figure 4.1). Les deux milieux sont considérés linéaires, homogènes, non magnétiques et isotropes. Le milieu externe (de rayon $R = 1400 \text{ nm}$) est censé être non absorbant, par conséquent, la partie imaginaire de la permittivité relative nulle : $\Im(\epsilon_2) = 0$.

La nanoparticule sphérique, de rayon $r = 20 \text{ nm}$, est éclairée par une onde plane monochromatique polarisée $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t)$ avec $\mathbf{E}_0$ est l'amplitude du champ électrique incident, $\omega = k_0 c$ la fréquence angulaire où $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$ est le module du vecteur d'onde de l'éclairage, λ_0 est la longueur d'onde dans le vide, et c la vitesse de la lumière dans le vide.

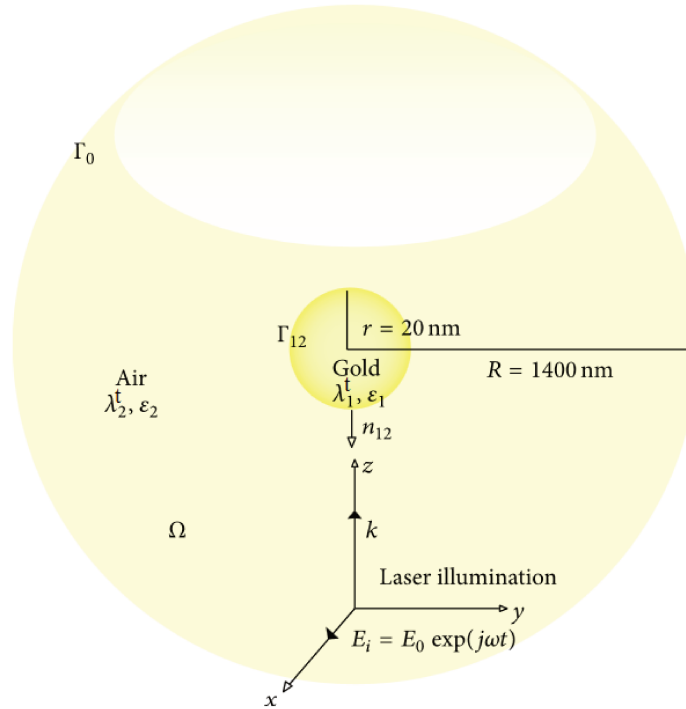


FIGURE 4.1: Nanoparticule métallique immergée dans l'air et illuminée par une onde plane monochromatique.

Dans ce qui suit, nous présentons les équations aux dérivées partielles associées aux problèmes multiphysiques couplés (page 47). Rappelons que l'interaction entre la lumière et la matière est régie par l'équation de Helmholtz dérivée des équations de Maxwell. Le problème thermique est régi par l'équation de la chaleur stationnaire [96]. Le terme de couplage entre les problèmes électromagnétiques et thermiques est proportionnel au carré du champ électrique à l'intérieur du nanoparticule d'or $\|\mathbf{E}\|^2$ (page 35). Considérons les deux milieux matériels successivement.

- À l'intérieur de la particule, le champ électrique noté $\mathbf{E}_1$ satisfait la relation :

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_1) - k_0^2 \epsilon_1 \mathbf{E}_1 = \mathbf{0} \quad (4.1)$$

La puissance électromagnétique absorbée par la nanosphère est convertie en énergie thermique. Il est considéré comme une source de chaleur pour le problème thermique et provient de l'effet Joule et la température à l'intérieur de la particule noté T_1 est donnée par :

$$\nabla \cdot [\lambda_1^t \nabla T_1] + \frac{\omega}{2} \epsilon_0 \text{Im}(\epsilon_1) \|\mathbf{E}_1\|^2 = 0 \quad (4.2)$$

– En dehors de la particule, le champ électrique est la solution de :

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_2) - k_0^2 \epsilon_2 \mathbf{E}_2 = \mathbf{0} \quad (4.3)$$

La température extérieure noté T_2 est solution de :

$$\nabla \cdot [\lambda_2^t \nabla T_2] = 0. \quad (4.4)$$

La description complète du problème physique dans une formulation forte du problème des éléments finis doit tenir compte de deux conditions de passage :

– À l'interface Γ_{12} entre deux milieux, les conditions de passage correspondent à la continuité de la composante tangentielle du champ électrique :

$$\mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0}, \quad (4.5)$$

avec $\mathbf{n}_{12}$ la normale à la surface. La température est supposée continue au passage de cette surface de séparation des milieux (pas de température de contact), comme le flux de chaleur :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_{12}} (\lambda_1^t \nabla T_1) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_{12}} (\lambda_2^t \nabla T_2). \quad (4.6)$$

– À la frontière externe Γ_0 du domaine de calcul Ω , une condition de rayonnement correspond à la libre propagation du champ diffusé et de l'éclairage par une onde plane :

$$\nabla \times \mathbf{E}_2 = \iota [k_0 n_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_i) - \mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i] \quad (4.7)$$

et une condition de Dirichlet est imposée pour la température : $T_0 = 293,15$ K (température ambiante, condition de bain).

À la frontière externe Γ_0 du domaine de calcul Ω , les conditions imposées sont des approximations qui sont pertinentes si la taille du domaine de calcul Ω est assez grande. Pour chaque problème étudié, une étude numérique préliminaire est réalisée afin de trouver la taille optimale du domaine qui mène à la stabilité des résultats (chapitre 2). Les trois stratégies d'adaptation, en utilisant différents champs physiques pour l'estimation de l'erreur sont comparées dans la section suivante.

4.3 Le remaillage et les stratégies d'adaptation

Dans les calculs de simulation par élément finis couplant différents phénomènes, la précision de la solution numérique dépend à la fois du type, de la forme et la qualité du maillage du domaine. Pour atteindre une précision donnée de la solution, la boucle itérative de remaillage augmente le nombre d'éléments dans les régions de Ω où les solutions physiques présentent de fortes variations. Dans le même temps, la densité d'éléments diminue dans les régions de faibles variations de la solution. Néanmoins, le nombre total d'éléments reste toujours en augmentation à partir d'une itération de remaillage à la suivante. La taille minimale des éléments est souvent liée au champ physique afin de capter les variations de la solution. Par exemple dans le calcul électromagnétique, la taille minimale des éléments doit être plus petite qu'une fraction de la longueur d'onde. Toutefois, le calcul sur un maillage plus dense nécessite plus de mémoire (RAM) et plus de temps de calcul (CPU). Par conséquent, le nombre d'itérations de remaillage nécessaires pour atteindre une précision donnée est un paramètre critique dans les simulation 3D multiphysique. Ceci explique le choix du critère d'arrêt pour la boucle itérative de remaillage basé sur la stabilité du nombre d'éléments : la sortie de la boucle de remaillage est commandée lorsque le calcul de l'évolution relative δ du nombre d'éléments N_i à partir d'une étape i à la suivante ne dépasse pas 10% :

$$\delta = \frac{N_{i+1} - N_i}{N_i} < 0.1 \quad (4.8)$$

Ce critère exige la convergence du processus de remaillage et permet de minimiser le nombre d'itération de remaillage nécessaires pour atteindre une précision donnée.

La première étape du procédé de remaillage consiste à générer un maillage grossier de la géométrie du domaine. Après un premier calcul de la solution physique, un estimateur d'erreur est utilisé pour générer une carte de taille d'élément à l'itération i basée sur le champ physique M_i . Le rôle de l'estimateur d'erreur est d'estimer la densité du maillage (fine ou grossière) partout dans Ω . Si l'erreur est importante, les tailles sont plus petites et si l'erreur est faible, une taille plus grossière est obtenue. Dans cette étude, nous utilisons l'estimateur d'erreur d'interpolation *a posteriori* sur la solution physique calculée à l'itération précédente $i - 1$ de remaillage. L'estimateur d'erreur est déduit de la norme d'erreur locale de la solution physique. Par la suite, un nouveau maillage du domaine Ω en $\mathbb{R}^3$, qui respecte la carte de taille M_i est donc produit. Le calcul de la solution et le processus de remaillage sont répétées dans une boucle jusqu'à atteindre la convergence de la solution vers une précision fixe. Par conséquent, le choix du champ physique d'entrée pour l'estimateur d'erreur permet d'optimiser le nombre d'étapes de remaillage. Dans ce qui suit, nous proposons trois stratégies d'optimisation de remaillage basées sur les différents choix de solution du problème multiphysique électromagnétique-thermique.

4.3.1 Stratégie d'optimisation A_1 : Contrôle séquentiel de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ et de la température T

Dans le problème du chauffage plasmonique, les problèmes thermiques et électromagnétiques sont couplés uniquement par les termes de sources de d'énergie d'excitation (équation. 4.2) et donc les deux problèmes peuvent être résolus séquentiellement (couplage faible). La méthode la plus intuitive pour le remaillage est basée sur le contrôle de l'erreur pour chaque problème. Le problème électromagnétique permet d'estimer la source de chaleur qui permet de déterminer l'élévation de la température dans la nanoparticule. Dans la première boucle le remaillage est adapté sur l'intensité de champ $\|E\|^2$. Lorsque la cible de précision est atteinte pour l'intensité, la température T est calculée dans la deuxième boucle de remaillage. Le maillage final de la première boucle est utilisé comme un maillage initial pour la deuxième boucle. L'algorithme de la figure 4.2 décrit la stratégie d'optimisation A_1 .

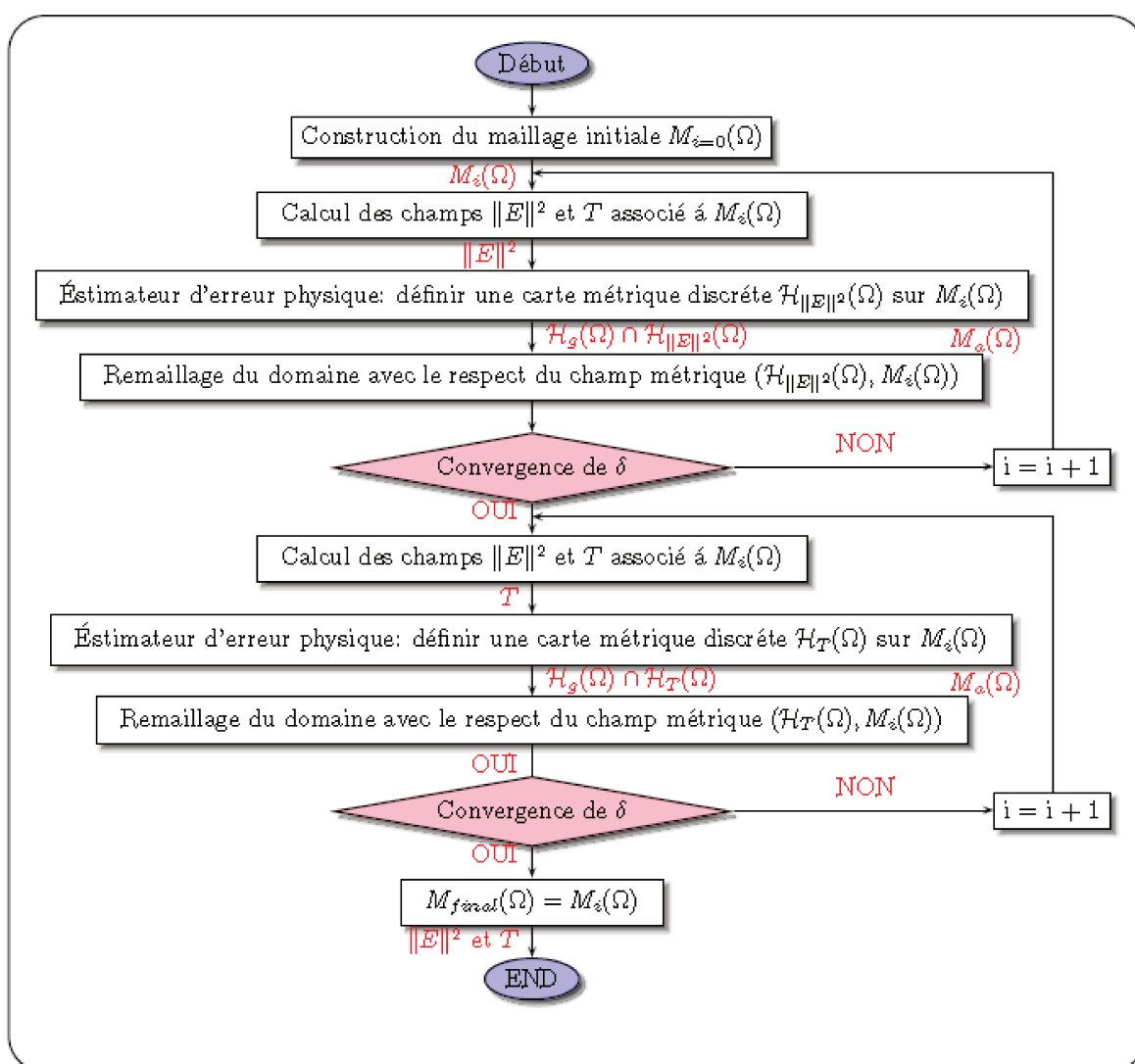
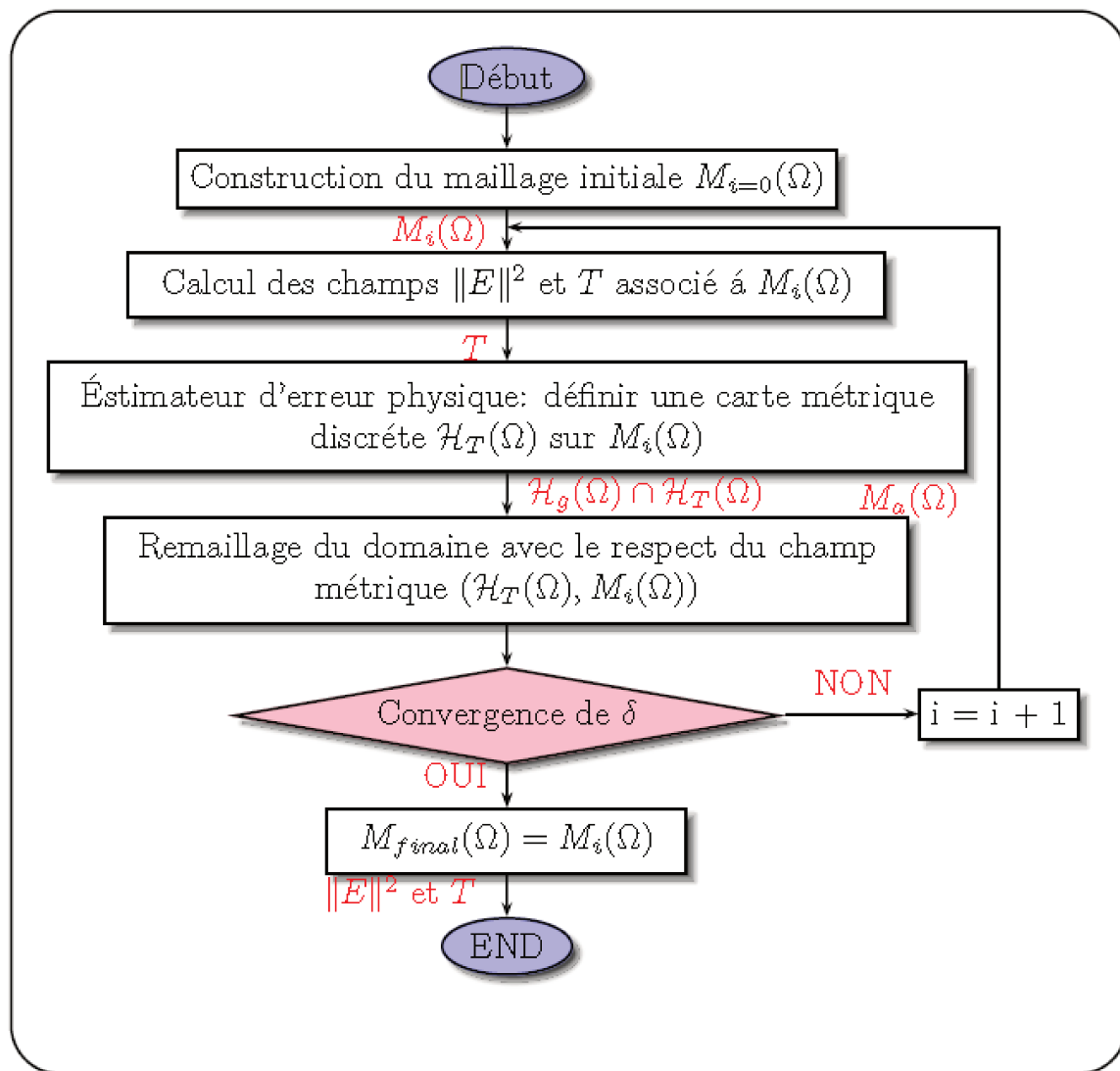


FIGURE 4.2: Algorithme de la stratégie de remaillage adaptatif séquentiel A_1 .

Comme le champ électrique au voisinage de la surface métallique Γ_{12} est connu pour présenter des gradients élevés (chapitre 2, ceci étant la conséquence de la discontinuité de sa composante normale à la frontière), un maillage très raffiné dans ces zones sera utilisé pour résoudre le problème thermique.

4.3.2 Stratégie d'optimisation A_2 : contrôle unique de la température

Comme la cible est le calcul de la distribution de température, intuitivement, le champ physique utilisé pour l'estimation de l'erreur est uniquement la température. Les gradients de température attendus étant plus faibles que ceux de l'intensité du champ électrique présentant une discontinuité au passage des interfaces, on espère dans ce cas minimiser le nombre d'éléments utiles pour atteindre la précision fixée. Il est possible qu'une description trop précise de la source de chaleur soit inutile pour le calcul de la température. La boucle d'optimisation A_2 est décrite dans l'algorithme de la figure 4.3.

FIGURE 4.3: Algorithme de la stratégie de remaillage adaptatif séquentiel A_2 .

4.3.3 Stratégie d'optimisation A_3 : contrôle d'une combinaison linéaire de l'intensité et de la température

Pour générer un maillage adéquat à la fois pour le champ électrique $\|E\|^2$ et la température T , le champ électrique normalisé noté $\|E\|_n^2$ et la température normalisée notée T_n sont utilisés pour construire une combinaison linéaire notée F_n telle que :

$$F_n = \frac{\|E\|_n^2 + T_n}{2}, \quad (4.9)$$

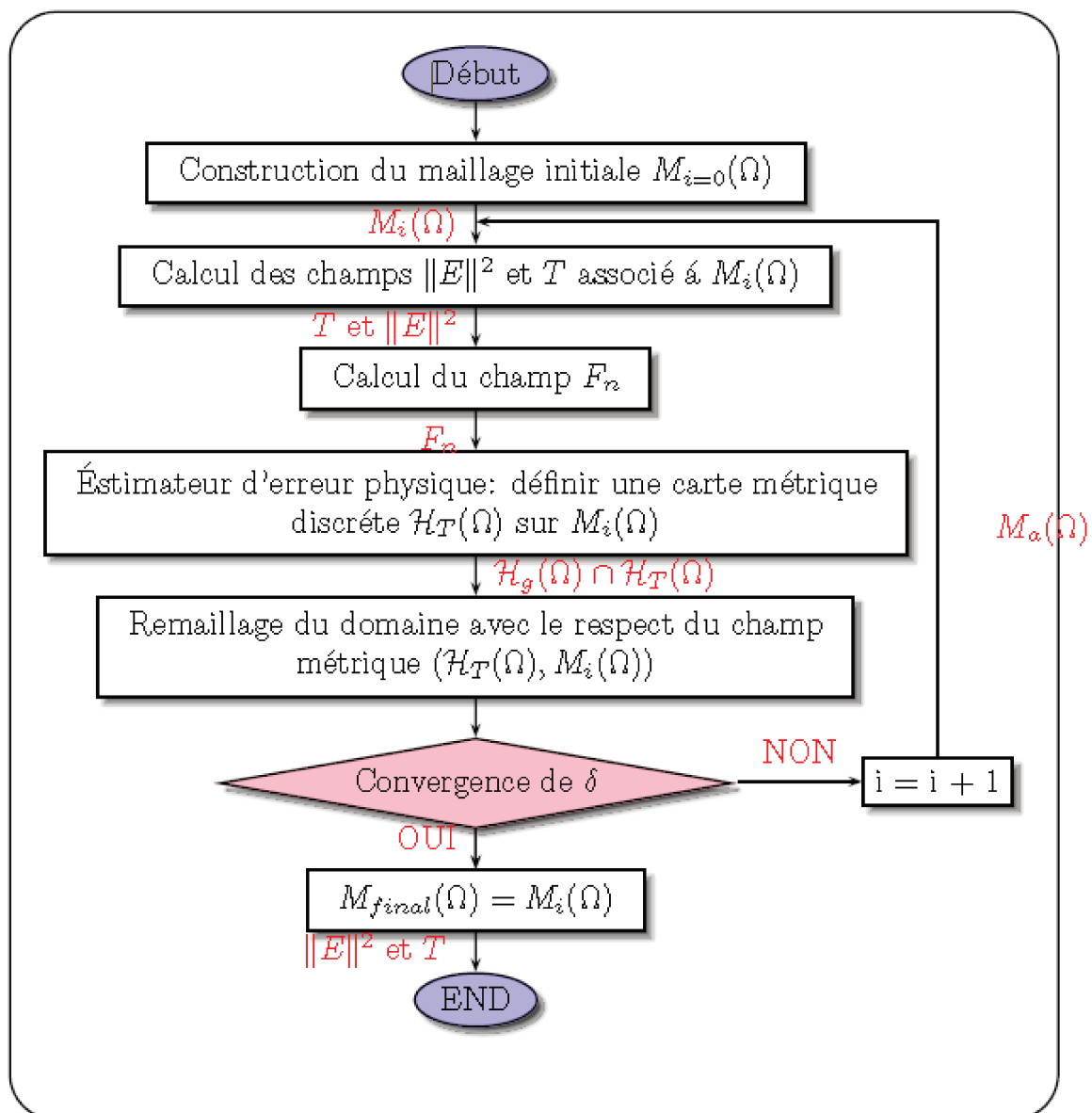
avec :

$$\|\mathbf{E}\|_n^2 = \frac{\|\mathbf{E}\|^2 - \min_{\Omega} \|\mathbf{E}\|^2}{\max_{\Omega} \|\mathbf{E}\|^2 - \min_{\Omega} \|\mathbf{E}\|^2} \quad (4.10)$$

et :

$$T_n = \frac{T - \min_{\Omega} T}{\max_{\Omega} T - \min_{\Omega} T} \quad (4.11)$$

Cette approche permet de donner une importance égale à la détermination des maximums de température et d'intensité lumineuse. La carte de taille relative à ce nouveau champ permet de contrôler à la fois le champ électrique et la température dans les zones à fortes variations. La boucle d'optimisation A_3 est illustrée dans l'algorithme de la figure 4.4.

FIGURE 4.4: Algorithme de la stratégie de remaillage adaptatif séquentiel A_3 .

Les résultat attendu de la stratégie A_3 est une diminution de nombre des itérations de calcul nécessaires pour atteindre la précision fixée, en tenant compte à la fois des propriétés topologiques du champ électrique et de la température. L'équilibre entre les erreurs des solutions électromagnétique et thermique grâce à F_n pourrait conduire à une convergence plus rapide que celui de la stratégie A_2 , et à un gain de temps de calcul par rapport à la stratégie A_1 .

4.4 Résultats numériques et discussions

Le processus de remaillage adaptatif 3D est appliqué pour simuler numériquement le chauffage plasmonique des (et par) les nanosphères métalliques. La nano-

particule d'or est éclairée par une onde plane de longueur d'onde $\lambda_0 = 632,8$ nm. La valeur de la permittivité relative de métaux varie beaucoup en fonction de la source de données. Elle peut être calculée pour chaque longueur d'onde dans le domaine visible à partir de [98] : pour les données de Johnson et Christy $\epsilon_1 = -11,29 + 1,67i$ [32] et pour celles de Palik $\epsilon_1 = -10,61 + 1,33i$ [34]. Les parties imaginaires de la permittivité relative obtenue à partir de ces deux références présentent un écart de 25% et interviennent dans la source thermique. Les parties réelles ne présentent qu'un écart de 6%. Nous choisissons arbitrairement pour l'or une permittivité relative complexe qui est un arrondi de celle de Palik $\epsilon_1 = -11 + 1,33i$ et donc les résultats suivants doivent être interprétés en termes d'ordre de grandeur. La discussion page 24 justifie ce choix de paramètres, considérés classiquement comme « hors résonance », mais permettant une évaluation plus prudente des élévations de température.

La conductivité thermique de l'air est $\lambda_2^t = 0,026 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et celle de la nanoparticule d'or est $\lambda_1^t = 131,33 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Le champ d'éclairage est $\|\mathbf{E}_0\| = 2.667.10^6(1,0,0) \text{ V/m}$ le long de l'axe x . Le rayon de la nanoparticule sphérique est $r = 20$ nm. Le rayon du domaine de calcul Ω est $R_\Omega = 1400$ nm assurant une stabilité des calculs du champ électrique et de la température. L'étude du chapitre précédent a montré que ce problème ne peut être résolu avec la méthode de raffinement classique proposée par Comsol multiphysique. En effet, elle conduit à un dépassement de mémoire dès l'étape 3 de raffinement. En effet, le rapport d'aspect du domaine de calcul au rayon de la particule $R_\Omega/r = 70$ et la différence entre les propriétés topologiques du champ électromagnétique et de la température conduisent à un dépassement de la mémoire vive utilisable, à partir de la troisième itération de raffinement, contrairement à notre procédure d'adaptation de maillage (OPTIFORM).

Par la suite, nous étudierons la convergence du processus de remaillage, le temps de calcul et les propriétés de maillage en fonction des trois stratégies d'optimisation proposées.

4.4.1 Convergence du processus de remaillage

Pour étudier l'effet des trois stratégies sur la convergence du processus de remaillage, le paramètre de taille minimum des éléments h_{min} est fixé à 0,35 nm pour les trois stratégies de calcul. La tolérance maximale de l'erreur de la solution physique ε diminue progressivement en fonction de l'étape de remaillage jusqu'à atteindre 0,005 à l'étape 4 : $\varepsilon \in \{0,1; 0,05, 0,01, 0,005\}$. Les figures 4.5-4.6 illustrent l'évolution de la convergence en utilisant les trois stratégies. Ces figures montrent une convergence rapide de la température (après trois itérations de remaillage) avec un écart maximum de 1% (voir Figure 4.5).

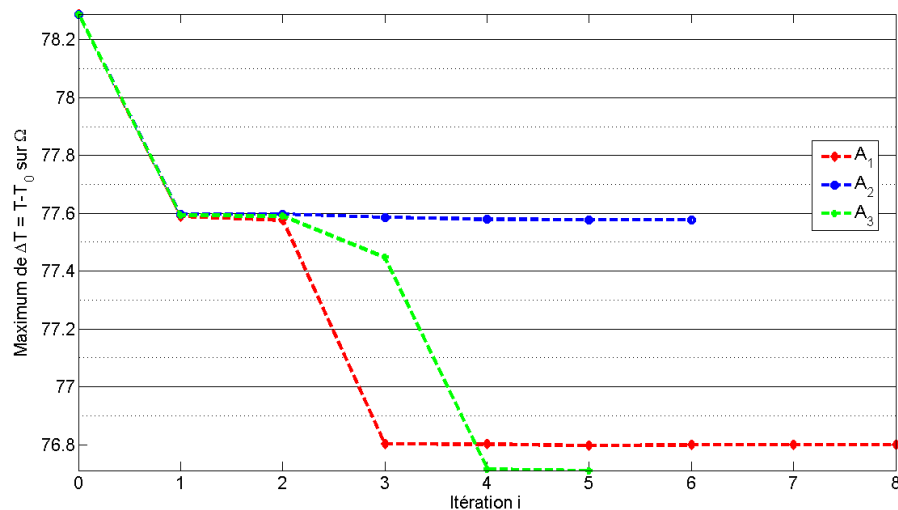


FIGURE 4.5: Evolution relative de la valeur maximale de la température $\max_{\Omega} T$ (a) en utilisant la méthode de remillage adaptatif et les stratégies A_1 , A_2 et A_3 .

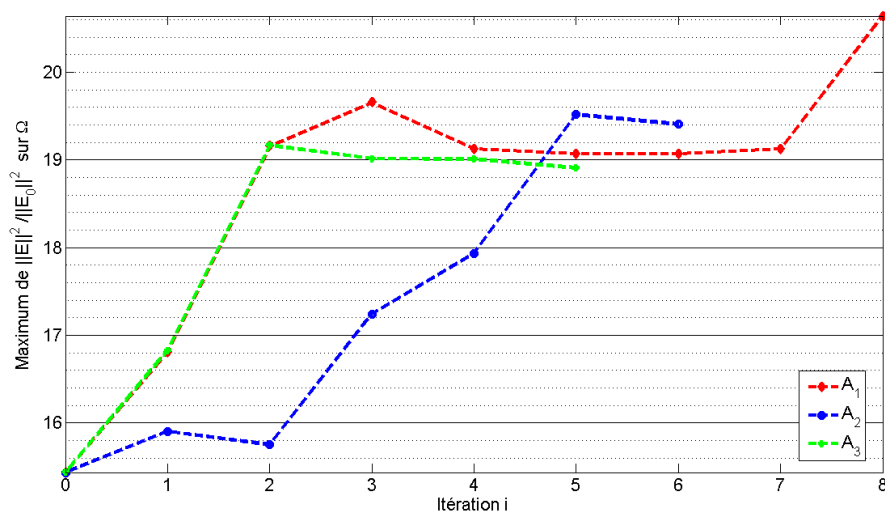


FIGURE 4.6: Evolution relative de l'intensité du champ électrique $\max_{\Omega} \|E\|^2$ (b), en utilisant la méthode de remillage adaptatif et les stratégies A_1 , A_2 et A_3 .

La stratégie d'adaptation A_2 présente une meilleure stabilité de calcul et la stratégie A_3 n'atteint le critère de convergence qu'à l'itération $i = 5$. La température calculée à partir du maillage géométrique initial ($i = 0$) est surestimée de 2%, mais un résultat de calcul est fiable uniquement si une étude de convergence est

effectuée. Le comportement différent des stratégies est dû principalement à la topologie du champ électrique $\|\mathbf{E}\|_2$ présentant des gradients élevés aux interfaces. La figure 4.6 montre que la meilleure convergence est celle obtenue par la stratégie A_3 tandis qu'avec la stratégie A_2 la stabilité n'est atteinte qu'après la sixième itération de remaillage. La stratégie A_1 conduit à une convergence depuis l'itération 5, mais semble diverger à l'itération 8. Le grand temps de calcul nécessite un arrêt manuel du remaillage à cette itération.

Les champs physiques étant très localisés au niveau de la particule ou de son interface, le domaine de calcul Ω étant très grand pour assurer l'indépendance du résultat en fonction des conditions de bord, la convergence des schémas numérique est très contrainte. Deux objectifs peuvent être recherchés pratiquement : la valeur des maximums d'intensité du champ électrique et de la température ou la qualité de la restauration des topologies des solutions. À titre d'illustration, la figure 4.7 montre une coupe de l'intensité relative du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2/\|\mathbf{E}_0\|^2$ et de l'élévation de la température $\Delta T = T - T_0$ obtenue avec la stratégie A_2 qui semble être la plus rapide. La topologie de l'intensité relative est caractérisée par une forte variation près de la surface d'échange de la particule avec le milieu extérieur suivant la direction x de l'onde incidente (figure 4.7). Au contraire, la topologie de la température est plus douce (figure 4.7). La nanoparticule se comporte clairement comme une source isotrope de chauffage pour le milieu environnant. Les résultats obtenus en utilisant les stratégies A_1 et A_3 sont indifférenciables de ceux calculés avec A_2 : l'erreur relative entre les cartes étant inférieure à 1,5% sur le domaine Ω .

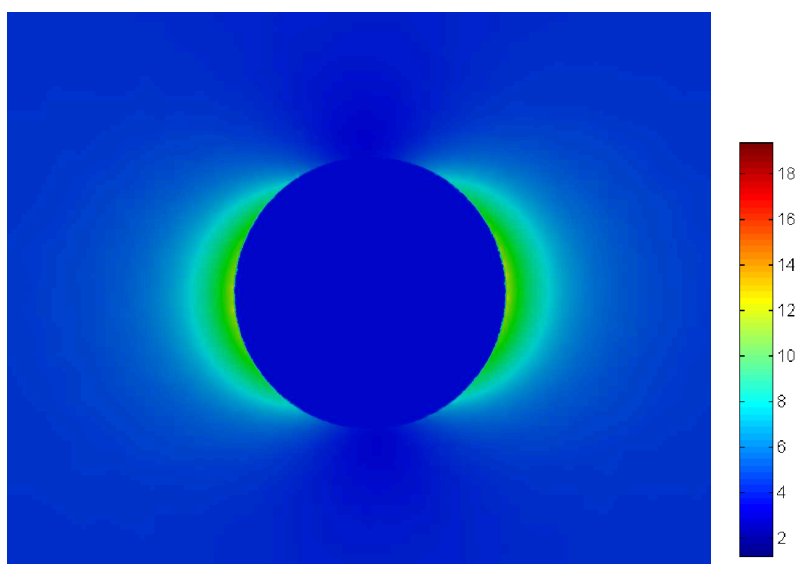
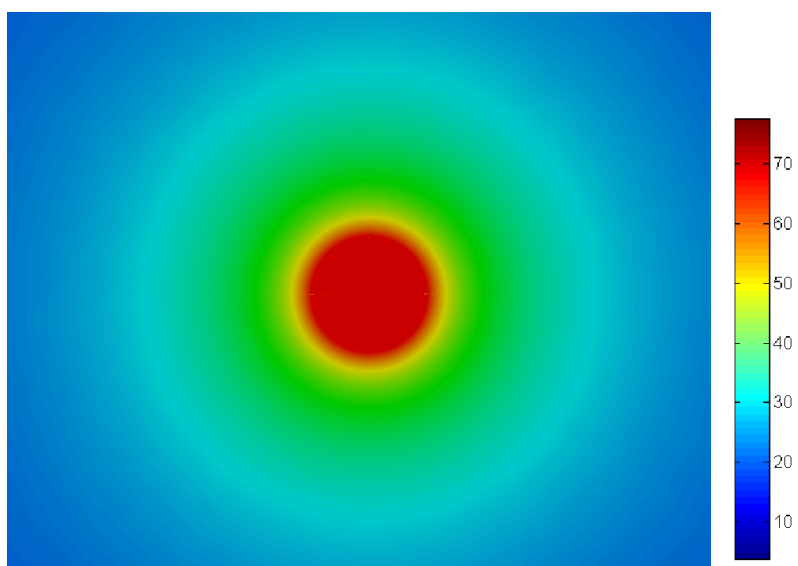
(a) champ $\frac{\|E\|^2}{\|E_0\|^2}$ (b) champ T

FIGURE 4.7: Répartition de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2/\|E_0\|^2$ et de la température T après adaptation avec la stratégie A_2 .

À ce stade, la stratégie A_3 semble être le meilleur compromis sur le plan de la précision du champ électrique et de la température. Cependant, suivant l'objectif fixé et les contraintes de temps de calcul et d'utilisation de la mémoire vive, un arbitrage différent peut être fait.

4.4.2 Temps de calcul (CPU) du processus de remaillage

La stabilité du schéma numérique des stratégies proposées peut être évaluée à partir du nombre d'itération nécessaires pour atteindre un critère de convergence tel que $\delta < 10\%$ (Eq. 4.8). Ce nombre est plus faible dans le cas de la stratégie A_3 (5 itérations) alors que la stratégie A_2 nécessite 6 itérations et la stratégie A_1 nécessite 8 itérations avec divergence du schéma numérique (figure 4.8). L'utilisation de l'adaptation sur F_n (équation 4.9) pour la stratégie A_3 équilibre l'influence des deux topologies des solutions. Cependant, si le calcul de la température doit être répété pour l'optimisation des structures [7] ou pour la résolution d'un problème inverse [99, 43], le temps de calcul doit être le plus petit possible. Or le temps de calcul est cumulatif lors du processus de remaillage puisqu'il est directement lié au nombre d'itérations pour atteindre le critère de convergence. Il est d'environ 11 heures pour la stratégie A_1 , 2 heures pour A_2 et 3 heures pour A_3 . Par conséquent, en cas de l'utilisation massive des modèles multiphysiques, la stratégie d'adaptation A_2 pourrait être la meilleure stratégie, avec une précision de calcul acceptable.

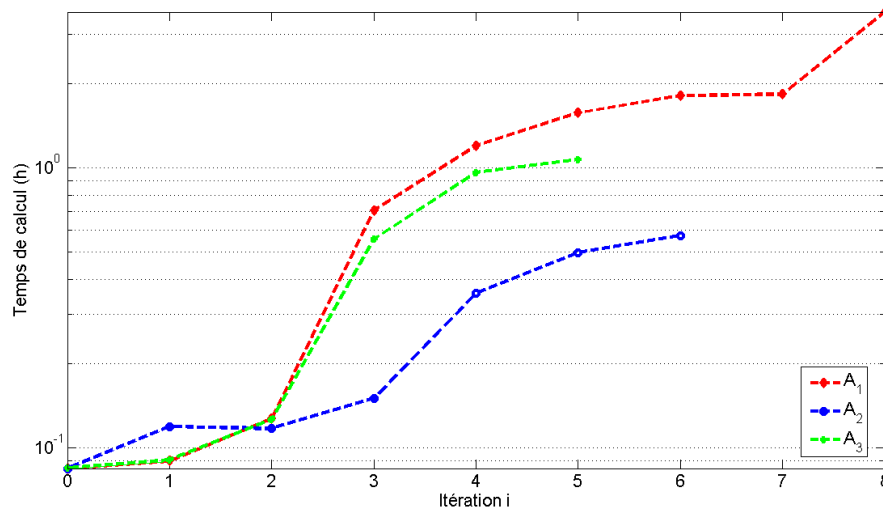


FIGURE 4.8: Évolution du temps de calcul pour chaque étape d'adaptation avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3 . Le temps de calcul est cumulé environ 11 heures pour A_1 , 2 heures pour A_2 , et 3 heures pour A_3 .

Le temps de calcul pour des simulations multiphysiques sur des structures complexes avec remaillage est très important mais la mémoire vive utilisée pour les calculs ne l'est pas moins, puisqu'elle peut limiter la faisabilité du calcul.

4.4.3 Utilisation de la mémoire (RAM) du processus de remaillage

Une caractéristique importante d'un schéma numérique de simulation est l'utilisation de la mémoire globale nécessaire à la résolution numérique. La mémoire utilisée dépend du nombre de degrés de liberté (NDL) du modèle numérique (et de la méthode d'inversion choisie). Le nombre de degrés de liberté a une conséquence directe sur la taille du système linéaire qui peut être résolu directement ou itérativement dans le cadre de la méthode des éléments finis. À chaque itération, un maillage optimal est généré afin d'optimiser le nombre d'élément et donc le nombre de NDL. Les figures 4.9(a-b) et 4.10(a-b) comparent les trois stratégies sur le plan de la RAM et du NDL. De ces figures, on peut conclure que la stratégie A_2 est la moins coûteuse en RAM que ce soit pour le problème électromagnétique ou le problème thermique. Elle consomme 40% de RAM en moins que les deux autres. Les stratégies A_1 et A_3 nécessitent un plus grand NDL pour les deux problèmes multiphysiques.

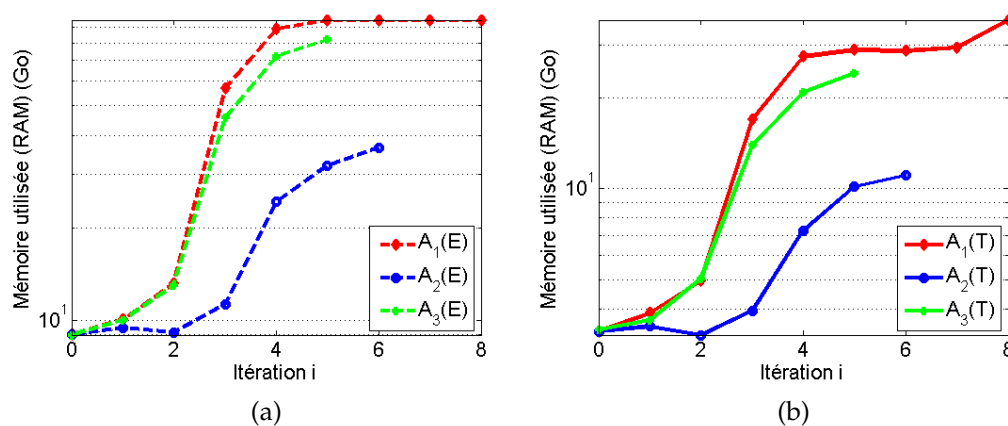


FIGURE 4.9: Évolution de la RAM pour le calcul du champ électrique E (a), de la température T (b) avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3 .

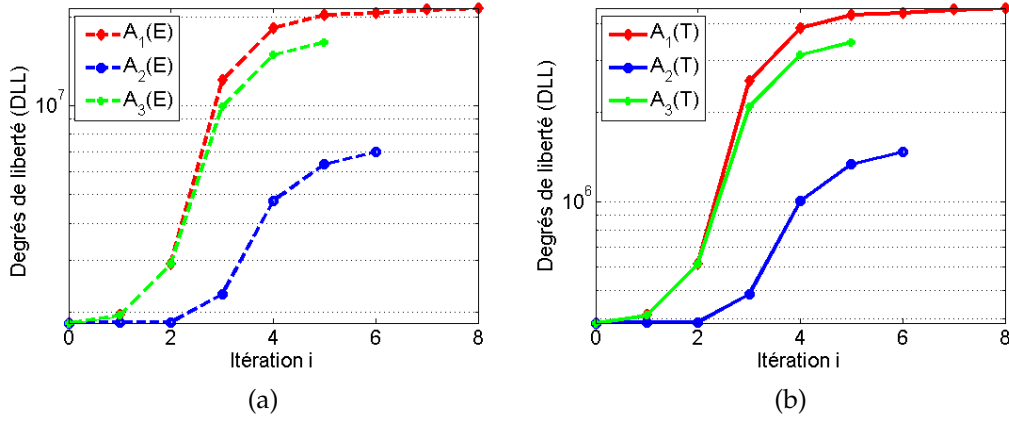


FIGURE 4.10: Évolution du nombre total de degrés de liberté pour le calcul du champ électrique E (a), de la température T (b) avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3 .

Ee considérant l'utilisation de la RAM et le nombre de degrés de liberté, la stratégie A_2 est la plus efficace, mais les propriétés de maillage qui sont abordées dans le prochain paragraphe pourraient donner un autre point de vue.

4.4.4 Propriétés des maillages du processus de remaillage

Le remaillage est très utile pour obtenir une précision de calcul donnée. Cependant, compte-tenu de l'hétérogénéité des problèmes traités (électromagnétisme et thermique) et des topologies des solutions, l'observation des maillages obtenus à partir des trois stratégies est révélateur de l'augmentation des NDL. La convergence de la méthode, basée sur l'augmentation relative limitée du nombre d'éléments δ , est représentée sur la figure 4.11 pour les trois stratégies d'adaptation de maillage. Cette première étude permet de caractériser les stratégies pour lesquelles seul change le champ physique utilisé pour le calcul de la carte d'erreur.

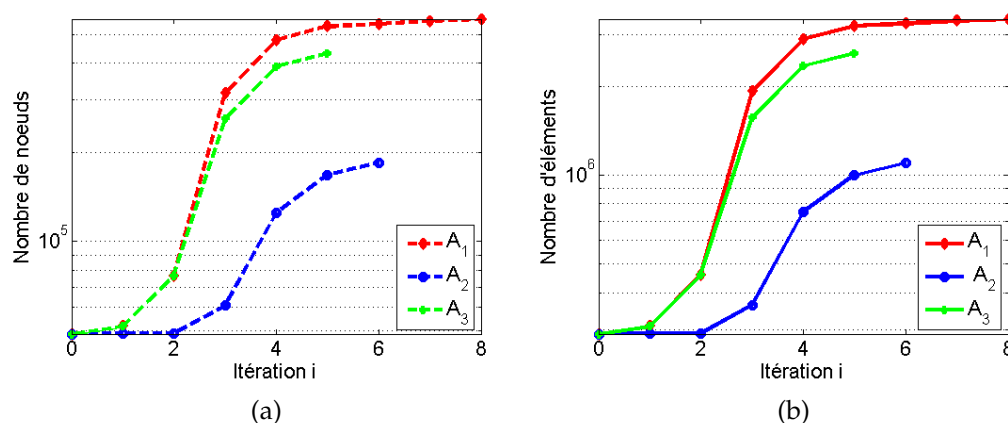


FIGURE 4.11: Evolution du nombre de noeuds (a), et d'éléments (b) à chaque itération avec les stratégies A_1 , A_2 et A_3 .

Les figures 4.11(a-b) on montre que la stratégie A_1 ne converge pas avant l'itération 8. Ce comportement est dû essentiellement à l'augmentation du nombre d'éléments et de noeuds pour décrire les gradients des champs électriques, alors que la variation de la température est très faible à partir de la troisième itération (figure 4.5). Au contraire, les stratégies A_2 et A_3 convergent à la cinquième et sixième itération respectivement. La stratégie A_2 nécessite deux fois moins d'éléments que les deux autres. Toutefois, la représentation précise des solutions sur tout le domaine de calcul Ω est un autre aspect de l'efficacité du processus de remaillage. Par conséquent des représentations d'iso-surfaces (qui sont très sensibles aux petites variations de solution) peuvent donner des informations utiles sur cette propriété.

La figure 4.12 montre une coupe du maillage initial basé uniquement sur les caractéristiques géométriques des objets. Ce premier maillage est le point de départ de chaque stratégie. Les figures 4.13- 4.14- 4.15 illustrent l'évolution des maillages pour les trois stratégies A_1 , A_2 et A_3 respectivement. La haute densité de maillage au voisinage de la direction x dans la figure 4.13(f) montre que le processus de remaillage est capable de bien évaluer les gradients dans le problème électromagnétique (figure 4.7). Le maillage semble être légèrement modifié dans la figure 4.13(i) que dans la direction verticale montrant une tendance à l'isotropie, (une propriété de l'évolution de la température). Cette tendance apparaît clairement dans la figure 4.14(g). En outre, l'objectif étant la précision de la température, le maillage est beaucoup moins dense à proximité de la surface de la nanosphère et les propriétés topologiques de l'intensité ne figurent pas explicitement dans le maillage. La densité des éléments à l'aide de la stratégie A_3 révèle également la manipulation des propriétés topologiques à la fois du champ électrique et de la température (figure 4.15(f)).

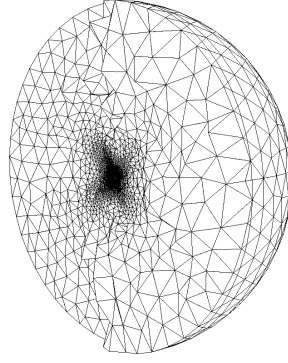


FIGURE 4.12: Coupe selon le plan médian (xz) du maillage initiale.

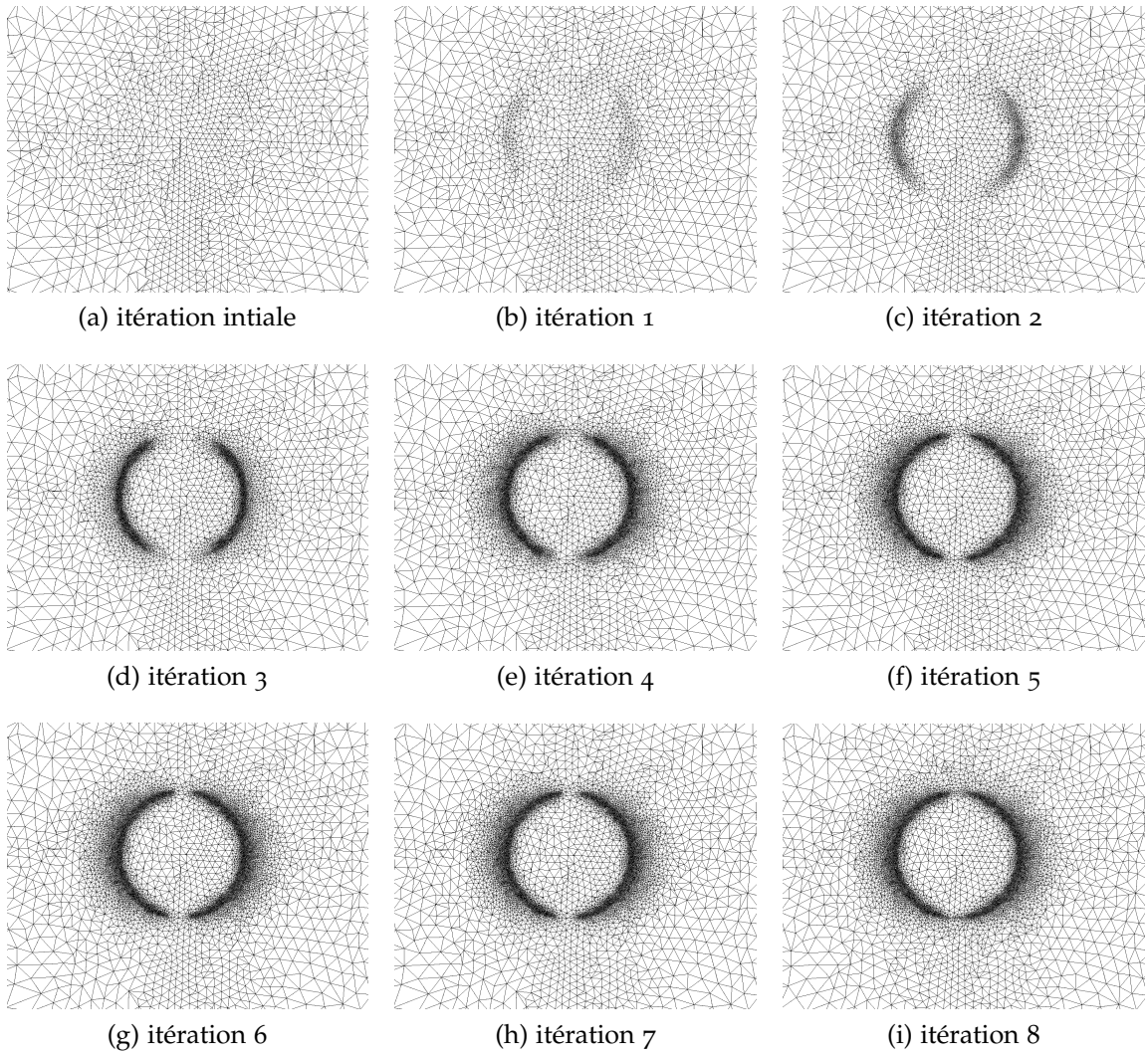


FIGURE 4.13: Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la stratégie A_1 .

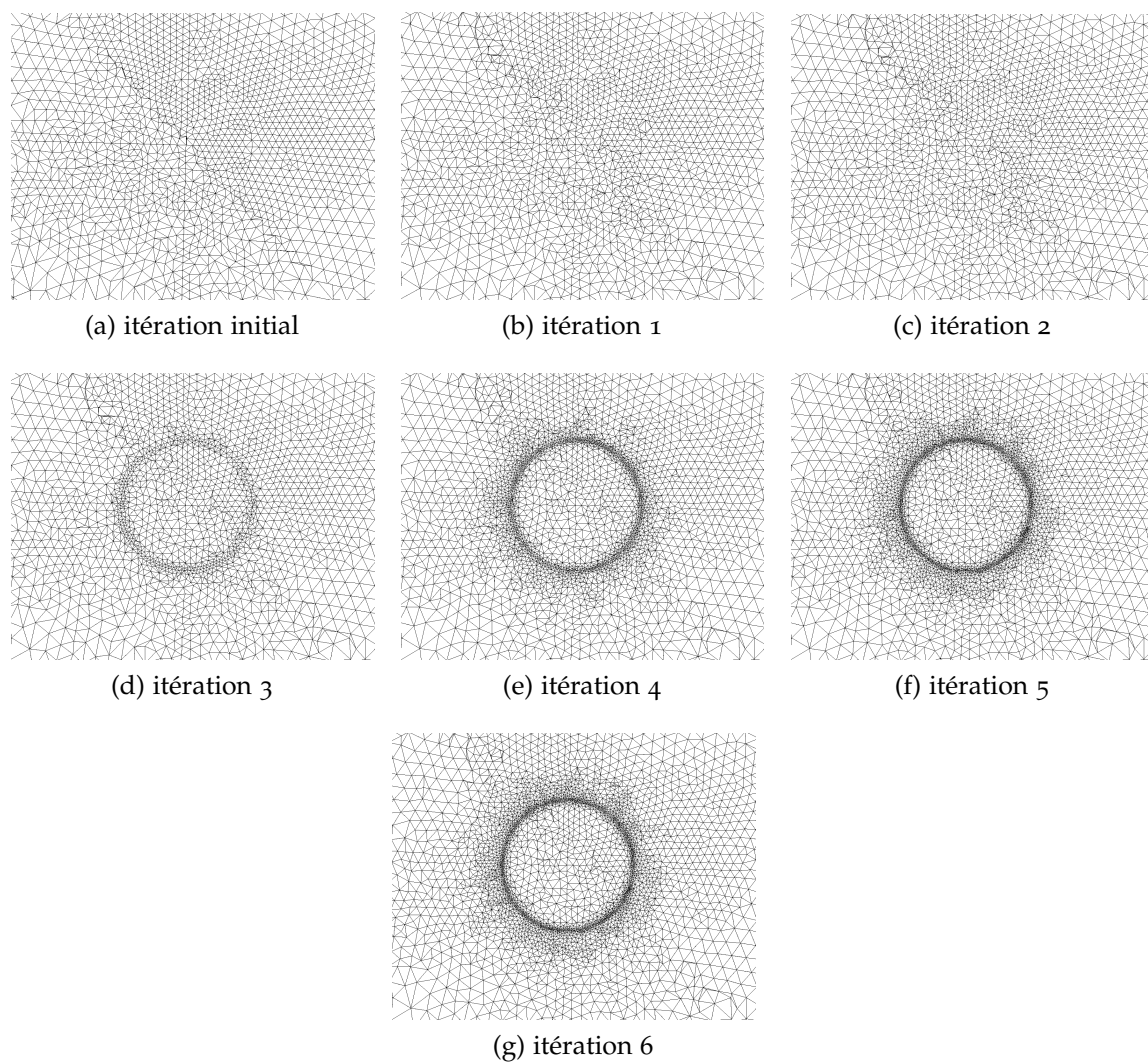


FIGURE 4.14: Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la stratégie A_2 .

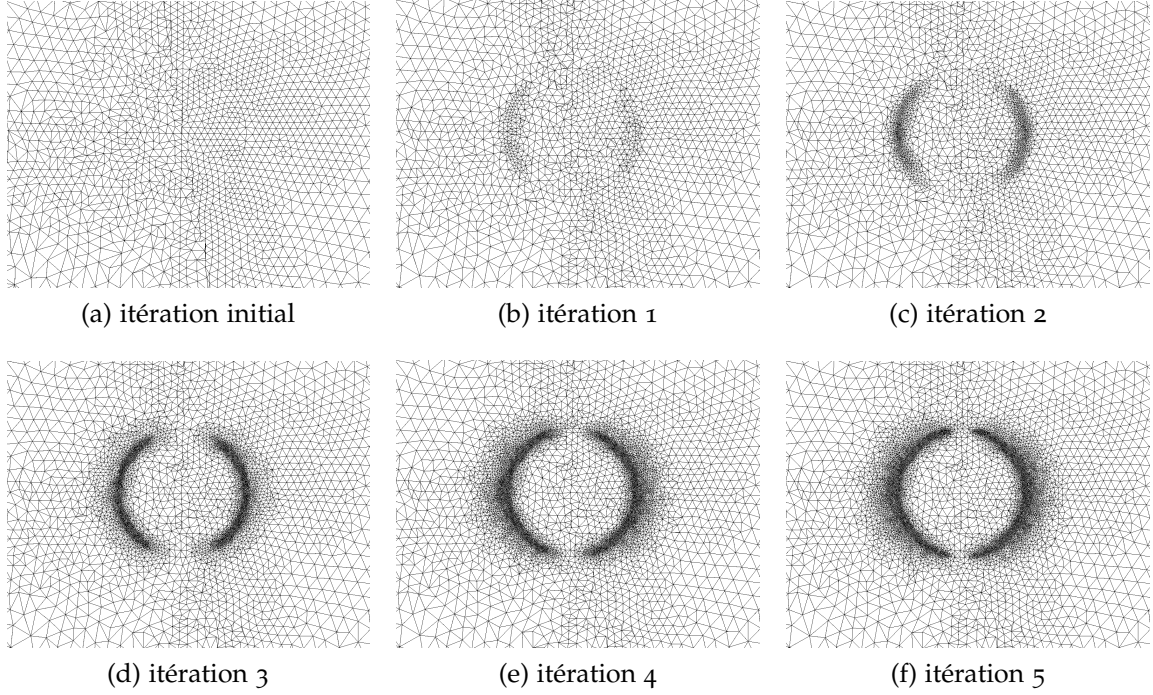


FIGURE 4.15: Zoom de la coupe selon le plan médian $y = 0$ du maillage au voisinage du nanoparticule à chaque étape d'adaptation par la stratégie A_3 .

La densité de maillage adéquate dans tout le domaine de calcul est caractérisée géométriquement par l'iso-surface de la solution. Les iso-surfaces sont connues pour être très sensibles à la discrétisation de l'espace. La figure 4.16 représente les iso-surfaces du champ électrique d'intensité $\|E\|^2$ et de la température T associée au maillage initial $M_{i=0}(\Omega)$ (figure. 4.12). La mauvaise qualité de la représentation des solutions $\|E\|^2$ (Fig. 4.16(a)) et T (Fig. 4.16(b)) apparaît clairement. Par conséquent, le maillage initial, sur la base de la géométrie des objets ne suffit pas.

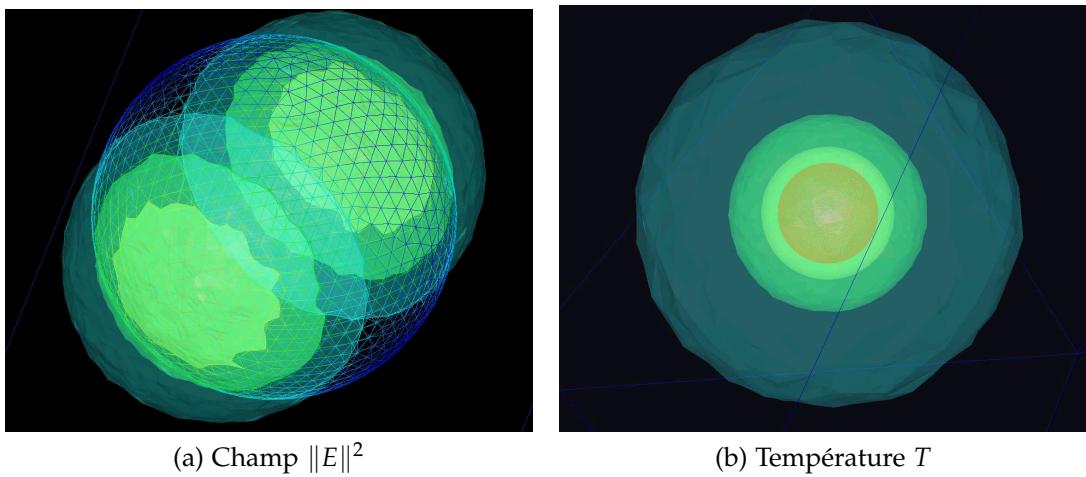


FIGURE 4.16: Iso-surfaces associées au maillage initial ($N_{lement} = 289\ 605$).

La comparaison entre les iso-surfaces obtenues par les trois stratégies à la fin des boucles illustre à la fois la précision relative de chaque méthode et leur capacité à obtenir des solutions continues dans un domaine matériel et donc une bonne description de l'intensité et le champ de la température sur le domaine Ω . Les figures 4.17(b), 4.17(d) et 4.17(f) montrent que les iso-surfaces pour la température sont presque indistinguables au contraire des iso-surfaces de l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$. Les intensités de champ électrique obtenues à partir des stratégies A_1 et A_3 sont proches l'une de l'autre, même si le nombre d'éléments est plus faible pour A_3 . Les iso-surfaces du champ électrique obtenu à partir de la stratégie A_2 semble être moins précis, elles sont localisées dans la même région du domaine Ω . Ces résultats montrent que si la cible est seulement l'élévation de température, la stratégie A_2 est la plus avantageuse.

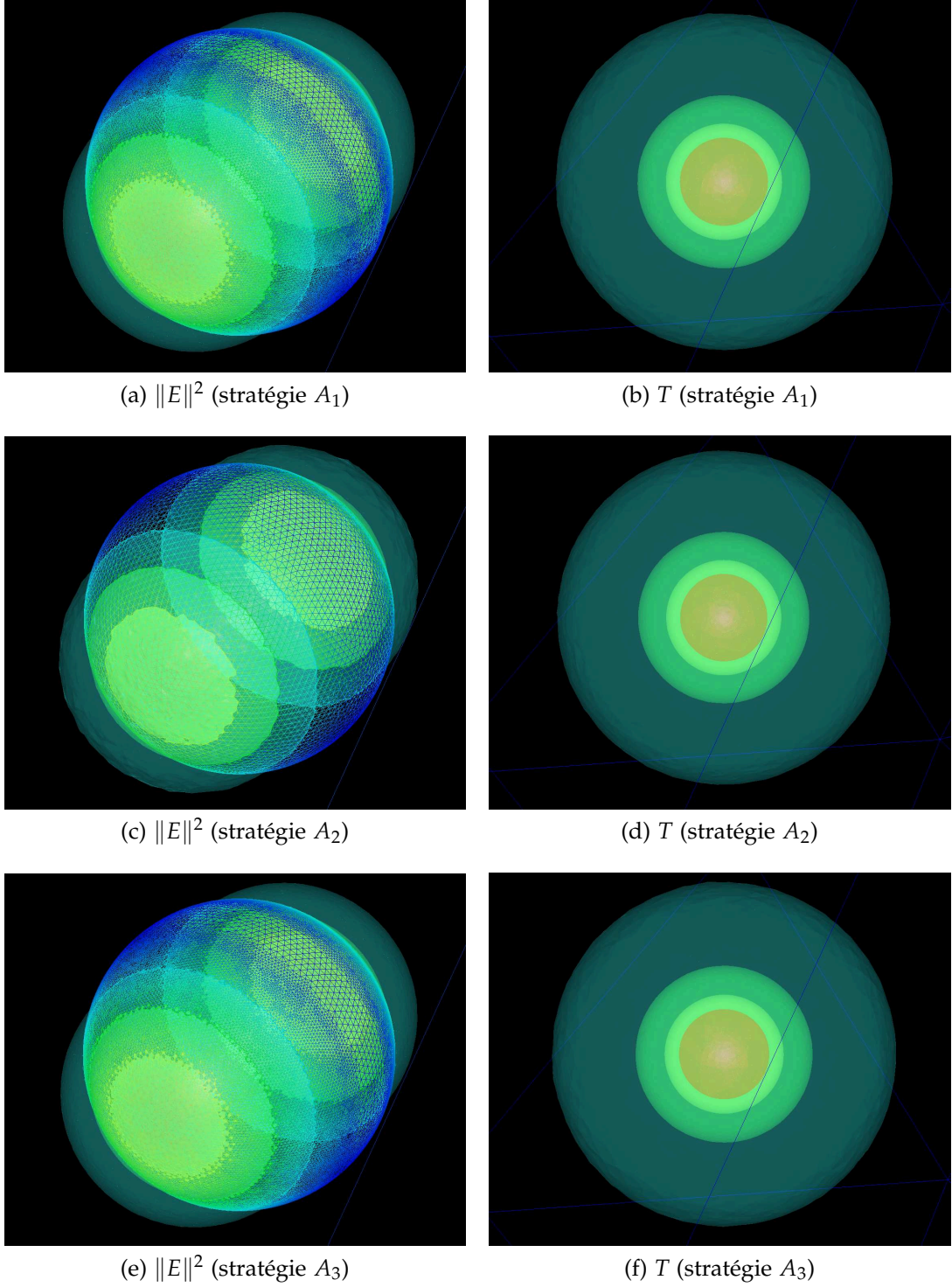


FIGURE 4.17: Iso-surfaces, après remaillage avec A_1 ($N_{tetrahedra} = 3\,380\,792$), de $\|E\|^2$ (a) T (b), après remaillage avec A_2 ($N_{tetrahedra} = 1\,097\,595$) de $\|E\|^2$ (c) T (d) et après remaillage avec A_3 ($N_{tetrahedra} = 2\,586\,902$) de $\|E\|^2$ (e) T (f)

Le tableau 4.1 résume et compare les différentes propriétés de chaque stratégie.

	A_1	A_2	A_3
RAM	--	++	-
temps de calcul	--	++	+
Précision du champ électrique	+	-	++
Précision de la temperature	++	-	++
Convergence (δ comme critère)	--	+	++

TABLEAU 4.1: Résumé de l’efficacité des stratégies A_1 , A_2 et A_3 en fonction du critère choisi.

4.5 Conclusion

Le processus de remaillage adaptatif 3D a été appliqué sur un problème couplé électromagnétique- thermique. La méthode de remaillage permet d’adapter et d’optimiser automatiquement la taille des éléments pour minimiser l’erreur des solutions numériques. Cependant, le choix du champ physique utilisée pour le processus de remaillage conduit à des comportements très différents. Dans cette étude, nous avons considéré l’adaptation sur l’intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ et sur la température T en mode séquentiel (stratégie A_1), une adaptation sur la température T uniquement (stratégie A_2) et une adaptation combinée de l’intensité $\|\mathbf{E}\|^2$ et de la température T normalisées (stratégie A_3). Les trois stratégies produisent des solutions précises, mais leur stabilité et leur efficacité sont différentes. La convergence de la stratégie A_1 n’est pas assurée en raison de l’augmentation radical du nombre d’éléments nécessaires pour décrire les gradients des champs électriques. La stratégie A_3 est plus stable et converge plus rapidement que la stratégie A_1 et nécessite moins de ressources de calcul. La stratégie A_2 est beaucoup moins coûteuse, au détriment de la précision sur la température et de la capacité à bien représenter le champ électrique. Le choix entre les stratégies A_2 et A_3 devrait donc être fait selon un compromis entre la précision d’une part, et les contraintes de temps et de mémoire vive d’autre part. La non convergence (en utilisant le critère de l’augmentation du nombre d’éléments) de la méthode classique et naturelle A_1 conduit à éviter cette stratégie pour le calcul de l’élévation de température induite par l’illumination électromagnétique. Le processus d’adaptation de remaillage et la stratégie A_3 peuvent être utilisés pour étudier l’évolution de la température au voisinage de différentes nanoparticules utilisées dans le traitement du cancer [95]. Parmi les nombreuses applications des nanotechnologies, nous choisirons les capteurs basés sur les nanoantennes formées de couples de nanostructures séparées par un intervalle petit et contrôlé. Pour une transition douce avec les chapitres précédents, le système considéré sera composé de deux nanosphères sans substrat.

L'objectif est maintenant de calculer les dilatations qui permettront de conclure sur l'éventuel désaccord des nanoantennes, par variation de l'intervalle entre les deux nanoparticules, variation induite par l'éclairage laser.

Application à une loi de comportement thermo-géométrique basée sur le couplage photo-thermique pour une nanoantenne

Sommaire

5.1	Introduction	127
5.1.1	Modélisation physique du problème thermo-électromagnétique	128
5.1.2	Simulation du chauffage plasmonique avec remaillage . . .	130
5.2	Loi de comportement thermo-géométrique pour les nanoantennes illuminées par un laser	138
5.3	Conclusion	143

5.1 Introduction

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 4) et page 24, l'exaltation du champ électromagnétique au voisinage des nanoparticules métalliques et l'absorption de l'énergie électromagnétique correspondante apparaît sur une large gamme spectrale dans le visible . Cette absorption de l'énergie électromagnétique produit un échauffement de la nanoparticule et du milieu ambiant. La nanoantennes constituées de dimères (couple de nanoparticules à distance nanométrique l'une de l'autre) ont un comportement qui peut être fortement modifié par une réduction de cette distance liée à la dilatation. L'effet de l'interaction entre particules sur la réponse optique a fait l'objet de nombreuses études au cours de ces dernières années [100, 101, 102]. Il a notamment été montré que le couplage plasmonique engendre un décalage spectral de la résonance plasmon vers le rouge (622-700 nm) et une forte exaltation de champ électromagnétique local dans la région séparant les deux nanoparticules [103, 104, 105, 106, 107]. Cet effet de couplage est donc utilisé pour ajuster les longueurs d'onde de résonance et pour concentrer les champs électromagnétiques dans l'intervalle entre les nanoparticules.

La littérature montre que le couplage plasmonique est uniquement contrôlé par la distance inter-particulaire et la polarisation du champ incident : les nanoparticules excitées interagissent entre elles via l'interaction des champs proches. Cependant, l'élévation de température des particules est augmentée par la présence de sa voisine et par suite cet effet peut modifier la distance inter-particulaire par di-

lation. Une loi de comportement thermo-géométrique reliant l'élévation de température aux paramètres géométriques de la nanoparticule peut être déduite sur la base de la dépendance du spectre d'extinction (ou de diffusion) en fonction de la distance inter-particulaire [108]. Notre objectif est d'étudier si le couplage photo-thermique modifie cette loi de comportement. W. Zhang et al ont développé cette loi de comportement mais en séparant les deux phénomènes optique et thermique [109], nous proposons de considérer les deux phénomènes couplés. Cette loi de comportement thermo-géométrique pourra être utile pour l'optimisation des nanoantennes. Par exemple, le contrôle des distances entre particules au cours des processus de biophysique dynamique tel que la division d'ADN par enzyme de restriction EcoRv [110, 111] permettent une mesure indirecte. Dans ce chapitre, nous incluons le problème mécanique pour calculer les dilatations induites par l'éclairage laser d'une paire de nanoparticules d'or afin de déduire une éventuelle correction de la loi de comportement thermo-géométrique. À la différence des travaux de W.Zhang et al [109], nous exploiterons ainsi le couplage électromagnétique-thermique et son effet sur l'interaction entre les particules et sur les variations de température. La technique d'adaptation de maillage présentée dans le chapitre 2 sera utilisée dans le but est de trouver cette loi de comportement thermo-géométrique.

5.1.1 Modélisation physique du problème thermo-électromagnétique

Nous considérons dans ce cas deux nanoparticules d'or sphériques de diamètre D , de distance inter-particulaire notée s , de permittivité relative $\epsilon_1 = -9 + 1,6i$ et de conductivité thermique $\lambda_1^t = 131,33 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Les deux nanoparticules constituent le domaine matériel non convexe Ω_1 , de frontières Γ_{12} et Γ'_{12} . Elles sont immergées dans l'eau (domaine de calcul Ω et de frontière Γ_0) qui est un milieu diélectrique uniforme de permittivité relative $\epsilon_2 = 1,79$ et de conductivité thermique $\lambda_2^t = 0,6 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Les deux domaines sont considérés comme linéaires, homogènes, non magnétiques et isotropes. Les deux nanoparticules sont éclairées par une source laser modélisée par une onde monochromatique plane polarisée parallèlement à l'axe inter-particulaire, telle que :

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t) \quad (5.1)$$

avec $\mathbf{E}_0 = 2,73.10^6(1,0,0) \text{ V/m}$ le long de l'axe des x , $\omega = 2\pi \frac{c}{\lambda_0} = 2\pi \frac{3.10^8}{585.10^{-9}}$. Dans cette étude, seule la polarisation parallèle à l'axe inter-particulaire est considérée car elle produit une interaction plasmonique plus intense par suite un effet plus remarquable sur le chauffage des nanoparticules, à l'opposé de la polarisation perpendiculaire à l'axe inter-particulaire qui donne des réponses très proches de celui d'une nanoparticule unique [107].

La température dans les nanoparticules est notée T_1 et la température dans l'eau est notée T_2 .

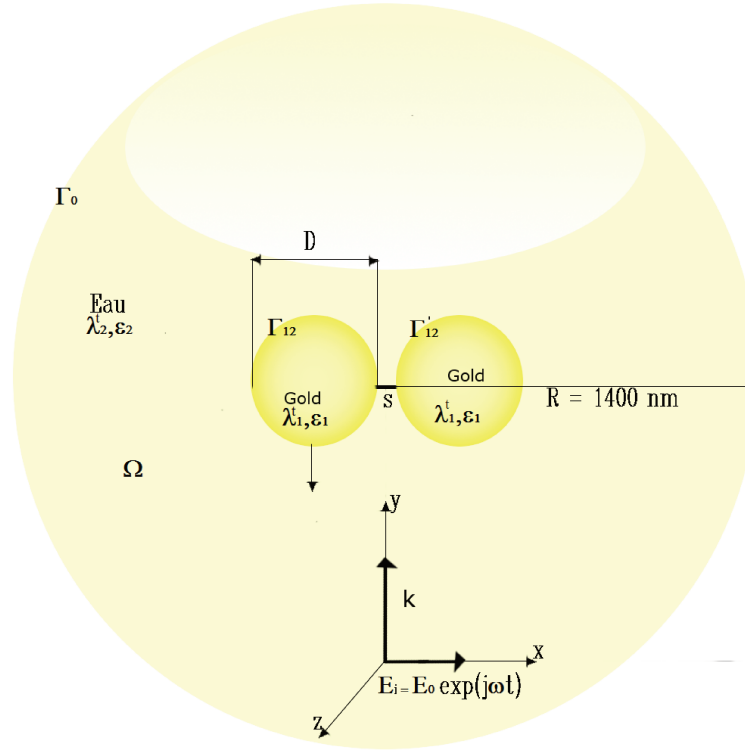


FIGURE 5.1: Représentation du modèle d'illumination des deux nanoparticules sphérique illuminées par un source laser.

Dans ce qui suit, nous présentons les équations aux dérivées partielles associées aux problèmes multiphysiques couplés. Le problème consiste à résoudre l'équation de Helmholtz et l'équation de la chaleur stationnaire dans chaque matériau non magnétique. Prenons deux médias successivement :

– À l'intérieur des deux nanoparticules, les équations sont :

$$\begin{cases} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_1) - k_0^2 \epsilon_1 \mathbf{E}_1 = \mathbf{0} \\ \nabla \cdot [\lambda_1^t \nabla T_1] + \frac{\omega}{2} \epsilon_0 \text{Im}(\epsilon_1) \|\mathbf{E}_1\|^2 = 0 \end{cases} \quad (5.2)$$

– En dehors des nanoparticules :

$$\begin{cases} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_2) - k_0^2 \epsilon_2 \mathbf{E}_2 = \mathbf{0} \\ \nabla \cdot [\lambda_2^t \nabla T_2] = 0. \end{cases} \quad (5.3)$$

Les conditions de passage en Γ_{12} et Γ'_{12} entre les nanoparticule d'or et l'eau sont :

$$\begin{cases} \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0} \\ T_1 = T_2 \\ \lambda_1^t \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_{12}} (\nabla T_1) = \lambda_2^t \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_{12}} (\nabla T_2). \end{cases} \quad (5.4)$$

À la frontière externe Γ_0 du domaine composé d'eau Ω :

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}_2 = i[k_0 \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_i) - \mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i] \\ T_2 = T_0 = 293,15K \end{cases} \quad (5.5)$$

5.1.2 Simulation du chauffage plasmonique avec remaillage

La simulation numérique du chauffage plasmonique généré par deux nanoparticules d'or de rayon $D = 50$ nm et de distance inter-particulaire $s = 10$ nm est effectuée à l'aide de 'Comsol multiphysics' interfacé avec OPTIFORM, code d'adaptation de maillage gouverné par l'estimateur d'erreur géométrique et la h-Adaptation, avec la stratégie d'optimisation A_3 (voir chapitre 4). En effet, cette stratégie de calcul a montré son efficacité pour le calcul de chauffage plasmonique avec un meilleur compromis entre précision des solutions et ressources de calcul nécessaires (RAM et temp CPU) (Tableau 4.1). Le maillage initial est composé de 181 431 éléments et 30 904 noeuds. Les figures 5.2 montrent le maillage initial et le maillage adapté. La représentation 3D montre que l'adaptation du maillage n'a que peu modifié les zones éloignées des deux nanoparticules qui sont des zones de faible variation de champ. En revanche, on note sur les coupes dans le plan médian ($y = 0$) ; une forte densité d'éléments au voisinage des nanoparticules, même dans la direction x (zones de forte variation du champ).

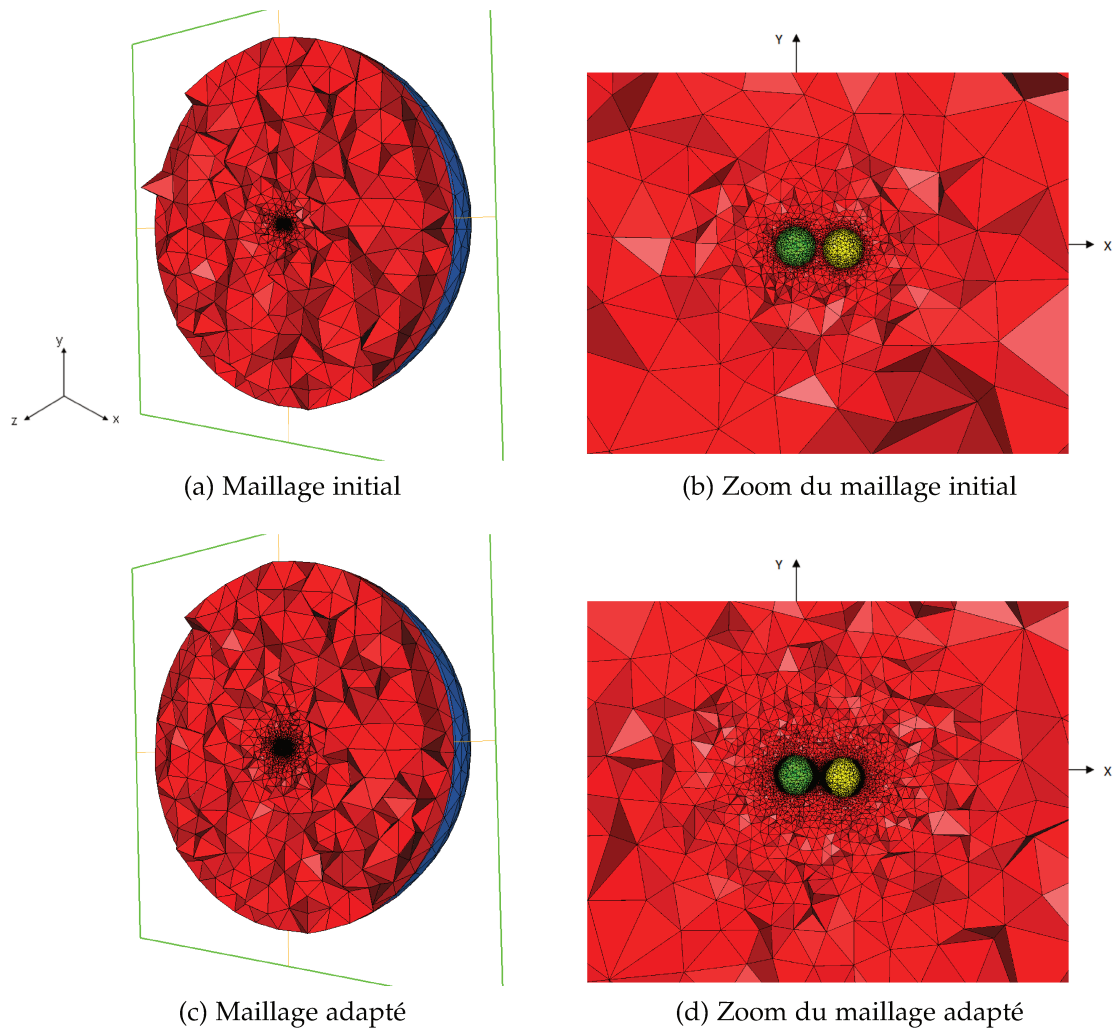


FIGURE 5.2: Maillage initial et maillage adapté.

Cinq adaptations du maillage sont effectuées afin d'optimiser la simulations du chauffage plasmonique. Les maillages adaptés à chaque itérations sont illustrés figures 5.3. Les résultats de calcul (intensité et température) sont représentées figures 5.4 et 5.5.

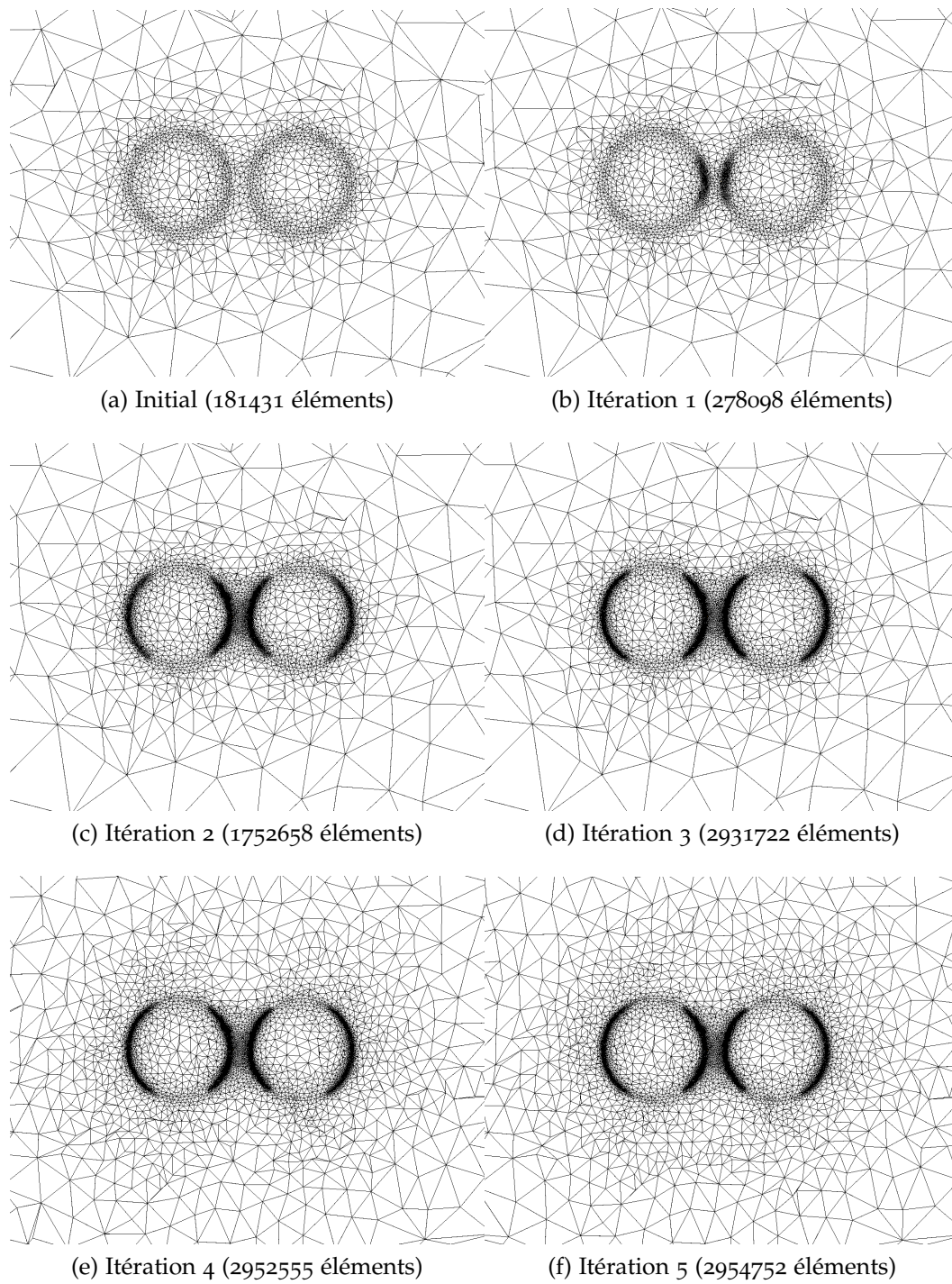
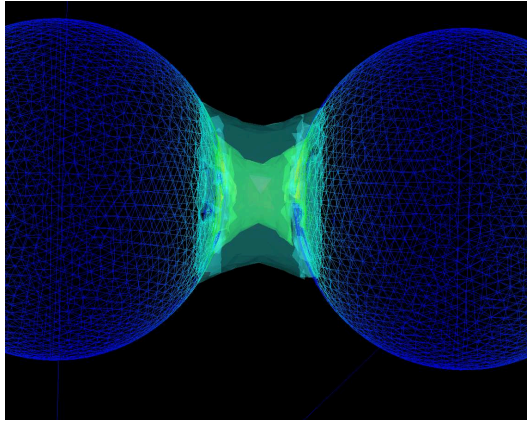
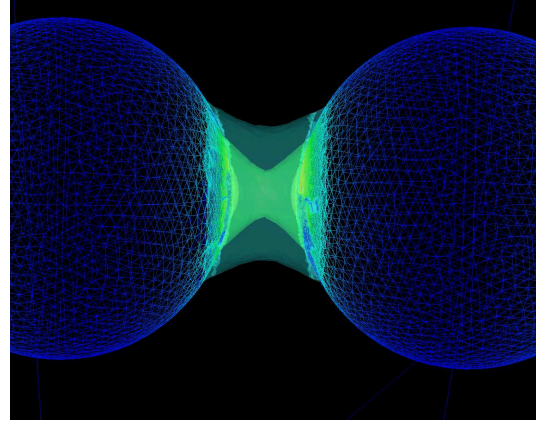


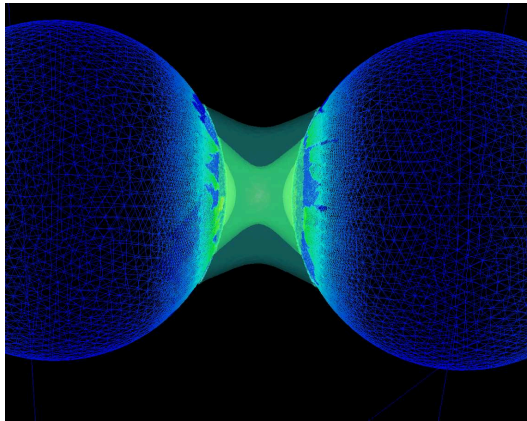
FIGURE 5.3: Coupe selon le plan median $y = 0$, zoom sur le maillage au voisinage des nanoparticules à chaque itération.



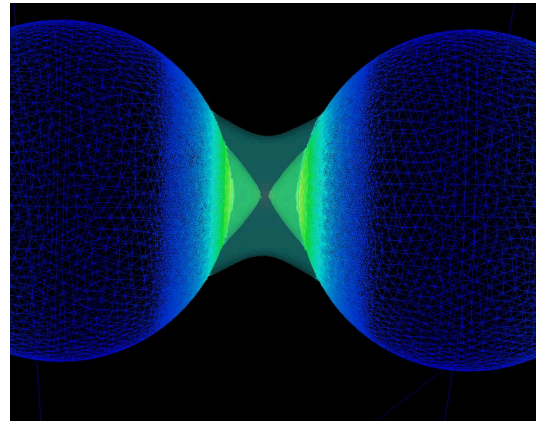
(a) Initial (181431 éléments)



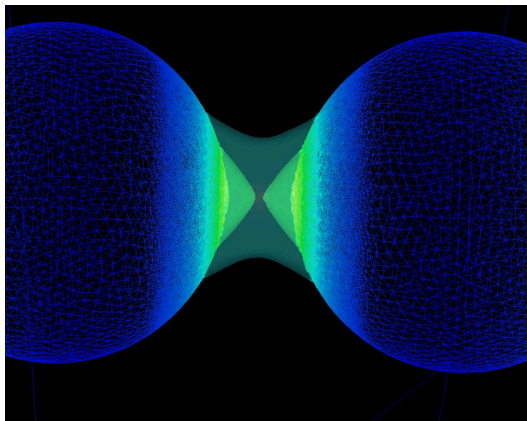
(b) Itération 1 (278098 éléments)



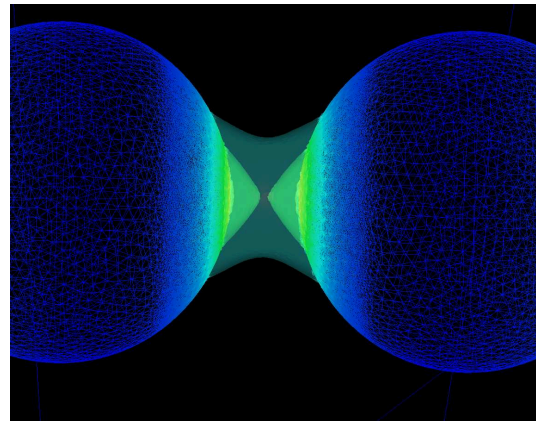
(c) Itération 2 (1752658 éléments)



(d) Itération 3 (2931722 éléments)

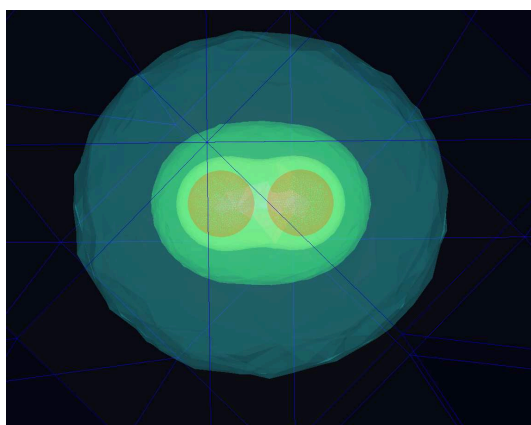


(e) Itération 4 (2952555 éléments)

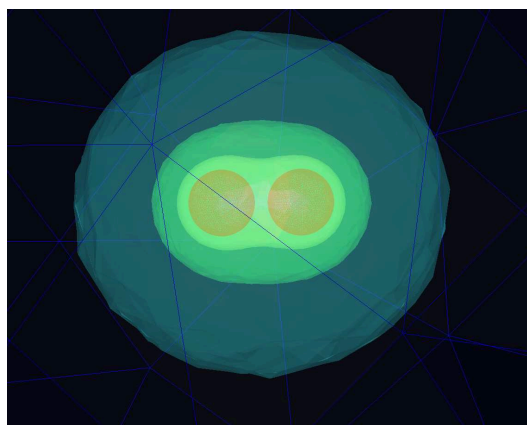


(f) Itération 5 (2954752 éléments)

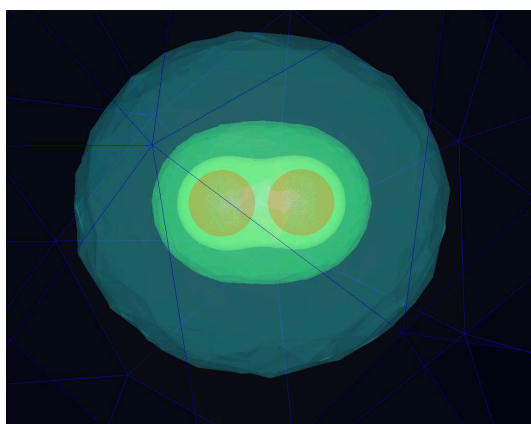
FIGURE 5.4: Iso-surfaces de l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ à chaque itération de remaillage.



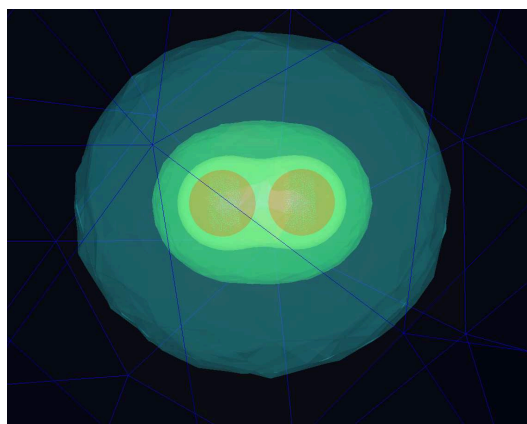
(a) Initial (181431 éléments)



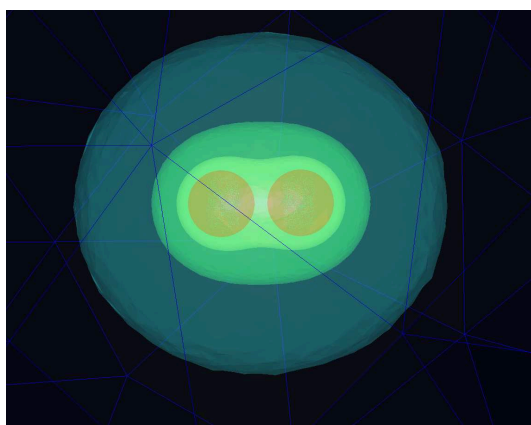
(b) Itération 1 (278098 éléments)



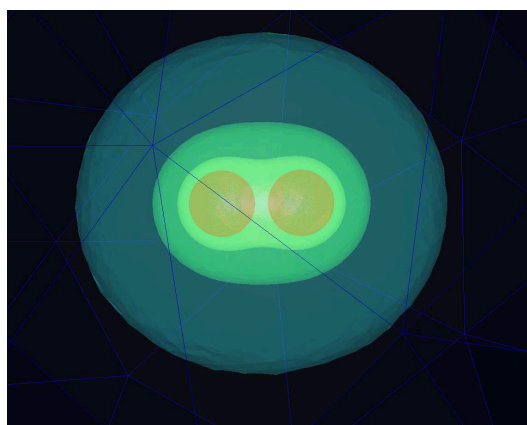
(c) Itération 2 (1752658 éléments)



(d) Itération 3 (2931722 éléments)



(e) Itération 4 (2952555 éléments)



(f) Itération 5 (2954752 éléments)

FIGURE 5.5: Iso-surfaces de température T (b,d) à chaque itération de remaillage.

À la première itération, on note une tendance à l'exaltation électrique dans la zone d'interaction entre les deux particules. On note aussi le raffinement des éléments au niveau de cette zone (le nombre d'éléments est de 2 954 752 éléments tétraédriques). À la seconde itération le nombre d'éléments est de 278 098 (46 908

noeuds). Là aussi le raffinement est très localisé pour le champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ dans la zone d'interaction des deux nanoparticules et sur les frontières avec l'eau le long du plan médian ($y = 0$). Les itérations 3,4 et 5 confirment cette tendance avec un niveau de raffinement stabilisé à partir de l'itération 3. Les iso-surfaces de l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ montrent une amélioration à chaque itération (figures 5.4).

Les différents résultats de chaque itération illustrent bien la robustesse de la méthode de l'adaptation et la bonne description des intensités des champs physiques dans les différents domaines. Une adaptation efficace permet de capter les fortes exaltations du champ électrique dans les zones d'interaction entre les deux nanoparticules. Les figures 5.4(f) et 5.5(f) illustrent bien cette constatation où on note une convergence de la représentation de cette interaction résultant du couplage plasmonique.

On remarque sur la coupe dans le plan médian ($y = 0$) que grâce au remaillage, la distribution de l'intensité du champ électrique est bien améliorée (d'environ 4%). Aussi aux interfaces entre les deux milieux et en raison de discontinuité de champ, on remarque les erreurs d'interpolation visibles sur la calcul obtenu à partir du maillage initial sur la représentation de l'intensité du champ électrique sont réduites (figure 5.6(a-b)).

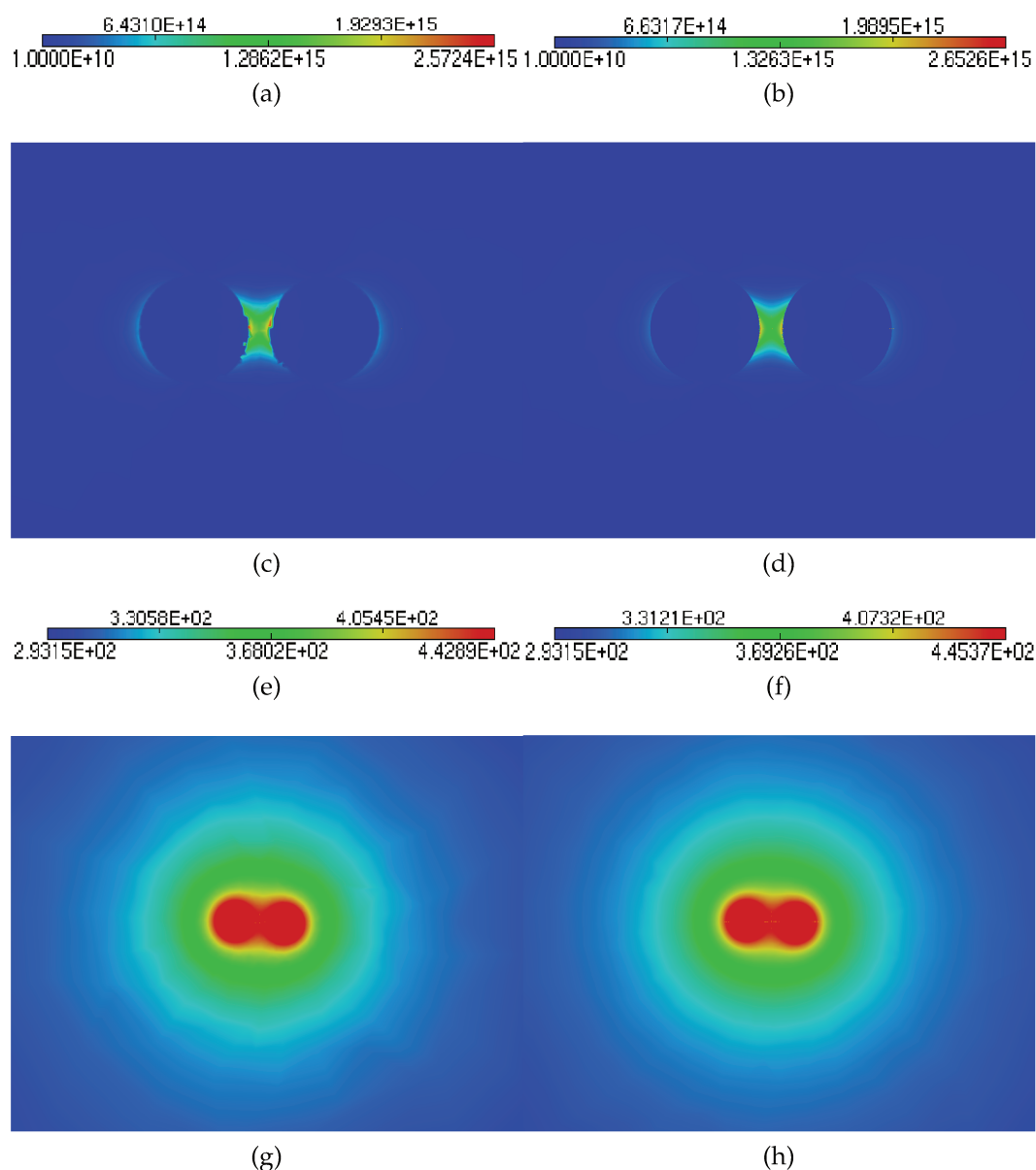


FIGURE 5.6: Coupe selon le plan médiant $y = 0$ de l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ (a,b) et de la température T (c,d) avant remaillage ($N_{tetrahedra} = 181\,431$) et après remaillage ($N_{tetrahedra} = 2\,954\,752$)

Les figures 5.8 et 5.7 illustrent les ressources (RAM, temps de calcul et nombres d'éléments et de noeuds) nécessaires pour chaque étape d'adaptation. La figure 5.7(a) montre l'importante consommation de la RAM avec l'augmentation du nombre d'éléments de maillage. Par conséquent, pour atteindre une très bonne précision avec les méthodes de maillage classique, sans raffinement local de la solution, il faut disposer d'une grande quantité de mémoire RAM ce qui nécessite des supercalculateurs. Comme, le temps de calcul total est très grand pour une seule combinaison de diamètres D des particules et de distance inter-particulaire (s), il est plus

logique d'utiliser la stratégie A_3 pour obtenir les données permettant de déduire la loi de comportement thermo-géométrique : plusieurs calculs pour différentes valeurs de D et de s sont nécessaires.

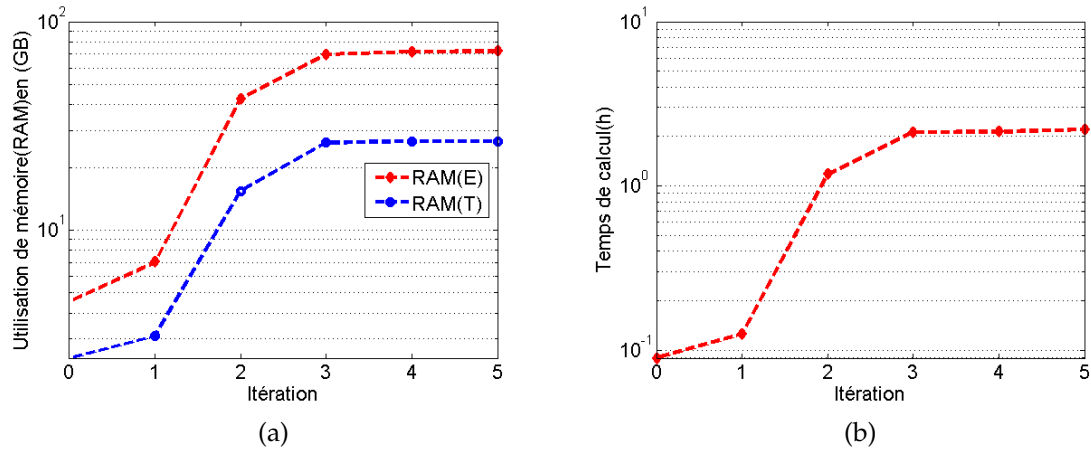


FIGURE 5.7: Évolution de la RAM pour le calcul du champ électrique et de température (a), et l'évolution du temps de calcul (b) pour chaque itération de remaillage adaptatif

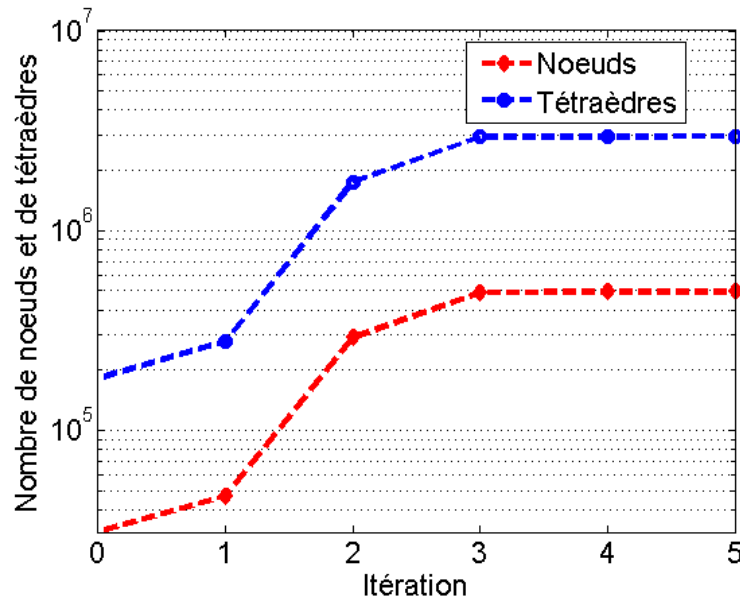


FIGURE 5.8: Évolution du nombre d'éléments et des noeuds à chaque itération de remaillage adaptatif

Dans la section suivante, cette stratégie sera utilisée pour simuler le chauffage plasmonique avec différentes combinaisons de (D et s).

5.2 Loi de comportement thermo-géométrique pour les nanoantennes illuminées par un laser

Grâce à la dépendance de la réponse optique et thermique en fonction de la distance interparticulaire. Des nanoparticules d'or illuminées en condition de résonance plasmon, ont été utilisées comme des loi de comportement. Jain et al [104] ont modélisé la décroissance exponentielle du décalage de la position relative du pic de résonance $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ en fonction de la distance inter-particulaire s et du diamètre des particules D . Ils ont ainsi déduit une loi de comportement photo-géométrique :

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = A \exp\left(-\frac{s}{D}\right), \quad (5.6)$$

avec A et τ sont des constantes. Inspirés de ces résultats, W.Zhang et al ont déduit une loi de comportement thermo-géométrique donnant l'élévation de la température à partir d'une source de chaleur ponctuelle [109] :

$$\frac{\Delta T}{\Delta T_0} = \left[A \exp\left(-\frac{s}{D}\right) + 1 \right] \left[1 + \frac{1}{2\left(\frac{s}{D} + 1\right)} \right] \quad (5.7)$$

Dans cette étude, on souhaite établir une loi de comportement thermo-géométrique tenant compte du couplage thermo-électromagnétique. Dans ce but il faut calculer l'élévation de température sous illumination des deux nanoparticules d'or immergées dans l'eau, pour différents diamètres ($D = 20, D = 30, D = 40, D = 50, D = 60$) nm et différentes distances inter-particulaire (s variant de 10 nm à 90 nm). Les simulations sont toujours réalisées avec Comsol multiphysics interfacé avec OPTIFORM. L'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ et la température obtenues pour différentes valeurs de s pour des nanoparticules de diamètre $D = 50$ nm sont représentées figure 5.9.

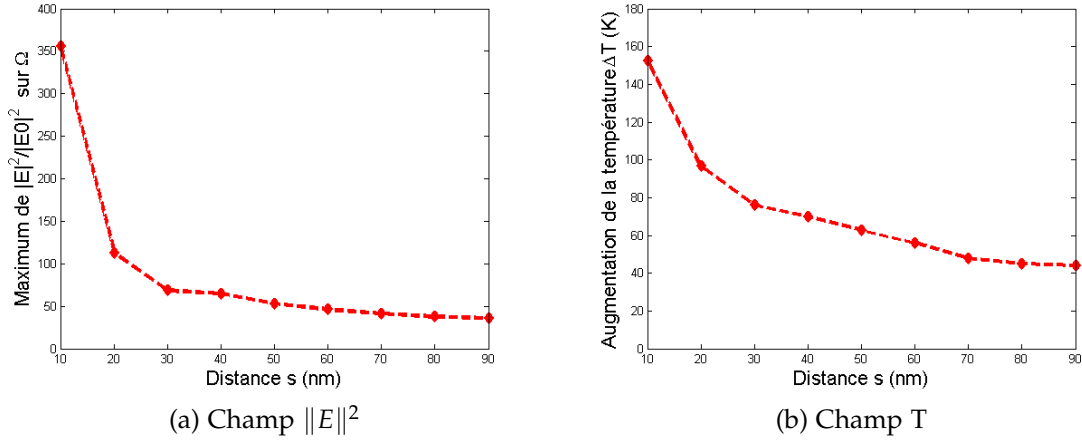


FIGURE 5.9: Évolution de l'intensité du champ électrique (a) et de l'augmentation de la température (b) en fonction de la distance inter-particulaire s pour deux nanoparticules sphériques de diamètre $D = 50$ nm.

La figure 5.9(a) montre que le maximum de l'intensité de champ électrique entre les nanoparticules décroît rapidement (de façon exponentielle?) en fonction de la distance inter-particulaire s . Plus la distance s est faible plus l'interaction est forte. À partir d'une distance $s = 80$ nm l'effet de l'interaction se stabilise et les particules peuvent être alors considérées comme découplées, ou au moins faiblement couplées. Dans tout ce qui suit, la distance inter-particulaire s maximale sera $s = 90$ nm.

La figure 5.9(b) montre l'augmentation de la température des nanoparticules ΔT en fonction de la distance inter-particulaire s . On observe une décroissance plus douce que celle de l'intensité de 160°C à 60°C . EN effet, la température est liée directement à la densité de puissance absorbée Q par les nanoparticules (voir chapitre 1). Là aussi, à partir de 80 nm de distance inter-particulaire, l'élévation de température se stabilise au voisinage de 40°C .

La figure 5.10 montre une comparaison de l'élévation de température ΔT en fonction de s donnée par notre modèle couplé thermo-électromagnétique (modèle 2) avec remaillage adaptatif et le modèle qui utilise une source de chaleur ponctuelle de Z.Wang et al [109]. Dans cette étude, les mêmes conditions sont utilisées, avec $D = 50$ nm et $s = 10$ nm, relativement au pouvoir d'absorption de 20 mW pour chaque nanoparticules (modèle 1). Les résultats obtenus par l'approche de couplage thermo-électromagnétique et utilisant une source d'énergie plasmonique d'illumination montrent un écart important sur l'élévation de température. Plus la distance entre les deux nanoparticules est importantes et plus l'écart est important. On note qu'à $s = 10$ nm les deux approches donnent des résultats semblables. La température obtenue avec le couplage électro-thermique est plus faible et décroît plus vite.

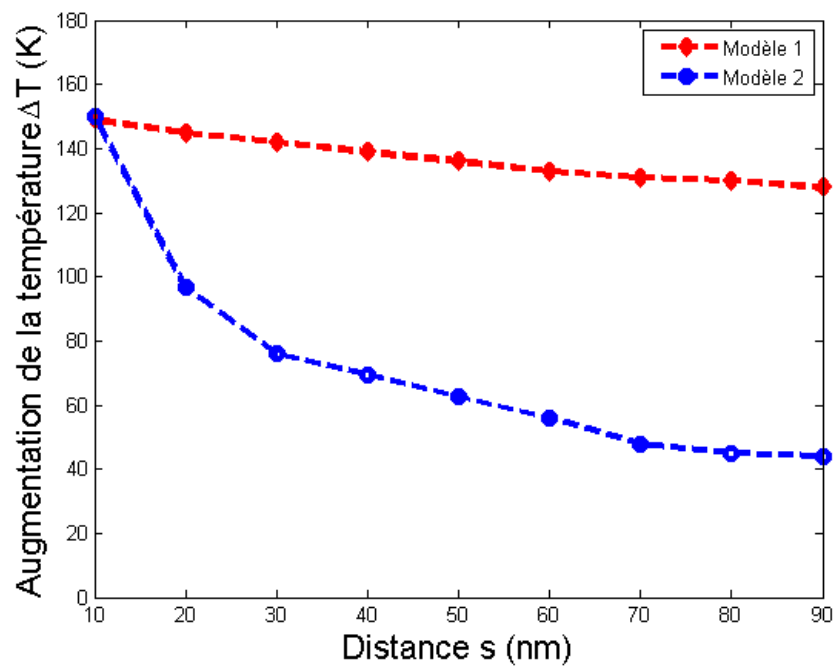


FIGURE 5.10: Comparaison de l'augmentation de la température en fonction de la distance inter-particulaire s pour le modèle qui tient compte au couplage électromagnétique - thermique (modèle 2) et pour le modèle qui utilise une approximation de source ponctuelle (modèle 1).

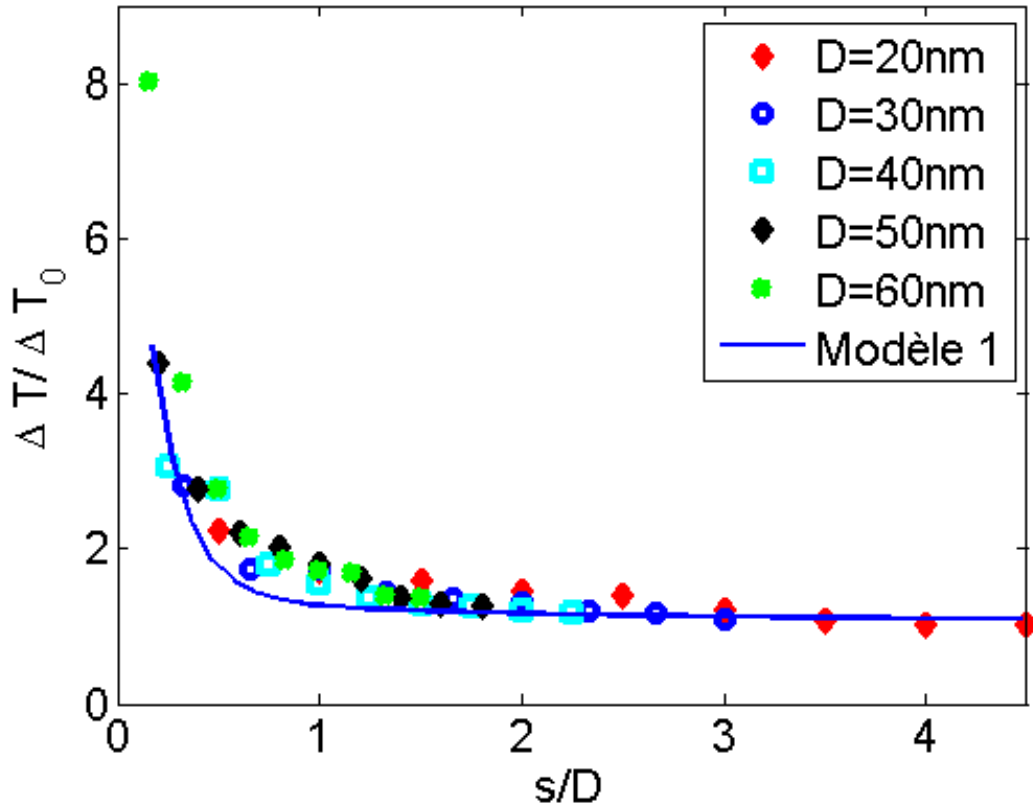


FIGURE 5.11: Évolution de l'augmentation de température en fonction du rapport $\frac{s}{D}$

Afin d'étudier l'effet du rapport de $\frac{s}{D}$ sur l'élévation de température, nous présentons sur la figure 5.11 la variation relative de $\frac{\Delta T}{\Delta T_0}$ (où ΔT_0 est l'élévation de température d'une nanoparticule hors condition de couplage plasmonique) pour différentes valeurs de diamètre D allant de 20 à 60 nm. La courbe d'interpolation *Modèle 3* correspond à la loi de comportement thermo-géométrique pour les nanoantennes obtenue par Zhang et al [109] :

$$\frac{\Delta T}{\Delta T_0} = [a \exp(-\frac{s}{\tau}) + 1] [1 + \frac{1}{2(\frac{s}{D} + 1)}], \quad (5.8)$$

avec $a = 6,1 \pm 0,8$ et $\tau = 0,17 \pm 0,02$. La comparaison de cette loi de comportement avec nos résultats montre des écarts importants qui sont dus au couplage thermo-électromagnétique et à l'utilisation d'une source de chaleur réaliste, définie en tout point des nanosphères. L'optimisation des paramètres du modèle (a et τ) permet d'améliorer les résultats. L'optimisation est réalisée en utilisant la méthode des moindres carrés non linéaire en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt basé sur la minimisation de la variance résiduelle :

$$\sigma = \frac{SSR}{NFD}, \quad (5.9)$$

avec NFD le nombre de degré de liberté et SSR la somme des carrés des différence entre les valeurs calculées par le modèle éléments finis et la fonction évaluée [112, 113]. Le résultat est représenté figure 5.12 ($a = 8,33 \pm 1,09$ et $\tau = 0,271 \pm 0,035$). Les incertitudes sur les coefficients nous enjoignent à utiliser une autre fonction d'ajustement.

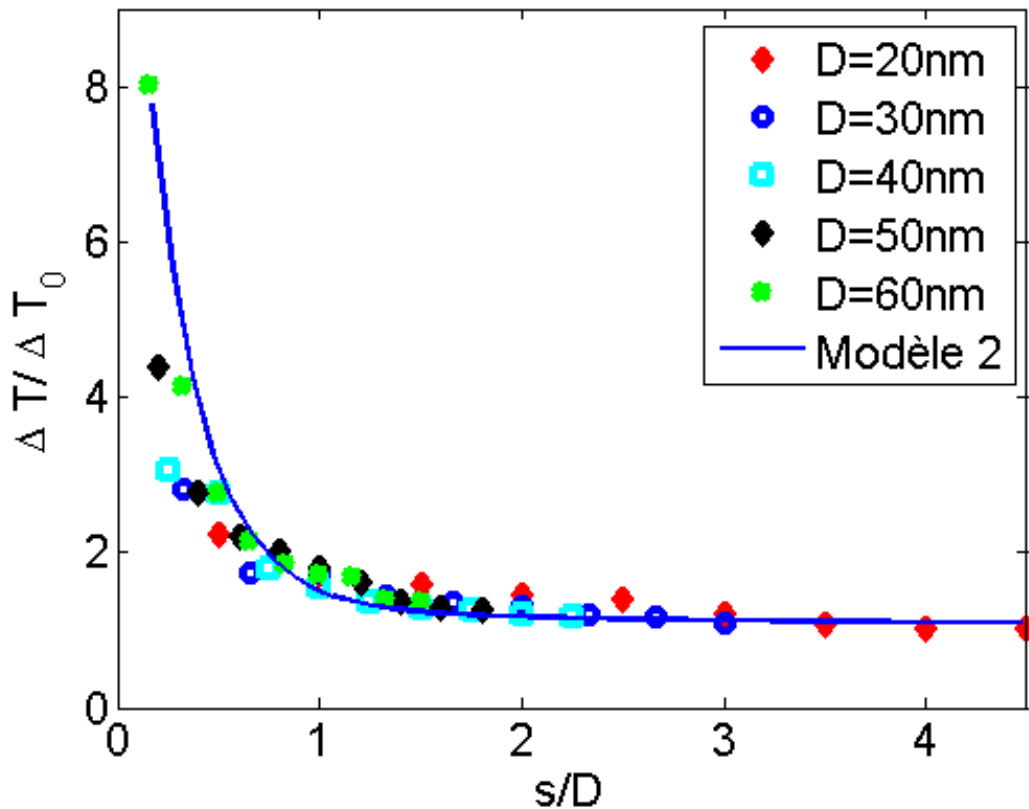


FIGURE 5.12: Évolution de l'augmentation de température en fonction du rapport $\frac{s}{D}$.

L'optimisation a permis de corriger les valeurs de a et τ et le logiciel *Eureqa* qui utilise la programmation génétique donne de bons résultats avec un modèle voisin :

$$\frac{\Delta T}{\Delta T_0} = \left[a_0 + \frac{a_1}{\frac{s}{D} - a_2} \right] \quad \text{avec } \frac{s}{D} \in [0.16, +\infty[. \quad (5.10)$$

Il donne : $a_0 = 0.813$, $a_1 = 0.747$ et $a_2 = 0.0729$. Avec ces valeurs les écarts sont réduits de 13% (voir figure 5.12). La confrontation de cette nouvelle loi de comportement thermo-géométrique et de nos résultats numériques est illustrée sur la figure 5.13. Les résultats obtenus sont plus précis et l'écart est très faible. La loi paraît plus fiable si s/D dépasse 0,4.

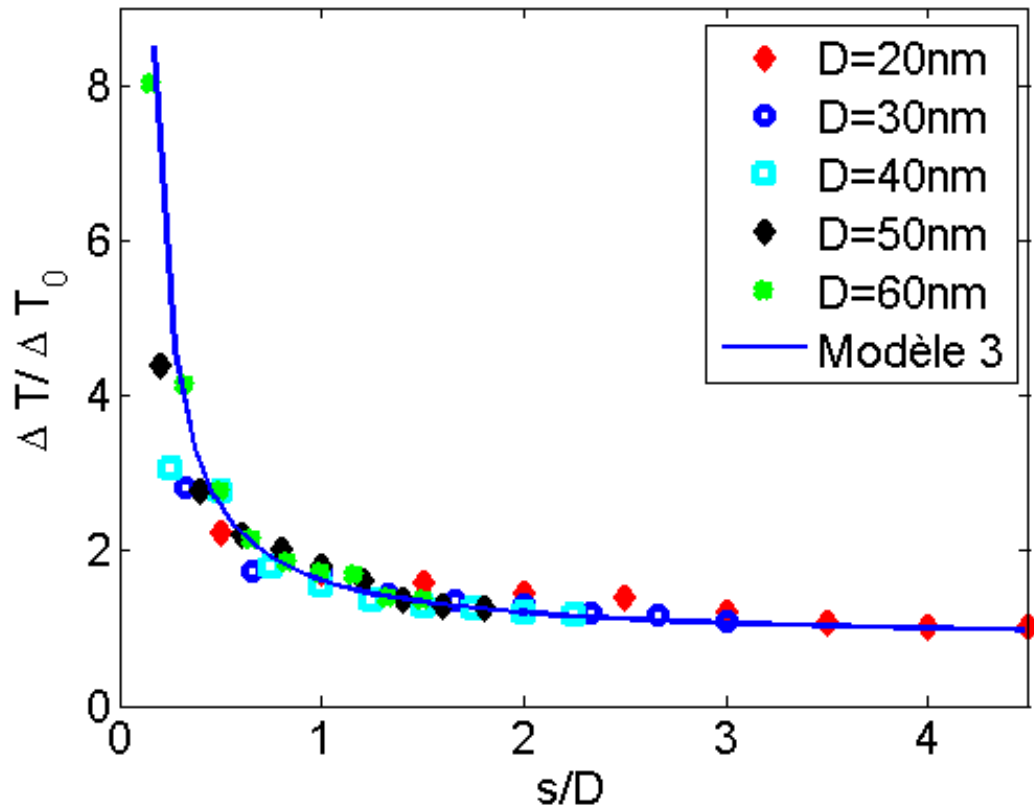


FIGURE 5.13: Evolution de l'augmentation de température en fonction du rapport $\frac{s}{D}$

Une loi de comportement donnant l'élévation de température d'une nanonantenne en fonction de ses paramètres géométriques est donc obtenue avec l'équation 5.13. Elle permet de trouver la taille inter-particulaire s à partir de la mesure de température d'une paire de nanoparticules de taille D excitées par une source laser polarisée linéairement selon l'axe passant par les centres des nanoparticules.

5.3 Conclusion

Dans ce chapitre, le processus de remaillage adaptatif du chapitre 4 a été utilisé pour simuler numériquement le chauffage plasmonique de deux nanoparticules métalliques. La stratégie optimale A_3 a été choisie pour adapter le maillage et optimiser les temps des calcul. Les résultats obtenus dont la convergence a été vérifiée, ont permis de proposer une loi de comportement sous la forme de deux fonctions pour relier l'élévation de la température à la distance inter-particulaire et au diamètre de particules. Cette loi de comportement peut être un guide utile pour les différentes applications en biophysique qui exploitent les nanoparticules plasmonique.

Etude de la dilatation thermique des nanoparticules

Sommaire

6.1	Introduction	145
6.2	Simulation des dilatations de nano-sphères métalliques, induites par éclairage laser	146
6.2.1	Simulations de la dilatation d'une nanosphère d'or de rayon 50 nm	148
6.2.2	Simulation de la dilatation d'une nanosphère d'or de rayon 20 nm	152
6.3	Dilatation d'une nanoantenne : couplage plasmonique sphère-sphère	156
6.4	Conclusion	160

6.1 Introduction

L'élévation de température d'une nanoantenne de type dimère peut induire une dilatation qui pourrait modifier l'écart entre les deux nanoparticules la composant. Les nanoantennes en fonctionnement (sous éclairage) ne seraient alors pas dans les conditions idéales de fonctionnement, qui avaient été choisies lors du dépôt des nanostructures sur le substrat. De même, lorsque des nanostructures sont déposées sur un substrat, les effets thermiques peuvent produire leur décollement en générant des cisaillements avec le substrat dont la dilatation diffère [15]. Simuler ces phénomènes multiphysiques (electro-thermo-mécaniques), dans le but de déterminer une source possible de la baisse de performance de nanocapteurs ou pour compenser cette dérive devient utile afin de guider la conception et d'aider à la caractérisation des biocapteurs. Dans ce chapitre, nous appliquons la méthode des éléments finis, couplée à la stratégie d'optimisation du maillage, au calcul des dilatations thermiques dans les nanoparticules métalliques (voir page 38 et suivantes). Nous introduisons le dernier problème évoqué dans la section 1.5 et dans le système d'équations 1.125, page 47. En premier lieu, nous simulons en 3D les dilatations de nano-objets de formes simples dans des conditions d'illumination identiques à celles d'une première étude en 2D [16] pour vérifier la validité des résultats prometteurs de la modélisation 2D dans le cas réaliste 3D. Par la suite, nous calculerons les dilatations dans des structures type nanoantenne, afin de modifier éventuellement la loi de comportement thermo-géométrique élaborée au chapitre .

6.2 Simulation des dilatations de nano-sphères métalliques, induites par éclairage laser

Considérons une nanoparticule sphérique d'or, de rayon r , immergée dans un milieu diélectrique (l'air) et illuminée par une source laser. Le système matériel est présenté par la figure 6.1 :

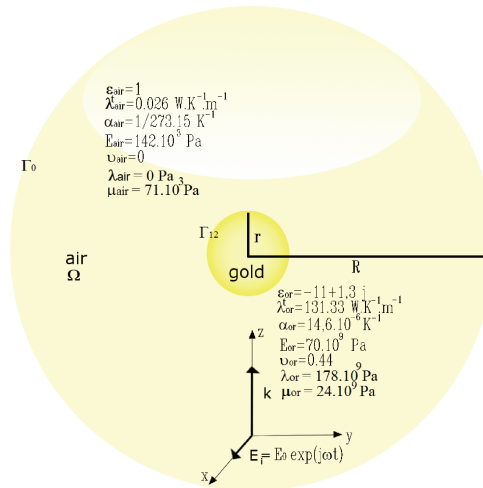


FIGURE 6.1: Représentation du modèle numérique d'une nanoparticule illuminée par une source laser.

Le problème consiste à résoudre les trois équations aux dérivées partielles associées aux problèmes multiphysiques couplés. Le couplage dans le cas du problème électromagnétique-thermique est proportionnel au champ électrique et dans le cas du problème thermo-élastique est proportionnel au gradient de température. Dans ce cas, les domaines sont la nanoparticule immergée dans un domaine infini (air) où nous avons :

- A l'intérieur des particules : les champs $\mathbf{E}$, T , et $\mathbf{U}$ satisfait le système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_1) - k_0^2 \epsilon_1 \mathbf{E}_1 = 0 \\ \nabla \cdot (\lambda_1^t \nabla T_1) + \frac{1}{2} \epsilon_0 \omega \Im(\epsilon_1) \|\mathbf{E}_1\|^2 = 0 \\ \mu_1 \nabla^2 \mathbf{U}_1 + (\lambda_1 + \mu_1) \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}_1) - (3\lambda_1 + 2\mu_1) \alpha_1 \nabla (\Delta T_1) = 0 \end{array} \right. \quad (6.1)$$

- Dans le milieu diélectrique : les champs $\mathbf{E}$, T , et $\mathbf{U}$ satisfait le système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_2) - k_0^2 \epsilon_2 \mathbf{E}_2 = 0 \\ \nabla \cdot (\lambda_2^t \nabla T_2) = 0 \\ \mu_2 \nabla^2 \cdot \mathbf{U}_2 + (\lambda_2 + \mu_2) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}_2) - (3\lambda_2 + 2\mu_2) \alpha_2 \nabla (\Delta T_2) = 0 \end{array} \right. \quad (6.2)$$

À ces formulations aux dérivées partielles s'ajoutent les conditions de passage et de bord qui doivent être imposées pour assurer le réalisme physique :

a) À l'interface entre les deux domaines (or et air) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0} \\ \lambda_1^t \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_{12}} (\nabla T_1) = \lambda_2^t \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_{12}} (\nabla T_2) \\ T_1 = T_2 \\ \mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2 \end{array} \right. \quad (6.3)$$

b) A la frontière extérieure du domaine d'immersion (air) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0} \\ \nabla \times \mathbf{E}_2 = i[k_0 \mathbf{n}_{12} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_i) - \mathbf{k}_0 \times \mathbf{E}_i] \\ T_2 = 293.15 \text{ K} \\ \mathbf{U}_2 = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (6.4)$$

c) Une contrainte d'encastrement est imposée au centre du milieu de calcul pour éviter les mouvement de corps rigide (les rotations ou les translations).

La stratégie d'adaptation du maillage proposée est séquentielle combinant trois champs physiques distincts : la première adaptation est contrôlée sur l'intensité du champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$, la seconde par la variation de température T , et la dernière par la dilatation $\mathbf{U}$ (voir 6.2). Bien que cette stratégie nécessite un grand temps de calcul total, son avantage est qu'elle garantit une haute précision de calcul, les champs de dilatation des nanoparticules étant relativement faibles. Le critère d'arrêt pour les trois boucles d'adaptations est basé sur la stabilité de l'évolution du nombre des éléments de maillage, comme dans les exemples précédents. Les cartes de tailles physiques contrôlant l'estimateur d'erreur sur les champs physiques $\|E\|^2, T$ et U sont notés respectivement $\mathcal{H}_{\|E\|^2}(\Omega)$, $\mathcal{H}_T(\Omega)$ et $\mathcal{H}_U(\Omega)$. La carte de taille contrôlant les courbures géométriques est noté $\mathcal{H}_g(\Omega)$.

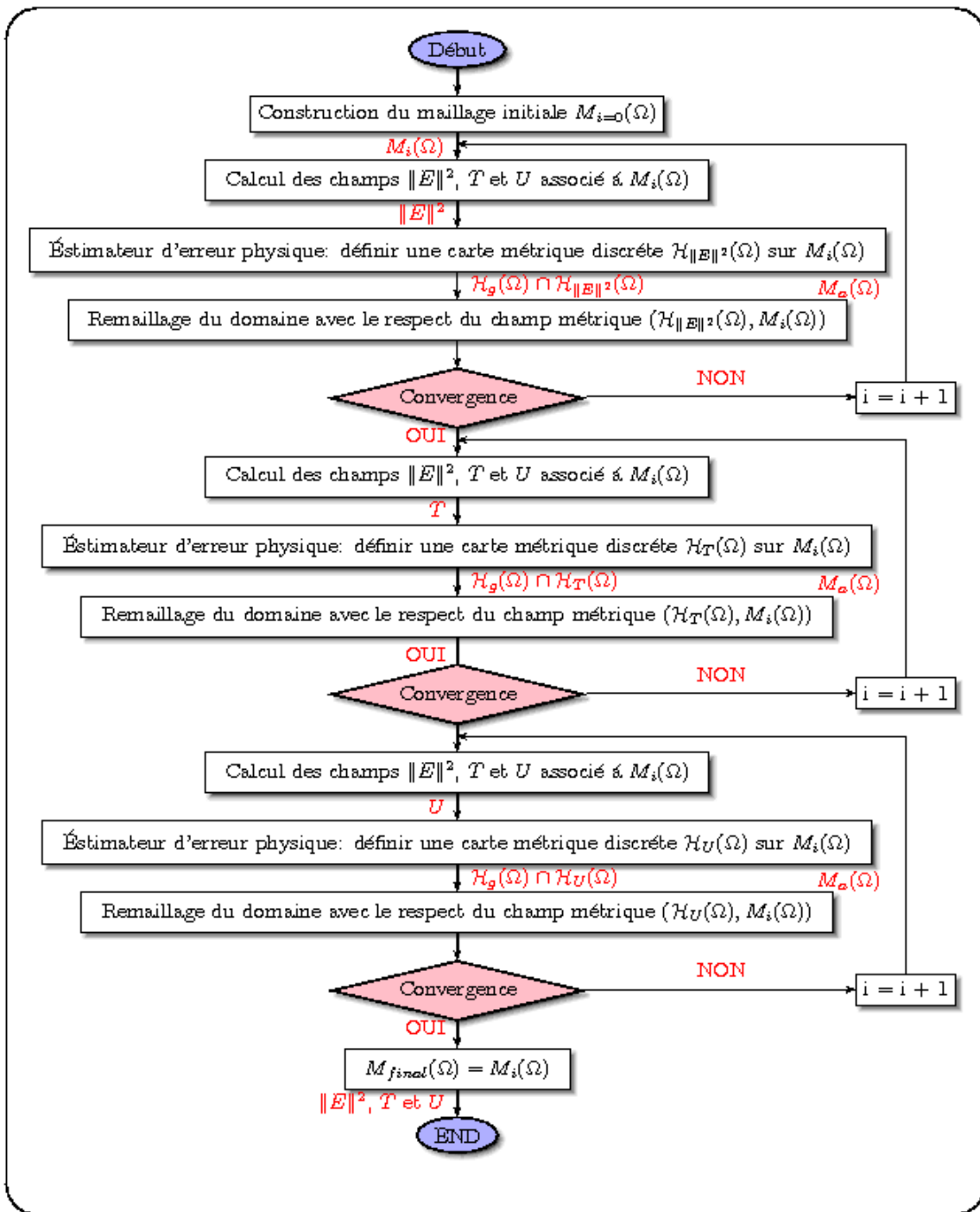


FIGURE 6.2: Processus d'optimisation de remaillage séquentiel.

6.2.1 Simulations de la dilatation d'une nanosphère d'or de rayon 50 nm

Dans cette partie, nous simulons l'illumination d'une nanosphère de rayon $r = 50$ nm, par une onde plane d'amplitude $\|E_0\| = 1,323.10^6$ V/m. Le maillage ini-

tial de la nanoparticule sphérique comportant 21 871 noeuds et 128 470 éléments tétraédriques est donné sur la figure 6.3. Sur le maillage final présenté sur la figure 6.3(b), on remarque que dans les zones éloignées de la nanoparticule, il n'y a pas de raffinement de maillage. Le maillage est grossier dans ces zones avec une taille moyen de $h_{max} = 200$ nm. En revanche, un raffinement du maillage au niveau de la particule et de l'interface or-air avec un taille moyenne d'éléments de l'ordre de $h_{min} = 0.8$ nm est nécessaire afin d'atteindre les objectifs de précision. Les résultats sur l'adaptation séquentielle du maillage généré par la carte d'erreur physique sur le champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$ suivi par l'adaptation sur l'élévation de la température puis sur la dilatation de la nanoparticule est donné sur la figure 6.4. Le maillage final (figure 6.4(d)) montre un raffinement remarquable dans les zones de fortes variations des trois champs physiques. En effet, le champ électrique présente une exaltation du champ au voisinage de nanoparticule dans la direction de la polarisation incidente (figure 6.5(a)). Le champ de température présente une répartition de faible variation à l'intérieur de la nanoparticule et une variation relativement forte sur la surface séparant les deux milieux et dans une région, de son voisinage, de taille deux fois plus grand que la nanoparticule (figure 6.5(b)). Le champ de déplacement est radial, il présente une variation seulement à l'interface séparant les deux matériaux (figure 6.6). La faible dilatation de la géométrie (inférieure au nanomètre : 0,17 nm) a nécessité un fort raffinement sur cette surface pour éviter les erreurs de discrétisation.

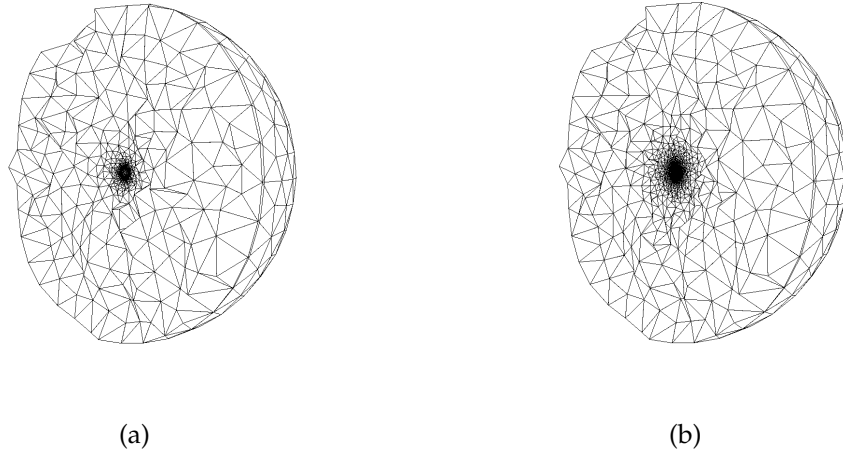


FIGURE 6.3: Coupe selon le plan médian (xz), vue 3D du maillage initial (a), et du maillage final après adaptation.

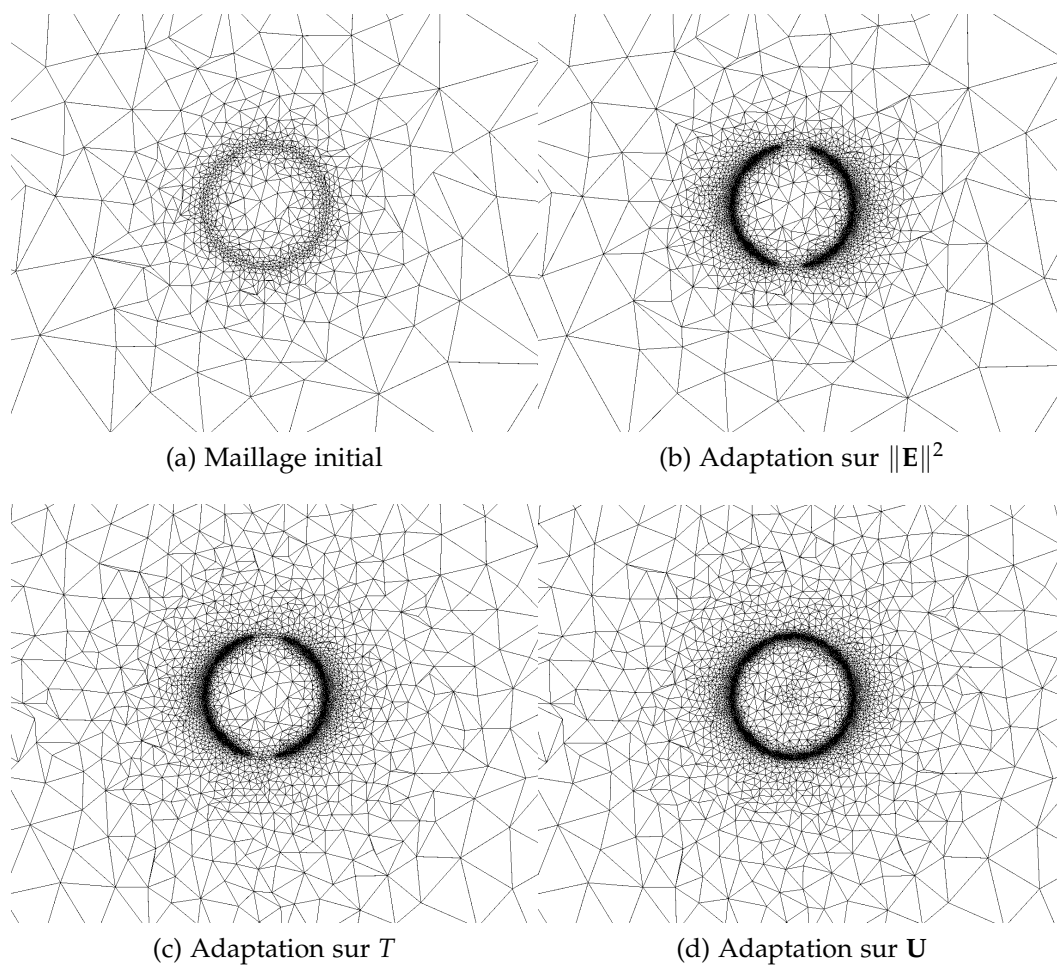


FIGURE 6.4: Coupe selon le plan médian (xz), zoom au voisinage du nanoparticule sur le maillage initial (a), après adaptation sur $\|\mathbf{E}\|^2$ (b), après adaptation sur T (c), et après adaptation sur $\mathbf{U}$ (d).

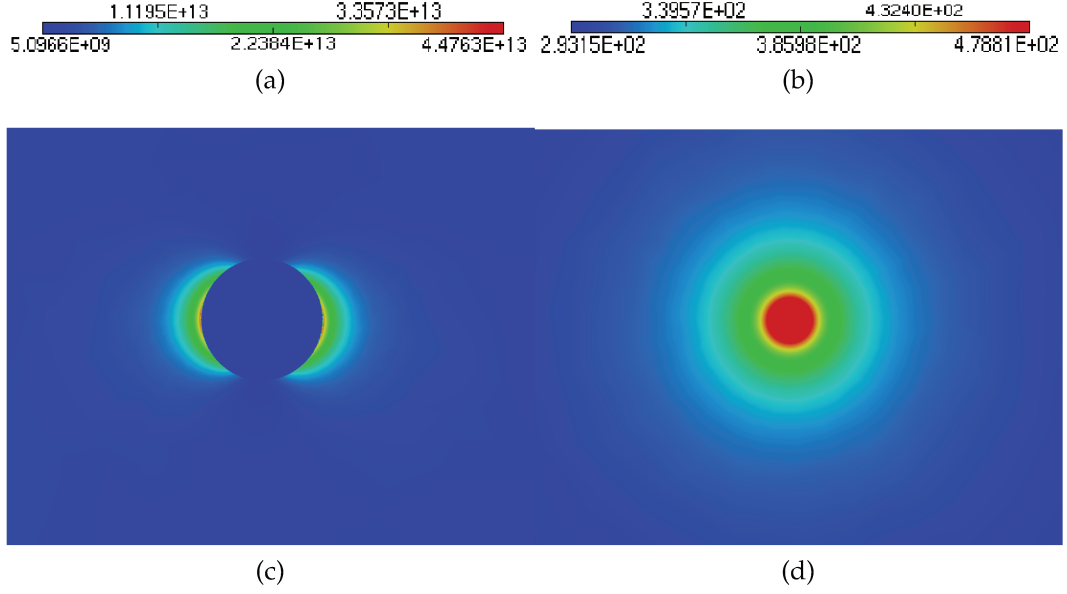


FIGURE 6.5: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ (a), et de la température T (b) après adaptation de maillage.

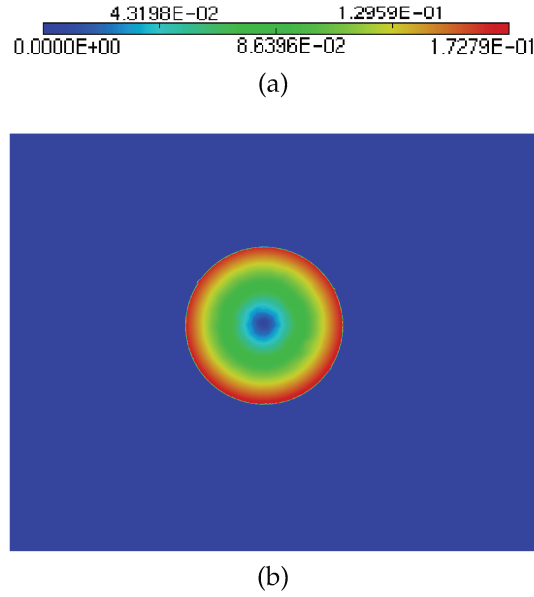


FIGURE 6.6: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition du champ de déplacement $\|U\|$ après adaptation du maillage.

Compte tenu de la taille de la nanoparticule ($r = 50$ nm) nous fixons la carte de taille minimale du maillage à chaque itérations $h_{min} = 0.8$ nm. Le tableau 6.1 illustre les caractéristiques du maillage éléments finis à chaque itérations du processus

d’adaptation. Le processus complet comporte 10 itérations où à chaque étape il analyse le champ physique et estime l’erreur qui permet de gouverner le maillage suivant. L’erreur maximale tolérée sur l’estimation de la carte de taille est fixée à $\epsilon = 1\%$. Dans les itérations de 0 à 5, l’adaptation physique est gouvernée par le champ électrique $\|E\|^2$. Dans les itérations 6-8 l’adaptation physique est réalisée sur la température et les dernières itérations de 8 à 10 l’adaptation est réalisée sur la dilatation.

TABLEAU 6.1: Caractéristique des maillage à chaque itération du processus d’adaptation.

Itération de maillage	0	1	2	3	4	5
taille h_{min}		0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
Erreur ϵ		0.1	0.05	0.01	0.01	0.01
Nombre des noeuds	21 871	29 768	98 585	318 317	386 708	399 907
Nombre des éléments	128 470	175 981	593 759	1 922 935	2 329 733	2 404 444

6	7	8	9	10
0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
402 594	402 945	481 945	540 946	537 111
2 421 616	2 423 417	2 902 865	3 256 697	3 231 422

La variation de température maximale atteinte par la nanoparticule est de 185,66°C. La dilatation maximale de la nanoparticule métallique est de 0,344 nm. Il est à noter que, la dilatation est liée à la valeur de puissance laser que nous avons utilisée, une source de puissance plus importante engendre plus de variation de température par suite de modification de géométrie.

6.2.2 Simulation de la dilatation d’une nanosphère d’or de rayon 20 nm

Afin d’illustrer l’effet de la taille des particules sur les phénomènes engendrées par l’illumination électromagnétique, nous simulons la dilatation d’une nanoparticule de rayon plus petit que la précédent $r = 20$ nm. La particule est illuminée par une onde plane d’amplitude $E_0 = 8.10^6$ V/m. Les mêmes conditions aux limites et de modélisation géométriques ont été utilisées. Le maillage initial comporte 219 253 éléments.

Huit itérations ont été nécessaire pour adapter le maillage aux variations des champ physiques. Pour les 4 premiers itérations, l’adaptation est effectuée sur le champ

électrique $\|\mathbf{E}\|^2$. Pour les itérations de 5 à 6, l'adaptation est faite sur la variation de température et pour les itérations 7 et 8, l'adaptation est réalisée sur la dilatation.

Le tableau 6.2 illustre les caractéristiques des maillages à chaque itération du processus d'adaptation. La taille minimale des éléments est fixée à $h_{min} = 0,4$ nm. Ce choix est en relation directe avec la taille de la particule. L'erreur maximale tolérée est fixée à 1%. On note une augmentation significative du nombre d'éléments dans le cas d'une adaptation sur $\|\mathbf{E}\|^2$ et une stabilisation du nombre d'éléments lorsque l'adaptation est effectuée sur la variation de température.

TABLEAU 6.2: Nombre des noeuds, éléments (tétraèdres), h_{min} , ϵ , pour chaque itération du processus d'adaptation de maillage .

Remeshing step	0	1	2	3	4	5	6
h_{min}		0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
ϵ		0,1	0,05	0,01	0,01	0,01	0,01
Nodes	37 114	48 118	113 630	229 503	251 509	252 236	252 506
Tetrahedra	219 253	285 082	683 308	1 382 536	1 506 007	1 511 159	1 513 033

7	8
0,4	0,4
0,01	0,01
367 860	364 682
2 206 431	2 184 508

La figure 6.7 illustre l'adaptation pour chaque champ physique $\|\mathbf{E}\|^2$, T et $\mathbf{U}$. Sur les figures des isovaleurs (figure 6.8-6.9), on remarque que la variation de température maximale atteinte par la nanoparticule métallique est de l'ordre de 700° C. La dilatation maximale de la nanoparticule est de 0,43 nm. Cette dilatation reste relativement faible. La dilatation est liée à la puissance laser que nous avons utilisée et qui est compatible avec les puissances utilisées expérimentalement.

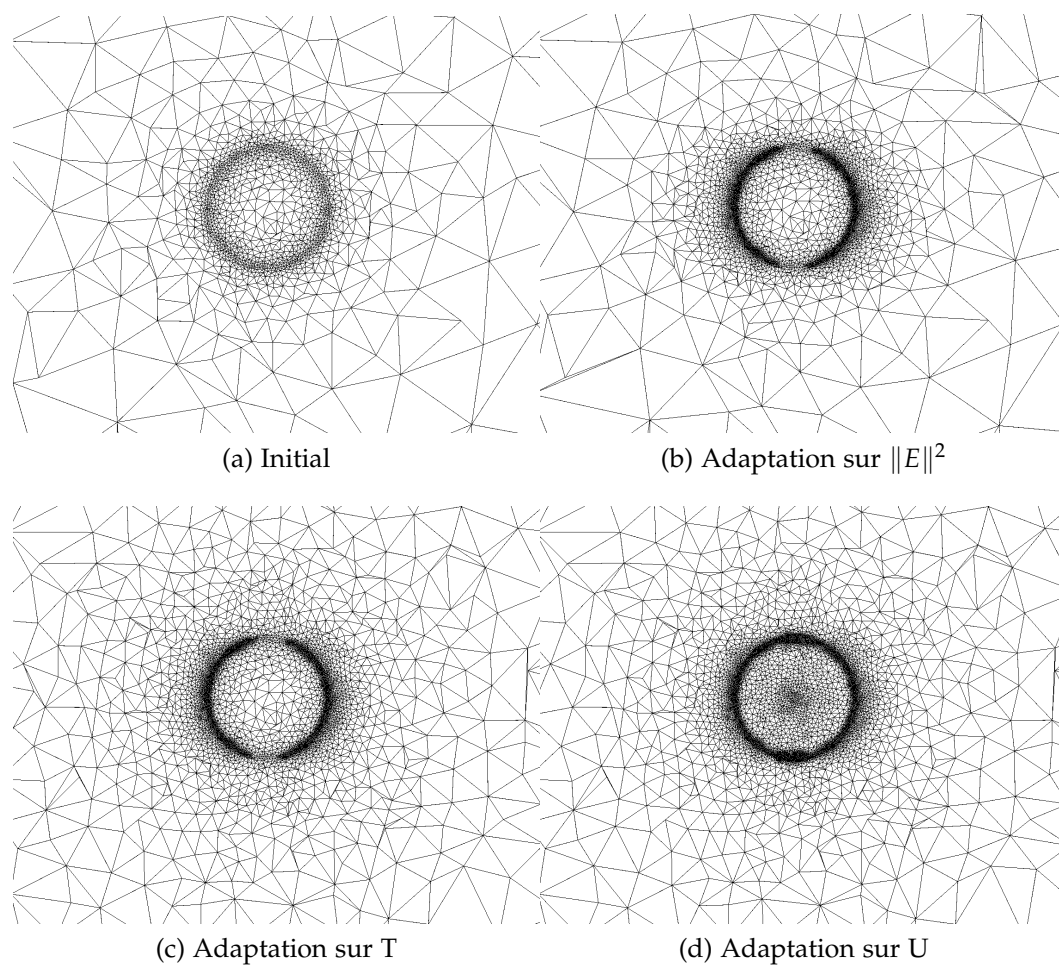


FIGURE 6.7: Zoom au voisinage du nanoparticule des maillages adaptés

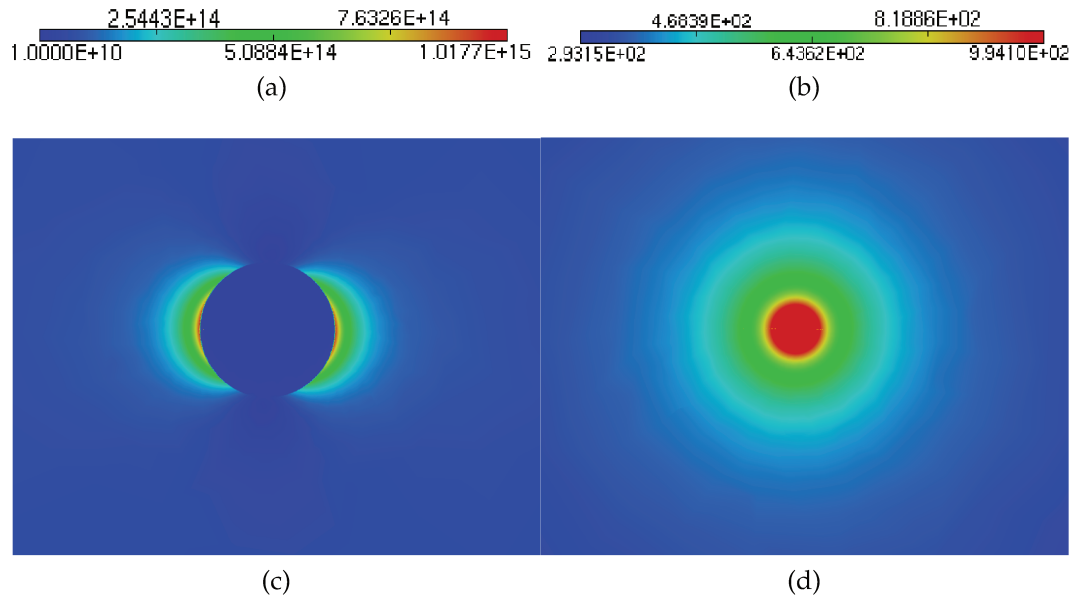


FIGURE 6.8: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ (a), et de la température T (b) après adaptation de maillage.

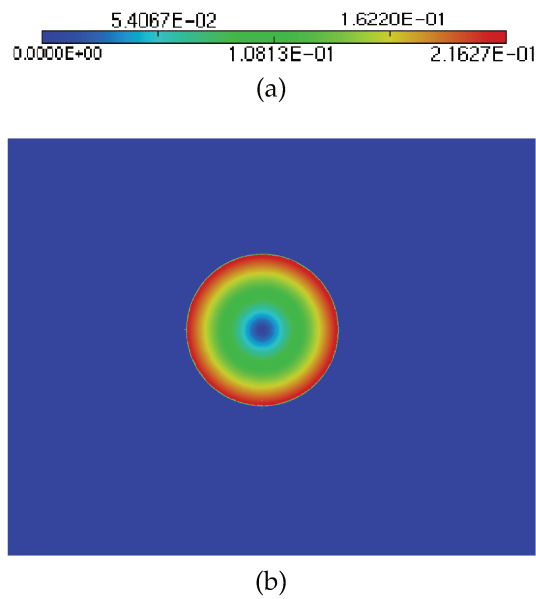


FIGURE 6.9: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition du champ de déplacement $\|U\|$ après adaptation de maillage

6.3 Dilatation d'une nanoantenne : couplage plasmonique sphère-sphère

L'association de deux nanostructures espacées de quelques nanomètres constitue une nanoantenne, dont la fréquence de résonance comme l'élévation de température dépend de la taille de cet espacement (chapitre 6.1). La modification de la distance inter-particulaire provoque une modification des caractéristiques du champ exalté dans la région qui sépare les deux nanoparticules. Dans cette étude, nous considérons deux nanoparticules sphériques d'or de rayon $r = 50$ nm, de distance inter-particulaire $s = 10$ nm, immergées dans l'air et illuminées par une onde plane d'amplitude $E_0 = 1,323.10^6$ V/m (figure 6.10).

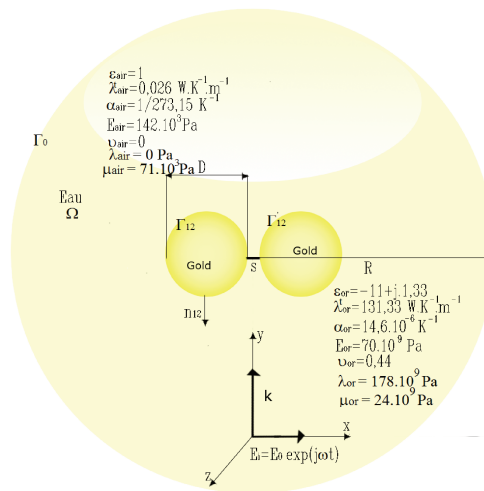


FIGURE 6.10: Représentation d'une nanoantenne illuminée par une onde plane.

Les simulations numériques des problèmes multiphysiques sont effectuées en adoptant les maillages sur les champs physiques ($\|E\|^2$, T et $\|U\|$). Les résultats de l'adaptation des maillages sont illustrés sur la figure 6.11. Le maillage initial et le maillage adapté sur le champ $\|E\|^2$ sont donnés par les figures 6.11(a) et (b). Les maillages finaux adaptés sur la température et la dilatation sont donnés sur les figures 6.11(c) et (d). On pourra les comparer à ceux de l'étude photo-thermique du chapitre 6.1.

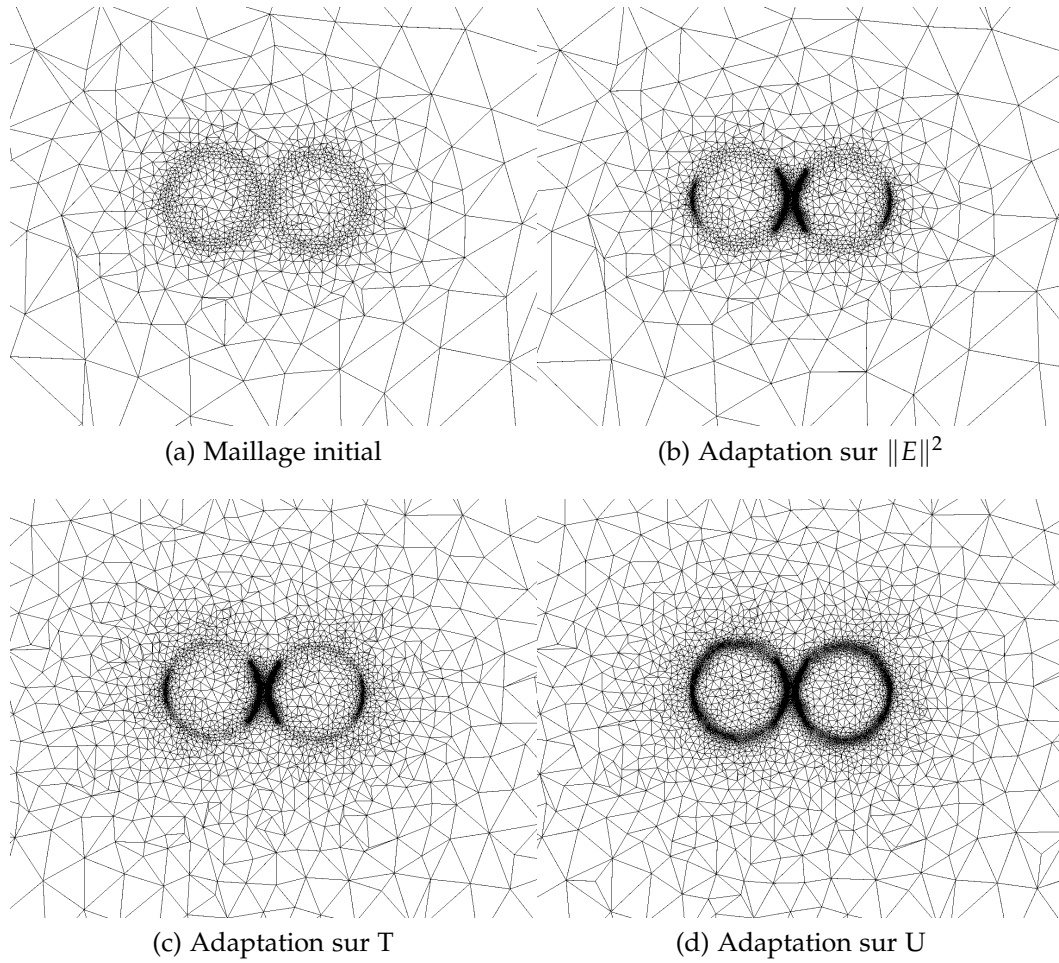


FIGURE 6.11: Zoom des maillages adaptés au voisinage des nanoparticules.

Douze itérations ont été effectuées pour simuler les phénomènes des dilatations thermiques. Les six premières sont effectuées en adaptant le maillage sur le champ électrique $\|\mathbf{E}\|^2$. Pour les itérations de 7 et 8, l'adaptation est réalisée sur la carte d'erreur issue de la température. Pour les itérations de 9 à 12, l'adaptation est effectuée sur les dilatations des nanoparticules.

Le tableau 6.3 illustre les caractéristiques de maillage à chaque itération du processus d'adaptation. La taille minimale des éléments est fixée à 0,8 nm. Ce choix est en relation avec la taille de la particule. L'erreur maximale tolérée sur l'erreur d'interpolation est fixée à 1%.

TABLEAU 6.3: Caractéristiques d’adaptation des maillage pour chaque itération.

Itération de remaillage	0	1	2	3	4	5
Taille h_{min}		0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
Erreur ϵ		0.1	0.05	0.01	0.01	0.01
Nombre des noeuds	20 667	21 568	27 545	114 483	161 064	198 138
Nombre des éléments	120 703	126 155	162 412	690 565	970 286	1 191 887

6	7	8	9	10	11	12
0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
220 530	241 175	255 831	263 491	424 490	701 218	753 118
1 323 830	1 447 530	1 536 500	1 581 477	2 558 361	4 223 848	4 522 038

Les résultats obtenus montre que l’augmentation de la température maximale atteinte par la nanostructure est de 1091°C. Cette élévation de température est cinq fois plus élevée que dans le cas d’une illumination d’une nanoparticule isolée malgré pour une même amplitude de l’onde incidente. Les dilations des nanoparticules est de l’ordre de 1.7 nm (figure 6.13). La distance inter-particulaire est réduite de 17% et passe alors de 10 nm à 8,3 nm. L’effet de cette modification n’est pas négligeable sur le fonctionnement du nanoantenne. En effet, plus la distance inter-particulaire est faible plus le confinement de la lumière est importante.

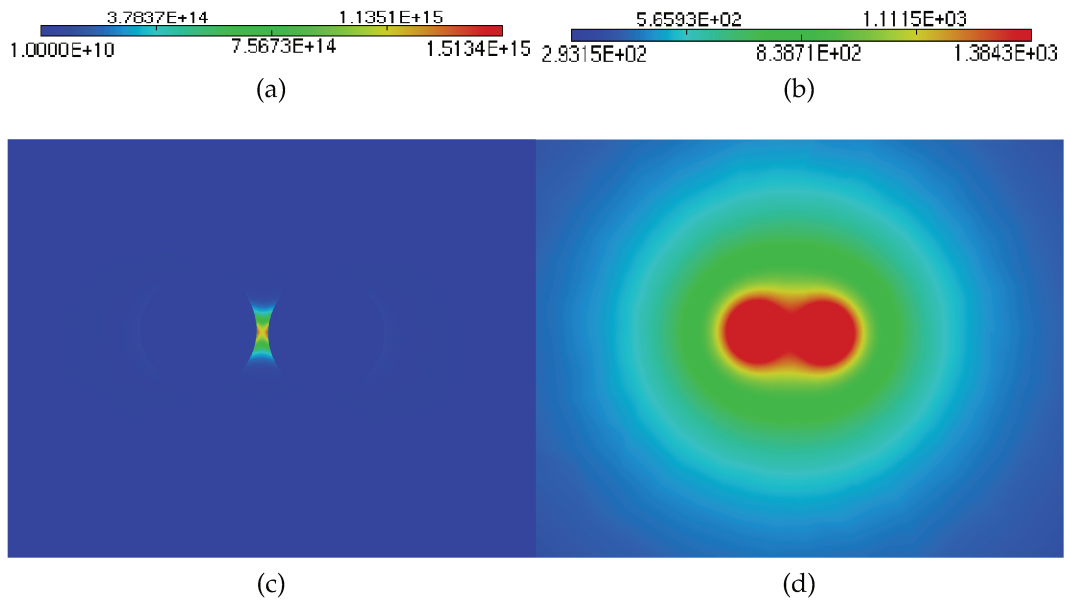


FIGURE 6.12: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition de l'intensité du champ électrique $\|E\|^2$ (a), et de la température T (b) après adaptation de maillage.

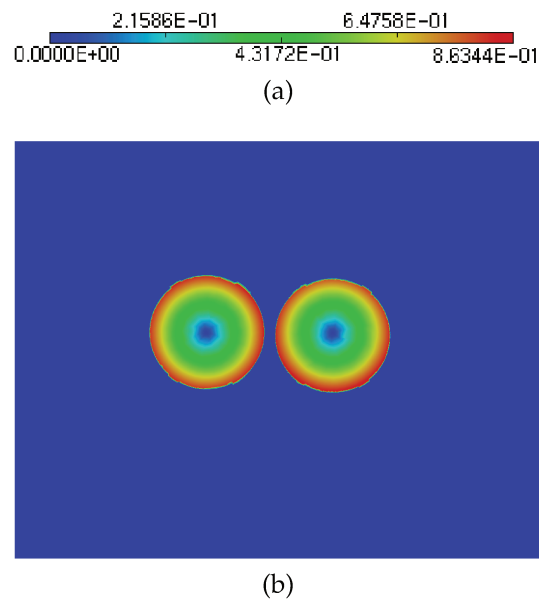


FIGURE 6.13: Coupe selon le plan médian $y = 0$ de la répartition du champ de déplacement U après adaptation de maillage

6.4 Conclusion

Dans ce chapitre, le processus d'adaptation de maillage OPTIFORM a été utilisé pour simuler les dilatations thermiques d'une nanoparticule de différentes tailles. Les calculs nous ont permis d'évaluer l'ordre de grandeur de la dilatation des nanoparticules sous illumination laser. Nous avons choisi des valeurs de puissance laser compatibles avec l'expérience. L'illumination de deux nanoparticules de distance inter-particulaire de 10 nm, peut induire une modification de la géométrie relativement importante (de l'ordre de 17%), consécutive aux élévations de température. La validité et la stabilité de la modélisation 3D d'adaptation de maillage proposé est encourageante et son extension a des applications sur les biocapteurs ou les systèmes NEMS dont la partie sensible est de taille nanométrique.

Conclusion générale

Compte tenu de la diversité des applications des nanoparticules, dans de nombreux secteurs d'activités en particulier les capteurs ou les systèmes physiques dont la partie sensible est nanométrique, la description multiphysique à l'échelle nanométrique des nanoparticules est devenue indispensable pour fiabiliser et optimiser les systèmes.

Cette thèse propose une modélisation et une simulation numérique de la l'influence de l'illumination des nanostructures sur leur température et donc leur dilatation. En effet, cette l'interaction onde-matière et en particulier l'absorption d'énergie électromagnétique induit une élévation de température et engendre des dilatations thermiques qui peuvent avoir des conséquences sur la géométrie des nanostructures ou la fiabilité des systèmes.

La simulation numérique développée dans cette thèse avait pour but d'évaluer non seulement des comportements globaux, des ordres de grandeur mais aussi des valeurs définies. La méthode de raffinement disponible dans les logiciels éléments finis commerciaux comme Comsol Multiphysics a montré son incapacité à atteindre ce but. Aussi un logiciel de remaillage, utilisant les grandeurs physiques calculées a posteriori pour remailler (OPTIFORM) a-t-il été interfacé avec Comsol. Cette technique d'adaptation de maillage est basée sur un estimateur d'erreur d'interpolation *a posteriori* et une technique de génération de maillage de type h-adaptation a été adoptée. L'estimateur d'erreur permet d'estimer les zones de fortes variations des champs physiques et de générer une carte de taille physique. A la base de cette carte de taille, la méthode de génération des maillages permet de contrôler la taille des éléments en utilisant les méthodes frontale de Delaunay modifié. Après optimisation des paramètres de remaillage, l'utilisation de cette méthode a permis de résoudre des problèmes non accessibles avec la version classique du solveur. En particulier, le champ électrique au voisinage d'une sphère d'or a été calculé en contrôlant la précision du calcul et comparé à la solution analytique de la théorie de Mie. L'influence des conditions de bord a également été étudiée pour évaluer la taille du domaine de calcul. L'élévation de température a été également calculée et finalement la dilatation, dans une approche faiblement couplée. Différentes cibles ont été utilisées dans le processus de remaillage et discutées, en lien avec la mémoire vive nécessaire à la résolution et le temps de calcul.

La méthode de remaillage adaptatif a permis de détecter les effets des petits angles dans la jonction entre deux facettes dans les nanoparticules d'or. Un angle de 5° entre deux facettes adjacentes a augmenté la valeur de l'intensité du champ électrique de 23%.

L'étude spécifique de nanoantennes a permis de corriger une loi de comportement qui permet d'évaluer l'élévation de température d'une nanonantenne en fonc-

tion de ses caractéristiques géométriques. Avec la modélisation multiphysique des interactions électro-thermique couplé, nous avons mis en place une fonction permettant de relier l'élévation de température en fonction de distance inter-particulaire et de la taille des particules. Des dilatations non négligeables ont été calculées à partir d'un éclairage par onde plane assez intense. Elles ont pour conséquence de modifier l'intervalle entre les deux nanostructures et pourrît dérégler la nanonantenne.

L'approche numérique que nous proposons peut être appliquée à des géométries et des structures complexes pour d'autres applications. On peut citer l'application aux capteurs biologiques ou aux systèmes électromécaniques nanométriques **NEMS**. Une validation de l'approche numérique par des confrontations aux résultats expérimentaux serait utile. La modélisation multiphysique basée sur un couplage fort entre les trois phénomènes physique electro-thermo-mécanique serait une perspective intéressante mais compliquée probablement par le choix nécessaire d'un solveur adapté. Des pistes d'amélioration ont été proposées, afin de tenir compte de la taille nanométrique des objets dans la partie modélisation.

Première partie

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographie

- [1] C.-H. KUO, T.-F. CHIANG, L.-J. CHEN et M. H. HUANG, « Synthesis of highly faceted pentagonal- and hexagonal-shaped gold nanoparticles with controlled sizes by sodium dodecyl sulfate », *Langmuir*, vol. 20, no. 18, p. 7820–7824, 2004. (Cité dans les pages [viii](#), [3](#), [85](#), et [86](#).)
- [2] A. O. GOVOROV et H. H. RICHARDSON, « Generating heat with metal nanoparticles », *Nano Today*, vol. 2, no. 1, p. 30 – 38, 2007. (Cité dans les pages [1](#), [16](#), [34](#), et [101](#).)
- [3] Z. FANG, Y.-R. ZHEN, O. NEUMANN, A. POLMAN, F. J. G. de ABAJO, P. NORDLANDER et N. J. HALAS, « Evolution of light-induced vapor generation at a liquid-immersed metallic nanoparticle », *Nano Letters*, vol. 13, no. 4, p. 1736–1742, 2013. (Cité dans les pages [1](#) et [101](#).)
- [4] A. O. GOVOROV, W. ZHANG, T. SKEINI, H. RICHARDSON, J. LEE et N. A. KOTOV, « Gold nanoparticle ensembles as heaters and actuators : melting and collective plasmon resonances », *Nanoscale Research Letters*, vol. 1, no. 1, p. 84–90, 2006. (Cité dans les pages [1](#) et [101](#).)
- [5] G. BAFFOU et H. RIGNEAULT, « Femtosecond-pulsed optical heating of gold nanoparticles », *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 035415, Jul 2011. (Cité dans les pages [1](#) et [101](#).)
- [6] G. BAFFOU et R. QUIDANT, « Thermo-plasmonics : using metallic nanostructures as nano-sources of heat », *Laser & Photonics Reviews*, vol. 7, no. 2, p. 171–187, 2013. (Cité dans les pages [1](#), [16](#), [34](#), [101](#), et [102](#).)
- [7] T. GROSGES, D. BARCHIESI, S. KESSENTINI, G. GRÉHAN et M. L. de la CHAPELLE, « Nanoshells for photothermal therapy : a monte-carlo based numerical study of their design tolerance », *Biomed. Opt. Express*, vol. 2, p. 1584–1596, Jun 2011. (Cité dans les pages [1](#) et [115](#).)
- [8] S. KESSENTINI et D. BARCHIESI, « Quantitative comparison of optimized nanorods, nanoshells and hollow nanospheres for photothermal therapy », *Biomed. Opt. Express*, vol. 3, p. 590–604, Mar 2012. (Cité dans les pages [1](#), [85](#), et [102](#).)
- [9] M. HU, J. CHEN, Z.-Y. LI, L. AU, G. V. HARTLAND, X. LI, M. MARQUEZ et Y. XIA, « Gold nanostructures : engineering their plasmonic properties for biomedical applications », *Chem. Soc. Rev.*, vol. 35, p. 1084–1094, 2006. (Cité dans les pages [1](#) et [101](#).)
- [10] G. BAFFOU, R. QUIDANT et C. GIRARD, « Heat generation in plasmonic nanostructures : Influence of morphology », *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 15, p. –, 2009. (Cité dans les pages [1](#), [8](#), et [34](#).)
- [11] J. CHEN, B. WILEY, Z.-Y. LI, D. CAMPBELL, F. SAEKI, H. CANG, L. AU, J. LEE, X. LI et Y. XIA, « Gold nanocages : Engineering their structure for biomedical applications », *Advanced Materials*, vol. 17, no. 18, p. 2255–2261, 2005. (Cité dans les pages [1](#) et [102](#).)
- [12] A. M. GOBIN, D. P. O'NEAL, D. M. WATKINS, N. J. HALAS, R. A. DREZEK et J. L. WEST, « Near infrared laser-tissue welding using nanoshells as an exogenous absorber », *Lasers in Surgery and Medicine*, vol. 37, no. 2, p. 123–129, 2005. (Cité dans les pages [2](#) et [102](#).)

- [13] A. G. SKIRTACH, C. DEJUGNAT, D. BRAUN, A. S. SUSHA, A. L. ROGACH, W. J. PARAK, H. MÄÜHWALD et G. B. SUKHORUKOV, « The role of metal nanoparticles in remote release of encapsulated materials », *Nano Letters*, vol. 5, no. 7, p. 1371–1377, 2005. (Cité dans les pages 2 et 102.)
- [14] P. CHERUKURI, E. S. GLAZER et S. A. CURLEY, « Targeted hyperthermia using metal nanoparticles », *Advanced Drug Delivery Reviews*, vol. 62, no. 3, p. 339 – 345, 2010. (Cité dans les pages 2 et 102.)
- [15] C. JIANRONG, M. YUQING, H. NONGYUE, W. XIAOHUA et L. SIJIAO, « Nanotechnology and biosensors », *Biotechnology Advances*, vol. 22, no. 7, p. 505 – 518, 2004. (Cité dans les pages 2 et 145.)
- [16] E. KREMER, *Modélisation numérique des dilatations thermiques dans les micro- et nano-structures*. Thèse doctorat, Université de technologie de Troyes, 2009. 2009TROY0035. (Cité dans les pages 2, 4, 35, 102, et 145.)
- [17] S. KESSENTINI, *Modélisation et optimisation de nanostructures plasmoniques : applications biomédicales*. Thèse doctorat, Université de technologie de Troyes, 2012. 2012TROY0024. (Cité dans les pages 2 et 102.)
- [18] F. MEZGHANI, D. BARCHIESI, A. CHEROUAT, T. GROSGES et H. BOROUCHAKI, « Computation of the field enhancement by small facet angles of metallic nanoparticles : Adaptive remeshing for finite element method », in *Progress In Electromagnetics Research Symposium Proceedings PIERS 2014 Guangzhou*, (Cambridge), p. 509–513, The Electromagnetics Academy, 2014. (Cité dans les pages 3, 86, et 100.)
- [19] A. FOX, *Optical Properties of Solids*. Oxford master series in condensed matter physics, Oxford University Press, 2001. (Cité dans la page 8.)
- [20] N. J. HOGAN, A. S. URBAN, C. AYALA-OROZCO, A. PIMPINELLI, P. NORDLANDER et N. J. HALAS, « Nanoparticles heat through light localization », *Nano Letters*, vol. 14, no. 8, p. 4640–4645, 2014. (Cité dans la page 8.)
- [21] S. HOUARD et L. DETTWILLER, *Optique : Une approche expérimentale et pratique*. Physique générale, De Boeck Supérieur, 2011. (Cité dans la page 8.)
- [22] D. BARCHIESI, T. GROSGES, E. KREMER et M. LAMY DE LA CHAPELLE, « Electromagnetic heat-induced in meso-structures : Computation of temperature in metallic dimers », *PIERS Online*, vol. 7, no. 5, p. 406–410, 2011. (Cité dans les pages 8 et 34.)
- [23] V. W.-W. YAM et E. C.-C. CHENG, « Highlights on the recent advances in gold chemistry-a photophysical perspective », *Chem. Soc. Rev.*, vol. 37, p. 1806–1813, 2008. (Cité dans la page 8.)
- [24] S. GAPONENKO, *Introduction to Nanophotonics*. Introduction to Nanophotonics, Cambridge University Press, 2010. (Cité dans les pages 8, 15, 16, et 34.)
- [25] Z. ZHANG, *Nano/Microscale Heat Transfer*. McGraw Hill professional, McGraw-Hill Education, 2007. (Cité dans les pages 8, 25, 26, 28, et 30.)
- [26] S. MAIER, *Plasmonics : Fundamentals and Applications*. Springer US, 2010. (Cité dans les pages 8 et 16.)
- [27] D. BARCHIESI AND M. LAMY DE LA CHAPELLE, *Ondes et matière : Physique de la Matière, Électromagnétisme, interactions rayonnement-matière*. Technosup, Paris : Ellipses, 1 éd., 2007. (Cité dans les pages 8 et 15.)

- [28] J. JIN, *The Finite Element Method in Electromagnetics*. A Wiley-Interscience publication, Wiley, 2002. (Cité dans les pages 12, 50, 51, 56, 57, et 102.)
- [29] T. MYINT-U et L. DEBNATH, *Linear Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*. Birkhäuser, 2007. (Cité dans la page 12.)
- [30] L. G. SHULTZ, « The optical constants of silver, gold, copper and aluminum. I. the absorption coefficient k », *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 44, no. 5, p. 357–362, 1954. (Cité dans la page 15.)
- [31] L. G. SHULTZ et F. R. TANGHERLINI, « The optical constants of silver, gold, copper and aluminum. II. the index of refraction n », *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 44, no. 5, p. 362–368, 1954. (Cité dans la page 15.)
- [32] P. B. JOHNSON et R. W. CHRISTY, « Optical constants of the noble metals », *Phys. Rev. B*, vol. 6, no. 12, p. 4370–4379, 1972. (Cité dans les pages 15, 24, et 111.)
- [33] M. A. ORDAL, L. L. LONG, R. J. BELL, S. E. BELL, R. R. BELL, R. W. ALEXANDER et C. A. WARD, « Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared », *Applied Optics*, vol. 22, no. 7, p. 1099–1118, 1983. (Cité dans la page 15.)
- [34] E. D. PALIK, *Handbook of Optical Constants*. San Diego USA : Academic Press Inc., 1985. (Cité dans les pages 15 et 111.)
- [35] A. VIAL, A.-S. GRIMAULT, D. MACIAS, D. BARCHIESI et M. LAMY DE LA CHAPELLE, « Improved analytical fit of gold dispersion : Application to the modeling of extinction spectra with a finite-difference time-domain method », *Phys. Rev. B*, vol. 71, no. 8, p. 085416–085423, 2005. (Cité dans la page 15.)
- [36] A. VIAL et T. LAROCHE, « Description of dispersion of metals by means of the critical points model and application to the study of resonant structures using the FDTD method », *J. Phys. D : Appl. Phys.*, vol. 40, p. 7152–7158, 2007. (Cité dans la page 15.)
- [37] A. VIAL et T. LAROCHE, « Comparison of gold and silver dispersion laws suitable for FDTD simulations », *Appl. Phys. B*, vol. 93, p. 139–143, 2008. (Cité dans la page 15.)
- [38] A. VIAL, T. LAROCHE, M. DRIDI et L. LE CUNFF, « A new model of dispersion for metals leading to a more accurate modeling of plasmonic structures using the FDTD method », *Appl. Phys. A : Mater.*, vol. 103, p. 849–853, 2011. (Cité dans la page 15.)
- [39] D. BARCHIESI et T. GROSGES, « Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium, and aluminum in the visible bandwidth », *J. Nanophoton.*, vol. 8, no. 1, p. 089996 (083097), 2014. (Cité dans la page 15.)
- [40] D. BARCHIESI et T. GROSGES, « Errata : Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium, and aluminum in the visible bandwidth », *J. Nanophoton.*, vol. 8, no. 1, p. 089996, 2015. (Cité dans la page 15.)
- [41] P. G. ETCHEGOIN, E. C. LE RU et M. MEYER, « An analytic model for the optical properties of gold », *The Journal of Chemical Physics*, vol. 125, no. 16, 2006. (Cité dans la page 15.)
- [42] T. LAROCHE, A. VIAL et M. ROUSSEY, « Crystalline structure's influence on the near-field optical properties of single plasmonic nanowires », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, p. 123101–1–123101–3, 2007. (Cité dans la page 15.)

- [43] D. BARCHIESI, « The Lycurgus cup : inverse problem using photographs for characterization of matter », *J. Optical Society of America A*, vol. 32, no. 8, p. 1544–1555, 2015. (Cité dans les pages 16 et 115.)
- [44] J. H. HODAK, A. HENGLEIN et G. V. HARTLAND, « Size dependent properties of au particles : Coherent excitation and dephasing of acoustic vibrational modes », *The Journal of Chemical Physics*, vol. 111, no. 18, p. 8613–8621, 1999. (Cité dans la page 16.)
- [45] M. HU, J. CHEN, Z.-Y. LI, L. AU, G. V. HARTLAND, X. LI, M. MARQUEZ et Y. XIA, « Gold nanostructures : engineering their plasmonic properties for biomedical applications », *Chem. Soc. Rev.*, vol. 35, p. 1084–1094, 2006. (Cité dans les pages 17, 18, et 85.)
- [46] D. BARCHIESI, E. KREMER, V. P. MAI et T. GROSGES, « A Poincaré’s approach for plasmonics : The plasmon localization », *J. Microscopy*, vol. 229, no. 2, p. 525–532, 2008. (Cité dans la page 17.)
- [47] D. BARCHIESI, « A classroom theory of the surface plasmon polariton », *Eur. J. Phys.*, vol. 33, no. 5, p. 1345–1357, 2012. (Cité dans la page 17.)
- [48] D. BARCHIESI et A. OTTO, « Excitations of surface plasmon polaritons by attenuated total reflection, revisited », *La Rivista del Nuovo Cimento*, vol. 36, no. 5, p. 173–209, 2013. (Cité dans la page 17.)
- [49] C. BOHREN et D. HUFFMAN, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley Science Series, Wiley, 2008. (Cité dans les pages 18, 19, 20, 21, 22, 23, et 24.)
- [50] W. WISCOMBE, N. C. for ATMOSPHERIC RESEARCH (U.S.). ATMOSPHERIC ANALYSIS, P. DIVISION et N. S. F. (U.S.), *Mie Scattering Calculations : Advances in Technique and Fast, Vector-speed Computer Codes*. NCAR technical note, National Technical Information Service, U.S. Department of Commerce, 1979. (Cité dans la page 23.)
- [51] T. GROSGES, H. BOROUCHAKI et D. BARCHIESI, « Improved scheme for accurate computation of high electric near-field gradients », *Optics Express*, vol. 15, no. 3, p. 1307–1321, 2007. (Cité dans la page 24.)
- [52] T. BERGMAN, A. LAVINE et F. INCROPERA, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 7th Edition. John Wiley & Sons, 2011. (Cité dans les pages 25, 26, 28, et 31.)
- [53] S. VOLZ, éd., *Microscale and Nanoscale Heat Transfer*, vol. 107 in *Topics in Applied Physics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. (Cité dans les pages 25 et 32.)
- [54] O. MARTYNENKO et P. KHRAMTSOV, *Free-Convective Heat Transfer : With Many Photographs of Flows and Heat Exchange*. Springer Berlin Heidelberg, 2005. (Cité dans les pages 25 et 28.)
- [55] T. TRITT, *Thermal Conductivity : Theory, Properties, and Applications*. Physics of Solids and Liquids, Springer US, 2006. (Cité dans la page 25.)
- [56] A. BIANCHI, Y. FAUTRELLE et J. ETAY, *Transferts thermiques*. Collection de l’Agence universitaire de la Francophonie, Presses polytechniques et universitaires romandes, 2004. (Cité dans les pages 25 et 26.)
- [57] A. GIOVANNINI ET B. BÉDAT, *Transfert de chaleur*. Toulouse : CEPAD - CAILpadués-Editions, 1 éd., 2004. (Cité dans les pages 25, 26, 29, 30, et 36.)
- [58] G. BAFFOU, R. QUIDANT et F. J. García de ABAJO, « Nanoscale control of optical heating in complex plasmonic systems », *ACS Nano*, vol. 4, no. 2, p. 709–716, 2010. (Cité dans les pages 25 et 34.)

- [59] P. WARRIER et A. TEJA, « Effect of particle size on the thermal conductivity of nanofluids containing metallic nanoparticles », *Nanoscale Research Letters*, vol. 6, no. 1, p. 247, 2011. (Cité dans les pages 25 et 26.)
- [60] E. H. SONDEHEIMER, « The mean free path of electrons in metals », *Advances in Physics*, vol. 50, no. 6, p. 499–537, 2001. (Cité dans la page 26.)
- [61] W. S. AMATO et T. CHI, « Free convection heat transfer from isothermal spheres in water », *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 15, no. 2, p. 327 – 339, 1972. (Cité dans la page 28.)
- [62] L. PIERRE-YVES, « Le coefficient d'échange h ». (Cité dans les pages 29, 35, 36, et 74.)
- [63] L. PIERRE-YVES, « Le coefficient d'échange, son importance dans les transferts thermiques : la conduction. ». (Cité dans les pages 29 et 35.)
- [64] O. EKICI, R. K. HARRISON, N J DURR, D S EVERSOLE, M LEE AND A BEN-YAKAR, « Thermal analysis of gold nanorods heated with femtosecond laser pulses », *Journal of Physics D : Applied Physics*, vol. 41, no. 18, p. 185501, 2008. (Cité dans la page 34.)
- [65] A. CLELAND, *Foundations of Nanomechanics : From Solid-State Theory to Device Applications*. Advanced Texts in Physics, Springer, 2002. (Cité dans les pages 38 et 39.)
- [66] C. BACON et J. POUYET, *Mécanique des solides déformables*. Hermes Science Publications, 2000. (Cité dans les pages 38, 42, et 45.)
- [67] J. SALENÇON, *Mécanique des milieux continus : Thermoélasticité*. Mécanique (Les éditions de l'École Polytechnique), L'École polytechnique, 2007. (Cité dans les pages 38 et 44.)
- [68] S. FOREST et M. AMESTOY, *Mécanique des milieux continus*. Presses de l'École des Mines, 2008. (Cité dans la page 38.)
- [69] H. PETROVA, J. PEREZ-JUSTE, Z. ZHANG, J. ZHANG, T. KOSEL et G. V. HARTLAND, « Crystal structure dependence of the elastic constants of gold nanorods », *J. Mater. Chem.*, vol. 16, p. 3957–3963, 2006. (Cité dans la page 39.)
- [70] H. PETROVA, C.-H. LIN, M. HU, J. CHEN, A. R. SIEKKINEN, Y. XIA, J. E. SADER et G. V. HARTLAND, « Vibrational response of Au-Ag nanoboxes and nanocages to ultrafast laser-induced heating », *Nano letters*, p. 1059–1063, 2007. (Cité dans la page 39.)
- [71] Y. MESHCHERYAKOV et N. BULGAKOVA, « Thermoelastic modeling of microbump and nanojet formation on nanosize gold films under femtosecond laser irradiation », *Applied Physics A*, vol. 82, no. 2, p. 363–368, 2006. (Cité dans la page 39.)
- [72] J. SCHIOTZ, T. VEGGE et K. W. JACOBSEN, « Atomic-scale modeling of the deformation of nanocrystalline metals », in *Symposium J – Multiscale Modelling of Materials*, vol. 538 in *MRS Proceedings*, 1998. (Cité dans la page 39.)
- [73] A. MATHUR et J. ERLEBACHER, « Size dependence of effective Young's modulus of nanoporous gold », *Applied Physics Letters*, vol. 90, no. 6, p. –, 2007. (Cité dans les pages 39 et 46.)
- [74] J.-M. ZHANG, Y. ZHANG et K.-W. XU, « Dependence of stresses and strain energies on grain orientations in {FCC} metal films », *Journal of Crystal Growth*, vol. 285, no. 3, p. 427 – 435, 2005. (Cité dans la page 39.)
- [75] H. PETROVA, J. PEREZ JUSTE, I. PASTORIZA-SANTOS, G. V. HARTLAND, L. M. LIZMARZAN et P. MULVANEY, « On the temperature stability of gold nanorods : comparison between thermal and ultrafast laser-induced heating », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 8, p. 814–821, 2006. (Cité dans la page 46.)

- [76] H. JURIY, *Concept de la détection micromécanique sur base de la résonance de plasmons de surface*. Thèse doctorat, Université de Liège, 2009. (Cité dans la page 46.)
- [77] R. LEWIS, P. NITHIARASU et K. SEETHARAMU, *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. Wiley, 2008. (Cité dans les pages 50 et 51.)
- [78] H. D. ., *Fundamentals of Finite Element Analysis*. McGraw-Hill, 2004. (Cité dans les pages 50 et 57.)
- [79] T. GROSGES, H. BOROUCAKI et D. BARCHIESI, « Improved scheme for accurate computation of high electric near-field gradients », *Opt. Express*, vol. 15, p. 1307–1321, Feb 2007. (Cité dans la page 64.)
- [80] H. B. PAUL-LOUIS GEORGE, *Triangulation de Delaunay et maillage : applications aux éléments finis*. Hermes science, 06/1997. (Cité dans les pages 71, 72, et 74.)
- [81] H. BOROUCAKI, *Maillage adaptatif : applications aux éléments finis*. Habilitation à diriger des recherches en mathématiques, Université Paris 6, Janvier 1997. (Cité dans les pages 74 et 76.)
- [82] P. LAUG, *Contribution à la génération automatique de maillages de qualité pour la simulation numérique*. Habilitation à diriger des recherches en mathématiques, Université Paris 6, Mars 2006. (Cité dans la page 74.)
- [83] D. par PAUL-LOUIS GEORGE., *Maillage et adaptation*. Hermes science, 12/10/2001. (Cité dans les pages 75, 79, 83, et 88.)
- [84] H. BOROUCAKI, T. GROSGES et D. BARCHIESI, « Improved 3d adaptive remeshing scheme applied in high electromagnetic field gradient computation », *Finite Elements in Analysis and Design*, vol. 46, no. 1, p. 84 – 95, 2010. (Cité dans les pages 77, 83, et 102.)
- [85] H. BOROUCAKI, T. GROSGES et D. BARCHIESI, « Enhancement of the accuracy of numerical field computation using an adaptive three-dimensional remeshing scheme », *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 338, no. 3, p. 127 – 131, 2010. (Cité dans les pages 77, 82, et 88.)
- [86] T. GROSGES, H. BOROUCAKI et D. BARCHIESI, « Three dimensional adaptive meshing scheme applied to the control of the spatial representation of complex field pattern in electromagnetics », *Applied Physics B*, vol. 101, no. 4, p. 883–889, 2010. (Cité dans la page 77.)
- [87] S. J. ZHU, A. CHEROUAT, H. BOROUCAKI et X. L. GONG, « 3d remeshing simulation of aluminum foams behavior under static load », *Advanced Materials Research*, vol. 1099, p. 17–24, 2015. (Cité dans les pages 77 et 88.)
- [88] X. WANG et D. W. PEPPER, « hp-adaptive finite element simulations of viscous flow including convective heat transfer », *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, vol. 51, no. 6, p. 491–513, 2007. (Cité dans les pages 77, 78, et 88.)
- [89] R. VERFURTH., *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques*. Wiley-Teubner, 1996. (Cité dans les pages 78, 79, 89, et 90.)
- [90] B. LIU, J. XIE, J. Y. LEE, Y. P. TING et J. P. CHEN, « Optimization of high-yield biological synthesis of single-crystalline gold nanoplates », *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 109, no. 32, p. 15256–15263, 2005. (Cité dans la page 85.)

- [91] M.-C. DANIEL et D. ASTRUC, « Gold nanoparticles : Assembly, supramolecular chemistry, quantum-size-related properties, and applications toward biology, catalysis, and nanotechnology », *Chem. Rev.*, vol. 104, p. 293–346, 2004. (Cité dans la page 85.)
- [92] T. COUPEZ, *Estimation a posteriori, adaptation de maillage*. (Cité dans la page 89.)
- [93] COMSOL, *The Adaptive Mesh Refinement Solver in the COMSOL API Reference Manual*. (Cité dans la page 90.)
- [94] N. HARRIS, M. J. FORD et M. B. CORTIE, « Optimization of plasmonic heating by gold nanospheres and nanoshells », *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 110, no. 22, p. 10701–10707, 2006. (Cité dans la page 101.)
- [95] S. KESSENTINI et D. BARCHIESI, « Quantitative comparison of optimized nanorods, nanoshells and hollow nanospheres for photothermal therapy », *Biomed. Opt. Express*, vol. 3, p. 590–604, Mar 2012. (Cité dans les pages 102 et 124.)
- [96] D. BARCHIESI, E. KREMER, A. CHEROUAT, T. GROSGES et H. BOROUCHAKI, « Dilation of nanonantennas induced by an electromagnetic source », *Advanced Electromagnetics (AEM)*, vol. 1, no. 2, 2012. (Cité dans les pages 102 et 103.)
- [97] A. KHAMAYSEH et V. de ALMEIDA, « Adaptive hybrid mesh refinement for multiphysics applications », *Journal of Physics : Conference Series*, vol. 78, no. 1, p. 012039, 2007. (Cité dans la page 102.)
- [98] D. BARCHIESI et T. GROSGES, « Errata : Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium and aluminum in the visible bandwidth », *Journal of Nanophotonics*, vol. 8, no. 1, p. 089996, 2015. (Cité dans la page 111.)
- [99] D. BARCHIESI, « Numerical retrieval of thin aluminium layer properties from spr experimental data », *Opt. Express*, vol. 20, p. 9064–9078, Apr 2012. (Cité dans la page 115.)
- [100] S. H. KWON, « Plasmonic ruler with angstrom distance resolution based on double metal blocks », *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 25, p. 1619–1622, Aug 2013. (Cité dans la page 127.)
- [101] D. P. FROMM, A. SUNDARAMURTHY, P. J. SCHUCK, G. KINO et W. E. MOERNER, « Gap-dependent optical coupling of single bowtie nanoantennas resonant in the visible », *Nano Letters*, vol. 4, no. 5, p. 957–961, 2004. (Cité dans la page 127.)
- [102] P. K. JAIN et M. A. EL-SAYED, « Plasmonic coupling in noble metal nanostructures », *Chemical Physics Letters*, vol. 487, no. 4–6, p. 153 – 164, 2010. (Cité dans la page 127.)
- [103] J. P. CAMDEN, J. A. DIERINGER, J. ZHAO et R. P. V. DUYNE, « Controlled plasmonic nanostructures for surface-enhanced spectroscopy and sensing », *Accounts of Chemical Research*, vol. 41, no. 12, p. 1653–1661, 2008. (Cité dans la page 127.)
- [104] P. K. JAIN, W. HUANG et M. A. EL-SAYED, « On the universal scaling behavior of the distance decay of plasmon coupling in metal nanoparticle pairs : A plasmon ruler equation », *Nano Letters*, vol. 7, no. 7, p. 2080–2088, 2007. (Cité dans les pages 127 et 138.)
- [105] P. NORDLANDER, C. OUBRE, E. PRODAN, K. LI et M. I. STOCKMAN, « Plasmon hybridization in nanoparticle dimers », *Nano Letters*, vol. 4, no. 5, p. 899–903, 2004. (Cité dans la page 127.)

- [106] H. CHA, D. LEE, J. H. YOON et S. YOON, « Plasmon coupling between silver nanoparticles : Transition from the classical to the quantum regime », *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 464, p. 18 – 24, 2016. (Cité dans la page 127.)
- [107] S. MARHABA, *Influence of the morphology on the optical properties of single metallic nano-objects*. Theses, Université Claude Bernard - Lyon I, nov. 2008. (Cité dans les pages 127 et 128.)
- [108] B. M. REINHARD, M. SIU, H. AGARWAL, A. P. ALIVISATOS et J. LIPHARDT, « Calibration of dynamic molecular rulers based on plasmon coupling between gold nanoparticles », *Nano Letters*, vol. 5, no. 11, p. 2246–2252, 2005. (Cité dans la page 128.)
- [109] W. ZHANG, Q. LI et M. QIU, « A plasmon ruler based on nanoscale photothermal effect », *Opt. Express*, vol. 21, p. 172–181, Jan 2013. (Cité dans les pages 128, 138, 139, et 141.)
- [110] R. B. M., S. S., M. A., A. A. P. et L. J., « Use of plasmon coupling to reveal the dynamics of dna bending and cleavage by single ecorv restriction enzymes », *Proc Natl Acad Sci U S A.*, no. 8, p. 2667–72, 2007. (Cité dans la page 128.)
- [111] P. K. JAIN, W. HUANG et M. A. EL-SAYED, « On the universal scaling behavior of the distance decay of plasmon coupling in metal nanoparticle pairs : A plasmon ruler equation », *Nano Letters*, vol. 7, no. 7, p. 2080–2088, 2007. (Cité dans la page 128.)
- [112] A. CHAARI, T. GROSGES, L. GIRAUD-MOREAU et D. BARCHIESI, « Nanobubble evolution around nanowire in liquid », *Opt. Express*, vol. 21, p. 26942–26954, Nov 2013. (Cité dans la page 142.)
- [113] D. W. MARQUARDT, « An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters », *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 11, no. 2, p. 431–441, 1963. (Cité dans la page 142.)

Fadhil MEZGHANI

Doctorat : Matériaux, Mécanique, Optique et Nanotechnologie

Année 2016

Modélisation multiphysique de structures nanométriques résonantes

La simulation multiphysique de l'interaction rayonnement-matière, des effets thermiques et mécaniques induits dans un matériau nanostructuré à un intérêt notamment lorsqu'il s'agit d'élaborer des capteurs voire de les optimiser. En effet, les effets thermiques peuvent être utilisés pour des applications chimiques ou biologiques et les dilatations mécaniques peuvent influencer sur la durabilité du capteur et sur son efficacité.

A l'échelle nanométrique, les longueurs caractéristiques des effets thermo-électro-magnétique-mécaniques ne sont pas du même ordre de grandeur et la simulation éléments finis doit être adaptée à chaque problème avec un contrôle adapté à l'erreur de la solution physique. Une procédure utilisant un remaillage adaptatif 3D Optiform et Comsol Multiphysics permet une relaxation du maillage ou un raffinement adapté afin d'accélérer la résolution (RAM et CPU) et améliorer la solution physique.

Des simulations numériques des nano-objets de formes simples et des nanoantennes pour lesquelles l'exaltation du champ électromagnétique est localisée dans des zones de quelques nanomètres, alors que le gradient de température est beaucoup plus homogène dans le domaine de calcul et les dilatations sont nanométriques sont effectuées.

Mots clés : physique mathématique - modèles mathématiques- électromagnétisme - éléments finis, méthode des - nanotechnologie - thermique – mécanique – calcul adaptatif.

Multiphysics Modeling of Resonant Nanostructures

Multiphysics simulation of light-matter interaction, induced temperature and dilation in nanostructures is of interest especially when it comes to develop or optimize sensors. Indeed, thermal effects can be used for chemical or biological applications, and mechanical dilation can affect the durability of the sensor and its effectiveness.

However, the characteristic lengths of electromagnetic fields, temperature and dilation are not of the same magnitude and the mesh used in a finite element multiphysics model must be adapted to each problem.

An efficient numerical model for controlling the error in the computational domain is necessary while allowing the relaxation or the refinement of the mesh, in order to decrease the computational time and memory.

The purpose of this thesis is to show that the adaptation loop of the mesh for solving a multiphysics 3D problem using Comsol Multiphysics in OPTIFORM mesher, based on the error estimation of the physical solution, is more efficient than a conventional remeshing process.

The proposed procedure is applied to simulate nano-objects with simple shapes and to nanoantennas for which the confinement of the electromagnetic field is localized on a few nanometers, while the gradient of the temperature is much smoother in the computational domain but leading to nanoscale dilation.

Keywords: mathematical physics - mathematical models - electromagnetism - finite element method - nanoscience - heat engineering - mechanics - adaptive computation.

Thèse réalisée en partenariat entre :



Ecole Doctorale "Sciences et Technologies"