PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Étude des contraintes thermomécaniques dans les revêtements multicouches utilisés en optique
Auteur: Author:	Frédérik Poitevin
Date:	2018
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Poitevin, F. (2018). Étude des contraintes thermomécaniques dans les revêtements multicouches utilisés en optique [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/3037/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/3037/
Directeurs de recherche: Advisors:	Ludvik Martinu, & Jolanta-Ewa Sapieha
Programme: Program:	Génie physique

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉTUDE DES CONTRAINTES THERMOMÉCANIQUES DANS LES REVÊTEMENTS MULTICOUCHES UTILISÉS EN OPTIQUE

FRÉDÉRIK POITEVIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE PHYSIQUE)
MARS 2018

© Frédérik Poitevin, 2018.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

ÉTUDE DES CONTRAINTES THERMOMÉCANIQUES DANS LES REVÊTEMENTS MULTICOUCHES UTILISÉS EN OPTIQUE

présenté par : POITEVIN Frédérik
en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. ROCHEFORT Alain, Doctorat, président
M. MARTINU Ludvik, Ph. D., membre et directeur de recherche
Mme KLEMBERG-SAPIEHA Jolanta-Ewa, Doctorat, membre et codirectrice de recherche
M. PETER Yves-Alain, D. Sc., membre

DÉDICACE

À vous qui lisez ces lignes,
vous avez tout mon respect.

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord mon directeur de recherche Ludvik Martinu de m'avoir donné l'opportunité d'effectuer ma maîtrise au sein du Laboratoire de Revêtements Fonctionnels et d'Ingénieries des Surfaces (LaRFIS).

Un grand merci à Stéphane Larouche d'avoir consacré autant de temps à notre collaboration pour le module Stoney de OpenFilters et pour toutes les discussions que nous avons eues.

Je remercie ensuite Oleg Zabeida pour son support et son aide dans la détermination de l'orientation de mon projet et les nombreuses discussions.

Je tiens aussi à remercier Étienne Bousser pour ses commentaires suite à la lecture de ce mémoire ainsi que pour son constant dévouement au LaRFIS.

De plus, je voudrais remercier tous mes collègues du LaRFIS.

Un remerciement tout spécial va à mes parents et à ma partenaire de vie pour leur support dans tous mes projets et sans lesquels je n'aurais sans aucun doute jamais pu effectuer les travaux présentés ici.

Finalement, merci à la Chaire Industrielle Multisectorielle du CRSNG en Revêtements et Ingénierie des Surfaces (CIM-RIS) d'avoir financé ces travaux et merci à tous les gens impliqués dans celle-ci.

RÉSUMÉ

Avec l'importance du rôle que jouent les filtres optiques dans un grand nombre d'applications technologiques vient naturellement la question de leurs résistances aux sollicitations mécaniques. Les filtres optiques sont souvent utilisés en tant qu'antireflet déposés sur la majorité des instruments d'optique, mais leur utilisation ne s'arrête pas là.

Les filtres optiques sont généralement formés de plusieurs couches de matériaux différents (deux matériaux ou plus) avec des indices de réfraction différents déposés les uns sur les autres. Il a été montré que pour une lumière à incidence normale, le meilleur filtre optique, du point de vue de ses caractéristiques optiques, est celui avec la plus grande différence d'indice de réfraction entre les matériaux des couches utilisées. Toutefois, pour une incidence autre que normale, il arrive que le filtre optimal contienne des couches d'indice de réfraction intermédiaire. Dans certains cas, des gradients d'indice de réfraction sont aussi utilisés.

Des techniques numériques sont généralement nécessaires à la conception de filtres optiques. Plusieurs méthodes automatisées de synthèse et d'optimisation des caractéristiques optiques des filtres existent. Par contre, très peu de logiciels sont disponibles pour optimiser les caractéristiques mécaniques des revêtements et il en existe encore moins pour les revêtements minces utilisés en optique. En effet, la méthodologie généralement utilisée pour optimiser les caractéristiques mécaniques des revêtements contient soit une étape expérimentale (dans la majorité des cas) ou une étape de simulation numérique (parfois utilisée à des fins de diagnostic). Dans ce mémoire je présente les résultats de mes recherches concernant l'automatisation de l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques des filtres optiques et je présente un des diagnostics par simulation que j'ai effectués en collaboration avec nos partenaires industriels au LaRFIS.

Mon objectif était d'avancer les travaux du LaRFIS sur l'optimisation automatisée des caractéristiques mécaniques des revêtements et d'avancer les connaissances sur des questions dans les domaines d'applications spécifiques.

Il est prévu que mon travail sur l'optimisation automatisée des caractéristiques mécaniques des revêtements soit implémenté dans la version 2.0 du logiciel gratuit à code source ouvert OpenFilters fait au LaRFIS. OpenFiltres offre 4 méthodes de synthèse et d'optimisation : *Refine*, *Needles*, *Steps* et *Fourier Transform method*. La méthode *Refine* optimise le design approximatif initial de l'empilement fourni par l'utilisateur à l'aide d'algorithmes qui le modifie afin de satisfaire les exigences sur les caractéristiques optiques spécifiques. Les trois autres méthodes sont des méthodes de synthèse. Mes travaux en collaboration avec Stéphane La-

rouche (créateur d'OpenFilters) ont entre autres permis l'implémentation de l'optimisation des contraintes thermiques dans les interfaces entre les couches et a permis l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques des filtres optiques avec couche à indice de réfraction intermédiaire, des filtres optiques présentant des mélanges de matériaux et des filtres rugates.

ABSTRACT

With the important role that optical filters play in a large number of technological applications comes naturally the question of their resistance to mechanical solicitations. Optical filters are abundantly used as anti-reflective coatings as they are deposited on the majority of optical instruments, but their use is not limited to that.

Optical filters are generally made of several layers of different materials (two or more) with different refractive indices deposited in a stack. It has been shown that for light at normal incidence, the best optical filter, from the point of view of its optical characteristics, is the one with the largest difference in the refractive index between the materials of the layers used. However, for light with an incidence different from normal, the optimal filter may contain layers of intermediate refractive index. In some cases, gradients in the refractive index are also used.

Numerical techniques are generally required for the design of optical filters. There are several automated methods to synthesize and optimize the optical characteristics of filters. On the other hand, very few softwares exist to optimize the mechanical characteristics of coatings, and even less for thin coatings used in optics. Indeed, the methodology generally used to optimize the mechanical characteristics of coatings contains either an experimental step (in most cases) or a numerical simulation step (sometimes used for diagnostic purposes). In this thesis I present the results of my research on the automated optimization of the thermo-mechanical characteristics of optical filters and I present one of the diagnostics by simulations that I did in collaboration with the industrial partners of the Functional Coating and Surface Engineering Laboratory (FCSEL).

My objective was to continue the earlier work of the FCSEL on the automated optimization of mechanical characteristics of coatings and to advance this knowledge.

My work on the automated optimization of the mechanical characteristics of coatings will be implemented in version 2.0 of OpenFilters - the open-source software developed at FCSEL. OpenFiltres offers 4 methods of synthesis and optimization: Refine, Needles, Steps and the Fourier Transform method. The Refine method optimizes the initial approximate design of the stack provided by the user using algorithms that modify it to satisfy the requirements on the optical characteristics specified by the user. The other three methods are related to the of synthesis. My work in collaboration with Stéphane Larouche (creator of OpenFilters) allowed the implementation of the optimization of thermal stresses at the interfaces between the layers and allowed the optimization of the thermo-mechanical characteristics of the optical

filters with layers of intermediate index of refraction, optical filters with mixtures of materials as well as rugate filters.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iii

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES TABLEAUX xii

LISTE DES FIGURES xiii

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xvi

LISTE DES ANNEXES xvii

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1
1.1 Définitions 2
1.2 Contexte 4
1.3 Objectifs 5
1.4 Organisation du mémoire 5

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE ET FORMALISME MATHÉMATIQUE 7
2.1 Mécanique des milieux continus 7
2.1.1 Déformation 7
2.1.2 Contrainte 10
2.1.3 Équations de la mécanique des milieux continus 13
2.2 Contrainte thermique 19
2.2.1 Formalisme de Suhir pour les monocouches 19
2.2.2 Formalisme pour les empilements 25
2.3 Représentation des caractéristiques optiques et optimisation dans OpenFilters 29
2.3.1 Représentation des caractéristiques optiques dans OpenFilters 29
2.3.2 Processus d'optimisation 30
2.3.3 Synthèse et optimisation par la méthode *Step* 32

2.4 Logiciels de design et d'optimisation de revêtements 33
2.4.1 Logiciels commerciaux 33
2.4.2 Justification de la création d'un nouveau logiciel 33
2.5 Vérification de l'implémentation du formalisme de Suhir dans OpenFilters . . 34

CHAPITRE 3 ÉTUDE DES CONTRAINTES POUR DES REVÊTEMENTS AVEC COUCHE SUPERFICIELLE HYBRIDE ET MINÉRALE 36
3.1 Introduction 36
3.2 Méthodologie 37
3.3 Résultats et discussions 38
3.4 Conclusion 45

CHAPITRE 4 OPTIMISATION AUTOMATISÉE, À L'AIDE D'OPENFILTERS, DE LA RÉPONSE THERMOMÉCANIQUE DES REVÊTEMENTS OPTIQUES . . 46
4.1 Introduction 46
4.2 Résumé de la théorie et précautions à prendre 46
4.2.1 Contrainte parallèle 46
4.2.2 Contraintes et forces aux interfaces 49
4.2.3 Considération de la face arrière 52
4.3 Synthèse et optimisation des caractéristiques thermomécaniques des filtres optiques 53
4.3.1 Processus d'optimisation des caractéristiques thermomécaniques . . . 53
4.3.2 Synthèse et optimisation de design par la méthode *Step* 55
4.3.3 Considérations importantes lors de l'optimisation à plusieurs cibles . 56
4.4 Calcul des dérivées pour les contraintes de cisaillement 58
4.5 Calcul des dérivées pour les contraintes de pelage 59
4.6 Exemples d'utilisation des nouvelles fonctionnalités d'optimisation de OpenFilters 61
4.6.1 Design initial 63
4.6.2 Réflecteur à une longueur d'onde et à une température 65
4.6.3 Antireflet sur une plage de longueur d'onde et de températures 67
4.7 Exemple d'utilisation des nouvelles fonctionnalités de synthèse de OpenFilters 69
4.7.1 Design initial 69
4.7.2 Synthèse d'un antireflet par la méthode Step 71

CHAPITRE 5 CONCLUSION 73
5.1 Synthèse des travaux 73

5.2 Limitations de la solution proposée 74
5.3 Différences entre les valeurs de contraintes aux interfaces présentées et celles de la littérature 75
5.4 Améliorations futures 75

RÉFÉRENCES 77

ANNEXES 82

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Propriétés mécaniques de la couche de diamant et du substrat de ZnS donnée dans [1]	34
Tableau 3.1	Propriétés mécaniques des matériaux constituant les revêtements antireflets [2]. La contrainte dans ce tableau correspond à la contrainte parallèle.	38
Tableau 4.1	Propriétés du N-KZFS2 et du mélange hypothétique (longueur d'onde de référence 550 nm).	62
Tableau 4.2	Cibles sur les caractéristiques du filtre pour l'optimisation du réflecteur.	62
Tableau 4.3	Cibles sur les caractéristiques du filtre pour l'optimisation de l'antireflet.	62
Tableau 4.4	Valeurs des fonctions de mérites suite à l'optimisation du réflecteur. .	65
Tableau 4.5	Valeurs des fonctions de mérites suite à l'optimisation de l'antireflet. .	67
Tableau 4.6	Cibles sur les caractéristiques du filtre pour la synthèse de l'antireflet à l'aide de la méthode Step.	69
Tableau 4.7	Valeurs des fonctions de mérites suite à la synthèse de l'antireflet. . .	72

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Convention utilisée pour exprimer une déformation dans un corps déformable. 8
Figure 2.2 Tétraèdre infinitésimal de masse $\rho \mathrm{d}V$. 12
Figure 2.3 Une couche (indice c) sur un substrat épais (indice s). 20
Figure 2.4 Languette étroite avec un module de Young E et un coefficient de Poisson ν. 22
Figure 2.5 Empilement arbitraire de couches minces. 26
Figure 2.6 Forces dans un empilement arbitraire de couches minces. 27
Figure 2.7 Gauche : résultats obtenus par Klein [1], à l'aide du formalisme de Suhir, pour la contrainte parallèle en compression dans la couche de diamant (Film Stress (compressive)) et la contrainte de cisaillement dans l'interface (Interfacial Stress (shear)). Droite : résultats obtenus par l'implémentation du formalisme de Suhir dans OpenFilters pour la contrainte parallèle en compression dans la couche de diamant, la contrainte de cisaillement et la contrainte de pelage dans l'interface. . 35
Figure 3.1 Deux systèmes de revêtements antireflets ayant des stabilités thermiques très différentes. Dans les résultats présentés ci-dessous, $l = 2.5$ cm. 36
Figure 3.2 Contrainte parallèle dans chacune des couches à 80°C pour l'antireflet entièrement minérale (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite). 38
Figure 3.3 Valeur maximale de la contrainte parallèle dans chacune des couches en fonction de la température, pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite). 40
Figure 3.4 Contrainte de cisaillement dans chacune des interfaces à 80°C pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite) 40
Figure 3.5 Valeur maximale (valeur au bord) de la contrainte de cisaillement dans chacune des interfaces en fonction de la température pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite). 41

Figure 3.6 Contrainte de pelage dans chacune des interfaces à 80°C pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite). 42
Figure 3.7 Micrographies optiques des revêtements antireflets sur le substrat CR-39 après les tests de chaleur pour le revêtement inorganique déposé par évaporation par faisceau d'électrons avec assistance ionique (gauche) et le revêtement avec couche hybride superficielle avec assistance ionique (droite). La largeur et la hauteur de chaque image correspondent à 3,52 mm (image prise dans [2]) 42
Figure 3.8 Valeur maximale (valeur au bord) de la contrainte de pelage dans chacune des interfaces en fonction de la température pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite). 43
Figure 4.1 Schéma du système dont la courbure est K (où $K > 0$ pour une surface supérieure concave) est donné par l'équation 4.1 avant toute relaxation mécanique. Les couches m sont d'épaisseurs arbitraires t_j (où $\sum_{r=1}^{m} t_r = t$). 47
Figure 4.2 Empilement multicouche composé de q couches sur un substrat épais. 48
Figure 4.3 Les forces aux interfaces dans les structures multicouches. 51
Figure 4.4 Deux filtres optiques avec des revêtements en compression. Gauche (filtre 1) : courbure causée par un revêtement en compression déposé d'un seul côté d'un substrat. Droite (filtre 2) : courbure causée par deux revêtements en compression déposés de chaque côté d'un substrat. 52
Figure 4.5 Profil d'indice de réfraction du design initial (a) et valeur des caractéristiques optiques et thermomécaniques de celui-ci. (b) Spectre de réflexion. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température. 64

Figure 4.6 Optimisation du réflecteur. (a) Profil d'indice de réfraction des filtres optimisés. (b) Spectre de réflexion des filtres optimisés. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. Optimisation optomécanique (en noir) : toutes les cibles du tableau 4.3 sont utilisées. Optimisation optique (en bleu) : uniquement la cible sur la réflexion dans le tableau 4.3 est utilisée. Optimisation mécanique (en rouge) : toutes les cibles sur les contraintes du tableau 4.3 sont utilisées. 66

Figure 4.7 Optimisation de l'antireflet. (a) Profil d'indice de réfraction des filtres optimisés. (b) Spectre de réflexion des filtres optimisés. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. Optimisation optomécanique (en noir) : toutes les cibles du tableau 4.3 sont utilisées. Optimisation optique (en bleu) : uniquement la cible sur la réflexion dans le tableau 4.3 est utilisée. Optimisation mécanique (en rouge) : toutes les cibles sur les contraintes du tableau 4.3 sont utilisées. 68

Figure 4.8 (a) Profil d'indice de réfraction du filtre initial utilisé pour la synthèse. (b) Spectre de réflexion. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température. 70

Figure 4.9 (a) Profil d'indice de réfraction du filtre synthétisé en minimisant la contrainte de pelage, la valeur absolue de la contrainte de cisaillement et la réflexion pour des températures entre 230 et 380 K et des longueurs d'onde entre 350 et 700 nm. (b) Spectre de réflexion. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température. 71

Figure C.1 Données techniques sur le substrat N-KZFS2. 85

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

LaRFIS	Laboratoire de Revêtements Fonctionnels et d'Ingénieries des Surfaces
CIM-RIS	Chaire Industrielle Multisectorielle du CRSNG en Revêtements et Ingénierie des Surfaces
FCSEL	Functional Coating and Surface Engineering Laboratory
CET	Coefficient d'expansion thermique
IBACVD	Dépôt chimique en phase vapeur assisté par faisceau d'ions
DRX	Diffraction des rayons X

LISTE DES ANNEXES

Annexe A Dérivation de l'équation 2.4 82
Annexe B Calcul de la dérivée $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}$ 83
Annexe C Données techniques sur le substrat N-KZFS2 85

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Le travail qui suit étant en grande partie de nature théorique, je me dois de justifier l'intérêt d'étudier la contrainte dans les revêtements optiques à l'aide de formalismes analytiques (voir chapitre 2 pour les notions de mécanique nécessaires à la compréhension de ce mémoire).

Tout d'abord, il y a plusieurs motifs possibles pour déposer des revêtements minces sur des substrats épais. Les deux principales sont : l'amélioration de la performance mécanique du substrat (par exemple, augmenter sa résistance aux égratignures) ou la modification des propriétés optiques de celui-ci (par exemple, diminuer les réflexions). Ces deux fonctions des couches minces sont souvent requises pour un même dispositif. Entre autres, on peut souhaiter avoir une bonne résistance aux sollicitations mécaniques (par exemple l'érosion, l'indentation ou les variations de température) afin d'assurer que les performances optiques ne se détériorent pas (par exemple, empêcher un revêtement antireflet de s'éroder). Dans ce cas, des compromis doivent nécessairement être faits entre la qualité optique et la résistance mécanique.

Étant donné que tout mécanisme de dégradation mécanique des revêtements est causé par la contrainte dans ceux-ci, l'intérêt d'étudier la contrainte dans les revêtements optiques est justifié. L'intérêt pour les formalismes analytiques doit toutefois être justifié.

Plusieurs raisons, naissant directement de l'objectif de ce travail (section 1.3), expliquent le choix de l'étude des formalismes analytiques. En effet, l'objectif de ce travail est d'ajouter la possibilité d'optimiser la contrainte dans les différentes couches et dans les interfaces entre les couches lors du design d'un filtre optique à l'aide de logiciel de design, par exemple, OpenFilters développé au LaRFIS (voir section 1.2 pour plus d'information sur OpenFilters). Il est donc nécessaire d'avoir une méthode rapide permettant de calculer la contrainte et d'étudier l'effet de la variation de certains paramètres du filtre (par exemple, les indices de réfraction et les épaisseurs des couches) sur cette contrainte. Une alternative serait d'effectuer des simulations par éléments finis pour calculer la contrainte. Plusieurs simulations seraient alors nécessaires afin d'étudier l'effet de la variation des paramètres du filtre sur la contrainte qui nous intéresse. De plus, étant donné que nous sommes intéressés avant tous par les filtres optiques, les couches constituant les revêtements que nous désirons optimiser seront très minces par rapport à la taille du filtre optique. Des maillages très denses seraient alors nécessaires ce qui augmenterait le temps de calcul. Par contre, lorsqu'on connait une équation pour la contrainte que nous voulons minimiser, l'effet de la variation de certains paramètres du filtre est donné par la dérivée de cette équation par rapport aux dits paramètres, ce

qui nécessite beaucoup moins de temps de calcul que d'effectuer plusieurs simulations dans lesquels les maillages sont très volumineux.

Notons que dans le texte ci-dessus, le terme "contrainte" est utilisé sans spécifier l'origine de celle-ci. Dans le travail qui suit, une attention particulière sera portée à la contrainte mécanique due aux sollicitations thermiques et engendrée par les différences entre les coefficients d'expansion thermique (CET). Les différentes contraintes étudiées dans ce document seront introduites au chapitre 2.

1.1 Définitions

Quelques définitions seront nécessaires pour comprendre la suite de ce travail.

Filtre optique : Dispositif optique qui transmet ou réfléchit la lumière de façon sélective en fonction de la longueur d'onde. Les filtres optiques dont ce mémoire traite sont ceux dits de type interférentiel, signifiant que la transmission ou la réflexion sélective est obtenue grâce à un phénomène d'interférence. Ce phénomène d'interférence est obtenu par le dépôt de couches minces d'indices de réfraction différents sur un substrat transparent créant ainsi des interfaces pouvant transmettre ou réfléchir la lumière. L'interférence survient entre la lumière réfléchie par les interfaces et la lumière transmise.

Design d'un filtre optique : Conception d'un filtre optique. L'optimisation et la synthèse sont différentes façons d'effectuer le design d'un filtre optique par rapport aux cibles comme, par exemple, la transmission dans une gamme spectrale spécifique.

Synthèse d'un filtre optique : Conception d'un filtre optique sans aucun design initial.

Optimisation d'un filtre optique : Ajustement des paramètres d'un filtre optique afin que ses caractéristiques respectent les spécifications.

Contrainte : Force par unité de surface présente dans un matériel lorsque celui-ci est soumis à des sollicitations mécaniques. Voir la section 2.1 pour une définition mathématique de la contrainte.

Contrainte intrinsèque : Contrainte présente dans les couches des filtres optiques à la température de dépôt résultant de la méthode de fabrication.

Déformation : Variation de dimension relative dans un matériel lorsque celui-ci est soumis à des sollicitations mécaniques. Voir la section 2.1 pour une définition mathématique de la déformation.

Déformation intrinsèque : Déformation présente dans les couches des filtres optiques à la température de dépôt résultant de la méthode de fabrication.

Paramètre de mélange : Le paramètre de mélange d'un mélange de matériaux correspond à un paramètre indiquant, par exemple, le rapport de concentration entre deux matériaux constituant le mélange. Son échelle peut être fixée de plusieurs façons dépendamment de l'information accessible concernant le mélange lors du dépôt. Par exemple, pour un matériau hybride, comme le SiOCH, le flux de précurseur pourrait être utilisé comme paramètre de mélange. L'idée de ce paramètre est de situer un mélange donné par rapport à un autre. On associe alors, pour chaque valeur du paramètre de mélange, une seule valeur pour chacune de ses propriétés optiques (exemple, indice de réfraction, coefficient d'extinction) et chacune de ses propriétés mécaniques (exemple, module de Young, coefficient de Poisson, etc.).

Simulation et modélisation : Les termes *simulation* et *modélisation* sont souvent utilisés à tort comme des synonymes. Les deux termes réfèrent à des processus intellectuels bel et bien reliés, mais différents l'un de l'autre. La modélisation est le processus par lequel un modèle mathématique d'une situation physique est développé. Une fois le modèle mathématique construit, des simulations peuvent être effectuées. Les simulations sont donc les procédures utilisées pour résoudre (obtenir des solutions particulières) les équations obtenues lors de la modélisation. Il arrive souvent que les équations obtenues lors de la modélisation ne permettent pas d'obtenir des conclusions satisfaisantes pour un système donné. Par exemple, lorsqu'un modèle mène à des équations aux dérivées partielles ne possédant pas de solution analytique connue. Dans ce cas, il sera pertinent d'effectuer des simulations numériques.

Les deux processus, modélisation et simulation, présentent un défi en soi. La modélisation nécessite une très bonne connaissance de la physique du système. En effet, tout modèle est en fait une idéalisation du système étudié [3]. Ainsi, certains aspects du système sont négligés afin de recueillir de l'information sur les aspects importants du système. Une bonne connaissance de la physique du système étudié assure qu'aucun aspect important de celui-ci n'est négligé. Les simulations numériques quant à elles, nécessitent de bonnes connaissances des différentes techniques numériques afin de s'assurer que la méthode utilisée constitue un bon compromis entre précision et rapidité. En somme, afin de performer une bonne simulation numérique il est important de s'assurer que le modèle est approprié [4]. Richard P. Feynman exprime bien les risques liés aux simulations : "You know the danger of computers, it's called GIGO : garbage in, garbage out !" [5].

1.2 Contexte

Les filtres optiques comme les antireflets sont utilisés depuis les années 1930. En effet, la recherche et le développement des filtres optiques ont été subventionnés par plusieurs secteurs industriels au cours des dernières années. Durant les années 1990, la recherche sur les filtres optiques était principalement subventionnée par l'industrie des télécommunications. Avec les années, de nouveaux secteurs industriels ont vu l'intérêt d'investir dans cette technologie. Par exemple, au LaRFIS où j'ai réalisé ma maitrise, au moment d'écrire ce mémoire, quatre de nos sept partenaires industriels de la CIM-RIS sont des compagnies liées aux revêtements optiques, spécifiquement visant des applications comme l'optique ophtalmique, les verres architecturaux et les communications.

Comme il sera expliqué dans la section 2.1.3, il existe différentes façons de résoudre les équations de la mécanique des milieux continus et le choix de la méthode utilisée dépend à la fois du contexte (industriel ou de recherche) et des résultats qui nous sont nécessaires.

Avec l'amélioration des connaissances et des techniques de production des filtres optiques, les exigences de fonctionnalités de ces revêtements ont elles aussi subi une inflation. Par exemple, les compagnies ophtalmiques ont désormais des exigences de résistance aux sollicitations mécaniques presque aussi strictes que leurs exigences optiques sur leurs produits, parfois même plus strictes. Ainsi, il est dorénavant nécessaire de considérer des fonctions comme la résistance aux sollicitations mécaniques des revêtements lors du design de ceux-ci.

Les activités du LARFIS sur l'optimisation automatisée des fonctions des revêtements ont commencé avec les travaux de Stéphane Larouche qui programma le logiciel OpenFilters pour le design des filtres optiques lors de son doctorat [6]. Ensuite, Marie-Maude de Denus-Baillargeon ajouta un module, à OpenFilters, permettant de prendre en compte la courbure causée par des sollicitations thermiques lors de l'optimisation (par la méthode «refinement» et «needle») du design de filtres optiques constitués de couches dont l'indice de réfraction est constant et sans couche à indice intermédiaire pour des applications astronomiques.

Lors de ma maitrise, j'ai effectué des travaux sur l'optimisation et la synthèse de design en tenant compte des cibles optiques et mécaniques. La possibilité d'optimiser la contrainte parallèle dans les couches causée par des sollicitations thermiques (ce qui revient à optimiser la courbure) pour des filtres optiques constitués de couches dont l'indice de réfraction n'est pas constant dans le sens de la profondeur et où les couches à indice intermédiaire sont possibles a été ajoutée au logiciel OpenFilters. Ceci permet alors d'utiliser les méthodes *Step* et *Needle* pour la synthèse des filtres optiques avec réponse thermomécanique optimisée.

La possibilité d'optimiser la contrainte dans les interfaces entre les couches (donc la contrainte

de cisaillement et la contrainte de pelage, comme introduit à la section 2.2) causée par des sollicitations thermiques a aussi été ajoutée. Ces deux nouvelles possibilités de OpenFilters peuvent maintenant être incluses dans la nouvelle version du logiciel.

1.3 Objectifs

Le thème de ce mémoire est motivé par les besoins dans le domaine des revêtements utilisés dans l'industrie de l'optique, spécifiquement :

(i) comprendre et visualiser les distributions de contraintes dans les empilements pour des raisons de diagnostic ;

(ii) automatiser le processus d'optimisation de la résistance des revêtements optiques à des sollicitations (thermo)mécaniques.

L'objectif spécifique de ce mémoire est donc fondé sur ces besoins et se résume comme suit : développer un outil permettant l'optimisation et la synthèse de designs de filtres optiques en tenant compte des cibles optiques ainsi que des cibles thermomécaniques.

1.4 Organisation du mémoire

Au chapitre 2, je présente les bases théoriques relatives à la mécanique des milieux continus et nécessaires à la compréhension du reste de ce mémoire. J'y présente aussi le formalisme de Suhir pour la contrainte (contrainte de cisaillement et de pelage) dans les interfaces entre les couches des filtres optiques et j'y décris la représentation des caractéristiques optiques ainsi que l'optimisation dans OpenFilters. L'implémentation, dans OpenFilters, du calcul des contraintes par le formalisme de Suhir, est finalement vérifiée en comparant les valeurs obtenues aux valeurs reportées dans la littérature.

Le formalisme de Suhir est ensuite utilisé au chapitre 3 à des fins de diagnostic. Le but ici est de montrer comment utiliser ce formalisme afin d'obtenir des valeurs approximatives des contraintes aux interfaces entre les couches d'un filtre. Ces valeurs approximatives peuvent par la suite être utilisées pour supporter une conclusion concernant des données expérimentales. Les conclusions que le formalisme de Suhir nous permet de supporter à propos d'un exemple de résultats expérimentaux sur la stabilité thermique des filtres hybridés y sont présentées.

Dans le chapitre 4, je présente les nouveaux résultats ayant permis d'implémenter l'optimisation et la synthèse de filtres optiques avec des cibles sur les caractéristiques thermomécaniques dans OpenFilters. Quelques exemples de designs de filtres optiques créés avec ces nouvelles fonctionnalités d'OpenFilters sont ensuite donnés.

Finalement, au chapitre 5 je fais une synthèse des principaux résultats de ce mémoire et j'y présente quelques avenues possibles pour la continuité des travaux liés au domaine de l'optimisation automatisée des propriétés mécaniques des filtres optiques. Les limitations de la solution proposée sont aussi discutées.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE ET FORMALISME MATHÉMATIQUE

Les sections qui suivent introduisent les différents concepts et notions qui seront nécessaires pour comprendre le travail de ce mémoire. Il ne s'agit pas d'une encyclopédie ou d'une revue de littérature exhaustive, mais nous nous référerons aux publications les plus pertinentes.

Quelques notions importantes de la mécanique des milieux continus seront d'abord introduites afin d'établir les bases du travail et d'éviter toute confusion. Plusieurs ouvrages traitant de ce sujet sont disponibles. Par exemple, je me suis inspiré, entre autres, de [3, 7–10].

Le formalisme de Suhir pour la contrainte thermique dans les revêtements est par la suite introduit dans la section 2.2. Ce formalisme est celui qui sera utilisé pour calculer la contrainte thermique lors de l'optimisation.

Quelques notions concernant la représentation des caractéristiques optiques et l'optimisation dans OpenFilters seront finalement présentées.

2.1 Mécanique des milieux continus

La mécanique des milieux continus est l'étude des corps déformables. Comme son nom l'indique, les matériaux y sont représentés par des distributions continues de masse sans tenir compte des effets moléculaires et atomiques. Nous le verrons dans ce qui suit, les modèles de mécanique des milieux continus de forme close (aussi appelé modèle analytique) sont obtenus en utilisant la conservation du moment linéaire et angulaire, les conditions de compatibilité ainsi que des équations constitutives des matériaux.

2.1.1 Déformation

Tous corps déformables soumis à une force subiront une déformation et donc la majorité des points de ce corps seront *déplacés*. Un point arbitraire A avec un vecteur position ${}^{A}\boldsymbol{r} = ({}^{A}x_1, {}^{A}x_2, {}^{A}x_3)$ avant la déformation sera déplacé à une position ayant un vecteur position ${}^{A}\boldsymbol{r'} = ({}^{A}x'_1, {}^{A}x'_2, {}^{A}x'_3)$ après la déformation (voir la figure 2.1). Le déplacement de ce point causé par la déformation est donc ${}^{A}\boldsymbol{u}({}^{A}\boldsymbol{r}) = {}^{A}\boldsymbol{r'} - {}^{A}\boldsymbol{r}$, ou exprimé en notation indicielle :

$$ {}^{A}u_i = {}^{A}x'_i - {}^{A}x_i \implies {}^{A}x'_i = {}^{A}u_i + {}^{A}x_i. \tag{2.1} $$

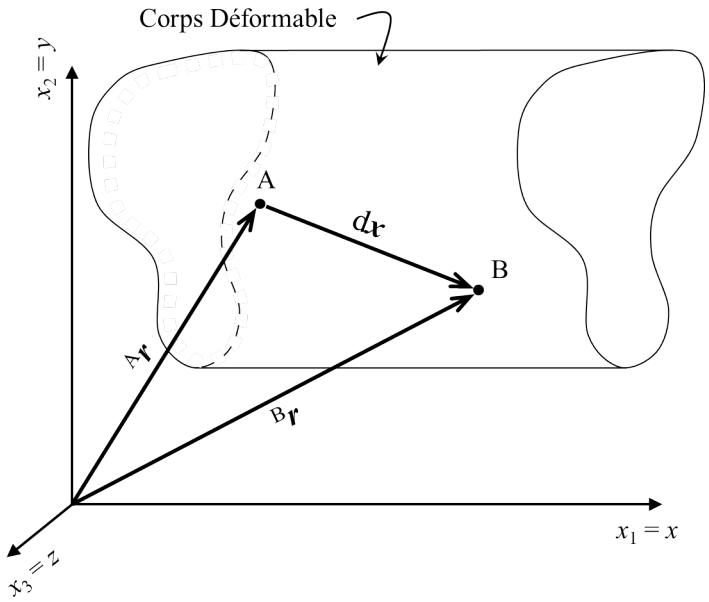


Figure 2.1 Convention utilisée pour exprimer une déformation dans un corps déformable.

Notons que ${}^A\boldsymbol{u}({}^A\boldsymbol{r})$ est une fonction de ${}^A\boldsymbol{r} = {}^Ax_i$ puisque ${}^A\boldsymbol{r}'$ est nécessairement une fonction de ${}^A\boldsymbol{r}$ afin de s'assurer qu'aucun point n'est créé ni supprimé durant la déformation. Donc un *champ vectoriel de déplacement* ${}^A\boldsymbol{u}({}^A\boldsymbol{r})$ valide pour tous points arbitraires ${}^A\boldsymbol{r}$ d'un corps déformable détermine entièrement une déformation.

Considérons maintenant la figure 2.1 où $\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \mathrm{d}x_i$ (en utilisant la convention de sommation d'Einstein) est le vecteur position entre deux points A et B. On suppose que A et B sont très près l'un de l'autre. Après une déformation, le vecteur position entre ces points sera $\mathrm{d}x_i' = \mathrm{d}x_i + \mathrm{d}u_i$. On a alors :

$$\mathrm{d}x_i^2 = \mathrm{d}x_1^2 + \mathrm{d}x_2^2 + \mathrm{d}x_3^2 =: \mathrm{d}l^2 \tag{2.2}$$

$$\mathrm{d}x_i'^2 = (\mathrm{d}x_i + \mathrm{d}u_i)^2 =: \mathrm{d}l'^2, \tag{2.3}$$

où $\mathrm{d}l$ et $\mathrm{d}l'$ sont les distances entre les points A et B avant et après la déformation respectivement. Si l'on développe l'équation 2.3 on obtient $\mathrm{d}l'^2 = \mathrm{d}l^2 + 2\mathrm{d}x_i\mathrm{d}u_i + \mathrm{d}u_i^2$ et après quelques minutes de contemplation on réalise qu'il est possible de réécrire cette équation comme suit [9] (voir l'annexe A) :

$$\mathrm{d}l'^2 = \mathrm{d}l^2 + 2\epsilon_{ik}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k, \tag{2.4}$$

où ϵ_{ik} est le *champ tensoriel de déformation finie* et est défini comme :

$$\epsilon_{ik}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right|_{\boldsymbol{x}} + \left.\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right|_{\boldsymbol{x}} + \left.\frac{\partial u_l}{\partial x_i}\right|_{\boldsymbol{x}} \left.\frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right|_{\boldsymbol{x}} \right). \tag{2.5}$$

Notons que $\left.\frac{\partial u_i}{\partial u_k}\right|_{\boldsymbol{x}} =: H_{ik}(\boldsymbol{x})$ est parfois appelé le *champ tensoriel de gradient de déplacement*. On peut donc interpréter le champ tensoriel de déformation finie comme étant le changement infinitésimal de longueur d'un élément de longueur lors d'une déformation. Notons que le champ tensoriel de déformation finie est symétrique puisque $u_{ik} = u_{ki}$, ce qui implique que pour tous points d'un corps déformable il est possible de choisir un référentiel (c'est-à-dire un système d'axes) dans lequel uniquement les composantes diagonales ne sont pas nulles. Un tel système d'axes (en général différent d'un point à l'autre d'un corps) est appelé un *système d'axes principaux* et les composantes non nulles du champ tensoriel de déformation finie dans ce système d'axes sont appelées les valeurs propres (ou valeurs principales).

Pour de petites déformations, il est commun d'approximer que le troisième terme de la définition du champ tensoriel de déformation finie (équation 2.5) est négligeable puisqu'il est du second ordre. Pour éviter la confusion, le champ tensoriel de déformation pour de petites déformations sera simplement appelé *champ tensoriel de déformation* (par contraste avec champ tensoriel de déformation finie). Ainsi, pour une petite déformation le *champ tensoriel de déformation* est donné par [1] :

$$\varepsilon_{ik}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}(\boldsymbol{x}) & \varepsilon_{12}(\boldsymbol{x}) & \varepsilon_{13}(\boldsymbol{x}) \\ \varepsilon_{21}(\boldsymbol{x}) & \varepsilon_{22}(\boldsymbol{x}) & \varepsilon_{23}(\boldsymbol{x}) \\ \varepsilon_{31}(\boldsymbol{x}) & \varepsilon_{32}(\boldsymbol{x}) & \varepsilon_{33}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right|_{\boldsymbol{x}} + \left.\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right|_{\boldsymbol{x}} \right) = \frac{1}{2}(H_{ik}(\boldsymbol{x}) + H_{ki}(\boldsymbol{x})). \tag{2.6}$$

État de déformation plane

Une simplification du champ tensoriel de déformation, dans les empilements de couches minces, souvent utilisée dans la littérature est de considérer un état plan de déformation plutôt qu'une déformation tridimensionnelle [11, 12].

1. Notons que le champ tensoriel de déformation correspond à la partie symétrique du *gradient vectoriel* du champ vectoriel de déplacement, c'est-à-dire $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \boldsymbol{u}$. Par opposition, le *champ tensoriel de rotation* (infinitésimal) correspond à la partie antisymétrique du gradient vectoriel du champ vectoriel de déplacement, c'est-à-dire $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{x}) = \nabla^a \boldsymbol{u} = \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right|_{\boldsymbol{x}} - \left.\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right|_{\boldsymbol{x}} \right) = \frac{1}{2}(H_{ik}(\boldsymbol{x}) - H_{ki}(\boldsymbol{x}))$.

Le champ vectoriel de déplacement est alors de la forme :

$$u_i(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} u_1(x_1, x_2) \\ u_2(x_1, x_2) \\ u_3 = 0 \end{bmatrix}. \tag{2.7}$$

On a donc un champ tensoriel de déformation comme suit :

$$\varepsilon_{ik}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}(x_1, x_2) & \varepsilon_{12}(x_1, x_2) & 0 \\ \varepsilon_{21}(x_1, x_2) & \varepsilon_{22}(x_1, x_2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{2.8}$$

2.1.2 Contrainte

Tous points d'un corps non déformé sont dans un état *d'équilibre mécanique*, c'est-à-dire que la somme des forces agissant sur un point arbitraire de ce corps est nulle. Lorsque le corps est déformé, cet équilibre est brisé. Des forces internes surviennent alors, tendant à retrouver l'équilibre initial du corps. Ces forces internes proviennent des particules (molécules ou atomes) formant le corps et elles agissent sur une très petite distance [9].

La contrainte est souvent utilisée comme un vecteur dans le langage courant. On dit souvent que la contrainte à l'intérieur d'un corps correspond à un vecteur de force par unités de surface à un point et une surface donnés (mêmes unités que la pression). Il est important de mentionner qu'il s'agit en fait du *vecteur de contrainte* (aussi appeler vecteur de traction et à différencier du tenseur de contrainte) qui correspond à un vecteur de force par unités de surface à un point donnée. Or à tous points d'un corps tridimensionnel, plusieurs surfaces (une infinité de surfaces pour chaque point) peuvent être utilisées pour calculer le vecteur de contrainte. Ainsi, toutes valeurs du vecteur de contrainte à un point arbitraire, $\boldsymbol{x}$, à l'intérieur d'un corps tridimensionnel doivent être accompagnées des coordonnées du vecteur unitaire, $\boldsymbol{n}$, orthogonal à l'élément de surface choisi pour le calcul de celle-ci.

On définit généralement le *champ vectoriel de contrainte* $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n})$ pour un élément de surface $\mathrm{d}A$ avec un vecteur orthogonal $\boldsymbol{n}$, situé à un endroit $\boldsymbol{x}$ dans un corps comme étant :

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) = \lim_{\mathrm{d}A \to 0} \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}}{\mathrm{d}A} \right), \tag{2.9}$$

où $\mathrm{d}\boldsymbol{F}$ est la force résultante agissant sur l'élément de surface $\mathrm{d}A$. Le champ vectoriel de contrainte possède alors deux projections par rapport au plan avec le vecteur orthogonal $\boldsymbol{n}$.

Celle-ci sont :

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n}) = t_n(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{n} + \boldsymbol{t}_t(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n}), \tag{2.10}$$

où $t_n(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})$ est le *champ de contrainte normale* et $\boldsymbol{t}_t(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})$ est le *champ vectoriel de contrainte de cisaillement* (ou champ vectoriel de contrainte parallèle au plan avec le vecteur orthogonal $\boldsymbol{n}$).

L'utilité de $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})$ sera clarifiée dans ce qui suit.

Considérons le tétraèdre de la figure 2.2 où les vecteurs $\boldsymbol{n}_1$, $\boldsymbol{n}_2$, $\boldsymbol{n}_3$ et $\boldsymbol{n}$ correspondent aux quatre vecteurs unitaires orthogonaux pour chacune des faces triangulaires. On cherche à écrire une équation du mouvement pour un tel tétraèdre infinitésimal.

La position du point central de la face avec le vecteur orthogonal $\boldsymbol{n}$ peut alors s'exprimer :

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{n}_1 + x_2\boldsymbol{n}_2 + x_3\boldsymbol{n}_3. \tag{2.11}$$

De plus, les positions des points centraux des faces avec les vecteurs orthogonaux $\boldsymbol{n}_1$, $\boldsymbol{n}_2$ et $\boldsymbol{n}_3$ peuvent quant à eux s'exprimer comme :

$$\begin{aligned} {}^1\boldsymbol{x} &= x_2\boldsymbol{n}_2 + x_3\boldsymbol{n}_3 \\ {}^2\boldsymbol{x} &= x_1\boldsymbol{n}_1 + x_3\boldsymbol{n}_3, \\ {}^3\boldsymbol{x} &= x_1\boldsymbol{n}_1 + x_2\boldsymbol{n}_2 \end{aligned} \tag{2.12}$$

respectivement. Si l'aire de la face triangulaire avec le vecteur orthogonal $\boldsymbol{n} = n_1\boldsymbol{n}_1 + n_2\boldsymbol{n}_2 + n_3\boldsymbol{n}_3 = n_i\boldsymbol{n}_i$ est $\mathrm{d}A$, alors celle des trois autres faces peut s'écrire :

$$\mathrm{d}A_i = \boldsymbol{n}_i\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}A = n_i\mathrm{d}A. \tag{2.13}$$

Supposons maintenant que ce tétraèdre ressent une force volumétrique au point $\boldsymbol{x}$ correspondant à $\mathrm{d}\boldsymbol{F} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}V$. La force totale ressentie par ce tétraèdre est alors la somme des vecteurs de traction pour chacune des faces triangulaires, plus la force volumétrique $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}V$. Si $\boldsymbol{a}$ est l'accélération et ρ est la densité de masse du tétraèdre, alors l'équation du mouvement pour celui-ci est :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}\rho\mathrm{d}V &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}V + \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})\mathrm{d}A + \boldsymbol{t}({}^1\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_1)\mathrm{d}A_1 + \boldsymbol{t}({}^2\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_2)\mathrm{d}A_2 + \boldsymbol{t}({}^3\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_3)\mathrm{d}A_3 \\ &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}V + \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})\mathrm{d}A + \boldsymbol{t}({}^1\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_1)n_1\mathrm{d}A + \boldsymbol{t}({}^2\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_2)n_2\mathrm{d}A + \boldsymbol{t}({}^3\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_3)n_3\mathrm{d}A \\ \implies \boldsymbol{a}\rho\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}A} &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}A} + \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n}) + \boldsymbol{t}({}^1\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_1)n_1 + \boldsymbol{t}({}^2\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_2)n_2 + \boldsymbol{t}({}^3\boldsymbol{x},-\boldsymbol{n}_3)n_3 \end{aligned} \tag{2.14}$$

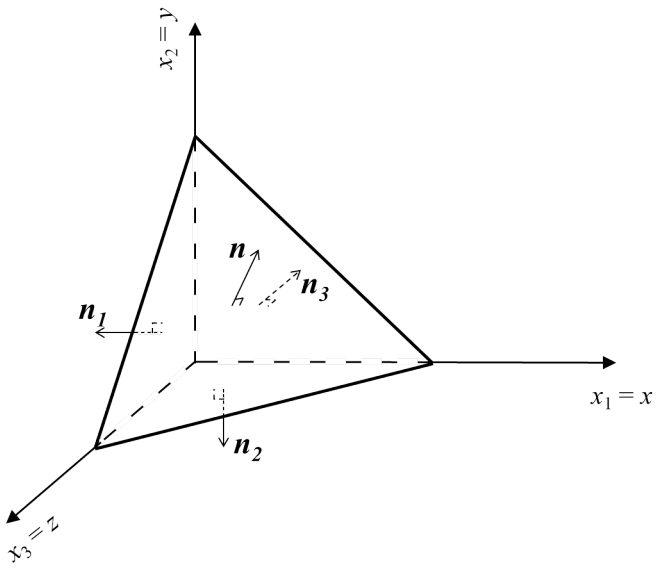


Figure 2.2 Tétraèdre infinitésimal de masse $\rho \mathrm{d}V$.

et lorsque $\mathrm{d}A \to 0$ on a $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}A} \to 0$ et ${}^{i}\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}$. Ainsi l'équation du mouvement est :

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) = -\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, -\boldsymbol{n}_1)n_1 - \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, -\boldsymbol{n}_2)n_2 - \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, -\boldsymbol{n}_3)n_3. \tag{2.15}$$

En utilisant le fait que $-\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, -\boldsymbol{n}_i) = \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_i)$, on peut réécrire l'équation 2.15 sous forme matricielle comme suit :

$$\begin{array}{ccccc}
\begin{bmatrix} t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \\ t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \\ t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_1) & t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_2) & t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_3) \\ t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_1) & t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_2) & t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_3) \\ t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_1) & t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_2) & t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_3) \end{bmatrix} & \cdot & \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} . \\
\boldsymbol{t}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) & = & \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, [\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \boldsymbol{n}_3]) & \cdot & \boldsymbol{n} \\
t_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) & = & \sigma_{ji}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_i) & \cdot & n_j
\end{array} \tag{2.16}$$

La matrice dans l'équation 2.16 est en fait un champ tensoriel d'ordre deux qui ne dépend que de $\boldsymbol{x}$ et de la base choisie $[\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \boldsymbol{n}_3]$ et qu'on appelle le *champ tensoriel de contrainte*. Donc le champ tensoriel de contrainte permet d'obtenir le champ vectoriel de contrainte $\boldsymbol{t}$ sur un élément de surface perpendiculaire à $\boldsymbol{n}$ ($\boldsymbol{n}$ étant arbitraire) à une position donnée $\boldsymbol{x}$ [7]. Ainsi pour reporter correctement une valeur de vecteur de contrainte en 3D il est nécessaire de définir la base (par exemple la base principale, la base de cisaillement, la base normale) et le plan ayant $\boldsymbol{n}$ comme vecteur orthogonal (par exemple le plan maximisant la contrainte principale, le plan XY, le plan perpendiculaire à l'axe des X).

Il est possible de montrer que la conservation du moment angulaire implique que le champ tensoriel de contrainte est symétrique, c'est-à-dire $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ et donc que le champ tensoriel de contrainte possède uniquement six composantes indépendantes. Ainsi, l'état de contrainte en un point donné $\boldsymbol{x}$ est entièrement déterminé par les valeurs des six composantes indépendantes du *champ tensoriel de contrainte* en ce point $\boldsymbol{x}$.

On peut aussi montrer que la conservation du moment linéaire implique [9] :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla + \boldsymbol{f} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} + \boldsymbol{f} = \boldsymbol{t} + \boldsymbol{f} = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}. \tag{2.17}$$

Notons finalement que l'on appelle les composantes de σ_{ij} avec $i \neq j$ les *composantes de cisaillement* et les composantes avec $i = j$ les *composantes normales*. De plus, si on réécrit le champ vectoriel de contrainte comme suit :

$$\begin{bmatrix} t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \\ t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \\ t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_1)n_1 + t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_2)n_2 + t_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_3)n_3 \\ t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_1)n_1 + t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_2)n_2 + t_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_3)n_3 \\ t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_1)n_1 + t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_2)n_2 + t_3(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_3)n_3 \end{bmatrix} \tag{2.18}$$

et qu'on l'insère dans l'équation 2.16, on constate que les composantes de σ_{ij} avec $i = j$ donnent les composantes normales au plan orthogonal à $\boldsymbol{n}$ du champ vectoriel de contrainte et que les composantes de σ_{ij} avec $i \neq j$ donne les composantes tangentielles.

Une *base principale* est une base $[\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \boldsymbol{n}_3]$ pour laquelle $\sigma_{ji}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_i) = 0 \; \forall \; \{j, i | j \neq i\}$. Autrement dit, la base principale est une base dans laquelle les composantes de cisaillement du champ tensoriel de contrainte sont nulles.

Une *base de cisaillement* est une base pour laquelle $\sigma_{ii}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}_i) = 0$. Autrement dit, la base de cisaillement est une base dans laquelle les composantes normales du champ tensoriel de contrainte sont nulles.

2.1.3 Équations de la mécanique des milieux continus

Comme mentionné précédemment, les équations permettant d'avoir un modèle de mécanique des milieux continus de forme close sont obtenues en utilisant la conservation du moment linéaire et angulaire, les conditions de compatibilité ainsi que des équations constitutives des matériaux. Ces équations seront introduites dans ce qui suit.

Conditions de compatibilité

La définition du tenseur de déformation (pour de petites déformations), $\varepsilon_{ik} := \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right)$ (équation 2.6), nous donne les six composantes de celui-ci en fonction des dérivées des composantes du champ vectoriel de déplacement. Donc, si l'on connait le champ vectoriel de déplacement $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = u_1(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{x}}_1 + u_2(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{x}}_2 + u_3(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{x}}_3$, alors on peut facilement calculer le tenseur de déformation. Par contre, si l'on connait le tenseur de déformation plusieurs champs vectoriels de déplacement peuvent être associés à ce tenseur. Notons que dans ce cas nous avons six équations (une pour chaque composante du tenseur de déformation) et seulement trois inconnues (les trois composantes du champ vectorielles de déplacement).

On définit alors un champ tensoriel de déformation, $\boldsymbol{\varepsilon}$, comme étant *compatible* s'il existe un champ vectoriel de déplacement, $\boldsymbol{u}$, unique et continue respectant $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \boldsymbol{u}$.

Il est possible de montrer (voir [7]) que pour un domaine simplement connexe, si le champ tensoriel de déformation satisfait :

$$\nabla \times \boldsymbol{\varepsilon} \times \nabla = \mathbf{0} \tag{2.19}$$

alors le $\boldsymbol{\varepsilon}$ est compatible [2]. L'équation 2.19 est appelée la *condition de compatibilité* de la déformation.

Relations constitutives

La relation constitutive du matériau dont le corps étudié est fait est la dernière équation nécessaire afin de modéliser un corps déformable. Elle correspond à une équation qui relie la déformation à une sollicitation en se basant sur quelques suppositions mécaniques ou thermodynamiques. Il existe plusieurs types de relations constitutives et celles-ci nous permettent de classer les matériaux, par exemple, comme étant élastiques, plastiques, viscoplastiques, viscoélastiques, etc. Dans le cadre de ce travail, nous serons intéressés par les comportements

2. Rappelons que le rotationnel d'un champ tensoriel $\boldsymbol{T}$ est aussi un champ tensoriel tel que :

$$(\boldsymbol{\nabla} \times T)_{ip} = \epsilon_{ijk}\frac{\partial T_{kp}}{\partial x_j} = \begin{array}{ccccc} \cancelto{=0}{\epsilon_{i11}\frac{\partial T_{1p}}{\partial x_1}} & + & \epsilon_{i12}\frac{\partial T_{2p}}{\partial x_1} & + & \epsilon_{i13}\frac{\partial T_{3p}}{\partial x_1} \\ +\epsilon_{i21}\frac{\partial T_{1p}}{\partial x_2} & + & \cancelto{=0}{\epsilon_{i22}\frac{\partial T_{2p}}{\partial x_2}} & + & \epsilon_{i23}\frac{\partial T_{3p}}{\partial x_2} \\ +\epsilon_{i31}\frac{\partial T_{1p}}{\partial x_3} & + & \epsilon_{i32}\frac{\partial T_{2p}}{\partial x_3} & + & \cancelto{=0}{\epsilon_{i33}\frac{\partial T_{3p}}{\partial x_3}} \end{array}, \tag{2.20}$$

où $\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si } (i,j,k) \text{ est } (1,2,3),(2,3,1), \text{ ou } (3,1,2), \\ -1 & \text{si } (i,j,k) \text{ est } (3,2,1),(1,3,2), \text{ ou } (2,1,3), \\ 0 & \text{si } i=j,\ j=k, \text{ ou } k=i \end{cases}$

élastiques des matériaux puisque les déformations non élastiques ont généralement des effets irréversibles sur les caractéristiques optiques et sont donc à éviter à tout prix. Étant donné que les déformations non élastiques surviennent lorsque la déformation élastique ou la contrainte dans un matériau dépassent une certaine valeur critique, une étude élastique des matériaux suffira.

Élasticité linéaire

S'il existe une fonction injective permettant d'obtenir la déformation à partir de la contrainte, alors le matériau est dit *élastique* et ladite fonction correspond à la relation constitutive du matériel. Pour la majorité des matériaux rigides, cette fonction semble être linéaire. Ainsi on a en général que le champ tensoriel de contrainte peut être exprimé comme le *produit scalaire tensoriel* d'un champ tensoriel de raideur $\boldsymbol{C}$ (d'ordre quatre) et du champ tensoriel de déformation :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}. \tag{2.21}$$

Puisqu'il s'agit d'une relation linéaire on peut aussi affirmer qu'il existe un champ vectoriel $\boldsymbol{S}$ tel que $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{S} : \boldsymbol{\sigma}$. Notons que l'équation 2.21 est l'équivalent tridimensionnel de la loi de Hooke exprimant la force en fonction de la déformation d'un ressort.

Il est possible de montrer que, puisque le champ tensoriel de raideur doit respecter les *symétries majeures* et *mineures*, et puisque $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}$ sont tous deux symétriques, le nombre de composantes indépendantes de $\boldsymbol{C}$ est de 21 (un tenseur d'ordre quatre possède 81 composantes)[7].

Élasticité linéaire isotrope

Un matériau *isotrope* est un matériau dans lequel les propriétés mécaniques (et thermodynamiques) sont les mêmes à tous points et dans toute direction.

On peut montrer que pour un matériau isotrope les axes principaux du champ tensoriel de la contrainte correspondent à ceux du champ tensoriel de la déformation et donc que la relation constitutive pour un système d'axes arbitraires est :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \lambda \mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} \\ \sigma_{ij} &= \lambda\varepsilon_{kk}\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij}, \end{aligned} \tag{2.22}$$

où λ et μ sont les *paramètres de Lamé*. Similairement on a :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2\mu}\boldsymbol{\sigma} - \frac{\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{I} \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2\mu}\sigma_{ij} - \frac{\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}\sigma_{kk}\delta_{ij}. \end{aligned} \tag{2.23}$$

Les tenseurs $\boldsymbol{C}$ et $\boldsymbol{S}$ sont alors :

$$C_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + 2\mu\delta_{ik}\delta_{jl} \quad \text{et} \quad S_{ijkl} = -\frac{\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}\delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{1}{2\mu}\delta_{ik}\delta_{jl}. \tag{2.24}$$

Les paramètres de Lamé sont reliés au *module de Young*, E, et au *coefficient de Poisson*, ν, par les équations suivantes :

$$E = \frac{\mu(2\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu} \tag{2.25}$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}. \tag{2.26}$$

Le module de Young et le coefficient de Poisson sont plus souvent utilisés pour définir la relation constitutive d'un matériau, car ils peuvent être déterminés expérimentalement. Les relations constitutives 2.22 et 2.23 peuvent être réécrites en utilisant le module de Young et le coefficient de Poisson plutôt que les paramètres de Lamé :

$$\sigma_{ij} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\varepsilon_{kk}\delta_{ij} + \frac{E}{1+\nu}\varepsilon_{ij} \tag{2.27}$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{ij} - \frac{\nu}{E}\sigma_{kk}\delta_{ij}. \tag{2.28}$$

Maintenant, si l'on combine les trois équations qui gouvernent notre matériau, c'est-à-dire les équations 2.17, 2.6 et 2.27, on obtient l'équation d'onde élastodynamique :

$$\begin{array}{rcrcrcl} \left[\frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} + \frac{E}{2(1+\nu)}\right]\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{u} & + & \frac{E}{2(1+\nu)}\Delta\boldsymbol{u} & + & \boldsymbol{f} & = & \rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial t^2} \\ \left[\frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} + \frac{E}{2(1+\nu)}\right]\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_k}u_k & + & \frac{E}{2(1+\nu)}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i}u_j & + & f_j & = & \rho\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}. \end{array} \tag{2.29}$$

Lorsque $\rho\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = 0$ (c'est-à-dire pour le cas élastostatique), on obtient la formulation de *Navier*. L'équation ci-dessus, qui est en fait trois équations, constitue un système complet d'équations différentielles. Donc, pour un champ vectoriel de force volumique $\boldsymbol{f}$ et des conditions aux bords données il est possible de trouver le champ vectoriel de déplacement $\boldsymbol{u}$.

Il est aussi possible d'obtenir un système d'équations de forme close pour la contrainte. Par exemple, l'équivalent de l'équation de compatibilité pour la contrainte dans le cas élastosta-

tique est l'équation de *Baltrami-Michell* :

$$\begin{array}{ccccccccccc} \Delta\boldsymbol{\sigma} & + & \frac{1}{1+\nu}\nabla\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})\nabla & + & \frac{\nu}{1-\nu}\nabla\cdot\boldsymbol{f}\boldsymbol{I} & + & \nabla\boldsymbol{f} & + & \boldsymbol{f}\nabla & = & \mathbf{0} \\ \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_k}\sigma_{ij} & + & \frac{1}{1+\nu}\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_i}\sigma_{kk} & + & \frac{\nu}{1-\nu}\delta_{ij}\frac{\partial}{\partial x_k}f_k & + & \frac{\partial}{\partial x_j}f_i & + & \frac{\partial}{\partial x_i}f_j & = & 0 \end{array} \tag{2.30}$$

qui avec l'équation d'équilibre statique $\Delta\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{f}=\mathbf{0}$ constitue un système d'équations différentielles complet pour le champ tensoriel de contrainte.

État de déformation plane

Un état plan de déformation, dans le plan XY, n'implique pas nécessairement que le champ vectoriel de contrainte restera dans le plan XY. Pour un matériau isotrope linéairement élastique, le champ tensoriel de contrainte dans celui-ci sera de la forme suivante :

$$\sigma_{ji}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \sigma_{11}(x_1,x_2) & \sigma_{12}(x_1,x_2) & 0 \\ \sigma_{21}(x_1,x_2) & \sigma_{22}(x_1,x_2) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33}(x_1,x_2) \end{bmatrix}. \tag{2.31}$$

Il est possible d'exprimer les composantes du champ tensoriel de contrainte en fonction des valeurs du champ tensoriel de déformation. On obtient [8] :

$$\begin{aligned} \sigma_{11}(x_1,x_2) &= \lambda(\varepsilon_{11}(x_1,x_2)+\varepsilon_{12}(x_1,x_2))+2\mu\varepsilon_{11}(x_1,x_2) \\ &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}(\varepsilon_{11}(x_1,x_2)+\varepsilon_{12}(x_1,x_2))+\frac{E}{1+\nu}\varepsilon_{11}(x_1,x_2) \\ \sigma_{22}(x_1,x_2) &= \lambda(\varepsilon_{11}(x_1,x_2)+\varepsilon_{12}(x_1,x_2))+2\mu\varepsilon_{22}(x_1,x_2) \\ &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}(\varepsilon_{11}(x_1,x_2)+\varepsilon_{12}(x_1,x_2))+\frac{E}{1+\nu}\varepsilon_{22}(x_1,x_2) \\ \sigma_{33}(x_1,x_2) &= \lambda(\varepsilon_{11}(x_1,x_2)+\varepsilon_{12}(x_1,x_2)) \\ &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}(\varepsilon_{11}(x_1,x_2)+\varepsilon_{12}(x_1,x_2)) \\ \sigma_{12}(x_1,x_2) &= 2\mu\varepsilon_{12}(x_1,x_2) \\ &= \frac{E}{1+\nu}\varepsilon_{12}(x_1,x_2). \end{aligned} \tag{2.32}$$

Solutions des équations de la mécanique des milieux continus

Il existe plusieurs façons de résoudre les équations 2.30 et 2.29. Pour certains cas spécifiques, une approche analytique est possible. Il existe certains cas où une approche analytique est impossible ou simplement non nécessaire. Dans ces cas une approximation numérique est

souvent utilisée [3].

Il est important de noter que l'approche choisie pour résoudre ces équations dépend majoritairement des besoins spécifiques que nous avons. Par exemple très souvent dans l'industrie certaines valeurs des composantes du champ vectoriel de contrainte ou de déformation pour une situation spécifique sont nécessaires. Il arrive qu'une solution analytique existe pour la situation spécifique considérée, mais que celle-ci soit difficile à utiliser (dû à sa complexité par exemple) et donc une solution approximative numérique sera préférée. La raison n'est pas nécessairement que le formalisme pour les solutions approximatives numériques est plus simple, mais plutôt que plus d'outils existent pour faciliter leurs utilisations. Je pense, par exemple, à des logiciels extrêmement complexes comme ANSYS ou LS-Dyna qui comprennent énormément de documentation et d'outils pour faciliter leur utilisation.

Une autre raison expliquant pourquoi l'industrie opte souvent pour des solutions numériques plutôt qu'analytiques est que les solutions numériques, par exemple les éléments finis, peuvent s'utiliser pour plusieurs problèmes différents. En fait, on parle souvent de méthode par éléments finis, car il s'agit en réalité plus d'une méthode pour obtenir des solutions approximatives que d'une solution à un problème spécifique. Par opposition, une solution analytique à un problème spécifique est généralement difficile à transférer à un autre problème.

La théorie derrière la méthode des éléments finis ne sera pas introduite dans ce mémoire puisqu'il ne s'agit pas du sujet principal de celui-ci. Le lecteur intéressé peut se référer aux ouvrages suivant [13–16].

Il y a toutefois quelques raisons pour lesquelles une solution analytique approximative pourrait être préférée à une solution numérique approximative. En général, une solution analytique nous permet de comprendre plus facilement et plus rapidement les relations entre les paramètres physiques impliqués dans le phénomène étudié. Les solutions analytiques sont donc très pédagogiques. Ceci est dû en partie au fait que, comme mentionnée plus haut, une solution analytique est plus générale qu'une solution numérique qui doit être effectuée pour chaque valeur des paramètres physiques qui nous intéressent. Les solutions analytiques nous permettent en fait de déterminer plus facilement des tendances entre les paramètres physiques que les solutions numériques, car une simple analyse des équations constituant la solution est nécessaire alors que plusieurs simulations numériques avec des valeurs initiales différentes sont nécessaires pour arriver aux mêmes déductions de façon numérique.

Cependant, la principale raison expliquant le choix d'une approche analytique dans ce travail

3. Notons que toute méthode numérique utilisée pour résoudre un problème de mécanique des milieux continue est une approximation puisque dans chacune d'elle il est nécessaire *d'échantillonner* un milieu continu.

est le fait qu'une optimisation devait être effectuée. Une approche numérique par éléments finis aurait pu être utilisée, mais aurait nécessité beaucoup trop de puissance et de temps de calcul. Le but étant de fournir un logiciel pouvant être utilisé sur un ordinateur personnel, une approche par éléments finis était, au moment d'écrire ce mémoire, impossible, car celle-ci nécessiterait un superordinateur pour obtenir des temps de calcul acceptables pour une étape d'une boucle d'optimisation.

2.2 Contrainte thermique

Il existe plusieurs solutions de forme close pour la contrainte dans les empilements multicouches. Les contraintes thermiques dans les poutres et les plaques multicouches ont été le sujet de beaucoup d'études [17–28]. Plusieurs études existent aussi sur les méthodes approximatives de prédiction de la contrainte dans les interfaces causée par des sollicitations thermiques et mécaniques [12, 28–48]

Le formalisme analytique de la contrainte thermique pour les structures hétéroépitaxiales qui sera présenté ici a tout d'abord été développé dans le contexte des thermostats à jonction métallique pour ensuite être adapté au cas plus général de la fabrication de dispositifs semiconducteurs utilisés en microélectronique [40, 42, 49]. Il s'agit toutefois d'un formalisme très général comme nous le verrons. Il est donc tout aussi applicable pour les revêtements utilisés en optique. Voir la section 5.2 pour des détails sur les limitations du formalisme de Suhir.

2.2.1 Formalisme de Suhir pour les monocouches

Le formalisme de Suhir pour la contrainte thermique à l'interface entre une monocouche et un substrat (voir figure 2.3 pour la notation utilisée) repose sur l'expression pour le déplacement longitudinal (en une dimension) de la couche $u_c(x)$ et du substrat $u_s(x)$ à l'interface (c'est-à-dire infiniment près de l'interface) lorsque ceux-ci sont soumis à une augmentation de température uniforme ΔT par rapport à leur état sans contrainte. L'idée est de représenter ces déplacements longitudinaux comme étant le résultat de trois contributions différentes. Les trois contributions sont :

1. Le déplacement dû à l'expansion thermique libre, $u_i^{\text{libre}}(x) = \alpha_i \Delta T x$ avec $i = s, c$ pour le substrat et la couche respectivement ;
2. Le déplacement dû à la courbure, $u_i^{\text{courbure}}(x) = \frac{t_i}{2} \int_0^x \frac{\mathrm{d}\xi}{R(\xi)}$ avec $i = s, c$ et où R est le rayon de courbure [4] ;

4. $u_i^{\text{courbure}}(x)$ est obtenue à l'aide de la formule pour la longeur d'un segment de courbe paramétrée.

3. Le déplacement dû au cisaillement, $u_i^{\text{Cisaillement}}(x) = \frac{1-\nu_i^2}{E_i t_i b} \int_0^x Q(\xi)\mathrm{d}\xi - \kappa_i q(x)$ avec $i = s, c$, où $q(x)$ est la force de cisaillement par unités surfaciques de longueur à l'interface (c'est-à-dire la contrainte de cisaillement à l'interface), $Q(x) = \int_{-l}^{x} q(\xi)\mathrm{d}\xi$ est la force ressentie par la section transversale située à x (c'est-à-dire la force axiale par unité de longueur) et κ_i est le *coefficient d'accommodation de l'interface* et sera discuté ci-dessous.

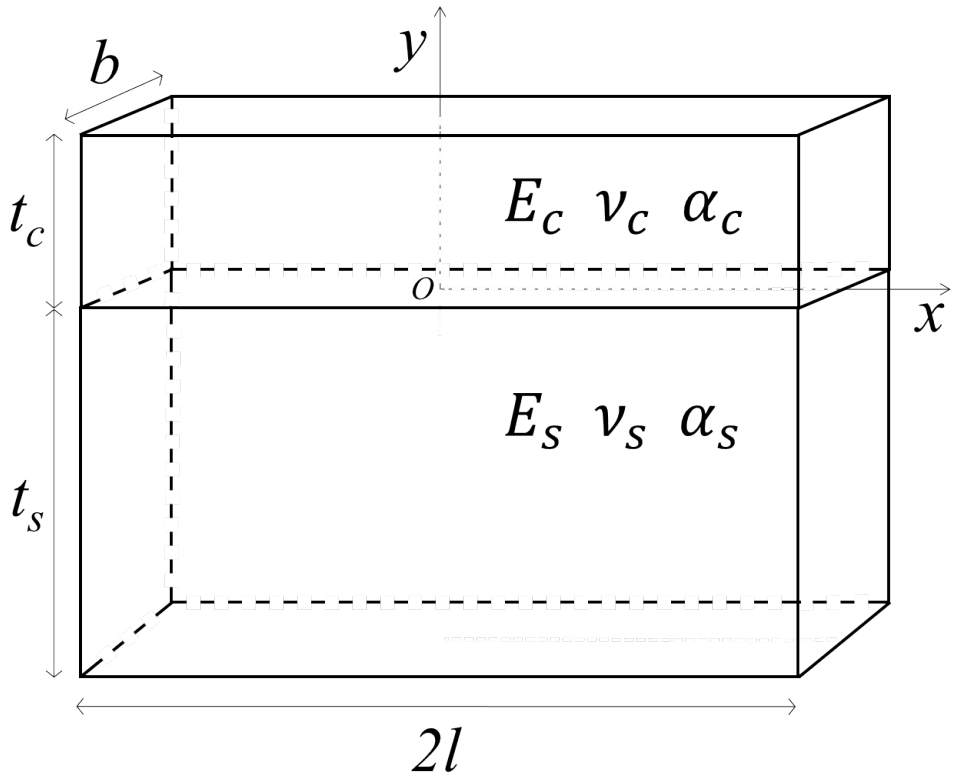


Figure 2.3 Une couche (indice c) sur un substrat épais (indice s).

L'équation pour le déplacement dû au cisaillement est beaucoup moins intuitive que les deux autres. On voit tout d'abord que $u_i^{\text{Cisaillement}}(x)$ est composé de deux termes. Le premier terme, qui peut être réécrit $\frac{1-\nu_i^2}{E_i t_i b} \int_0^x \left(\int_{-l}^{\xi} q(\chi)\mathrm{d}\chi \right) \mathrm{d}\xi$, correspond au déplacement dû aux forces de cisaillement si celles-ci sont distribuées de façon uniforme dans le sens de l'épaisseur (dans le sens des y) et si aucun déplacement n'a lieu dans le sens de la profondeur [5].

Puisque les forces de cisaillements ne sont pas nécessairement distribuées de façon uniforme, un deuxième terme est nécessaire. Ce terme correspond à la correction pour la non-uniformité

5. L'hypothèse qu'aucun déplacement n'a lieu dans le sens de la profondeur reviens à considérer un étant plan de contrainte ce qui est très commun dans la littérature [11, 12].

de la distribution des forces et est obtenu en avançant l'hypothèse que cette correction dépend uniquement de la force de cisaillement dans la section transversale considérée et est proportionnelle à cette force.

Ainsi, si l'on assume, sans perte de généralité, que $\Delta T > 0$ et que $\alpha_c < \alpha_s$, alors le déplacement longitudinal de la couche et du substrat infiniment près de l'interface est :

$$\begin{aligned} u_c(x) &= \alpha_c \Delta T x + \frac{t_c}{2} \int_0^x \frac{\mathrm{d}\xi}{R(\xi)} - \frac{1-\nu_c^2}{E_c t_c b} \int_0^x \left(\int_{-l}^{\xi} q(\chi) \mathrm{d}\chi \right) \mathrm{d}\xi + \kappa_c q(x) \\ u_s(x) &= \alpha_s \Delta T x - \frac{t_s}{2} \int_0^x \frac{\mathrm{d}\xi}{R(\xi)} + \frac{1-\nu_s^2}{E_s t_s b} \int_0^x \left(\int_{-l}^{\xi} q(\chi) \mathrm{d}\chi \right) \mathrm{d}\xi - \kappa_s q(x). \end{aligned} \tag{2.33}$$

Coefficient d'accommodation de l'interface κ

L'équation pour le coefficient d'accommodation de l'interface, κ, est obtenue en considérant une languette longue et étroite (voir la figure 2.4) soumise à une contrainte de cisaillement $\tau_0(x)$, en $y = 0$, pouvant être exprimée à l'aide de l'expansion :

$$\tau_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \gamma_n \sin \zeta_n x, \tag{2.34}$$

où $\zeta_n = \frac{(2n+1)\pi}{2l}$ et $\gamma_n = \frac{2}{\zeta_n l} \int_0^l \tau_0(x) \sin \zeta_n x \, \mathrm{d}x$. Le déplacement en fonction de la position en x peut être obtenu pour les points en $y = 0$ en utilisant la solution de Ribière [40]. On a donc :

$$u_0(x) = \frac{(1+\nu)}{2E} \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \left[(3 - \nu - (1+\nu)\zeta_n t \operatorname{cotanh} \zeta_n t) \operatorname{cotanh} \zeta_n t + (1+\nu)\zeta_n t \right] \sin \zeta_n x. \tag{2.35}$$

Pour une telle languette soumise à une contrainte de cisaillement $\tau_0(x)$ le déplacement transversal vient uniquement de $u^{cisaillement}(x)$ et donc on s'attend à ce que $u_0(x)$ satisfasse aussi l'équation suivante :

$$u_0(x) = -\frac{1-\nu^2}{Etb} \int_0^x \left(\int_{-l}^{\xi} q(\chi) \mathrm{d}\chi \right) \mathrm{d}\xi + \kappa q(x). \tag{2.36}$$

Puisque $q(x) = b\tau_0(x)$ implique que $q(x) = b \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \gamma_n \sin \zeta_n x$ on a donc, en utilisant l'équation 2.36 :

$$u_0(x) = \frac{1-\nu^2}{E} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\gamma_n}{\zeta_n l} \sin \zeta_n x + \kappa b \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \gamma_n \sin \zeta_n x. \tag{2.37}$$

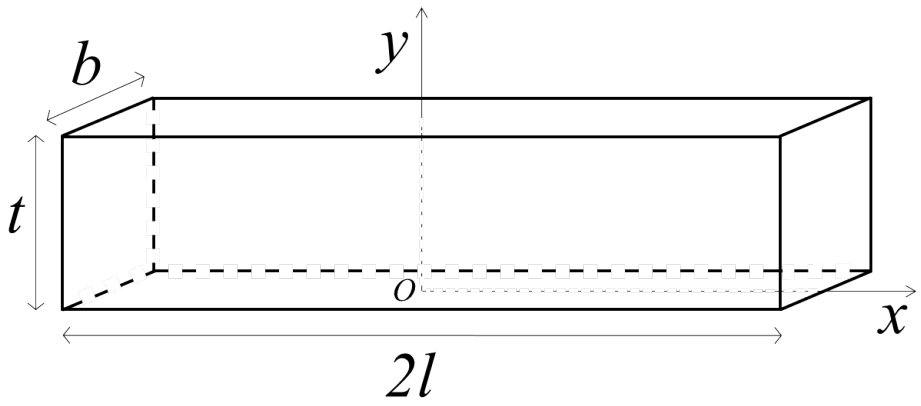


Figure 2.4 Languette étroite avec un module de Young E et un coefficient de Poisson ν.

En isolant κ dans les équations 2.35 et 2.37 on obtient :

$$\kappa = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n K(\zeta_n) \sin \zeta_n x}{Eb \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \gamma_n \sin \zeta_n x}, \tag{2.38}$$

où $K(\zeta_n) = \frac{1+\nu}{2}\left[(3-\nu-(1+\nu)\zeta_n t \operatorname{cotanh} \zeta_n t) \operatorname{cotanh} \zeta_n t + (1+\nu)\zeta_n t + (1+\nu)\zeta_n t - \frac{2(1-\nu)}{\zeta_n t}\right]$. Pour $\frac{t}{l} < 0.2$ on a que $\operatorname{cotanh} \zeta_n t \approx \frac{1}{\zeta_n t} + \frac{\zeta_n t}{3}$ et que $K(\zeta_n) \approx \frac{2}{3}(1+\nu)\zeta_n t$. Le coefficient d'accommodation de l'interface κ s'écrit alors :

$$\kappa = \frac{2(1+\nu)t}{3Eb}, \quad \text{pour} \quad \frac{t}{l} < 0.2. \tag{2.39}$$

Contrainte de cisaillement

En utilisant le fait que pour que le champ vectoriel de déplacement soit compatible, celui-ci doit être continu (c'est-à-dire $u_c(x) = u_s(x)$), on a :

$$-b\Delta\alpha\Delta T x = \kappa q(x) - \left(\frac{1-\nu_c^2}{E_c t_c} + \frac{1-\nu_c^2}{E_c t_c}\right) \int_0^x \left(\int_{-l}^{\xi} q(\chi) \mathrm{d}\chi \right) \mathrm{d}\xi + \frac{bt}{2} \int_0^x \frac{\mathrm{d}\xi}{R(\xi)}, \tag{2.40}$$

où $\kappa = b(\kappa_c + \kappa_s) = \frac{2(1+\nu_c)t_c}{3E_c} + \frac{2(1+\nu_s)t_s}{3E_s}$, $t = t_c + t_s$, $\Delta\alpha = \alpha_c - \alpha_s$, $K(x) = \frac{1}{R(x)}$ est la courbure et $\Delta T = T_{\text{dépôt}} - T$ est le différentiel de température entre la température de dépôt $T_{\text{dépôt}}$ et la température ambiante.

L'équation d'équilibre pour la section transversale en x est, en posant $Q(x) := \int_{-l}^{x} q(\chi)\mathrm{d}\chi$:

$$M_c(x) + M_s(x) = \frac{t}{2}Q(x), \tag{2.41}$$

où $M_c(x) = \frac{bD_c}{R(x)}$, $M_s(x) = \frac{bD_s}{R(x)}$ sont les moments fléchissants et $D_c = \frac{E_c t_c^3}{12(1-\nu_c^2)}$, $D_s = \frac{E_s t_s^3}{12(1-\nu_s^2)}$ sont les rigidités flexionnelles. En posant $D = D_c + D_s$, on peut réécrire l'équation 2.41 en isolant la courbure :

$$K(x) = \frac{t}{2bD}Q(x). \tag{2.42}$$

Les équations 2.40 et 2.42 peuvent être combinées pour nous donner une équation pour la force de cisaillement $q(x)$:

$$-\frac{b\Delta\alpha\Delta T}{\kappa}x = q(x) - k^2 \int_0^x \left(\int_{-l}^{\xi} q(\chi)\mathrm{d}\chi \right) \mathrm{d}\xi, \tag{2.43}$$

où $k^2 = \frac{\frac{1}{12}\left(\frac{t_c^2}{D_c} + \frac{t_s^2}{D_s} + \frac{3t^2}{D}\right)}{\kappa}$ et qui a pour solution, satisfaisant les conditions au bord, $q(0) = 0$ et $\int_{-l}^{l} q(\chi)\mathrm{d}\chi = 0$:

$$q(x) = -\frac{b\Delta\alpha\Delta T}{k\kappa}\frac{\sinh kx}{\cosh kl} \tag{2.44}$$

ce qui correspond à la contrainte de cisaillement suivante ([40]) :

$$\tau(x) = \frac{q(x)}{b} = -\frac{\Delta\alpha\Delta T}{k\kappa}\frac{\sinh kx}{\cosh kl}. \tag{2.45}$$

Maintenant, définissons $E' := \frac{E}{1-\nu}$ et notons qu'en général $E' \approx \frac{E}{1-\nu^2}$ de sorte que les rigidités flexionnelles sont $D_c = \frac{E_c t_c^3}{12(1-\nu_c^2)} \approx \frac{E_c t_c^3}{12(1-\nu_c)}$ et $D_s = \frac{E_s t_s^3}{12(1-\nu_s^2)} \approx \frac{E_s t_s^3}{12(1-\nu_s)}$. Pour une couche mince, l'équation 2.42 peut alors s'écrire :

$$K(x) = 6\frac{t_c + t_s}{b(E_c' t_c^3 + E_s' t_s^3)}Q(x) \approx 6\frac{Q(x)}{E_s' t_s^2}. \tag{2.46}$$

En utilisant la compatibilité du déplacement, on obtient alors :

$$q(x) - k_{\mathrm{CM}}^2 \int_0^x Q(\xi)\mathrm{d}\xi = -\frac{b\Delta\alpha\Delta T}{\kappa}x, \tag{2.47}$$

où $k_{\mathrm{CM}}^2 = \frac{\lambda}{\kappa}$ et $\lambda = \frac{1}{E_c' t_c} + \frac{1}{E_s' t_s} + 3\frac{(t_c+t_s)^2}{E_c' t_c^3 + E_s' t_s^3} \approx \frac{1}{E_c' t_c}$. En prenant les conditions aux bords

$q(0) = 0$ et $Q(l) = 0$ l'équation 2.47 a pour solution :

$$q(x) = -bE'_c t_c \Delta\alpha\Delta T \frac{\sinh k_{\mathrm{CM}} x}{\cosh k_{\mathrm{CM}} l} k_{\mathrm{CM}}. \tag{2.48}$$

La contrainte de cisaillement est alors :

$$\tau(x) = \frac{q(x)}{b} = -E'_c t_c \Delta\alpha\Delta T \frac{\sinh k_{\mathrm{CM}} x}{\cosh k_{\mathrm{CM}} l} k_{\mathrm{CM}} \qquad \text{(couche mince)}. \tag{2.49}$$

Notons ici que si l'on définit $\chi_0(x) = 1 - \frac{\cosh k_{CM} x}{\cosh k_{CM} l}$ et $\chi_1(x) = -\frac{\mathrm{d}\chi_0(x)}{\mathrm{d}x} = k\frac{\sinh k_{CM} x}{\cosh k_{CM} l}$ alors la contrainte de cisaillement peut s'écrire :

$$\tau(x) = -E'_c t_c \Delta\alpha\Delta T \chi_1(x) \qquad \text{(couche mince)}. \tag{2.50}$$

Ces définitions nous seront utiles plus loin.

Contrainte parallèle

La contrainte parallèle [6] (parallèle à l'interface) dû aux forces $Q(x)$ et au moment fléchissant est donnée par :

$$\begin{aligned} \sigma_c(x) &= -\frac{\Delta\alpha\Delta T}{\lambda t_c}\left(1 + \frac{3tD_c}{Dt_c}\right)\left(1 - \frac{\cosh kx}{\cosh kl}\right) \\ \sigma_s(x) &= \frac{\Delta\alpha\Delta T}{\lambda t_s}\left(1 + \frac{3tD_s}{Dt_s}\right)\left(1 - \frac{\cosh kx}{\cosh kl}\right), \end{aligned} \tag{2.51}$$

où $\sigma > 0$ signifie une contrainte en tension et $\sigma < 0$ signifie une contrainte en compression.

Pour une couche mince, le moment fléchissant est très petit. La contrainte parallèle est donc due principalement aux forces $Q(x)$. On a donc :

$$\sigma_c(x) = \frac{Q(x)}{t_c} = E'_c \Delta\alpha\Delta T \chi_0(x) \qquad \text{(couche mince)}. \tag{2.52}$$

Pour le substrat, la contrainte parallèle est due à la force $Q(x)$ et à son moment fléchissant $M_s(x) = \frac{bD_s}{R(x)} = \frac{E'_c t_c t_s}{2}\left(1 - \frac{\cosh k_{\mathrm{CM}} x}{\cosh k_{\mathrm{CM}} l}\right)\Delta\alpha\Delta T$. On peut montrer que :

$$\sigma_s(x) = -\frac{Q(x)}{t_s} - 6\frac{M_s(x)}{t_s^2} = -4\frac{t_c}{t_s}E'_c \Delta\alpha\Delta T \chi_0(x) \qquad \text{(couche mince)}. \tag{2.53}$$

6. Parfois appelé contrainte normale dans la littérature (en utilisant la convention du formalisme des poutres). Cette contrainte a été renommée par l'auteur pour éviter les confusions.

Contrainte de pelage

La *contrainte de pelage* («peeling stress» en anglais), $p(x)$, est la contrainte reliée à la force perpendiculaire à l'interface et elle est la cause des délaminations survenant à l'interface. On peut montrer à partir de l'équation d'équilibre que pour que la force perpendiculaire à l'interface soit nulle à $x = l$ la contrainte de pelage doit être donnée par [40] :

$$p(x) = -\frac{t_s D_c - t_c D_s}{2D\kappa}\Delta\alpha\Delta T\frac{\cosh kx}{\cosh kl}. \tag{2.54}$$

Pour une couche mince, l'équation d'équilibre des forces perpendiculaires à l'interface est :

$$(x+l)N_0 - \int_{-l}^{x} N(\xi)\mathrm{d}\xi = M_c(x) - \frac{t_c}{2}Q(x) \approx -\frac{t_c}{2}Q(x), \tag{2.55}$$

où $N(x)$ est la force associé à la contrainte de pelage à l'interface. On a alors :

$$N(x) = \int_{-l}^{x} p(\chi)\mathrm{d}\chi = N_0 - \frac{E_c' t_c^2 \Delta\alpha\Delta T}{2}\frac{\sinh k_{\mathrm{CM}}x}{\cosh k_{\mathrm{CM}}l}k_{\mathrm{CM}}, \tag{2.56}$$

$$p(x) = -\frac{\mathrm{d}N(x)}{\mathrm{d}x} = -\frac{E_c' t_c^2 \Delta\alpha\Delta T}{2}\chi_2(x) \quad \text{(couche mince)}, \tag{2.57}$$

où $\chi_2(x) = -\frac{\mathrm{d}\chi_1(x)}{\mathrm{d}x} = -k_{CM}^2\frac{\cosh k_{CM}x}{\cosh k_{CM}l}$.

2.2.2 Formalisme pour les empilements

Les hypothèses du modèle pour un empilement de q couches et de longueur $2l$ (voir la figure 2.5) sont résumées ci-dessous pour la commodité du lecteur :

1. Les matériaux sont linéairement élastiques ;
2. Le changement de température est uniforme ;
3. L'empilement est mince, tel que $\frac{t_f}{2l} < 0.2$ où $t_f = \sum_{i=1}^{q} t_i$ et que $t_f \ll t_0$;
4. La courbure, $K = \frac{1}{R}$, est petite, tel que $\frac{t_f}{R(x,y)} \ll 1$ de sorte que l'on puisse approximer que le rayon de courbure dépend uniquement de x et pas de y ;
5. La force de cisaillement $T(x)$ dans une couche peut être obtenue en multipliant la force calculée en supposant qu'elle est constante dans la couche (indépendante de la position en x) $T = E_c' t_c \Delta\alpha\Delta T$ par un facteur $\chi_0(x) = 1 - \frac{\cosh k_{CM}x}{\cosh k_{CM}l}$ qui contient la distribution longitudinale (selon x) de cette force (voir la figure 2.6). Ainsi, on peut écrire $\sigma(x) = \frac{T}{t_c}\chi_0(x)$, $\tau(x) = -T\chi_1(x)$ et $p(x) = \frac{t_c T\chi_2(x)}{2}$.

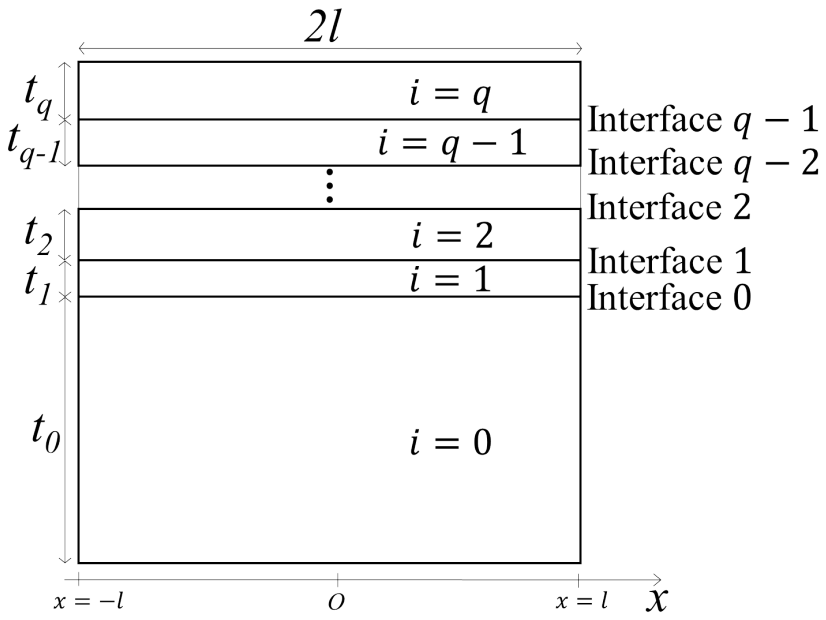


Figure 2.5 Empilement arbitraire de couches minces.

L'hypothèse 5 a plusieurs répercussions sur notre modèle. En effet, sans cette hypothèse les équations pour la contrainte de cisaillement et de pelage constituent alors un problème de valeur propre [47]. Ainsi, l'hypothèse 5 est adoptée dans notre cas puisque le formalisme sera utilisé dans une boucle d'optimisation et que le gain de vitesse de calcul que cette hypothèse apporte justifie son utilisation.

Pour le cas multicouche, on utilise la condition de compatibilité de la déformation (plutôt que celle du déplacement comme dans le cas d'une seul couche). Si e_i et e_{i-1} représentent les déformations à l'interface $(i-1)$ dans la couche au-dessus de l'interface et en dessous de l'interface $(i-1)$ respectivement, alors celles-ci peuvent être exprimées comme :

$$\left.\begin{aligned} e_i(x) &= \alpha_i \Delta T - \lambda_i F_i - \frac{t_i}{2R} \\ e_{i-1} &= \alpha_{i-1} \Delta T - \lambda_{i-1} F_{i-1} - \frac{t_{i-1}}{2R} \end{aligned}\right\} \text{interface } i-1 \qquad i = 1, 2, 3, ..., q \ , \tag{2.58}$$

où $\lambda_i = \frac{1}{E_i' t_i}$ est l'accommodation axiale de la couche i, α_i est le coefficient d'expansion thermique de la couche i et F_i est la force (assumée constante dans la couche) agissant sur la couche i (voir la figure 2.6). En utilisant que $e_{i-1} = e_i$ (compatibilité de la déformation), on a :

$$F_i = \frac{\left(\lambda_0 F_0 + \Delta\alpha_i \Delta T - \frac{a_i}{R}\right)}{\lambda_i} \qquad \text{pour } i = 0, 1, 2, ..., q, \tag{2.59}$$

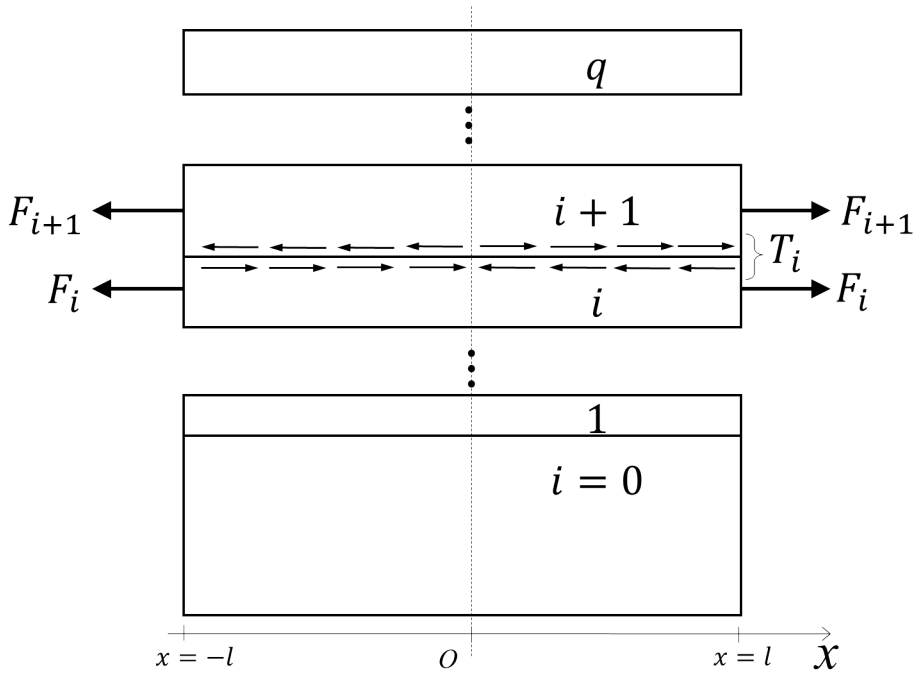


Figure 2.6 Forces dans un empilement arbitraire de couches minces.

où $a_i = \left(\sum_{j=0}^{i} t_j\right) - \frac{t_0+t_i}{2}$. Maintenant, puisque nous considérons un empilement statique, nous devons avoir $\sum_{i=0}^{q} F_i = 0$. On a donc :

$$\lambda_0 F_0 = -\frac{\sum_{i=0}^{i} \frac{\Delta\alpha_i}{\lambda_i}}{\sum_{i=0}^{i} \frac{1}{\lambda_i}} \Delta T + \frac{1}{\rho} \frac{\sum_{i=0}^{i} \frac{a_i}{\lambda_i}}{\sum_{i=0}^{i} \frac{1}{\lambda_i}}. \tag{2.60}$$

Pour des couches minces, $a_i \approx \frac{t_0}{2}$ car $\sum_{i=1}^{q} t_i \ll t_0$. On a donc que $\lambda_0 F_0 \approx \frac{h_0}{2\rho}$ et donc

$$F_i = E_i' t_i \Delta\alpha_i \Delta T \qquad i = 1, 2, 3, ..., q. \tag{2.61}$$

La contrainte parallèle est alors :

$$\sigma_i = \frac{F_i}{t_i} = E_i' \Delta\alpha \Delta T \qquad i = 1, 2, 3, ..., q, \tag{2.62}$$

et en tenant compte de sa distribution longitudinale selon x on a :

$$\sigma_i(x) = \sigma_i \chi_0(x) = E_i' \Delta\alpha \Delta T \chi_0(x) \qquad i = 1, 2, 3, ..., q. \tag{2.63}$$

La force de cisaillement dans l'interface i entre les couches i et $i+1$ est :

$$T_i = \sum_{j=i+1}^{q} F_j = \sum_{j=i+1}^{q} \sigma_j t_j = \Delta T \sum_{j=i+1}^{q} E_j' t_j \Delta\alpha_j. \tag{2.64}$$

Ainsi, la contrainte de cisaillement et de pelage à l'interface i sont :

$$\tau_i(x) = -T_i \chi_1(x) = -k_{CM} T_i \frac{\sinh k_{CM} x}{\cosh k_{CM} l} \tag{2.65}$$

$$p_i(x) = \frac{T_i}{2} \chi_2(x) \sum_{j=i+1}^{q} t_j = -\frac{k_{CM}^2 T_i}{2} \frac{\cosh k_{CM} x}{\cosh k_{CM} l} \sum_{j=i+1}^{q} t_j, \tag{2.66}$$

où $k_{CM}^2 = \dfrac{\sum_{i=0}^{q} \lambda_i}{\sum_{i=0}^{q} \kappa_i}$ dans le cas multicouche et $\kappa_i = \frac{2}{3} \frac{1+\nu_i}{(1-\nu_i)E_i'} t_i = \frac{2}{3} \frac{1+\nu_i}{E_i} t_i$.

Par contre, puisque les coefficients de Poisson ν_i de beaucoup des matériaux que nous utilisons au LaRFIS nous sont inconnus, une valeur de $\nu_i = \frac{1}{3}$ sera assumée dans le reste de ce document (excepté là où mentionné). La raison étant la difficulté d'obtenir des résultats reproductibles pour la mesure des coefficients de Poisson en un temps acceptable. Avec $\nu_i = \frac{1}{3}$ on a alors :

$$\kappa_i = \frac{4}{3} \frac{t_i}{E_i'} \qquad \nu_i = \frac{1}{3}, \tag{2.67}$$

et donc

$$k_{CM}^2 = \frac{3}{4} \frac{\sum_{i=0}^{q} \frac{1}{E_i' t_i}}{\sum_{i=0}^{q} \frac{t_i}{E_i'}}. \tag{2.68}$$

2.3 Représentation des caractéristiques optiques et optimisation dans OpenFilters

2.3.1 Représentation des caractéristiques optiques dans OpenFilters

La lumière étant une onde électromagnétique, en l'absence de charge isolée et de courant, la propagation de la lumière peut être représentée par une série d'ondes planes données par :

$$\boldsymbol{E} = E\boldsymbol{e}\,\mathrm{e}^{i\left[\omega t - \frac{2\pi N}{\lambda} z\right]}, \tag{2.69}$$

où $\boldsymbol{E}$ est le champ électrique, E son amplitude, λ la longueur d'onde, $\boldsymbol{e}$ la direction de polarisation, ω la pulsation de l'onde, N l'indice de réfraction du matériau, z la direction de propagation et t le temps.

À chaque interface que rencontre un faisceau lumineux de polarisation quelconque, on peut le décomposer en deux ondes - une onde avec le champ électrique dans le plan d'incidence (polarisation p) et une onde avec le champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence (polarisation s) - . On définit des *pseudo-indices de réfraction* pour les deux polarisations :

$$\eta = \begin{cases} N\cos\theta & \text{s polarisation} \\ \frac{N}{\cos\theta} & \text{p polarisation} \end{cases}, \tag{2.70}$$

où θ est l'angle de propagation dans le matériau.

Comme démontré par Abelès [50], il est possible de représenter chaque couche d'un filtre optique à l'aide d'une matrice caractéristique d'ordre (2,2) en se basant sur la continuité de la composante tangentielle des champs électriques et magnétiques aux interfaces. Cette matrice donne le rapport entre lesdites composantes aux interfaces en incluant le déphasage. Ainsi, une couche h est représentée par sa matrice caractéristique :

$$M_h = \begin{bmatrix} \cos\phi_h & \frac{i\sin\phi_h}{\eta_h} \\ i\eta_h\sin\phi_h & \cos\phi_h \end{bmatrix}, \tag{2.71}$$

où l'indice de réfraction effectif η_h et le déphasage ϕ_h dans la couche h sont

$$\begin{aligned} \eta_h &= \begin{cases} N_h\sqrt{1-\sin^2\theta_h} & \text{s polarisation} \\ \frac{N_h}{\sqrt{1-\sin^2\theta_h}} & \text{p polarisation} \end{cases}, \\ \phi_h &= N_h\frac{2\pi t_h}{\lambda}\sqrt{1-\sin^2\theta_h}, \end{aligned} \tag{2.72}$$

où θ_h est l'angle de propagation dans la couche.

L'amplitude de la transmission, t, et de la réflexion r d'un filtre optique constitué de q couches minces sont donnés par :

$$t = \frac{2\eta_{inc}}{\eta_{inc}B + C} \tag{2.73}$$

et

$$r = \frac{\eta_{inc} - \frac{C}{B}}{\eta_{inc} + \frac{C}{B}}, \tag{2.74}$$

où

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left(\prod_{r=q}^{1} M_r \right) \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{em} \end{bmatrix}, \tag{2.75}$$

où η_{inc} et η_{em} sont les pseudo-indices de réfraction du milieu d'incidence et du milieu d'émergence respectivement.

OpenFilters utilise ce formalisme pour représenter les caractéristiques optiques des filtres. Le calcul des caractéristiques optiques des filtres est présenté en détail dans l'article « OpenFilters : open-source software for the design, optimization, and synthesis of optical filters » [51]. Le lecteur est invité à se référer à cet article pour plus de détails.

2.3.2 Processus d'optimisation

Pendant le processus d'optimisation, l'algorithme de Levenberg-Marquardt est utilisé pour trouver un minimum local de la fonction de mérite. Pour ce faire, la dérivée de la fonction de mérite par rapport aux paramètres du filtre (dans OpenFilters toute optimisation est effectuée en variant uniquement l'indice de réfraction des couches N_h et l'épaisseur des couches t_h) est calculée puis ces paramètres sont ensuite modifiés dans la direction qui réduit le plus la fonction de mérite [52]. La direction de modification d'un paramètre est déterminée à l'aide de la dérivée de la fonction de mérite par rapport à ce paramètre. Les paramètres sont donc ajustés de façon à diminuer l'écart entre la valeur courante de la caractéristique et la valeur cible de celle-ci comme nous le verrons.

Pour un ensemble A des valeurs courantes des paramètres d'un filtre à q couche (par exemple, $A = \{ (N_h, t_h) \mid h = 1, 2, 3, ..., q \} =: \{ (a_{1,h}, a_{2,h}) \mid h = 1, 2, 3, ..., q \}$) [7] la valeur actuelle de la fonction de mérite $\mathrm{MF}(A)$ dans une optimisation avec m cibles est donnée par :

$$\mathrm{MF}(A) = \frac{1}{m} \sum_{r=1}^{m} \left(\frac{f_r(A, x_r) - \hat{f}_r(x_r)}{\Delta f_r(x_r)} \right)^2 \tag{2.76}$$

7. $a_{1,h} = N_h$ et $a_{2,h} = t_h$

où $\hat{f}_r(x_r)$ est la valeur voulue de la caractéristique r pour laquelle une cible est définie sur toutes les valeurs de la variable indépendante x_r (x_r sera soit une température ou longueur d'onde dans notre cas), $f_r(A, x_r)$ est la valeur courante de la caractéristique r étant donné la valeur courante des paramètres $A = \{ (N_h, t_h) \mid h = 1, 2, 3, ..., q \}$ et $\Delta f_r(x_r)$ est la valeur de tolérance sur la cible r qui peut dépendre de la variable indépendante x_r [53–55].

Comme mentionné, la dérivée de la fonction de mérite par rapport à un paramètre $a_{s,h}$ du filtre permet à l'algorithme de déterminer la direction de modification du paramètre de façon à se rapprocher de la valeur cible de la caractéristique. Cette dérivée est donnée par :

$$\frac{\mathrm{dMF}}{\mathrm{d}a_{s,h}} = 2\frac{1}{m}\sum_{r=1}^{m}\left(\frac{f_r - \hat{f}_r}{\Delta(f_r)^2}\frac{\mathrm{d}f_r}{\mathrm{d}a_{s,h}}\right). \tag{2.77}$$

Dans OpenFilters, l'optimisation des mélanges de matériaux est possible grâce à une méthode qui effectue une interpolation entre les différentes valeurs des paramètres d'un mélange pour différentes valeurs du *paramètre de mélange*. Ceci permet donc à l'algorithme d'optimiser le filtre en variant seulement l'indice de réfraction et l'épaisseur des couches.

Pour les caractéristiques optiques (par exemple le spectre de réflexion, le spectre de transmission, etc.) on peut obtenir les dérivées $\frac{\mathrm{d}f_r}{\mathrm{d}a_{s,h}}$ en calculant $\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}a_{s,h}}$, avec $M = \prod_{r=q}^{1} M_r$, où M_r est la matrice caractéristique de la couche r et q est le nombre de couches. Donc la dérivée de M par rapport au paramètre $a_{s,h}$ de la couche h est :

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}a_{s,h}} = \prod_{p=q}^{h+1} M_p \frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}a_{s,h}} \prod_{p=h-1}^{1} M_p. \tag{2.78}$$

La dérivée de la matrice caractéristique de la couche h par rapport à l'épaisseur t_h est alors donnée par [51] :

$$\frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}t_h} = \frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\phi_h}\frac{\mathrm{d}\phi_h}{\mathrm{d}t_h}, \tag{2.79}$$

où

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\phi_h} &= \begin{bmatrix} -\sin\theta_h & \frac{i\cos\theta_h}{\eta_h} \\ i\eta_h\cos\theta_h & -\sin\theta_h \end{bmatrix}, \\ \frac{\mathrm{d}\phi_h}{\mathrm{d}t_h} &= N_h\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\sin^2\theta_h}. \end{aligned} \tag{2.80}$$

La dérivée de la matrice caractéristique de la couche h par rapport à l'indice de réfraction,

N_h, est, quant à elle, donnée par :

$$\frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}N_h} = \frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\phi_h}\frac{\mathrm{d}\phi_h}{\mathrm{d}N_h} + \frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\eta_h}\frac{\mathrm{d}\eta_h}{\mathrm{d}N_h}, \tag{2.81}$$

où

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\eta_h} &= \begin{bmatrix} 0 & -\frac{i\sin\theta_h}{\eta_h^2} \\ i\sin\theta_h & 0 \end{bmatrix}, \\
\frac{\mathrm{d}\eta_h}{\mathrm{d}N_h} &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1-\sin^2\theta_h}} & \text{polarisation s} \\ \frac{1}{\sqrt{1-\sin^2\theta_h}}\left(2 - \frac{1}{1-\sin^2\theta_h}\right) & \text{polarisation p} \end{cases}, \\
\frac{\mathrm{d}\phi_h}{\mathrm{d}N_h} &= t_h \frac{2\pi}{\lambda\sqrt{1-\sin^2\theta_h}}.
\end{aligned} \tag{2.82}$$

2.3.3 Synthèse et optimisation par la méthode *Step*

La méthode de synthèse et d'optimisation *Step* est constituée de deux processus répétés itérativement, à savoir : l'ajout d'un saut (*Step*) infinitésimal dans le profil d'indice à la position optimale et l'optimisation du filtre résultant en utilisant la méthode d'optimisation décrite dans la section 2.3.2.

Processus d'addition de saut

Ce processus consiste à ajouter un saut (*Step*) infinitésimal dans le profil d'indice ΔN. Pour déterminer à quel endroit ajouter ce saut dans une couche h et décider si nous devons ajouter un saut vers le haut ou vers le bas, nous utilisons la dérivée de la fonction de mérite par rapport à l'addition d'un saut infinitésimal, c'est-à-dire $\frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\Delta N}\Big|_{\Delta N=0}$ pour les caractéristiques optiques. Maintenant, quand un saut est ajouté à la position z dans une couche ($z = 0$ étant le bas de la couche), la couche initiale h est séparée en deux couches et elle devrait donc être représentée par deux matrices caractéristiques $M_{h,1}$ et $M_{h,2}$. Les déphasages dans ces matrices sont alors :

$$\begin{aligned}
\phi_{h,1} &= N_h \frac{2\pi z}{\lambda}\sqrt{1-\sin^2\theta_h}, \\
\phi_{h,2} &= N_h \frac{2\pi(t_h - z)}{\lambda}\sqrt{1-\sin^2\theta_h}.
\end{aligned} \tag{2.83}$$

Si l'augmentation (ou la diminution) de l'indice de réfraction d'un côté est égale à la diminution (ou à l'augmentation) de l'autre côté, la dérivée de la fonction de mérite par rapport

à l'addition d'un saut infinitésimal peut être exprimée par [54] :

$$\left.\frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\Delta N}\right|_{\Delta N=0} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}M_{h,2}}{\mathrm{d}N}M_{h,1} - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}M_{h,1}}{\mathrm{d}N}M_{h,2}. \tag{2.84}$$

Notons que l'équation 2.84 est implémentée différemment dans OpenFilters afin de réduire le temps de calcul. Voir [54] pour plus d'information.

La dérivée de la fonction de mérite par rapport à l'addition d'un saut vers le haut et d'un saut vers le bas est calculée et le saut (vers le haut ou vers le bas) est ajouté à l'endroit correspondant à la valeur la plus négative de l'une ou l'autre des deux dérivées. Si la valeur la plus négative de la dérivée de la fonction de mérite est une valeur correspondant à un saut vers le haut, le saut sera un saut ascendant et vice versa.

2.4 Logiciels de design et d'optimisation de revêtements

Plusieurs logiciels fournissant des outils différents pour le design optique et l'optimisation de la performance sont disponibles. Certains sont protégés par des licences commerciales et d'autres sont gratuits. Dans la section qui suit, seulement le(s) logiciel(s) pour l'optimisation des caractéristiques mécaniques des revêtements seront présentés. Plusieurs logiciels concernant les caractéristiques optiques des filtres sont répertoriés dans la thèse de doctorat de Stéphane Larouche [6]. Parmi ceux-ci, aucun ne permet de considérer les caractéristiques mécaniques des filtres de façon satisfaisante.

2.4.1 Logiciels commerciaux

À la connaissance de l'auteur, FilmDoctor® est le seul logiciel permettant une optimisation automatique des caractéristiques mécaniques des couches minces. Sa force est sa capacité à rapidement calculer le champ tensoriel de contrainte dans une architecture de couche mince quelconque soumise à une sollicitation mécanique causée par une indentation. Pour plus d'information sur les capacités de FilmDoctor® le lecteur est invité à se référer à leur site web : http ://www.siomec.de/FilmDoctor. Le logiciel n'offre toutefois pas d'outils pour l'optimisation des caractéristiques optiques des revêtements multifonctionnels.

2.4.2 Justification de la création d'un nouveau logiciel

L'intérêt derrière la création d'OpenFilters est la possibilité de l'adapter à nos besoins. Comme Stéphane Larouche le mentionne dans sa thèse, il est important pour toute institution désirant être à l'avant-garde du design de filtres optiques de développer son propre

logiciel. Puisque les caractéristiques mécaniques des filtres optiques sont de plus en plus importantes dans l'industrie et qu'aucun logiciel présentement disponible ne permet d'effectuer le design de filtres optiques en considérant à la fois leurs caractéristiques mécaniques et optiques, la création d'un nouveau module pour OpenFilters était bien justifiée.

2.5 Vérification de l'implémentation du formalisme de Suhir dans OpenFilters

Afin de vérifier notre implémentation du formalisme de Suhir pour la contrainte dans les interfaces, on utilise les résultats de Klein [1] pour une couche de diamant de 50 μm sur un substrat de ZnS de 0,5 cm d'épaisseur et de 10 cm de diamètre à une température de 20 °C. L'implémentation a été testée avec d'autres résultats de la littérature, mais uniquement la comparaison avec les résultats de Klein sera présentée pour des raisons de concision.

Les propriétés du substrat et de la couche de diamant, données dans [1], sont inscrites dans le tableau 2.1.

Tableau 2.1 Propriétés mécaniques de la couche de diamant et du substrat de ZnS donnée dans [1]

	Module biaxial [GPa]	Coefficient d'expansion thermique $[(1/°K) \times 10^{-6}]$	Température de dépôt [°C]
Couche de diamant	1175	3,3295	900
Substrat de ZnS	105	8,4432	-

La figure 2.7 montre les résultats obtenus par Klein, à l'aide du formalisme de Suhir, pour la contrainte parallèle dans la couche de diamant et la contrainte de cisaillement dans l'interface ainsi que les valeurs obtenues par l'implémentation du formalisme de Suhir dans OpenFilters pour les mêmes contraintes et la contrainte de pelage. On voit que les valeurs sont exactement les mêmes pour la contrainte parallèle et la contrainte de cisaillement. Klein ne trace toutefois pas la contrainte de pelage, mais il mentionne que celle-ci est de deux ordres de grandeur plus petite que la contrainte de cisaillement, ce qui est bien le cas dans les résultats obtenus avec l'implémentation dans OpenFilters. On peut alors en conclure que l'implémentation du formalisme de Suhir dans OpenFilters est vérifiée.

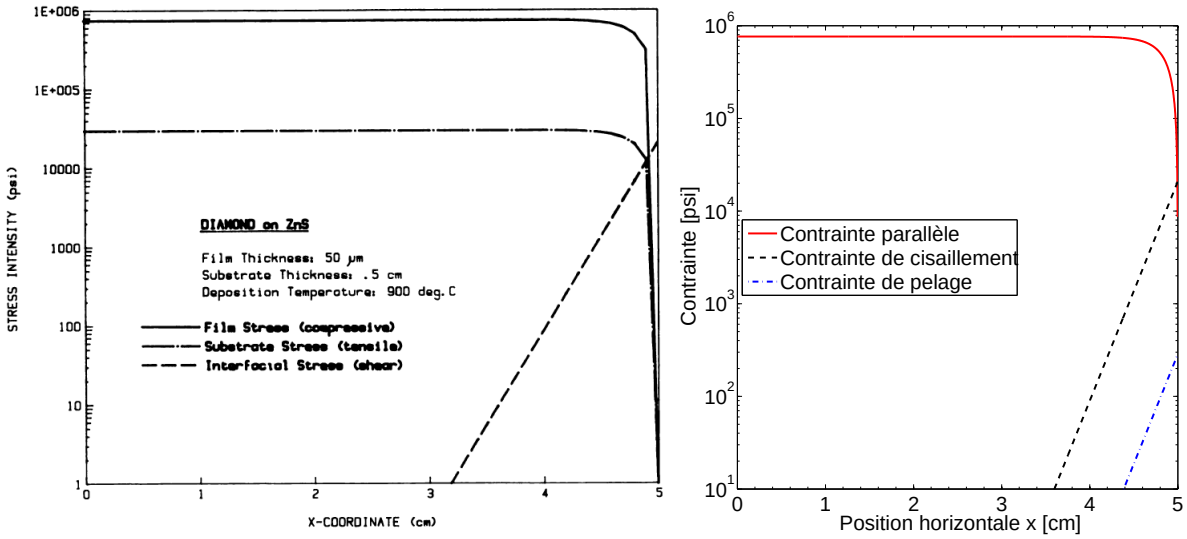


Figure 2.7 Gauche : résultats obtenus par Klein [1], à l'aide du formalisme de Suhir, pour la contrainte parallèle en compression dans la couche de diamant (Film Stress (compressive)) et la contrainte de cisaillement dans l'interface (Interfacial Stress (shear)). Droite : résultats obtenus par l'implémentation du formalisme de Suhir dans OpenFilters pour la contrainte parallèle en compression dans la couche de diamant, la contrainte de cisaillement et la contrainte de pelage dans l'interface.

CHAPITRE 3 ÉTUDE DES CONTRAINTES POUR DES REVÊTEMENTS AVEC COUCHE SUPERFICIELLE HYBRIDE ET MINÉRALE

3.1 Introduction

Lors de sa maitrise au LaRFIS, Martin Caron a étudié la stabilité des revêtements antireflets utilisés dans l'industrie ophtalmique lorsque ceux-ci sont soumis à différents types d'environnements [2]. Parmi les designs de revêtements antireflets étudiés, un était entièrement composé de matériaux minéraux et un autre avait la couche superficielle composée de matériaux hybrides (du SiOCH). Ces deux revêtements sont représentés dans la figure 3.1. Les résultats de Martin Caron concernant la stabilité thermique de ces deux revêtements montraient que le revêtement avec la couche superficielle hybride pouvait résister à des températures beaucoup plus élevées que le système constitué uniquement des couches minérales (pour plus d'information, voir [2]).

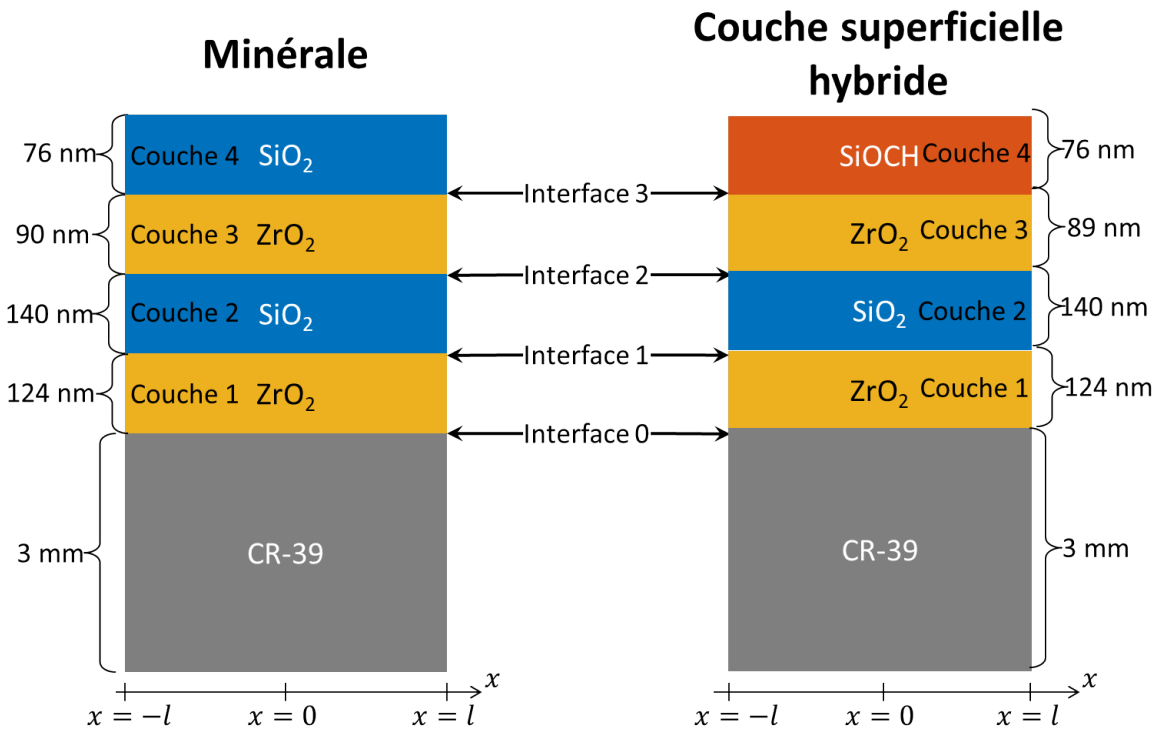


Figure 3.1 Deux systèmes de revêtements antireflets ayant des stabilités thermiques très différentes. Dans les résultats présentés ci-dessous, $l = 2.5$ cm.

Le but de cette partie de mon travail était d'expliquer ce résultat en termes de contrainte

élastique en utilisant le formalisme de Suhir introduit dans la section 2.2.

3.2 Méthodologie

Le formalisme introduit dans la section 2.2 a été utilisé pour calculer les contraintes aux interfaces ainsi que la contrainte parallèle dans les couches des deux revêtements dans la figure 3.1. Ces revêtements correspondent à des antireflets (réflexion inférieure à 1 % pour le spectre visible), déposés par évaporation à l'aide de faisceau d'ions sur des substrats de polymère (CR-39). La couche de SiOCH du revêtement hybride est produite par dépôt chimique en phase vapeur assisté par faisceau d'ions (IBACVD). Les propriétés des matériaux constituant ces revêtements telles que mesurées par Martin sont reportées dans le tableau 3.1. Pour plus de détails concernant la méthodologie utilisée pour obtenir ces valeurs, voir [2].

Notons que la température du substrat lors du dépôt n'a pas été mesurée pendant la fabrication : la valeur de 70°C est une estimation. De plus, la contrainte approximative à la température de dépôt est calculée en utilisant le fait que, dans le modèle utilisé, la contrainte parallèle à une température donnée, $\sigma(T)$, est représentée par la somme de la contrainte intrinsèque biaxiale, σ^{int}, et la contrainte thermique à cette température, $\sigma^{ther}(T)$, c'est-à-dire [1] :

$$\sigma(T) = \sigma^{int} + \sigma^{ther}(T). \tag{3.1}$$

Les données de Martin Caron nous donnent $\sigma(20°\text{C})$. Puisque $\sigma^{ther}(T) = E_i \Delta\alpha \Delta T = E_i(\alpha_i - \alpha_s)(T_0 - T)$, où t_0 est la température à laquelle la contrainte thermique dans la couche i est nulle et α_s est le CET du substrat, on a :

$$\sigma_i^{int} = \sigma_i(70°\text{C}) = \sigma_i(20°\text{C}) - E_i(\alpha_i - \alpha_0)(T_0 - 20°\text{C}), \tag{3.2}$$

et donc on peut calculer la contrainte approximative à la température de dépôt pour chacune des couches comme suit :

$$\begin{aligned} \sigma_i(70°\text{C}) &= \sigma_i(20°\text{C}) - E_i(\alpha_i - \alpha_0)(T_0 - 20°\text{C}) + E_i(\alpha_i - \alpha_0)(T_0 - 70°\text{C}) \\ &= \sigma_i(20°\text{C}) - E_i(\alpha_i - \alpha_0)50°\text{C}. \end{aligned} \tag{3.3}$$

1. Notons qu'en pratique, la contribution de la contrainte due à l'humidité, σ^{hum}, dans les couches est significative pour des températures inférieures à 60 °C et ne devrait pas être négligée - au-dessus de 60 °C, l'humidité est évaporée et donc σ^{hum} peut être négligée -. Cette contrainte n'est toutefois pas incluse dans le traitement présenté ici, puisqu'elle n'est pas linéaire en fonction de la température et que sa caractérisation sort du cadre de ce mémoire. Le but est de déterminer ce qui peut être conclu en ne tenant pas compte des effets de l'humidité dans ce cas précis. Si des données précises sont connues à propos de la variation de $\sigma^{hum}(T)$ en fonction de la température T, alors il est possible de l'inclure au traitement présenter ici.

Ces valeurs sont reportées dans le tableau 3.1 et peuvent être interprétées comme étant la contrainte intrinsèque σ^{int} dans l'équation 3.1.

On suppose que les CET ne varient pas avec la température.

3.3 Résultats et discussions

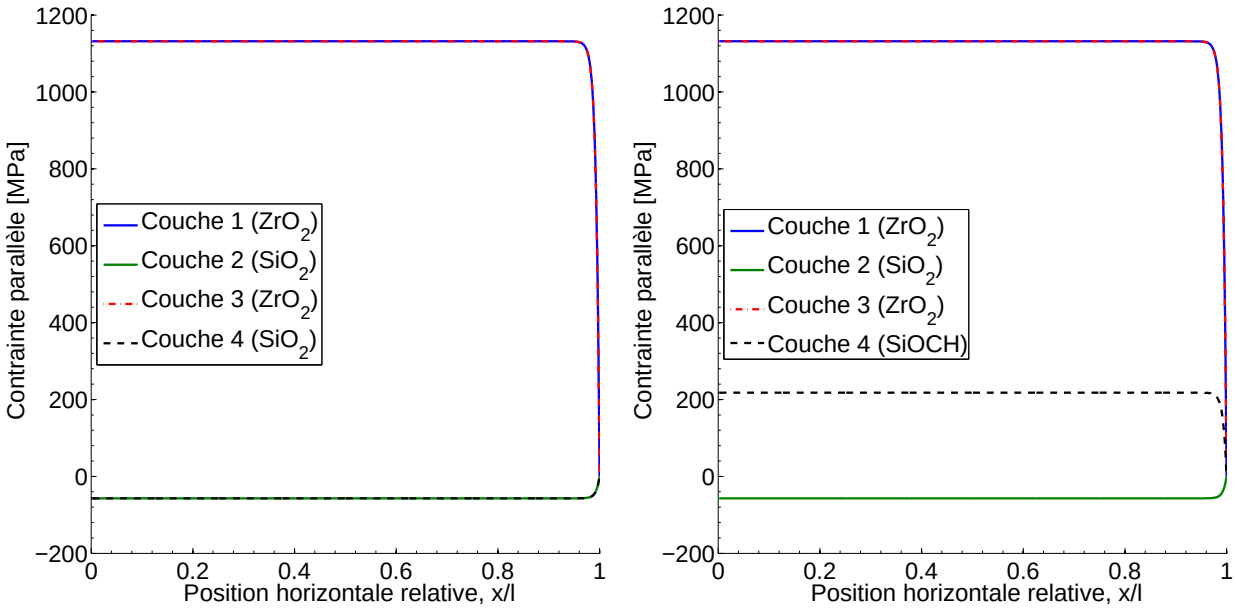


Figure 3.2 Contrainte parallèle dans chacune des couches à 80°C pour l'antireflet entièrement minérale (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite).

Les contraintes parallèles en fonction de la position horizontale, x, dans chacune des couches à 80°C pour les deux antireflets sont représentées dans la figure 3.2. On voit que la valeur

Tableau 3.1 Propriétés mécaniques des matériaux constituant les revêtements antireflets [2]. La contrainte dans ce tableau correspond à la contrainte parallèle.

	Module de Young [GPa]	Coefficient de Poisson	Coefficient d'expansion thermique [(1/°C) × 10^{-6}]	Contrainte mesurée à 20°C [MPa]	Contrainte à la température de dépôt (70°C) [MPa]
SiO_2	38,0	0,25	5,37	-405	-130
ZrO_2	104,0	0,25	3,08	164	928
SiOCH	51,0	0,25	3,28	-256	119
CR-39	3,94	0,37	150	-	-

de la contrainte parallèle dans une couche est la même que celle dans les couches de même matériau. Par exemple, la valeur de contrainte parallèle dans la couche 1 et la couche 3 du revêtement minéral est la même et ces deux couches sont composées de ZrO_2. Ceci est dû au fait que ces valeurs ont été calculées à l'aide de l'équation 2.63, c'est-à-dire :

$$\sigma_i(x) = E_i' \Delta\alpha \Delta t \chi_0(x) \qquad i = 1, 2, 3, ..., q.$$

Dans cette équation, la contrainte parallèle, σ, dépend uniquement de la position horizontale, x, du module de Young de la couche et de la différence de CET entre la couche et le substrat (ce qui est vrai pour les couches minces) [2]. Puisque deux couches de même matériau ont le même module de Young et la même différence de coefficient d'expansion thermique avec le substrat, le profil de la contrainte parallèle en fonction de la position horizontale est le même pour les couches du même matériau. On voit aussi que la contrainte dans la couche de SiOCH est en tension contrairement à la contrainte dans la couche de SiO_2 qui est en compression. Le système avec la couche superficielle hybride a donc une couche en tension de plus que le revêtement inorganique (3 couches en tension contre seulement 2 couches en tension pour l'inorganique).

Les valeurs maximales de la contrainte parallèle dans chacune des couches en fonction de la température pour l'antireflet entièrement inorganique et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride sont reportées dans la figure 3.3. La plage de température choisie correspond approximativement aux températures auxquelles les antireflets risquent d'être exposés (dans le pire des cas) durant leurs utilisations.

Les valeurs de contrainte de cisaillement en fonction de la position horizontale dans chacune des interfaces à 80°C pour l'antireflet entièrement inorganique et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride sont reportées dans la figure 3.4. On constate que la valeur maximale de la contrainte de cisaillement est située au bord (c'est-à-dire $x = \pm l$). L'interface 0, celui entre le CR-39 et le ZrO_2, correspond à celui avec les valeurs de contrainte de cisaillement qui sont les plus élevées (comparativement aux autres interfaces) pour les deux revêtements. La valeur maximale de cette contrainte est de -1,43 MPa pour le revêtement inorganique et de -1,54 MPa pour le revêtement avec la couche superficielle hybride. Il ne s'agit pas d'une différence très élevée, mais on note que la contrainte de cisaillement est plus élevée (en valeur absolue) dans le cas du revêtement avec couche superficielle hybridée que pour le revêtement inorganique.

Les valeurs maximales (à $x = l$) de la contrainte de cisaillement dans chacune des interfaces en

2. Notons que les CET dépendent généralement de la température. On ne tiendra pas compte de cette dépendance dans ce mémoire. Les CET seront donc assumés constants.

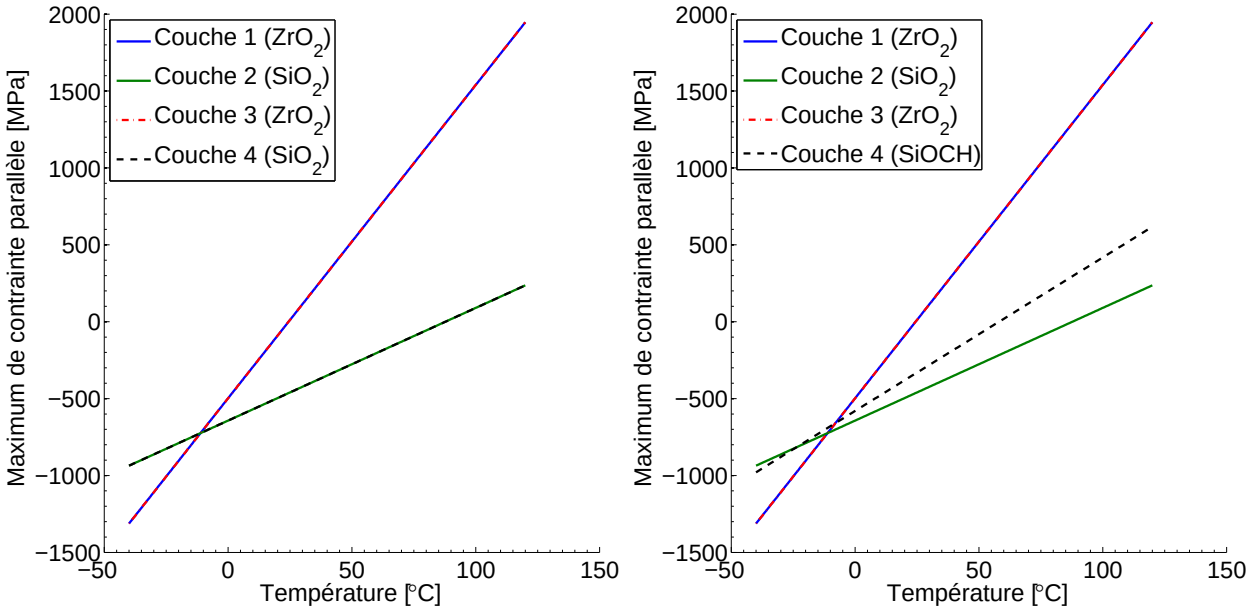


Figure 3.3 Valeur maximale de la contrainte parallèle dans chacune des couches en fonction de la température, pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite).

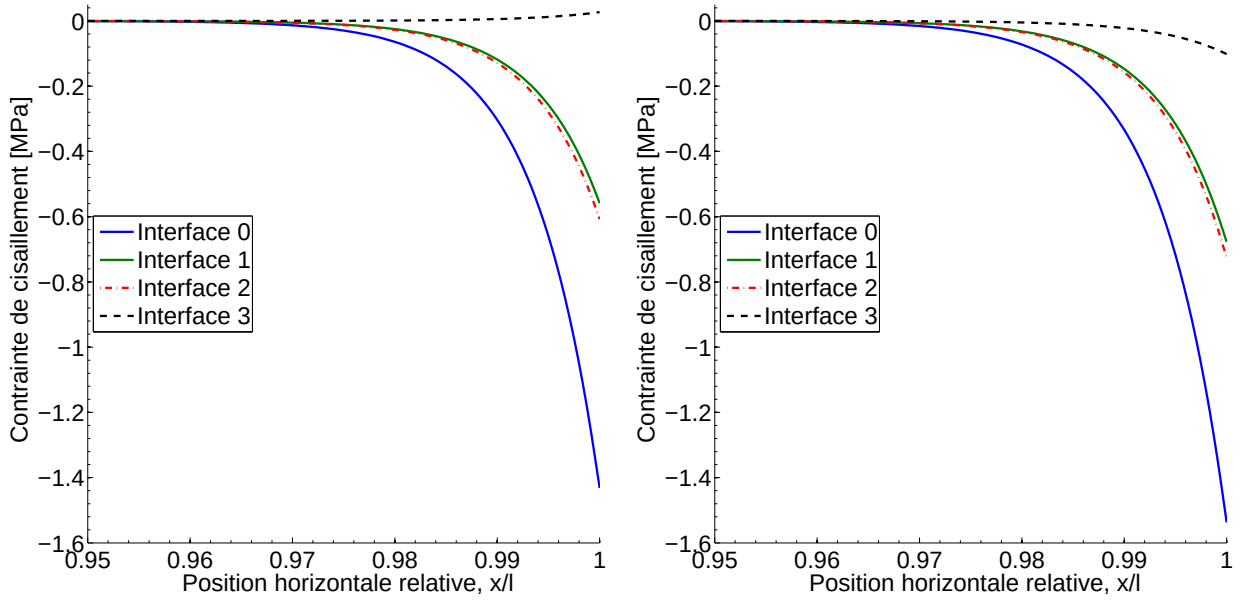


Figure 3.4 Contrainte de cisaillement dans chacune des interfaces à 80°C pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite)

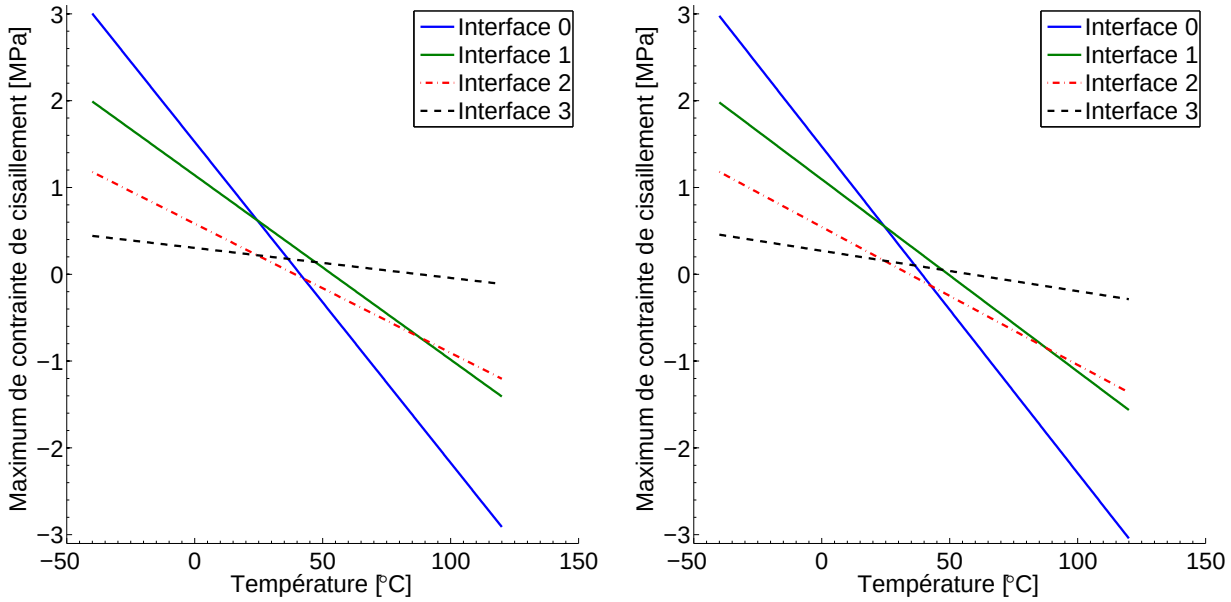


Figure 3.5 Valeur maximale (valeur au bord) de la contrainte de cisaillement dans chacune des interfaces en fonction de la température pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite).

fonction de la température pour l'antireflet entièrement inorganique et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride sont reportées dans la figure 3.5. Notons que l'interface avec la plus grande valeur de contrainte de cisaillement devient l'interface 1 pour les températures entre environ 20°C et 50°C. Pour les températures supérieures et inférieures, la plus grande valeur de contrainte de cisaillement se situe dans l'interface 0.

Les valeurs de contrainte de pelage en fonction de la position horizontale dans chacune des interfaces à 80°C pour l'antireflet entièrement inorganique et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride sont reportées dans la figure 3.6. On constate que tout comme pour la contrainte de cisaillement, la valeur maximale de la contrainte de pelage est située au bord. De plus, l'interface 0 correspond encore une fois à celui avec les valeurs de contrainte de pelage qui sont les plus élevées (comparativement aux autres interfaces) pour les deux revêtements. La valeur maximale de cette contrainte est de 1913 Pa en compression pour le revêtement inorganique et de 2022 Pa en compression pour le revêtement avec la couche superficielle hybride. Notons que ces valeurs de contrainte sont de plusieurs ordres de grandeurs plus petites que les deux contraintes précédentes. Il est tout de même intéressant de constater que le revêtement avec la couche superficielle hybride possède des interfaces plus en compression que le revêtement inorganique. Cela pourrait expliquer la meilleure stabilité

thermique du revêtement avec couche superficielle hybride si les défauts causés par chauffage étaient principalement constitués de délaminations. Or, ce n'est pas le cas.

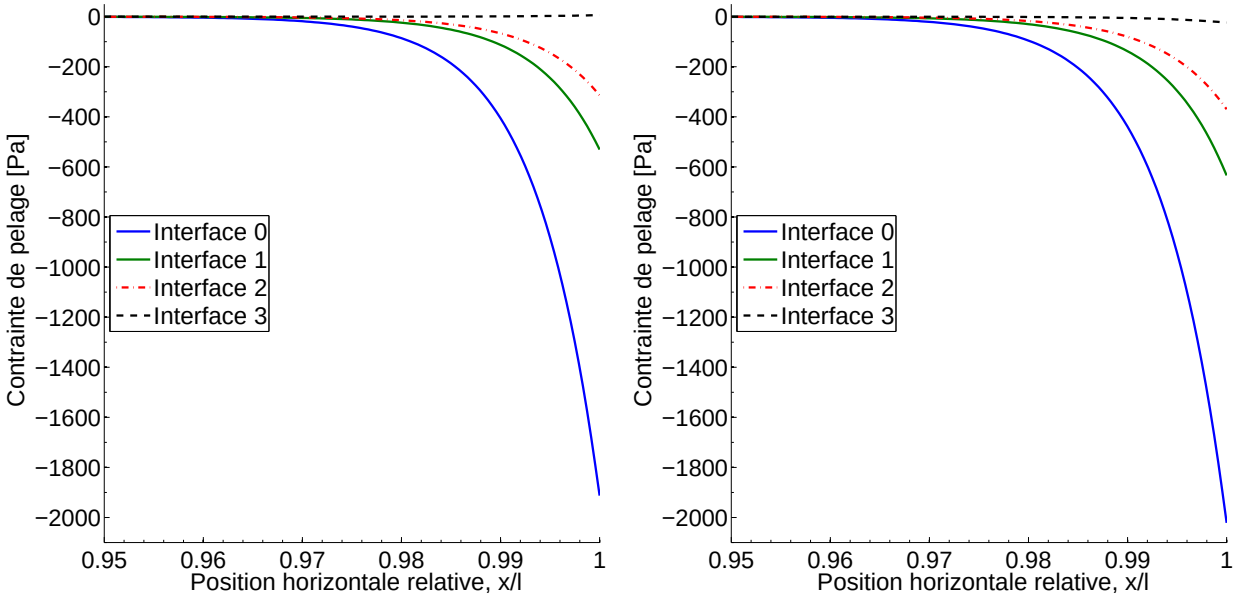


Figure 3.6 Contrainte de pelage dans chacune des interfaces à 80°C pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite).

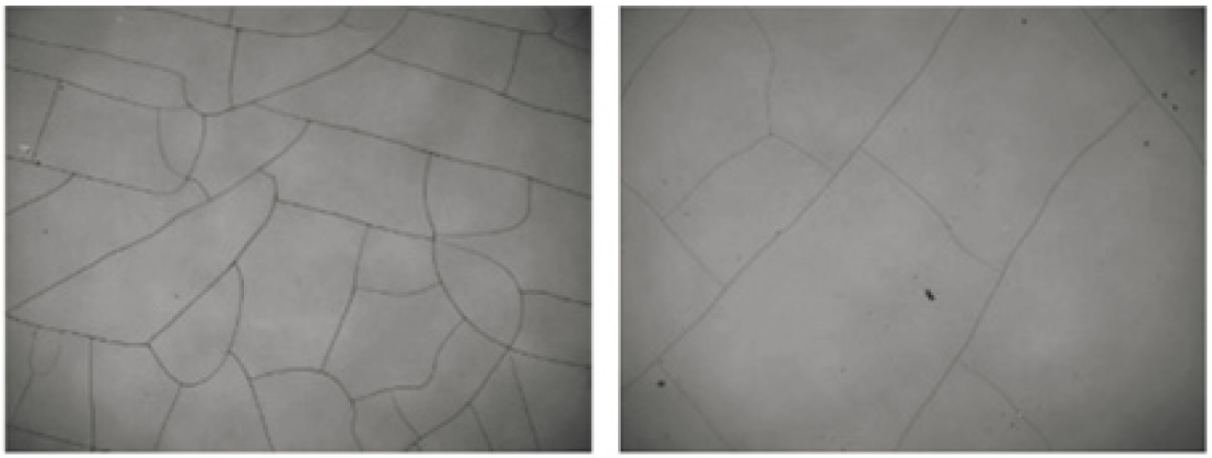


Figure 3.7 Micrographies optiques des revêtements antireflets sur le substrat CR-39 après les tests de chaleur pour le revêtement inorganique déposé par évaporation par faisceau d'électrons avec assistance ionique (gauche) et le revêtement avec couche hybride superficielle avec assistance ionique (droite). La largeur et la hauteur de chaque image correspondent à 3,52 mm (image prise dans [2])

La figure 3.7 montre des micrographies optiques des revêtements antireflets après les tests de chaleur pour le revêtement inorganique déposé par évaporation par faisceau d'électrons avec assistance ionique (appelons-le le revêtement eB+ion) et le revêtement avec couche hybride superficielle déposé avec assistance ionique (appelons-le le revêtement hybride). Les revêtements eB+ion et hybride correspondent aux revêtements de la figure 3.1, donc à ceux des résultats ci-dessus. On voit qu'aucun des revêtements eB+ion et hybride ne présentent de délamination. Ainsi, le fait que la contrainte de pelage soit davantage en compression dans le revêtement hybride que dans le revêtement eB+ion ne permet pas d'expliquer la meilleure stabilité thermique du revêtement hybride puisqu'aucune délamination n'a lieu.

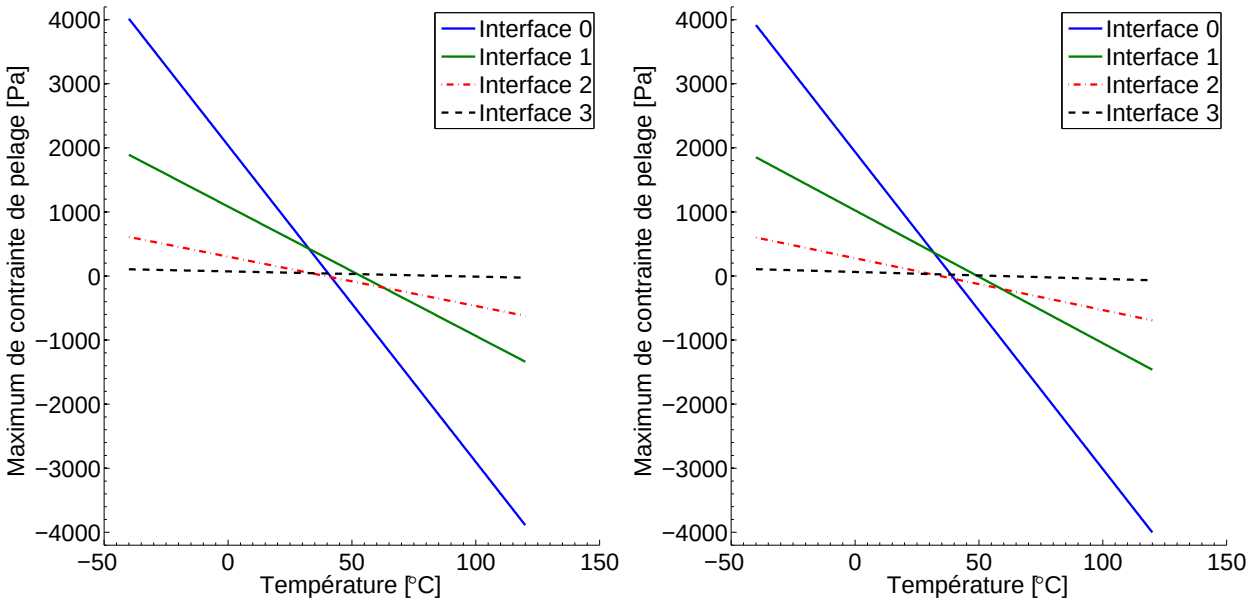


Figure 3.8 Valeur maximale (valeur au bord) de la contrainte de pelage dans chacune des interfaces en fonction de la température pour l'antireflet entièrement inorganique (à gauche) et pour l'antireflet avec la couche superficielle hybride (à droite).

La valeur maximale (à $x = l$) de la contrainte de pelage dans chacune des interfaces en fonction de la température pour les deux revêtements antireflets est reportée dans la figure 3.8. Tout comme pour la contrainte de cisaillement, l'interface avec la plus grande valeur de contrainte de pelage (en valeur absolue) devient l'interface 1 pour les températures entre environ 30°C et 40°C. Pour les températures supérieures et inférieures, la plus grande valeur absolue de contrainte de pelage se situe dans l'interface 0.

Discussion

Pour commencer, si la température de dépôts est plus petite que 70 °C, alors les contraintes à la température de dépôt (contraintes intrinsèques, σ_i^{int}) seront plus petites que les valeurs du tableau 3.1. Les graphiques des contraintes en fonction de la température auront donc la même allure que ceux présentés ci-dessus (mêmes pentes), mais les droites seront déplacées vers la gauche dans le graphique.

Maintenant, sachant que les couches de SiO_2 commencent généralement à fissurer lorsqu'elles sont soumises à des contraintes parallèles entre 750 MPa et 1150 MPa en tension (correspondant à des déformations entre 1,5% et 2,3%) et que les couches de ZrO_2 fissurent généralement lorsqu'elles sont soumises à des contraintes parallèles entre 550 MPa et 1250 MPa en tension (correspondant à des déformations entre 0,4% et 0,9%) on peut estimer à quelle température les couches commenceront à fissurer [56]. D'après la figure 3.3, on voit que, sur la plage de température considérée, la contrainte parallèle dans les couches de SiO_2 n'est pas suffisamment élevée pour être la source de fissuration. Par contre, la contrainte parallèle dans les couches de ZrO_2 est suffisamment élevée pour être la source de fissuration à partir d'environ 80°C. Ainsi, pourvu qu'à des températures autour de 80°C tous les matériaux de l'empilement aient conservé leur comportement élastique, on peut s'attendre à ce que des fissurations se produisent dans les couches de ZrO_2.

Pour ce qui est des valeurs de contraintes de cisaillement, pour des revêtements antireflets typiques de l'industrie ophtalmique on mesure des valeurs se situant entre 1 MPa et 50 MPa pour l'interface entre le substrat et l'antireflet [56]. Les valeurs de contraintes de cisaillement dans les interfaces présentées ici sont donc réalistes, ce qui supporte l'hypothèse que la méthode peut être utilisée à titre d'indicateur pour le design des filtres optiques.

Finalement, la contrainte de pelage dans les revêtements optiques est très difficile à mesurer de façon expérimentale. Des techniques comme la diffraction des rayons X (DRX) triaxiale ne peuvent pas être employées puisque les couches des filtres optiques sont généralement amorphes et ne présentent pas de structures cristallines. Au moment d'écrire ce mémoire, l'auteur ne connaît pas de méthode expérimentale permettant de mesurer la contrainte de pelage dans les filtres optiques de façon satisfaisante. Dans la section 5.3 les données de contrainte aux interfaces présentées dans ce mémoire sont comparées aux données disponibles dans la littérature et les différences sont discutées. Notons toutefois que les contraintes de pelage rapportées dans la figure 3.8, étant de trois ordres de grandeurs plus petites que les contraintes de cisaillement et six ordres de grandeurs plus petites que les contraintes parallèles, sont négligeables pour les températures considérées. Les interfaces peuvent, donc, être considérées comme étant dans un état plan de contrainte.

3.4 Conclusion

Ces résultats montrent que l'étude analytique approximative de la contrainte élastique seule ne suffit pas à expliquer pourquoi la stabilité thermique des revêtements avec la couche superficielle hybride est meilleure que celle des revêtements inorganiques. En parallèle, et en complément au LaRFIS, Michael Laberge utilise la méthode des éléments finis avec un modèle micromécanique afin d'étudier le taux de libération d'énergie d'une fissure située dans la couche de ZrO_2 sous la couche superficielle lorsque le revêtement est soumis à une traction parallèle aux interfaces entre les couches. De ce point de vue, il traite, à l'aide d'une analyse par éléments finis, un problème similaire à celui considéré ici. Ces deux analyses, complémentaires l'une de l'autre, expliquent, à l'aide de différents modèles, les résultats de Martin Caron [2] concernant la stabilité thermique de ces revêtements.

CHAPITRE 4 OPTIMISATION AUTOMATISÉE, À L'AIDE D'OPENFILTERS, DE LA RÉPONSE THERMOMÉCANIQUE DES REVÊTEMENTS OPTIQUES

4.1 Introduction

Les travaux décrits dans cette section forment la base de la version 2.0 du logiciel OpenFilters discuté précédemment dans la section 1.2. Pour des raisons d'organisation du code source, il a été déterminé qu'il était préférable de créer un nouveau module intitulé «Stoney» et qui regrouperait tous les codes sources des fonctionnalités en lien avec les caractéristiques mécaniques des filtres optiques. Ces travaux furent effectués en collaboration avec Stéphane Larouche, créateur d'OpenFilters.

Dans ce chapitre je reprends une partie de la théorie présentée dans le chapitre 2, mais de façon plus concise, pragmatique et qui se porte plus facilement à une implémentation numérique. J'en profite aussi pour mentionner quelques précautions à prendre lors de l'interprétation du formalisme. Par la suite, les calculs des différentes dérivées nécessaires pour l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques sont donnés. Pour terminer, des exemples d'utilisation de ces nouvelles fonctionnalités d'OpenFilters sont présentés.

4.2 Résumé de la théorie et précautions à prendre

4.2.1 Contrainte parallèle

Comme le montre Klein [57], on peut utiliser la solution analytique de Townsend et *al.* [58] pour la courbure $K = 1/R$ (R étant le rayon de courbure comme montré dans la figure 4.1) d'un empilement composé de m couches isotropes parfaitement collées entre elles et d'épaisseur t_j avec des modules biaxiaux E'_j ($E'_j = E_j/(1-\nu_j)$ où E_j et ν_j sont le module d'Young et le coefficient de Poisson de la couche j [59]) soumis à une déformation élastique uniforme ϵ_j (Eq. 4.1) pour obtenir la courbure d'un empilement multicouche dû aux différences de CET. La solution analytique de Townsend et *coll.* est :

$$K = \frac{\sum_{r=1}^{m} E'_r t_r \tau_r (\epsilon_r - \overline{\epsilon})}{\sum_{r=1}^{m} E'_r t_r \left[\left(\frac{t}{2} + \theta - \frac{\tau_j}{2} \right) \tau_j - \frac{t_j^2}{6} - \theta t \right]}, \tag{4.1}$$

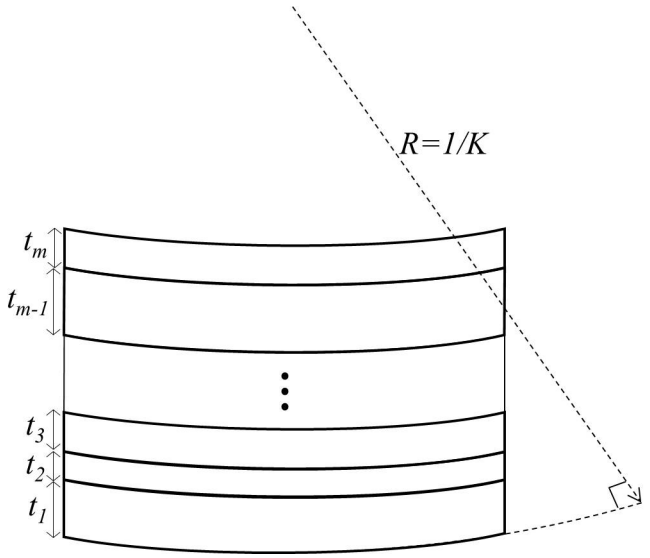


Figure 4.1 Schéma du système dont la courbure est K (où $K > 0$ pour une surface supérieure concave) est donné par l'équation 4.1 avant toute relaxation mécanique. Les couches m sont d'épaisseurs arbitraires t_j (où $\sum_{r=1}^{m} t_r = t$).

où

$$\overline{\epsilon} = \frac{\sum_{r=1}^{m} E'_r t_r \epsilon_r}{\sum_{r=1}^{m} E'_r t_r} \tag{4.2}$$

est la moyenne pondérée des déformations et

$$\begin{aligned} \tau_j &= \sum_{r=j+1}^{r=m} t_r - \sum_{r=1}^{r=j-1} t_r \\ \theta &= \frac{\sum_{r=1}^{m} E'_r t_r \tau_r}{2 \sum_{r=1}^{m} E'_r t_r}. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Pour un empilement multicouche de q couches (t_i est l'épaisseur de la couche i et $\sum_{r=1}^{q} t_r = t_f$) sur un substrat élastiquement isotrope d'épaisseur t_s (comme indiqué dans la figure 4.2), *l'approximation des couches minces*, c'est-à-dire $t_f \ll t_s$ et $\sum_{r=1}^{q} E'_r t_r \ll E'_s t_s$ (E'_i étant le

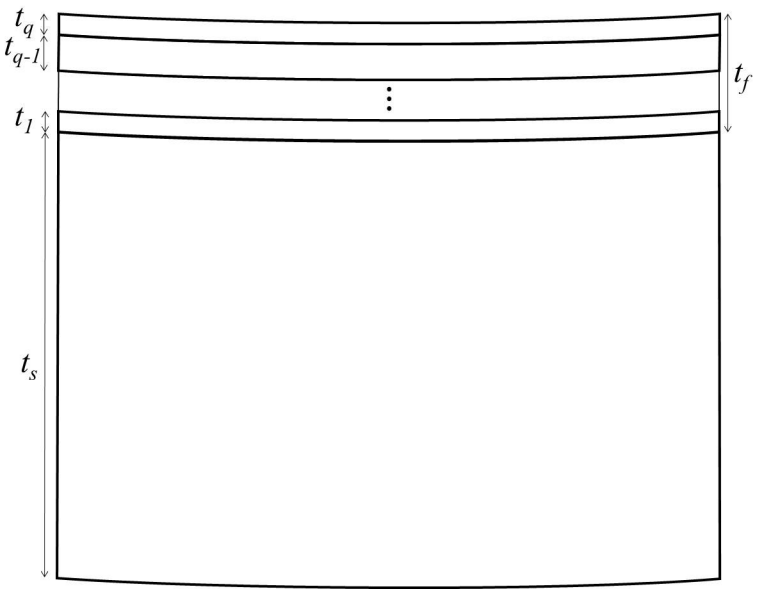


Figure 4.2 Empilement multicouche composé de q couches sur un substrat épais.

module biaxial de la couche i et E'_s celui du substrat [60]), impliquent que

$$\begin{aligned} \tau_s &= \sum_{r=1}^{q} t_r, \\ \tau_i &\simeq -t_s, \\ \theta &\ll t_s. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Puis, en approximant la moyenne pondérée des déformations en ne conservant que les termes linéaires dans son expansion de Taylor par rapport à $\frac{1}{E'_s t_s} \sum_{r=1}^{q} E'_r t_r$, nous obtenons que $\overline{\epsilon_j} \approx \epsilon_s + \frac{1}{E'_s t_s} \sum_{i=1}^{q} E'_i t_i (\epsilon_i - \epsilon_s)$. Ainsi,

$$\epsilon_i - \overline{\epsilon_j} \simeq \epsilon_i - \epsilon_s \tag{4.5}$$

et nous obtenons que dans l'approximation des couches minces, la courbure est

$$K \approx \frac{6}{E'_s t_s^2} \sum_{r=1}^{q} E'_r t_r (\epsilon_r - \epsilon_s). \tag{4.6}$$

Maintenant, en supposant que les déformations proviennent des différences entre les coefficients de dilatation thermique et des déformations intrinsèques, le différentiel de déformation

peut alors s'écrire

$$\Delta\epsilon_i = \epsilon_i - \epsilon_s \simeq \epsilon_i^{intr.} + \int_{T_{amb.}}^{T_{dep.}} (\alpha_i(T) - \alpha_s(T))\mathrm{d}T \tag{4.7}$$

où $\alpha_i(T)$ est le coefficient d'expansion thermique (dépendant de la température) de la couche i, $\alpha_s(T)$ celui du substrat, $T_{i,dep.}$ est la température de dépôt et $T_{amb.}$ est la température ambiante. Si on suppose, aussi, que $\alpha_s(T)$ et $\alpha_i(T)$ sont constants sur la plage de température avec laquelle nous travaillons, alors on obtient que le différentiel de déformation de la couche i est

$$\Delta\epsilon_i \approx \epsilon_i^{intr.} + (\alpha_i - \alpha_s)(T_{i,dep.} - T_{amb.}) \tag{4.8}$$

où $\epsilon_i^{intr.}$ est la déformation intrinsèque de la couche i. La courbure peut alors être exprimée comme suit

$$K \approx \frac{6}{E_s' t_s^2} \sum_{r=1}^{q} E_r' t_r \left(\epsilon_r^{intr.} + \Delta\alpha_r \Delta T_r\right), \tag{4.9}$$

où $\Delta\alpha_i = (\alpha_i - \alpha_s)$ et $\Delta T_i = (T_{i,dep.} - T_{amb.})$. Notez que l'équation 4.9 peut être exprimée en termes de contrainte biaxiale $\sigma_i = E_i'\epsilon_i$ si nous considérons une déformation isotrope et uniforme (c'est-à-dire : une déformation qui est fonction uniquement de la distance perpendiculaire à la base du substrat et qui n'est pas une fonction de la position le long de l'axe x) [61]. Dans notre cas, l'on a

$$\sigma_i = E_i' \Delta\epsilon_i. \tag{4.10}$$

L'équation 4.9 peut alors être écrite de façon équivalente comme suit

$$K \approx \frac{6}{E_s' t_s^2} \sum_{r=1}^{q} \sigma_r t_r, \tag{4.11}$$

où

$$\sigma_i = \sigma_i^{intr.} + \sigma_i^T = E_i'\epsilon_i^{intr.} + E_i'\Delta\alpha_i\Delta T_i. \tag{4.12}$$

4.2.2 Contraintes et forces aux interfaces

La force de cisaillement aux interfaces agit d'une manière qui n'affecte pas explicitement la contrainte parallèle ni la courbure du substrat comme le montre la figure 4.3. Cependant, si l'on veut minimiser l'effet des contraintes thermiques lors de la conception d'un filtre, les forces aux interfaces doivent également être minimisées, car elles peuvent être la cause de délaminations [60]. Ces forces aux interfaces peuvent prendre des valeurs significativement élevées et puisque leurs valeurs maximales ne dépendent pas de la taille du substrat, si ces forces dépassent la valeur critique pour une interface donnée alors l'interface se délaminera

entièrement.

Dans l'approximation des couches minces, le formalisme de Suhir donne la force longitudinale (c'est-à-dire la force de cisaillement) exercée sur n'importe quelle interface comme étant

$$F_i(x) = \left(1 - \frac{\cosh(kx)}{\cosh(kl)}\right) \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r = \chi_0(x) \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r \tag{4.13}$$

où l est la demi-largeur du système (par exemple, pour un substrat circulaire $2l$ est le diamètre du substrat) et k est le coefficient d'accommodation structurel pouvant être approximé comme suit [1] :

$$k \approx \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{\frac{1}{t_s E'_s} + \frac{1}{\sum_{r=1}^{q} t_r E'_r}}{\frac{t_s}{E'_s} + \sum_{r=1}^{q} \frac{t_r}{E'_r}}} \tag{4.14}$$

Notons que l'équation 4.13 montre que la force de cisaillement agissant sur l'interface i dépend de la différentielle de déformation $\Delta\epsilon$, de chacune des couches au-dessus de cette interface.

Ainsi, la contrainte de cisaillement dans l'interface i est

$$\tau_i(x) = \frac{\mathrm{d}F_i(x)}{\mathrm{d}x} = -k\frac{\sinh(kx)}{\cosh(kl)} \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r = -k\chi_1(x) \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r, \tag{4.15}$$

et la contrainte de pelage dans cette interface est

$$\begin{aligned} p_i(x) &= \frac{1}{2} \sum_{r=i+1}^{q} t_r \frac{\mathrm{d}^2 F_i(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{k^2 \cosh(kx)}{2\cosh(kl)} \sum_{r=i+1}^{q} t_r \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r \\ &= -\frac{k^2}{2}\chi_2(x) \sum_{r=i+1}^{q} t_r \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r. \end{aligned} \tag{4.16}$$

Notons que la contrainte parallèle dans la couche i peut être exprimée comme

$$\sigma_i(x) = \frac{F_{i-1}(x) - F_i(x)}{t_i} = \chi_0(x)\sigma_i. \tag{4.17}$$

Dans la limite où $kl \gg 1$ nous avons $F_i(x) = F_i = \sum_{r=i+1}^{q} t_r E'_r \Delta\epsilon_r$ et donc l'équation 4.17 donne

$$\sigma_i(x) = \frac{F_{i-1} - F_i}{t_i} = E'_i \Delta\epsilon_i = \sigma_i, \tag{4.18}$$

puisque $\chi_0(x) \approx 1$ comme on pourrait s'y attendre pour une déformation uniforme et isotrope [61].

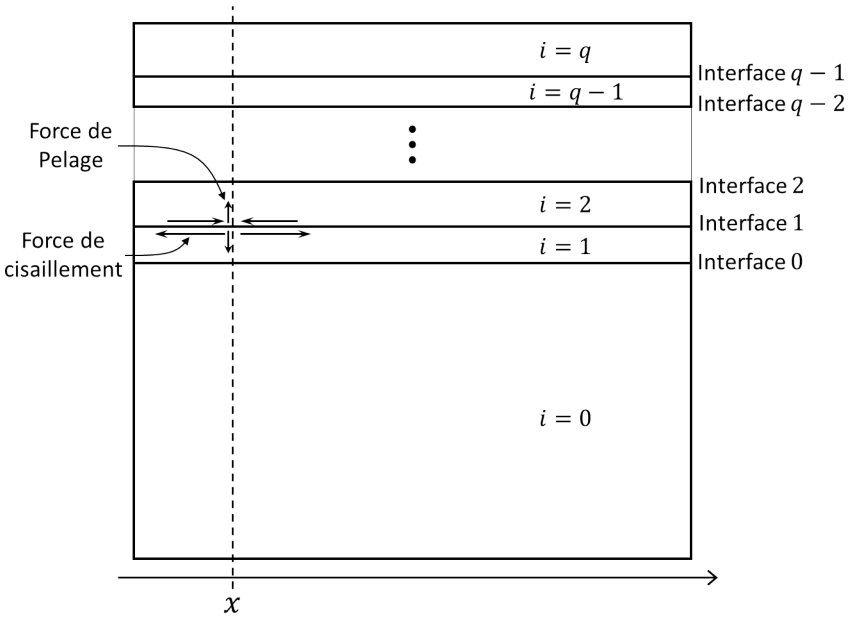


Figure 4.3 Les forces aux interfaces dans les structures multicouches.

Donc, si $kl \gg 1$ les équations 4.15 et 4.16 peuvent être écrites en termes de contraintes parallèles en utilisant l'équation 4.10. On obtient

$$\begin{aligned} \tau_i(x) &= -k\frac{\sinh(kx)}{\cosh(kl)} \sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r = -k\chi_1(x) \sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r \\ p_i(x) &= -\frac{k^2\cosh(kx)}{2\cosh(kl)} \sum_{r=i+1}^{q} t_r \sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r = -\frac{k^2}{2}\chi_2(x) \sum_{r=i+1}^{q} t_r \sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r. \end{aligned} \tag{4.19}$$

Dans OpenFilters tous les calculs assument $kl \gg 1$.

Les contraintes aux interfaces (pelage et cisaillement) sont maximales pour $x = l$, ce qui signifie que le maximum de contraintes est localisé au bord du filtre. La valeur maximale de la contrainte dans une interface i est donc donnée par

$$\begin{aligned} \tau_i^{max} &= -k \sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r \\ p_i^{max} &= -\frac{k^2}{2} \sum_{r=i+1}^{q} t_r \sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r = \frac{k}{2}\tau_i^{max} \sum_{r=i+1}^{q} t_r, \end{aligned} \tag{4.20}$$

montrant que, contrairement à la contrainte parallèle qui ne dépend que de l'état de la couche spécifique et de celle du substrat, la contrainte dans une interface i dépend de l'état de toutes les autres couches au-dessus de cette interface.

Notons que notre convention est qu'une contrainte positive représente une tension et qu'une contrainte négative représente une compression.

4.2.3 Considération de la face arrière

Dans OpenFilters, l'utilisateur peut choisir d'inclure l'effet des deux côtés du substrat dans le design et l'optimisation des caractéristiques optiques des filtres. Par exemple, si un revêtement antireflet a déjà été synthétisé d'un côté du substrat, alors l'utilisateur peut synthétiser un revêtement réfléchissant de l'autre côté en tenant compte du revêtement antireflet déposé sur la face arrière (FA). Dans OpenFilters il doit sélectionner l'option *concider backside* lorsqu'il ajoute un filtre au projet.

Pour ce qui est des caractéristiques mécaniques, l'effet de la face arrière peut être considéré lors du calcul de la courbure de la structure. Si K_{FA} est la courbure causée par la face arrière (calculée en utilisant l'équation 4.11) et que K_F est la courbure causée par la face avant, alors la courbure totale est donnée par :

$$K = K_F - K_{FA}. \tag{4.21}$$

Notons toutefois que dans le modèle utilisé dans OpenFilters, la contrainte dans chacune des couches est indépendante de celle dans les autres couches (dû à l'approximation des couches minces). Ceci implique que la contrainte dans une couche située d'un côté du substrat n'affectera pas la contrainte dans les couches situées de l'autre côté du substrat. Ceci sera le cas pour les structures respectant l'approximation des couches minces et pour lesquelles la courbure est petite.

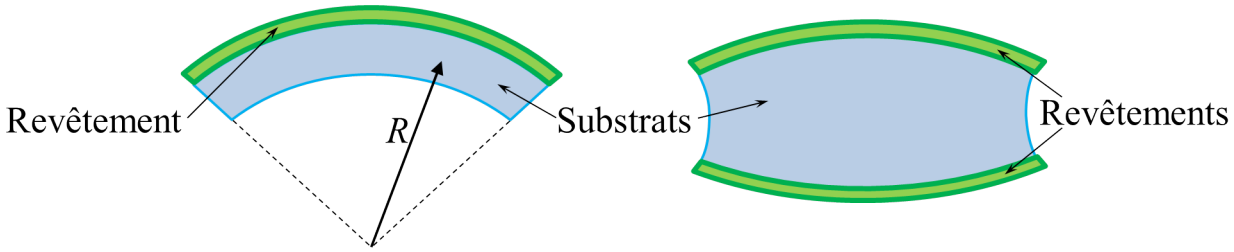


Figure 4.4 Deux filtres optiques avec des revêtements en compression. Gauche (filtre 1) : courbure causée par un revêtement en compression déposé d'un seul côté d'un substrat. Droite (filtre 2) : courbure causée par deux revêtements en compression déposés de chaque côté d'un substrat.

Ici, l'utilisateur devra être prudent. Il existe énormément de confusion dans la littérature au

sujet de la contrainte dans ce type de structure [57, 62], et plus particulièrement il faut redoubler de prudence pour les substrats avec des revêtements sur ses deux faces. Par exemple, dans l'article de Marie-Maude de Denus-Baillargeon, *Design and fabrication of stress-compensated optical coatings : Fabry–Perot filters for astronomical applications* [53], deux designs de filtres optiques pour lesquels la courbure a été minimisée ont été fabriqués et les résultats de leurs caractérisations thermomécaniques sont présentés. Comme représenté dans la figure 4.4, le premier design comporte un revêtement multicouche déposé d'un seul côté du substrat (appelons-le le filtre 1) et le deuxième comporte un revêtement multicouche déposé sur chacune des faces du substrat (appelons-le le filtre 2). Dans l'article, on y reporte des mesures de «contrainte dans les revêtements» effectuées avec le Tencor FLX-2900. Or cet appareil utilise la courbure du filtre afin de déterminer la contrainte présente dans les couches de celui-ci. On conclut alors dans l'article que la contrainte dans les revêtements du filtre 2 est plus petite que celle dans le revêtement du filtre 1. Toutefois, le Tencor FLX-2900 n'est pas réellement conçu pour mesurer la contrainte dans les filtres optiques comprenant des revêtements sur les deux faces du substrat comme le filtre 2. La théorie derrière son fonctionnement ne nous permet pas d'effectuer ce type de mesure. En effet, la courbure est plus petite dans le filtre 2 que dans le filtre 1 comme illustré dans la figure 4.4, mais ceci n'est pas dû à une plus petite contrainte dans les couches du filtre 2 que dans les couches du filtre 1. Ceci est dû au fait que la contrainte dans chacun des revêtements du filtre 2 est en compétition avec celle du revêtement sur l'autre face du substrat. Ainsi, la mesure de contrainte dans les revêtements reportée pour le filtre 2, puisqu'elle est calculée à partir de la mesure de la courbure, est erronée. En réalité, on s'attend à ce que la contrainte dans les revêtements du filtre 2 soit plus grande que celle dans le revêtement du filtre 1. Ceci peut facilement être supporté à l'aide de simulation par élément fini [63]. En somme, le design du filtre 2 minimise bel et bien la courbure, mais pas la contrainte, contrairement à ce qui est mentionné dans [53].

4.3 Synthèse et optimisation des caractéristiques thermomécaniques des filtres optiques

4.3.1 Processus d'optimisation des caractéristiques thermomécaniques

Tel que vu dans la section 2.3.2, pendant le processus d'optimisation, l'algorithme de Levenberg-Marquardt est utilisé pour trouver un minimum local de la fonction de mérite (équation 2.76). La dérivée de la fonction de mérite par rapport aux paramètres du filtre (indices de réfraction et épaisseurs des couches) est calculée puis ces paramètres sont ensuite modifiés dans la direction qui réduit le plus la fonction de mérite [52]. La direction de modification d'un paramètre est déterminée à l'aide de la dérivée de la fonction de mérite par rapport à ce paramètre

(équation 2.77). Les paramètres sont donc ajustés de façon à diminuer l'écart entre la valeur courante de la caractéristique et la valeur cible de celle-ci. Il nous est donc nécessaire de connaitre la dérivée de chacune des caractéristiques thermomécaniques qui nous intéressent par rapport aux paramètres impliqués dans le calcul de ces caractéristiques comme nous le verrons.

Par exemple, pour la caractéristique mécanique K (c'est-à-dire la courbure), les dérivées par rapport à t_h et σ_h (c'est-à-dire $\frac{\mathrm{d}f_j}{\mathrm{d}t_h}$ et $\frac{\mathrm{d}f_j}{\mathrm{d}\sigma_h}$) sont les suivantes

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}t_h} &= \frac{6\sigma_h}{E'_s t_s^2}, \\ \frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}\sigma_h} &= \frac{6t_h}{E'_s t_s^2}, \end{aligned} \tag{4.22}$$

où E'_s est le module de Young du substrat et t_s est l'épaisseur du substrat.

Notons que σ est une **caractéristique** d'un filtre optique. Il ne s'agit pas d'un **paramètre**, mais puisque la courbure et les contraintes aux interfaces peuvent être exprimées en fonction de σ, le fait de calculer la dérivée des caractéristiques mécaniques par rapport à σ simplifie le calcul des dérivées par rapport à tous les paramètres du filtre comme nous le verrons ci-dessous.

En général, dans OpenFilters, pour une caractéristique mécanique $f_i(A, x_i)$ d'un filtre optique avec q couches comme la contrainte de pelage ou la contrainte de cisaillement donné par le formalisme de Suhir, l'ensemble A des paramètres sur lesquels dépend cette caractéristique peut être écrit :

$$\begin{aligned} A &= \{\, \left[\sigma_h(E'_h, \sigma_h^{intr.}, \Delta\alpha_h, \Delta T_h), E'_h, t_h\right] \mid h = 1, 2, 3, ..., q \,\} \\ &=: \{\, [\sigma_h(a_{1,h}, a_{2,h}, a_{3,h}, a_{4,h}), a_{1,h}, t_h] \mid h = 1, 2, 3, ..., q \,\}, \end{aligned} \tag{4.23}$$

où chacun des paramètres $a_{s,h}$ est une fonction de l'indice de réfraction. Les paramètres $a_{s,h}$ sont interprétés comme étant des fonctions de l'indice de réfraction puisque l'algorithme dans OpenFilters optimise les filtres uniquement en variant l'indice de réfraction. La dérivé d'une caractéristique thermomécanique comme la contrainte de pelage ou la contrainte de cisaillement donné par le formalisme de Suhir, $f_i(A, x_i)$, par rapport à l'indice de réfraction d'une couche j, N_j, est :

$$\frac{\mathrm{d}f_i}{\mathrm{d}N_j} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial \sigma_j}\right)_{E'_j, t_j} \left[\sum_{s=1}^{4} \frac{\mathrm{d}\sigma_j}{\mathrm{d}a_{s,j}} \frac{\mathrm{d}a_{s,j}}{\mathrm{d}N_j}\right] + \left(\frac{\partial f_i}{\partial E'_j}\right)_{\sigma_j, t_j} \frac{\mathrm{d}E'_j}{\mathrm{d}N_j}, \tag{4.24}$$

où l'indice à droite des parenthèses des dérivées partielles est utilisé pour indiquer les variables interprétées comme constantes lors de la dérivée partielle. Les dérivées $\frac{\mathrm{d}\sigma_j}{\mathrm{d}a_{s,j}}$ sont

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\sigma_j}{\mathrm{d}E'_j} &= \Delta\alpha_j \Delta T_j \\
\frac{\mathrm{d}\sigma_j}{\mathrm{d}\sigma_j^{intr.}} &= 1 \\
\frac{\mathrm{d}\sigma_j}{\mathrm{d}\Delta\alpha_j} &= E'_i \Delta T_j \\
\frac{\mathrm{d}\sigma_j}{\mathrm{d}\Delta T_j} &= E'_j \Delta\alpha_j.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

La dérivée d'une caractéristique thermomécanique comme la contrainte de pelage ou la contrainte de cisaillement donné par le formalisme de Suhir, $f_i(A, x_i)$, par rapport à l'épaisseur d'une couche j, t_j, est quant à elle donnée par $\left(\frac{\partial f_i(A,x_i)}{\partial t_j}\right)_{\sigma_j, E'_j}$.

Comme mentionné dans la section 2.3.2, dans OpenFilters, l'optimisation des mélanges de matériaux est possible grâce à une méthode qui effectue une interpolation entre les différentes valeurs des paramètres d'un mélange pour différentes valeurs du *paramètre de mélange*. Ainsi, cette méthode d'interpolation, implémentée directement dans la gestion des matériaux, permet de déterminer la dérivée $\frac{\mathrm{d}a_{s,h}}{\mathrm{d}N_h}$.

Il reste donc uniquement à déterminer les dérivées $\left(\frac{\partial f_i}{\partial \sigma_j}\right)_{E'_j, t_j}$ et $\left(\frac{\partial f_i}{\partial E'_j}\right)_{\sigma_j, t_j}$ de l'équation 4.24 et la dérivée $\left(\frac{\partial f_i(A,x_i)}{\partial t_j}\right)_{\sigma_j, E'_j}$ pour que l'algorithme d'optimisation possède toute l'information nécessaire pour effectuer l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques comme la contrainte de pelage ou la contrainte de cisaillement donnée par le formalisme de Suhir. Ces dérivées pour la contrainte de cisaillement et la contrainte de pelage sont données dans les sections 4.4 et 4.5 respectivement.

4.3.2 Synthèse et optimisation de design par la méthode *Step*

La méthode de synthèse et d'optimisation *Step* est constituée de deux processus répétés itérativement, à savoir : l'ajout d'un saut (*Step*) infinitésimale dans le profil d'indice à la position optimale et l'optimisation du filtre résultant en utilisant la méthode d'optimisation décrite dans la section 4.3.1.

Processus d'addition de saut

Ce processus consiste à ajouter un saut (*Step*) infinitésimal dans le profil d'indice ΔN. Pour déterminer où ajouter ce saut dans une couche h et décider si nous devons ajouter un saut vers le haut ou vers le bas, nous utilisons la dérivée de la fonction de mérite par rapport à l'addition d'un saut infinitésimal, c'est-à-dire $\frac{\mathrm{d}M_h}{\mathrm{d}\Delta N}\Big|_{\Delta N=0}$ pour les caractéristiques optiques et $\frac{\mathrm{d}f_h}{\mathrm{d}\Delta N}\Big|_{\Delta N=0}$ pour les caractéristiques mécaniques. Maintenant, quand un saut est ajouté à la position z dans une couche ($z = 0$ étant le bas de la couche), la couche initiale h est séparée en deux couches.

Si l'augmentation (ou la diminution) de l'indice de réfraction d'un côté est égale à la diminution (ou à l'augmentation) de l'autre côté, la dérivée d'une caractéristique thermomécanique par rapport à l'addition d'un saut infinitésimale d'indice de réfraction peut être exprimée par :

$$\left.\frac{\mathrm{d}f_h}{\mathrm{d}\Delta N}\right|_{\Delta N=0} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}f_{h,2}}{\mathrm{d}N}f_{h,1} - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}f_{h,1}}{\mathrm{d}N}f_{h,2}, \tag{4.26}$$

où $\frac{\mathrm{d}f_{h,2}}{\mathrm{d}N}$ est donnée par l'équation 4.24.

La dérivée de la fonction de mérite par rapport à l'addition d'un saut vers le haut et d'un saut vers le bas est calculée et le saut (vers le haut ou vers le bas) est ajouté à l'endroit correspondant à la valeur la plus négative de l'une ou l'autre des deux dérivées. Si la valeur la plus négative de la dérivée de la fonction de mérite est une valeur correspondant à un saut vers le haut, le saut sera un saut ascendant et vice versa.

4.3.3 Considérations importantes lors de l'optimisation à plusieurs cibles

Lors de l'optimisation de plusieurs caractéristiques (optique ou mécanique) d'un filtre, l'utilisateur peut ajuster *l'importance* accordée à chacune des caractéristiques par l'algorithme d'optimisation en ajustant trois variables utilisées par celui-ci. Ces variables sont (ce référer à l'équation 2.76).

1. Le nombre de points pour lesquels une valeur cible d'une caractéristique $\hat{f}_j(x_j)$ (optique ou mécanique) est définie . Appelons ce nombre de points m_{carac} de sorte que si l'on effectue une optimisation de deux caractéristiques, une mécanique avec m_{mec} points et une optique avec m_{opt} points, alors $m = m_{mec} + m_{opt}$;
2. Les valeurs des différences entre la valeur initiale de la caractéristique et la cible associée à cette caractéristique $f_j(A, x_j) - \hat{f}_j(x_j)$, où $j = 1, 2, 3, ..., m_{carac}$;
3. Les valeurs de tolérance de chacune des cibles associées à une caractéristique $\Delta f_j(x_j)$, où $j = 1, 2, 3, ..., m_{carac}$.

Supposons que l'on souhaite optimiser un réflecteur à une longueur d'onde donnée (donc $m_{opt} = 1$) et que nous souhaitons aussi minimiser la contrainte de pelage dans ses interfaces pour une plage de températures allant de T_1 à T_2 avec une cible définie à chaque degré Kelvin (donc $m_{mec} > 1$). Supposons finalement que l'on désire que l'algorithme accorde autant d'importance à ces deux caractéristiques pour la première itération et que notre design initial respecte l'égalité :

$$(f_{opt}(\boldsymbol{\alpha}, x_{opt}) - \hat{f}_{opt}(x_{opt}))^2 = \sum_{r=1}^{m_{mec}} (f_r(\boldsymbol{\alpha}, x_r) - \hat{f}_r(x_r))^2. \tag{4.27}$$

Pour que l'algorithme d'optimisation accorde autant d'importance aux deux caractéristiques lors de la première itération, on doit s'assurer que $\mathrm{MF}^{opt} = \mathrm{MF}^{mec}$, c'est-à-dire que la fonction de mérite initiale pour les caractéristiques optiques est égale à la fonction de mérite initiale pour les caractéristiques mécaniques. Ainsi, si toutes les tolérances sur les cibles associées à la caractéristique mécanique sont choisies comme étant égales, de sorte que $\sum_{r=1}^{m_{mec}} \frac{1}{\Delta f_r(x_r)} = \frac{1}{\Delta f_{mec}}$, alors la tolérance sur la cible optique devra être choisie comme étant :

$$\Delta f_{opt} = \sqrt{m_{mec}} \cdot \Delta f_{mec} \tag{4.28}$$

pour que l'algorithme d'optimisation accorde autant d'importance aux deux caractéristiques lors de la première itération.

Évidemment, l'égalité 4.27 vient de notre désir qu'autant d'importance soit accordée aux deux caractéristiques pour la première itération. En général, si l'on désire optimiser ψ caractéristiques d'un filtre, avec chacune $m_1, m_2, ..., m_\psi$ cibles associées, de sorte qu'autant d'importance soit accordée à chacune des caractéristiques pendant la première itération et que la tolérance sur chacune des cibles d'une même caractéristique est la même, alors on doit choisir les variables à envoyer à l'algorithme d'optimisation pour qu'elles respectent l'égalité suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_1 \Delta f_1^2} \sum_{r=1}^{m_1} (f_r(\boldsymbol{\alpha}, x_r) - \hat{f}_r(x_r))^2 = \frac{1}{m_2 \Delta f_2^2} \sum_{r=1}^{m_2} (f_r(\boldsymbol{\alpha}, x_r) - \hat{f}_r(x_r))^2 = \dots \\ \dots = \frac{1}{m_\psi \Delta f_\psi^2} \sum_{r=1}^{m_\psi} (f_r(\boldsymbol{\alpha}, x_r) - \hat{f}_r(x_r))^2. \end{aligned} \tag{4.29}$$

Des exemples de procédures illustrant cette considération sont donnés dans la section 4.6.

Pour que l'importance accordée soit différente, des facteurs multiplicatifs peuvent être ajoutés à certains termes de la série d'égalité de l'équation 4.29 de façon à diminuer l'importance des termes auxquels ces facteurs sont ajoutés.

4.4 Calcul des dérivées pour les contraintes de cisaillement

Dans cette section les dérivées discutées à la section 4.3.1 sont calculées pour la contrainte de cisaillement donnée par le formalisme de Suhir présenté à la section 2.2.1 et reformulé de façon plus concise et pragmatique à la section 4.2.2.

Calcul de la dérivée $\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}t_i}$

La dérivée $\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}t_i}$ peut s'écrire, en utilisant la dérivation d'un produit, sous la forme suivante :

$$\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}t_i} = \begin{cases} -\left(\sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r\right)\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} - k\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\cancelto{=0}{\left(\sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r\right)} = \frac{\tau_i^{max}}{k}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} & \text{pour } j \geq i \\ \frac{\tau_i^{max}}{k}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} - k\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r\right) & \text{pour } j < i. \end{cases} \tag{4.30}$$

On doit donc évaluer la dérivée $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}$ (voir l'annexe B pour le calcul de $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}$). On a

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} = \frac{-k}{2}\left(\frac{\sum_{r=1}^{q} E'_r}{\left(\frac{\left(\sum_{r=1}^{q} t_i E'_r\right)^2}{t_s E'_s} + \sum_{r=1}^{q} t_r E'_r\right)} + \frac{1}{\left(\frac{t_s}{E'_s} + \sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)}\sum_{r=1}^{q}\frac{1}{E'_r}\right). \tag{4.31}$$

Calcul de la dérivée $\frac{\partial\tau_j^{max}}{\partial\sigma_i}$

La dérivée $\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i}$ peut s'écrire, en utilisant la dérivation d'un produit, sous la forme suivante :

$$\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i} = \begin{cases} \cancelto{=0}{\frac{\tau_i^{max}}{k}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\sigma_i}} - k\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\cancelto{=0}{\left(\sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r\right)} = 0 & \text{pour } j \geq i \\ \cancelto{=0}{\frac{\tau_i^{max}}{k}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\sigma_i}} - k\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma_i}\left(\sum_{r=i+1}^{q} t_r\sigma_r\right) & \text{pour } j < i. \end{cases} \tag{4.32}$$

On a donc :

$$\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i} = \begin{cases} 0 & \text{pour } j \geq i \\ -kt_i & \text{pour } j < i. \end{cases} \tag{4.33}$$

Calcul de la dérivée $\frac{\partial \tau_j^{max}}{\partial E_i'}$

On a :

$$\frac{\partial \tau_j^{max}}{\partial E_i'} = -\left(\sum_{r=j+1}^{q} t_r \sigma_r\right) \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E_i'}. \tag{4.34}$$

Ainsi, en procédant de façon similaire au calcul de la dérivée $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}$, on obtient :

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E_i'} = \frac{-k}{2}\left(\frac{\sum\limits_{r=1}^{q} t_r}{\left(\frac{\left(\sum\limits_{r=1}^{q} t_r E_r'\right)^2}{t_s E_s'} + \sum\limits_{r=1}^{q} t_r E_r'\right)} + \frac{1}{\left(\frac{t_s}{E_s'} + \sum\limits_{r=1}^{q} \frac{t_r}{E_r'}\right)} \sum_{r=1}^{q} \frac{1}{t_r}\right). \tag{4.35}$$

Donc la dérivée $\frac{\partial \tau_j^{max}}{\partial E_i'}$ est :

$$\frac{\partial \tau_j^{max}}{\partial E_i'} = \frac{k}{2}\left(\sum_{r=j+1}^{q} t_r \sigma_r\right)\left(\frac{\sum\limits_{r=1}^{q} t_r}{\left(\frac{\left(\sum\limits_{r=1}^{q} t_r E_r'\right)^2}{t_s E_s'} + \sum\limits_{r=1}^{q} t_r E_r'\right)} + \frac{1}{\left(\frac{t_s}{E_s'} + \sum\limits_{r=1}^{q} \frac{t_r}{E_r'}\right)} \sum_{r=1}^{q} \frac{1}{t_r}\right) \tag{4.36}$$

4.5 Calcul des dérivées pour les contraintes de pelage

Dans cette section les dérivées discutées à la section 4.3.1 sont calculées pour la contrainte de pelage donnée par le formalisme de Suhir présenté à la section 2.2.1 et reformulé de façon plus concise et pragmatique à la section 4.2.2.

Calcul de la dérivée $\frac{\mathbf{d}p_j^{max}}{\mathbf{d}t_i}$

La dérivée $\frac{\mathrm{d}p_j^{max}}{\mathrm{d}t_i}$ peut s'écrire, en utilisant la dérivation d'un produit et le fait que $p_j^{max} = \frac{k}{2}\tau_j^{max} \sum\limits_{r=j+1}^{q} t_r$, sous la forme suivante :

$$\frac{\mathrm{d}p_j^{max}}{\mathrm{d}t_i} = \begin{cases} \frac{\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}\sum\limits_{r=j+1}^{q} t_r + \frac{k}{2}\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}t_i}\sum\limits_{r=j+1}^{q} t_r & \text{pour } j > i \\ \frac{\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}\sum\limits_{r=j+1}^{q} t_r + \frac{k\tau_j^{max}}{2} + \frac{k}{2}\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}t_i}\sum\limits_{r=j+1}^{q} t_r & \text{pour } j \leq i. \end{cases} \tag{4.37}$$

Calcul de la dérivée $\frac{\partial p_j^{max}}{\partial \sigma_i}$

La dérivée $\frac{\mathrm{d}p_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i}$ peut s'écrire, en utilisant la dérivation d'un produit et le fait que $p_j^{max} = \frac{k}{2}\tau_j^{max} \sum_{r=j+1}^{q} t_r$, sous la forme suivante :

$$\frac{\mathrm{d}p_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i} = \begin{cases} \left(\cancelto{0}{\frac{\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\sigma_i}} + \cancelto{0}{\frac{k}{2}\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i}}\right)\cancelto{0}{\sum_{r=j+1}^{q} t_r} + \cancelto{0}{\frac{k\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma_i}\sum_{r=j+1}^{q} t_r} = 0 & \text{pour } j \geq i \\ \left(\cancelto{0}{\frac{\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}} + \frac{k}{2}\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i}\right)\sum_{r=j+1}^{q} t_r + \cancelto{0}{\frac{k\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma_i}\sum_{r=j+1}^{q} t_r} = -\frac{k^2 t_i}{2}\sum_{r=j+1}^{q} t_r & \text{pour } j < i. \end{cases} \tag{4.38}$$

On a donc :

$$\frac{\mathrm{d}p_j^{max}}{\mathrm{d}\sigma_i} = \begin{cases} 0 & \text{pour } j \geq i \\ -\frac{k^2 t_i}{2}\sum_{r=j+1}^{q} t_r & \text{pour } j < i. \end{cases} \tag{4.39}$$

Calcul de la dérivée $\frac{\partial p_j^{max}}{\partial E_i'}$

On a :

$$\frac{\partial p_j^{max}}{\partial E_i'} = \left(\frac{\tau_j^{max}}{2}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E_i'} + \frac{k}{2}\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}E_i'}\right)\sum_{r=j+1}^{q} t_r, \tag{4.40}$$

où $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E_i'}$ et $\frac{\mathrm{d}\tau_j^{max}}{\mathrm{d}E_i'}$ sont données dans la section 4.4.

4.6 Exemples d'utilisation des nouvelles fonctionnalités d'optimisation de OpenFilters

Dans les exemples suivants, le matériel utilisé pour le substrat est le N-KZFS2 qui correspond à un verre inorganique. Les valeurs utilisées des différentes propriétés de ce substrat sont indiquées dans le tableau 4.1 et sa fiche technique est donnée dans l'annexe C. Ce substrat a été choisi en raison de son coefficient d'expansion thermique relativement bas.

Dans les exemples qui suivent, un *mélange de matériaux* est utilisé, mais il est aussi possible d'utiliser des matériaux non mélangés. Le mélange de matériaux est un mélange hypothétique, c'est-à-dire que ses propriétés ont été délibérément choisies et qu'il n'existe pas nécessairement un tel mélange de matériaux. Les propriétés de ce mélange sont reportées dans le tableau 4.1. La raison pour l'utilisation d'un mélange hypothétique est qu'au moment de rédiger ce mémoire, très peu de données thermomécaniques sont disponibles pour des mélanges de matériaux malgré l'existence de techniques permettant de les mesurer [64]. Par exemple, le CET est très rarement documenté. Notons toutefois que les valeurs des propriétés du mélange hypothétique sont, entre autres, inspirées des données de Martin Caron [2].

Pour simplifier l'interprétation des designs de filtres optiques produits, il est assumé qu'aucune contrainte intrinsèque n'est présente dans le mélange à la température de dépôt (333 K). On a donc :

$$\sigma_i = E'_i \Delta\alpha_i \Delta T_i. \tag{4.41}$$

De plus, les CET du mélange ont été choisis de façon à ce que le CET du substrat soit près du centre de la plage de valeurs de CET que peut prendre le mélange. Ceci assure qu'il y existe des designs pour lesquels la contrainte de cisaillement ou de pelage est minimisée, puisque les termes de la somme $\sum_{r=i+1}^{q} t_r \sigma_r$ dans les équations 4.20 pourront prendre des valeurs positives et négatives pour s'annuler.

Les deux exemples qui suivent consistent en un réflecteur à une longueur d'onde et un antireflet sur une plage de longueurs d'onde. Ces filtres sont traités de façon à optimiser différentes caractéristiques de ceux-ci. À la fois l'épaisseur et l'indice de réfraction des couches du filtre sont ajustés par l'algorithme d'optimisation. Les tableaux 4.2 et 4.3 regroupe les cibles sur les caractéristiques utilisées lors des optimisations.

Notons que les tolérances sur chacune des cibles ont été choisies de façon à ce que la fonction de mérite de départ pour les caractéristiques mécaniques et optiques soit initialement égale (l'une à l'autre) lorsqu'une cible est définie pour ces deux types de caractéristiques (c'est-à-dire qu'autant d'importance soit accordée aux deux types de caractéristiques lors de la première itération). De plus, les tolérances sur les cibles mécaniques ont été choisies pour que

Tableau 4.1 Propriétés du N-KZFS2 et du mélange hypothétique (longueur d'onde de référence 550 nm).

Matériau	Indice de réfraction	Module de Young [GPa]	Coefficient de Poisson	CET [$\times 10^{-6}\mathrm{K}^{-1}$]	Température de dépôt [K]
Mélange hypothétique (couches)	1,45	75,0	0,33	5,37	333
	1,55	30,0	0,33	4,80	333
	2,39	100,0	0,33	3,00	333
N-KZFS2 (substrat)	1,56	66,0	0,33	4,4	-

Tableau 4.2 Cibles sur les caractéristiques du filtre pour l'optimisation du réflecteur.

Caractéristique f	Points où une cible est définie	Cible $\hat{f}$	Tolérance Δf
Réflexion	400 nm	1,0	0,01
Contrainte de pelage	200 K	<0,0 Pa	65,1 Pa
Contrainte de cisaillement	200 K	<10,0 kPa	7,67 kPa
Contrainte de cisaillement	200 K	>-10,0 kPa	7,67 kPa

Tableau 4.3 Cibles sur les caractéristiques du filtre pour l'optimisation de l'antireflet.

Caractéristique f	Points où une cible est définie	Cible $\hat{f}$	Tolérance Δf
Réflexion	350 à 700 nm tous les 1 nm	0,0	0,01
Contrainte de pelage	230 à 380 K tous les 2 K	<0,0 Pa	7,45 Pa
Contrainte de cisaillement	230 à 380 K tous les 2 K	<1,0 kPa	0,958 kPa
Contrainte de cisaillement	230 à 380 K tous les 2 K	>-1,0 kPa	0,958 kPa

la fonction de mérite de départ pour la contrainte de cisaillement soit égale à celle pour la contrainte de pelage. Si $\mathrm{MF}_{\mathrm{opt}}$ est la valeur initiale de la fonction de mérite pour la réflexion, MF_{τ} est la valeur initiale de la fonction de mérite pour la contrainte de cisaillement, MF_{p} est la valeur initiale de la fonction de mérite pour la contrainte de pelage et que nous posons que la tolérance sur la réflexion est de 0.01, alors on a le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \mathrm{MF}_{\mathrm{opt}} & = \mathrm{MF}_{\tau} + \mathrm{MF}_{\mathrm{p}} \\ \mathrm{MF}_{\tau} & = \mathrm{MF}_{\mathrm{p}}. \end{cases} \tag{4.42}$$

Ce système d'équations a été résolu à l'aide du solveur numérique offert par Matlab® afin d'obtenir la tolérance sur la contrainte de cisaillement et la contrainte de pelage en utilisant la définition de la fonction de mérite donnée par l'équation 2.76. Les valeurs obtenues pour le réflecteur et l'antireflet sont celles données dans les tableaux 4.2 et 4.3 respectivement.

Les résultats de l'optimisation utilisant les cibles des tableaux 4.2 et 4.3 sont présentés dans les sections qui suivent. Le design initial est d'abord présenté.

4.6.1 Design initial

Le design initial consiste en cinq couches de 50 nm chacune en alternance entre un haut indice de réfraction (2,39) et un bas indice de réfraction (1,45) comme on le voit dans la figure 4.5a. Le substrat est d'une épaisseur de 1 mm et d'un diamètre de 50 mm. Ce design possède un maximum de réflexion de 0,836 pour une longueur d'onde de 400 nm (voir la figure 4.5b). On voit aussi que, si nous nous limitons à la plage de températures de 200 K à 400K pour les exemples qui suivent, les valeurs maximales de contrainte de cisaillement et de pelage ont lieu à 200 K et sont de 128 kPa et 753 Pa respectivement (figures 4.5c et 4.5d).

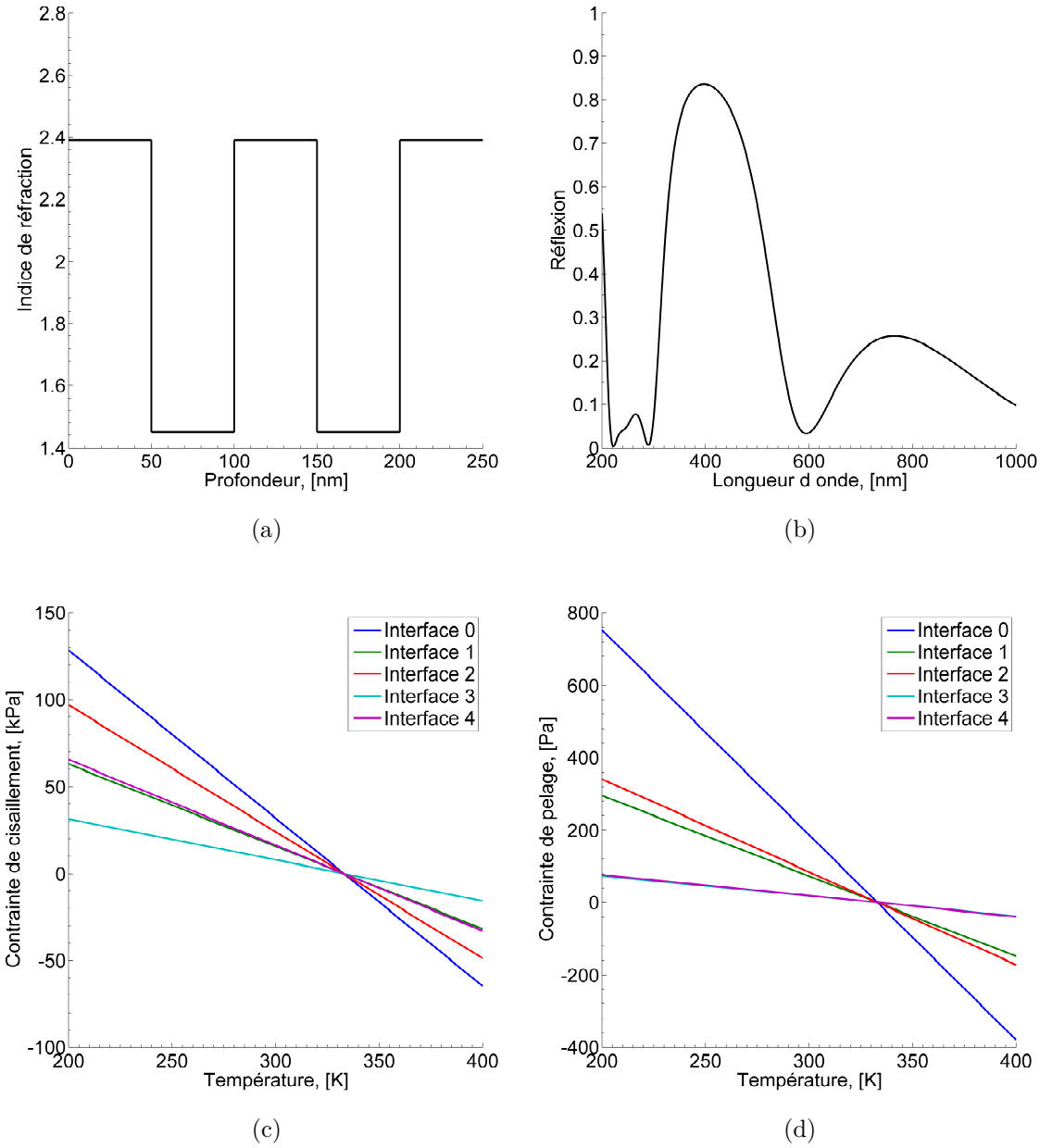


Figure 4.5 Profil d'indice de réfraction du design initial (a) et valeur des caractéristiques optiques et thermomécaniques de celui-ci. (b) Spectre de réflexion. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température.

4.6.2 Réflecteur à une longueur d'onde et à une température

Les résultats des optimisations des caractéristiques indiquées dans le tableau 4.2 sont reportés dans la figure 4.6. Uniquement les valeurs de contraintes dans l'interface où elles sont maximales (et minimales pour les contraintes de cisaillement) sont représentées. Les fonctions de mérite associées à chacune des optimisations sont données dans le tableau 4.4.

Tableau 4.4 Valeurs des fonctions de mérites suite à l'optimisation du réflecteur.

Fonction de mérite	Optimisation		
	Optomécanique	Optique	Mécanique
Total	234	266	4648
Optique	203	190	4647
Mécanique	30.3	76.6	1.518

On voit dans la figure 4.6b que le filtre obtenu avec l'optimisation optique possède les meilleures caractéristiques optiques par rapport à l'optimisation mécanique et optomécanique. De même, les figures 4.6c et 4.6d montrent que le filtre obtenu avec l'optimisation mécanique possède les meilleures caractéristiques mécaniques. On remarque alors en regardant ces trois figures que l'optimisation optomécanique produit un filtre qui correspond à un compromis entre les optimisations optique et mécanique. Pour se convaincre, on peut aussi regarder le tableau 4.4. Ce tableau montre que les valeurs des fonctions de mérite pour l'optimisation optomécanique sont comprises entre celles de l'optimisation mécanique et celles de l'optimisation optique.

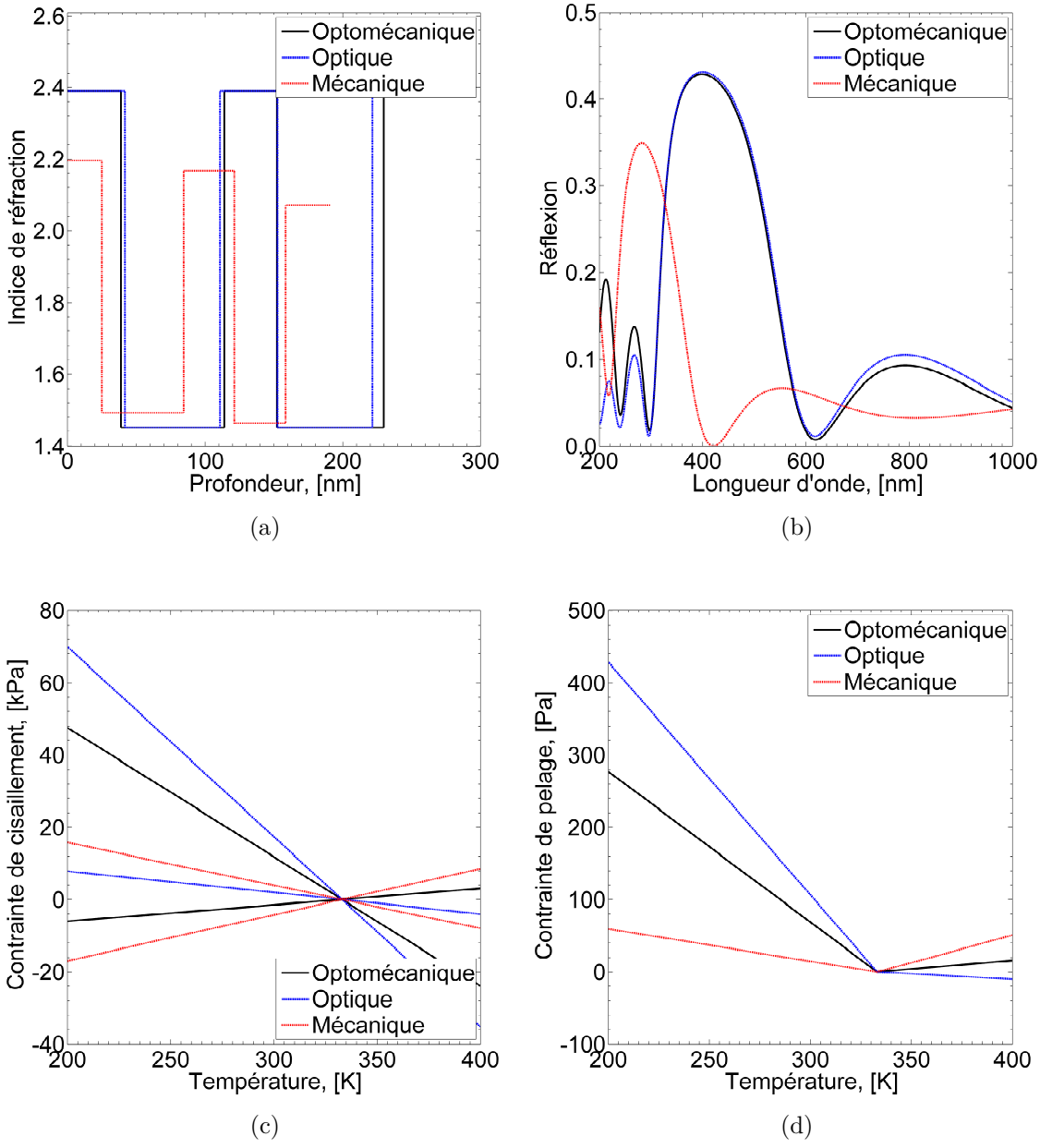


Figure 4.6 Optimisation du réflecteur. (a) Profil d'indice de réfraction des filtres optimisés. (b) Spectre de réflexion des filtres optimisés. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. Optimisation optomécanique (en noir) : toutes les cibles du tableau 4.3 sont utilisées. Optimisation optique (en bleu) : uniquement la cible sur la réflexion dans le tableau 4.3 est utilisée. Optimisation mécanique (en rouge) : toutes les cibles sur les contraintes du tableau 4.3 sont utilisées.

4.6.3 Antireflet sur une plage de longueur d'onde et de températures

Les résultats des optimisations des caractéristiques indiquées dans le tableau 4.3 sont reportés dans la figure 4.7. Uniquement les valeurs de contraintes dans l'interface où elles sont maximales (et minimales pour les contraintes de cisaillement) sont représentées. Les fonctions de mérite associées à chacune des optimisations sont données dans le tableau 4.5.

Tableau 4.5 Valeurs des fonctions de mérites suite à l'optimisation de l'antireflet.

Fonction de mérite	Optimisation		
	Optomécanique	Optique	Mécanique
Total	105	902	684×10^{1}
Optique	17.2	3.18×10^{-2}	663×10^{1}
Mécanique	87.6	902	210

On voit dans la figure 4.7b que le filtre obtenu avec l'optimisation optique possède les meilleures caractéristiques optiques par rapport à l'optimisation mécanique et optomécanique. Par contre, les figures 4.7c et 4.7d montrent que le filtre obtenu avec l'optimisation optomécanique possède les meilleures caractéristiques mécaniques et non pas le filtre obtenu avec l'optimisation mécanique. Ceci indique donc que, dans ce cas-ci, la cible sur la réflexion permet à l'algorithme d'optimisation de sortir d'un minimum local présent lors de l'optimisation mécanique. On voit aussi, dans le tableau 4.5 que la valeur de la fonction de mérite mécanique pour l'optimisation mécanique est beaucoup plus grande que pour l'optimisation optomécanique contrairement à la valeur de la fonction de mérite optique qui est beaucoup plus petite pour l'optimisation optique que pour l'optimisation optomécanique. Ceci nous confirme que l'optimisation mécanique a bel et bien rencontré un minimum local qui est évité par l'ajout d'une cible sur la réflexion lors de l'optimisation optomécanique.

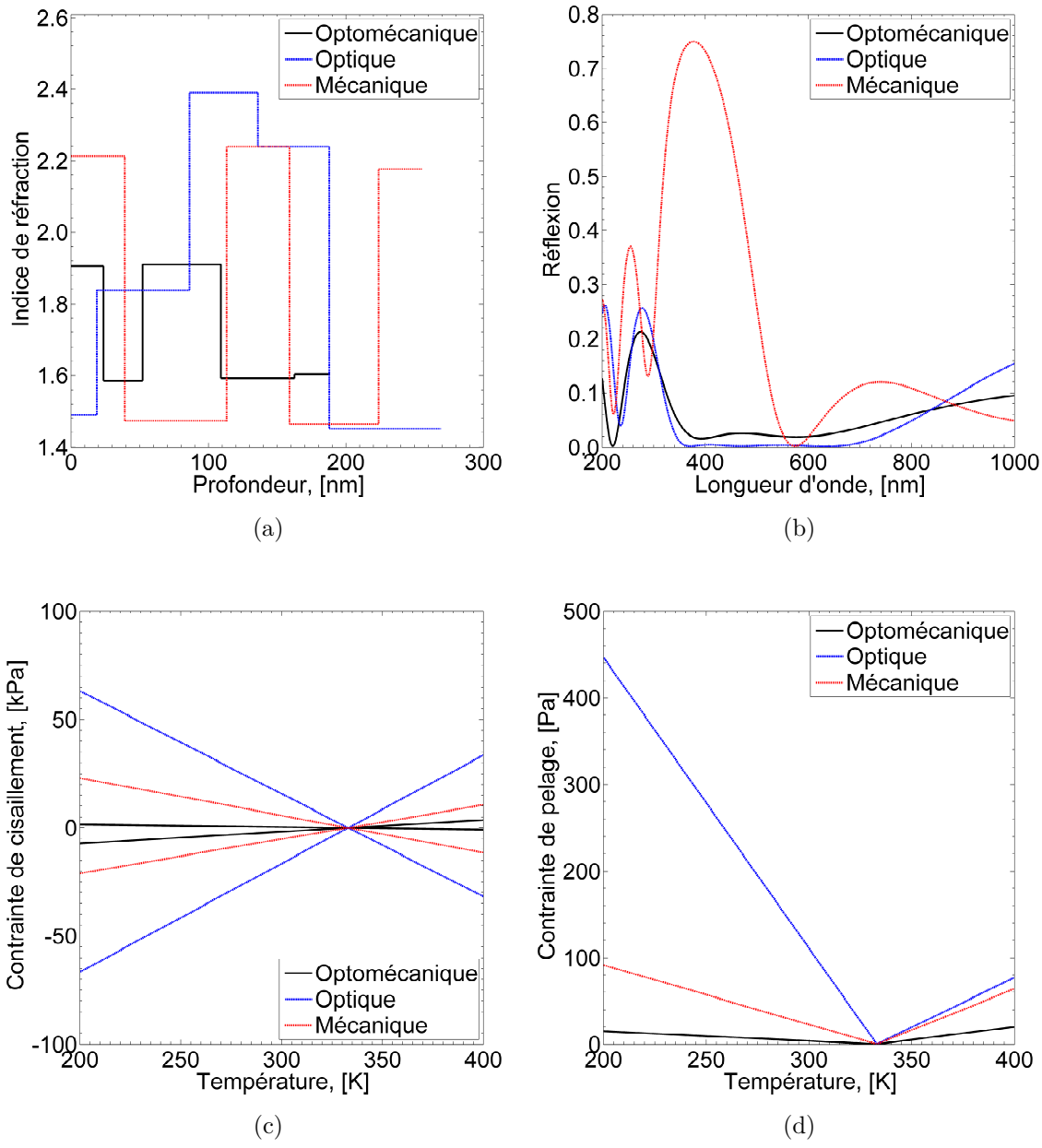


Figure 4.7 Optimisation de l'antireflet. (a) Profil d'indice de réfraction des filtres optimisés. (b) Spectre de réflexion des filtres optimisés. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température pour les filtres optimisés. Optimisation optomécanique (en noir) : toutes les cibles du tableau 4.3 sont utilisées. Optimisation optique (en bleu) : uniquement la cible sur la réflexion dans le tableau 4.3 est utilisée. Optimisation mécanique (en rouge) : toutes les cibles sur les contraintes du tableau 4.3 sont utilisées.

4.7 Exemple d'utilisation des nouvelles fonctionnalités de synthèse de OpenFilters

L'exemple qui suit consiste en un antireflet sur la même plage de longueur d'onde que l'antireflet ci-dessus. Les mêmes matériaux et géométries du substrat sont utilisés. Pendant l'étape d'optimisation, à la fois l'épaisseur et l'indice de réfraction des couches du filtre sont ajustés par l'algorithme. Les cibles utilisées pour la synthèse du filtre sont reportées dans le tableau 4.6. Les tolérances sur les différentes cibles sont choisies de façon à satisfaire l'équation 4.42.

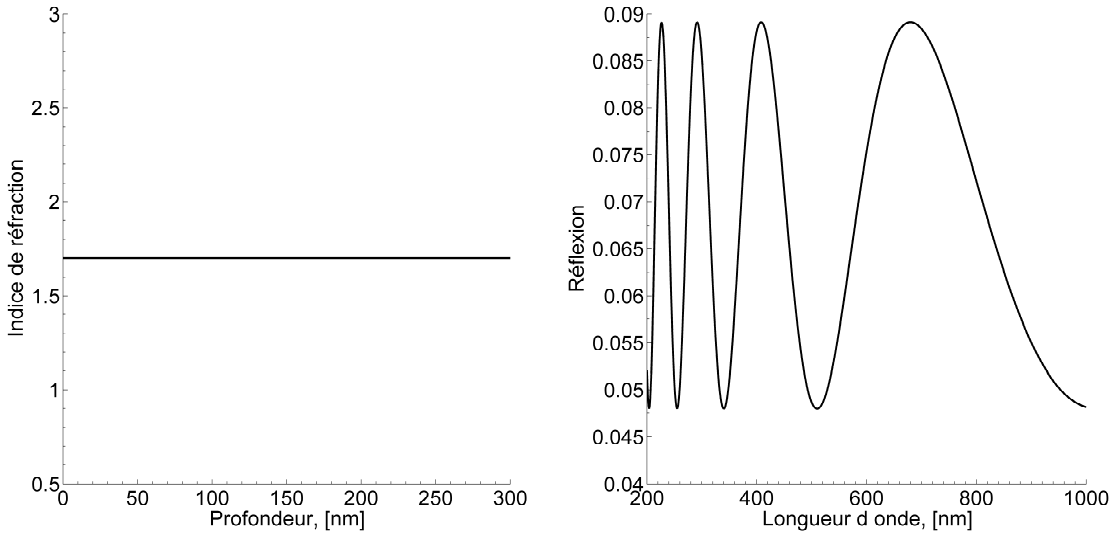
Tableau 4.6 Cibles sur les caractéristiques du filtre pour la synthèse de l'antireflet à l'aide de la méthode Step.

Caractéristique f	Points où une cible est définie	Cible $\hat{f}$	Tolérance Δf
Réflexion	350 à 700 nm à tous les 1 nm	0,0	0,01
Contrainte de pelage	230 à 380 K à tous les 2 K	<0,0 Pa	32,5 Pa
Contrainte de cisaillement	230 à 380 K à tous les 2 K	<1,0 kPa	1,22 kPa
Contrainte de cisaillement	230 à 380 K à tous les 2 K	>-1,0 kPa	1,22 kPa

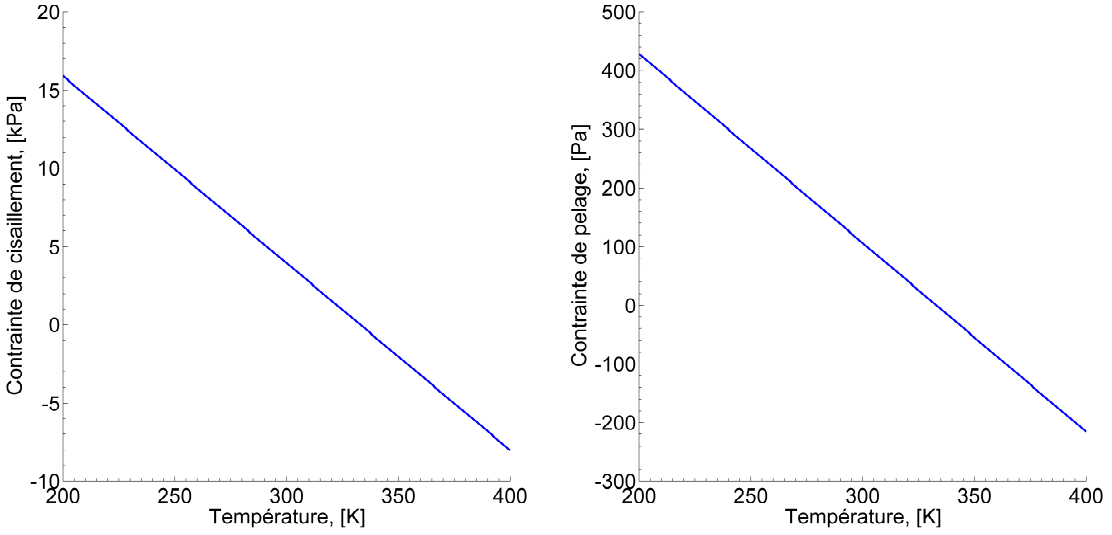
Le résultat de la synthèse du filtre est donné dans la section 4.7.2. Le design initial est d'abord présenté.

4.7.1 Design initial

Le design initial consiste en une couche de 300 nm et d'indice de réfraction de 1,70 comme on le voit dans la figure 4.8a. Le substrat est d'une épaisseur de 1 mm et d'un diamètre de 50 mm. La moyenne des réflexions entre 350 et 700 nm est de 0,0714 (figure 4.8b). Les valeurs maximales de contraintes de cisaillement et de pelage entre 230 et 380 K ont lieu à 230 et sont de 12,3 kPa et 332 Pa respectivement (figures 4.8c et 4.8d).



(a) (b)

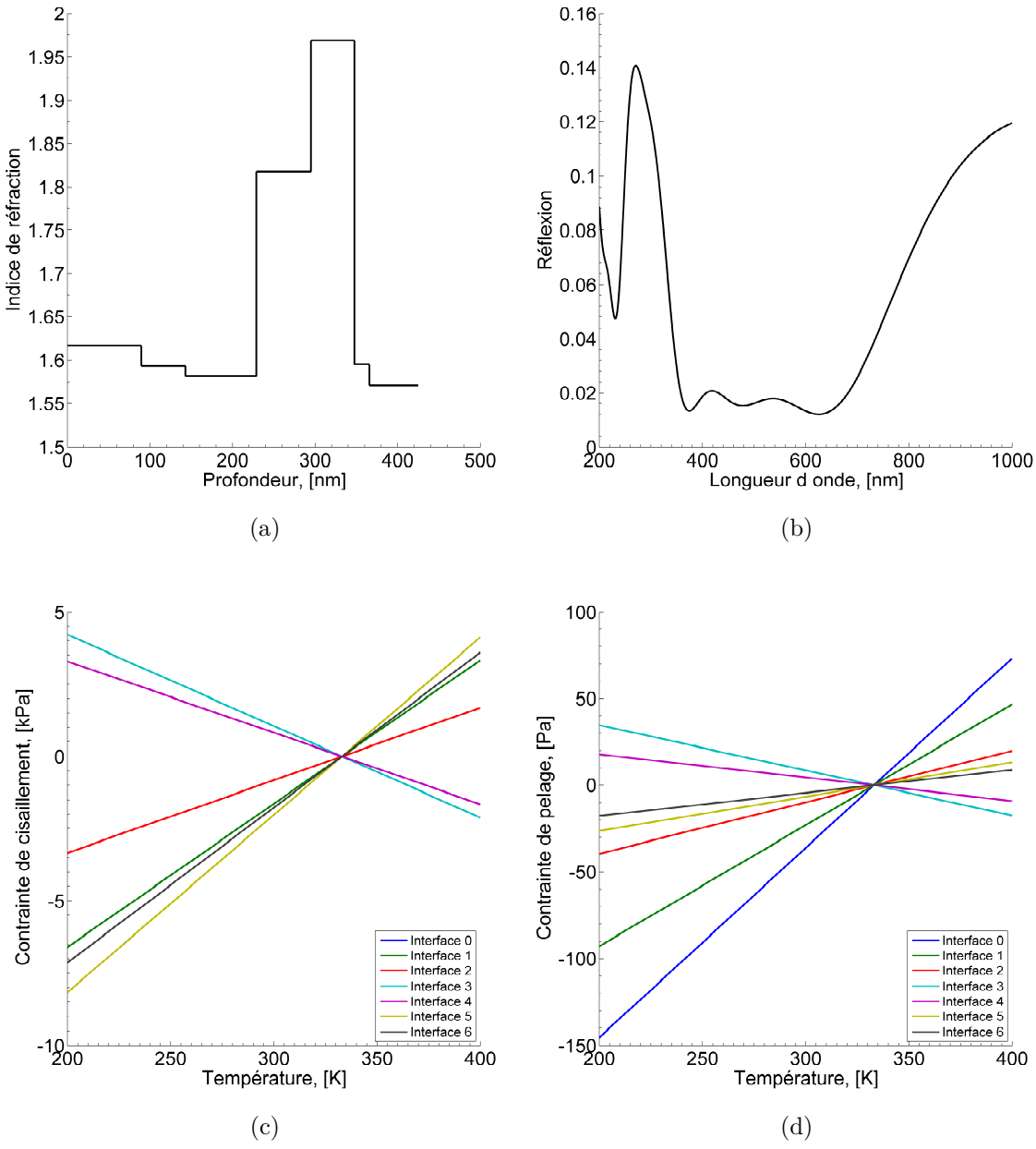


(c) (d)

Figure 4.8 (a) Profil d'indice de réfraction du filtre initial utilisé pour la synthèse. (b) Spectre de réflexion. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température.

4.7.2 Synthèse d'un antireflet par la méthode Step

Le résultat de la synthèse du filtre antireflet est donné dans la figure 4.9. Les fonctions de mérite associées à cette synthèse sont données dans le tableau 4.7.



(a) (b)

(c) (d)

Figure 4.9 (a) Profil d'indice de réfraction du filtre synthétisé en minimisant la contrainte de pelage, la valeur absolue de la contrainte de cisaillement et la réflexion pour des températures entre 230 et 380 K et des longueurs d'onde entre 350 et 700 nm. (b) Spectre de réflexion. (c) Maximum de contrainte de cisaillement dans les interfaces en fonction de la température. (d) Maximum de contrainte de pelage dans les interfaces en fonction de la température.

Tableau 4.7 Valeurs des fonctions de mérites suite à la synthèse de l'antireflet.

Type de fonction de mérite	Valeur de la fonction de mérite
Total	0.657
Optique	0.0604
Mécanique	0.597

On voit, dans la figure 4.9a que le filtre synthétisé en optimisant les contraintes de cisaillement et de pelage entre 230 et 380 K et la réflexion entre 350 et 700 nm possède des couches d'indice de réfraction et d'épaisseur variant le long de la profondeur du filtre. La moyenne des réflexions entre 350 et 700 nm est de 0,0166 (figure 4.9b). Les valeurs maximales de contrainte de cisaillement et de pelage entre 230 et 380 K sont de -6,32 kPa et 51,4 Pa et surviennent à des températures de 230 K et 380 K respectivement (figures 4.9c et 4.9d). Ce filtre possède donc de meilleures caractéristiques optiques que celui obtenu avec l'optimisation optomécanique de l'antireflet, mais de moins bonnes caractéristiques thermomécaniques.

CHAPITRE 5 CONCLUSION

Ce mémoire regroupe les avancements ayant été effectués dans le domaine de l'optimisation automatisée des caractéristiques mécaniques (thermomécanique dans ce mémoire) et établit la procédure à suivre pour la poursuite des travaux dans ce domaine. Les avantages de l'optimisation automatisée des caractéristiques mécaniques par rapport aux méthodes expérimentales, présentement dominantes, sont nombreux. Le plus important étant la réduction du nombre de filtres nécessaires à fabriquer pour les tests et donc une réduction du coût de conception. Dans les sections qui suivent, je présente un résumé des principaux résultats de ce mémoire, leurs limitations et des suggestions sur les prochaines étapes à effectuer pour contribuer au domaine de l'optimisation automatisée des caractéristiques mécaniques.

5.1 Synthèse des travaux

Le formalisme approximatif de Suhir a tout d'abord été utilisé à des fins de diagnostic. Deux filtres optiques avec seulement leurs couches superficielles différentes présentaient des résultats différents à un test de sollicitation thermique tel que mentionné dans le chapitre 3. Les résultats ont démontré que le formalisme approximatif de Suhir pour la contrainte élastique seule ne suffit pas à expliquer pourquoi la stabilité thermique des revêtements avec la couche superficielle hybride est meilleure que celle des revêtements inorganiques, suggérant que la différence de résistance à ces sollicitations n'est pas due à un phénomène élastique.

Ensuite, la possibilité d'optimiser et de synthétiser des filtres optiques en posant des cibles sur des caractéristiques thermomécaniques des filtres a été ajoutée à OpenFilters. Ces caractéristiques sont :

1. la courbure ;
2. le maximum des contraintes parallèles dans les couches ;
3. le maximum des contraintes de cisaillement dans les interfaces ;
4. le maximum des contraintes de pelage dans les interfaces.

Notons aussi que ces nouvelles fonctionnalités supportent à la fois les mélanges de matériaux et les matériaux réguliers. La gestion des matériaux a donc dû être adaptée.

L'implémentation de ces nouvelles fonctionnalités de OpenFilters a nécessité le calcul de plusieurs dérivées (section 4.4 et 4.5) utilisées par l'algorithme d'optimisation et de synthèse. Les résultats de ces dérivées constituent, en soi, de nouveaux résultats.

Finalement, la méthode à suivre pour ajouter de nouvelles cibles mécaniques a été facilitée par la création d'un module appelé Stoney et par l'information que contient ce mémoire. Le module Stoney, qui correspond à un fichier appelé Stoney dans le code source d'OpenFilters, contient la majeure partie des modifications nécessaires afin de permettre l'ajout des nouvelles fonctionnalités nommées ci-dessus. Il est prévu que ces nouvelles fonctionnalités soient incluses dans la version 2.0 d'OpenFilters.

5.2 Limitations de la solution proposée

Il est fréquent de tester la validité d'une solution de forme fermée, tel le formalisme de Suhir, à l'aide de simulations par éléments finis. Or, le cas de l'expansion thermique d'un revêtement multicouche mince sur un substrat épais peut difficilement être simulé par éléments finis. Les simulations élastiques par éléments finis de ce type sont énormément sensibles au maillage utilisé tel que noté dans la littérature [11]. La cause de cette sensibilité au maillage est une singularité au bord libre du système. En effet, il a été démontré qu'une solution analytique exacte respectant de façon stricte les équations constitutives de l'élasticité linéaire comporte bel et bien une singularité au bord [31–33, 46]. Une étude détaillée comparant la méthode de Suhir à d'autres méthodes de simulation a été effectuée par C. Basaran et Y. Zhao [11].

Notons aussi que le formalisme de Suhir utilisé assume une condition de compatibilité aux interfaces afin d'avoir une solution fermée. Il a été démontré, par Pao et Eisele [47], qu'il est possible de résoudre des cas spécifiques du problème en n'imposant aucune condition de compatibilité aux interfaces. Or les solutions données par la méthode de Pao et Eisele sont obtenues moins rapidement qu'avec la méthode de Suhir, car on doit y résoudre un système d'équations constituant un problème de valeurs propres. La méthode de Suhir était alors celle qui répondait le mieux à nos besoins.

Une autre limitation importante à mentionner est que puisque les mesures des propriétés mécaniques possèdent généralement une plus grande erreur statistique que les mesures de propriétés optiques, le processus d'optimisation automatisé des caractéristiques thermomécaniques pourrait paraître moins efficace en pratique que l'optimisation automatisée des caractéristiques optiques. Par exemple, il se pourrait que deux designs de filtres optiques qui devraient avoir des résistances thermomécaniques différentes, d'après le formalisme de Suhir, semblent avoir la même résistance thermomécanique, en pratique, due au fait que la différence de résistance prédite par le formalisme soit trop petite pour être mesurée. L'utilisateur doit donc être très prudent pour ce qui est de l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques.

5.3 Différences entre les valeurs de contraintes aux interfaces présentées et celles de la littérature

Il existe des méthodes expérimentales permettant de déterminer les trois composantes du champ tensoriel de contrainte à certains endroits dans un revêtement constitué de couches minces cristallines. Par exemple, la DRX triaxiale a été employée dans la littérature pour obtenir le champ tensoriel de contraintes intrinsèques de même que le champ tensoriel de contraintes thermiques dans des couches minces déposées sur des substrats épais et exposés à des températures diverses [65–70]. Les valeurs de contraintes parallèles mesurées par ces techniques sont de l'ordre du MPa tout comme les résultats reportés dans le chapitre 3. Les valeurs des contraintes de cisaillement et de pelage mesurées par DRX triaxiale sont, elle aussi, de l'ordre du MPa, alors que celles reportées dans les chapitres 3 et 4 sont de l'ordre du kPa pour le cisaillement et du Pa pour le pelage. La différence entre les valeurs mesurées dans la littérature et celle de ce mémoire vient du fait que dans le formalisme de ce mémoire, la contrainte intrinsèque est présumée correspondre à un état de contrainte biaxiale - c'est-à-dire qu'il n'y a pas de contrainte intrinsèque dans la direction perpendiculaire aux interfaces et qu'il n'y a pas de composantes de cisaillement intrinsèques. Seule la composante parallèle de la contrainte est non nulle. Cette hypothèse n'affecte, toutefois, pas la généralité des résultats obtenus avec la méthode présentée dans ce mémoire. En effet, si les contraintes intrinsèques de cisaillement et de pelage sont connues aux interfaces dans un empilement, et que nous désirons en tenir compte, il suffit de les additionner aux valeurs de contraintes thermiques respectives. Dans certains cas, les valeurs de contraintes intrinsèques dans les interfaces seront plus grandes que les valeurs de contraintes thermiques, dans d'autres cas ce sera les valeurs de contraintes thermiques qui seront plus grandes que les valeurs de contraintes intrinsèques.

5.4 Améliorations futures

Plusieurs améliorations futures sont envisageables. En effet, mes travaux et ceux de Marie-Maude de Denus-Baillargeon constituent une infime partie des travaux réalisables dans le domaine de l'optimisation automatisée des propriétés mécaniques des filtres optiques. Ci-dessous je donne quelques avenues qui, à mon avis, mèneraient à des contributions dans le domaine et constitueraient des améliorations aux travaux déjà effectués. Toutefois, il existe fort probablement d'autres voies qui permettront de faire avancer ce domaine de recherche.

La première amélioration, à mon avis, est de permettre l'utilisation de la méthode *Needle* pour la synthèse de filtres optiques avec des cibles mécaniques dans OpenFilters. Ceci pourrait être effectué très rapidement.

Une amélioration évidente serait de tester expérimentalement les filtres synthétisés avec OpenFilters pour vérifier si les améliorations prédites des comportements thermomécaniques sont bien observables. Par exemple, on pourrait déposer des filtres optiques présentant une mauvaise adhésion entre les couches. Certains de ces filtres pourraient être optimisés à l'aide d'OpenFiltres de façon à minimiser la contrainte de pelage (ou même de façon à forcer quelle soit négative). On s'attendrait alors que les designs minimisant la contrainte de pelage ne délaminent pas et que les autres designs délaminent. Il s'agit toutefois d'une méthodologie qui pourrait impliquer beaucoup d'essais et erreurs.

Le manque de données concernant les coefficients d'expansion thermique des matériaux pouvant être déposés avec les systèmes de dépôts du LaRFIS m'ayant forcé à effectuer mes optimisations avec un mélange de matériaux hypothétiques, la création d'une banque de données de coefficient d'expansion thermique des matériaux déposables serait définitivement une contribution remarquable.

Le formalisme de Pao et Eisele devrait être testé dans une boucle d'optimisation comme celle utilisée par OpenFilters afin de déterminer dans quel cas celui-ci est inutilisable due à un trop grand temps de calcul. Similairement, on peut imaginer une boucle d'optimisation comportant une étape de simulation par élément fini pour calculer les caractéristiques mécaniques du filtre et les différentes dérivées nécessaires. Bien que difficiles à envisager au moment de rédiger ce mémoire, l'optimisation et la synthèse de filtres optiques avec leurs caractéristiques mécaniques optimisées de cette façon seront fort probablement envisageables avec l'augmentation de la puissance de calcul et l'amélioration des algorithmes d'optimisation et de simulation par élément fini.

Permettre d'utiliser d'autres cibles mécaniques lors de l'optimisation et de la synthèse de filtres favoriserait aussi la recherche dans le domaine. Par exemple, la possibilité de fixer une cible correspondant à une valeur maximum ou minimum pour un type de contrainte donné résultant d'une indentation avec des paramètres d'indentation spécifique serait intéressante. En effet, il existe une solution analytique pour le champ vectoriel de contrainte élastique résultant d'une distribution hertzienne de pression dans un espace semi-infini possédant un revêtement multicouche [71]. Ceci n'est qu'une des nombreuses possibilités en ce qui concerne l'implémentation de l'utilisation de nouvelles cibles mécaniques à utiliser pour l'optimisation.

Finalement, il serait intéressant de tester d'autres algorithmes d'optimisations. Comme montré dans la section 4.6.3 l'algorithme d'optimisation a rencontré un minimum local lors de l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques sans cible sur la réflexion. Il est probable qu'un algorithme soit mieux adapté à l'optimisation des caractéristiques thermomécaniques que l'algorithme de Levenberg-Marquardt.

RÉFÉRENCES

[1] Klein, Claude A (1991). Thermal stress modeling for diamond-coated optical windows. *Laser-induced damage in optical materials : 1990*, ASTM International.

[2] Caron, Martin and Zabeida, Oleg and Klemberg-Sapieha, Jolanta Ewa and Martinu, Ludvik (2017). Stability and performance of organic-inorganic thin films on polymer substrates. *Surface and Coatings Technology*, *314*, 131–138.

[3] Ashby, MF (1996). Modelling of materials problems. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, *3*(1-3), 95–99.

[4] Buehler, Markus (2008). *Atomistic modeling of materials failure*. Springer Science & Business Media.

[5] Feynman, Richard Phillips and Leighton, Ralph (1988). *" What do you care what other people think ?" : further adventures of a curious character*. WW Norton & Company.

[6] Larouche, Stéphane (2008). *Méthodes avancées pour le design de filtres optiques avec des indices de refraction intermediaires arbitraires*. Thèse de doctorat, Université de Montréal, École Polytechnique de Montréal.

[7] Hackl, Klaus and Goodarzi, Mehdi (2010). An introduction to linear continuum mechanics. *Ruhr-University Bochum*.

[8] Sidoroff, François (1980). Mécanique des milieux continus. *Ecole Centrale de Lyon*.

[9] Landau, Lev D and Lifshitz, EM (1986). Theory of elasticity. *Course of Theoretical Physics*, Elsevier, New York, vol. 7. 15–17.

[10] Jiang, Changhong (2003). *Mechanical stress effects on optical multi-layer dielectric thin film multi-cavity Fabry-Perot interference films*. Thèse de doctorat, University of California, Berkeley.

[11] Basaran, Cemal and Zhao, Ying (1999). Closed form vs. finite element analysis of laminated stacks. *Finite elements in analysis and design*, *32*(3), 163–179.

[12] Jiang, ZQ and Huang, Y and Chandra, A (1997). Thermal stresses in layered electronic assemblies. *Transactions-american Society Of Mechanical Engineers Journal Of Electronic Packaging*, *119*, 127–132.

[13] Strang, Gilbert and Fix, George J (1973). *An analysis of the finite element method*, vol. 212. Prentice-hall Englewood Cliffs, NJ.

[14] Brenner, Susanne and Scott, Ridgway (2007). *The mathematical theory of finite element methods*, vol. 15. Springer Science & Business Media.

[15] Axelsson, Owe and Barker, Vincent Allan (2001). *Finite element solution of boundary value problems : theory and computation*. SIAM.

[16] Prantil, Vincent C and Papadopoulos, Christopher and Gessler, Paul D (2013). Lying by approximation : The truth about finite element analysis. *Synthesis Lectures on Engineering*, *8*(3), 1–112.

[17] Chen, WT and Nelson, CW (1979). Thermal stress in bonded joints. *IBM Journal of Research and Development*, *23*(2), 179–188.

[18] Hutchinson, John W (1996). *Mechanics of thin films and multilayers*. Solid Mechanics, Technical University of Denmark.

[19] Reddy, Junuthula Narasimha and Miravete, Antonio (1995). *Practical analysis of composite laminates*, vol. 1. CRC press.

[20] Kuo, An-Yu and others (1989). Thermal stresses at the edge of a bimetallic thermostat. *ASME J. Appl. Mech*, *56*(3), 585–589.

[21] Blech, Joab J and Kantor, Yehuda (1984). An edge problem having no singularity at the corner. *Computers & structures*, *18*(4), 609–617.

[22] Suganuma, Katsuaki and Okamoto, Taira and Koizljmi, Mitsue and Shimada, Masahiko (1984). Effect of interlayers in ceramic-metal joints with thermal expansion mismatches. *Journal of the American Ceramic Society*, *67*(12).

[23] Fo-van, Chang (1983). Thermal contact stresses of bi-metal strip thermostat. *Applied Mathematics and Mechanics*, *4*(3), 363–376.

[24] Wang, SS and Choi, I (1982). Boundary-layer effects in composite laminates. *ASME Journal of Applied Mechanics*, *49*(Part 1), 541–548.

[25] Grimado, PB (1978). Interlaminar thermoelastic stresses in layered beams. *Journal of Thermal Stresses*, *1*(1), 75–86.

[26] Wang, ASD and Crossman, Frank W (1977). Edge effects on thermally induced stresses in composite laminates. *Journal of Composite Materials*, *11*(3), 300–312.

[27] Boley, BA and Testa, RB (1969). Thermal stresses in composite beams. *International Journal of Solids and Structures*, *5*(10), 1153–1169.

[28] Chen, Du and Cheng, Shun and Gerhardt, TD (1982). Thermal stresses in laminated beams. *Journal of Thermal Stresses*, *5*(1), 67–84.

[29] Glaser, JC (1990). Thermal stresses in compliantly joined materials. *ASME J. Electron. Packag*, *112*(1), 24–29.

[30] Taylor, TC and Yuan, FL (1962). Thermal stress and fracture in shear-constrained semiconductor device structures. *IRE Transactions on Electron Devices*, *9*(3), 303–308.

[31] Bogy, David B (1968). Edge-bonded dissimilar orthogonal elastic wedges under normal and shear loading. *Journal of Applied Mechanics*, *35*(3), 460–466.

[32] Bogy, DB (1970). On the problem of edge-bonded elastic quarter-planes loaded at the boundary. *International Journal of Solids and Structures*, *6*(9), 1287–1313.

[33] Hein, VL and Erdogan, F4 (1971). Stress singularities in a two-material wedge. *International Journal of Fracture Mechanics*, *7*(3), 317–330.

[34] Zeyfang, R (1971). Stresses and strains in a plate bonded to a substrate : semiconductor devices. *Solid-State Electronics*, *14*(10), 1035–1039.

[35] Reinhart, FK and Logan, RA (1973). Interface stress of al x ga1- x as–gaas layer structures. *Journal of Applied Physics*, *44*(7), 3171–3175.

[36] Röll, K (1976). Analysis of stress and strain distribution in thin films and substrates. *Journal of Applied Physics*, *47*(7), 3224–3229.

[37] Olsen, GH and Ettenberg, M (1977). Calculated stresses in multilayered heteroepitaxial structures. *Journal of Applied Physics*, *48*(6), 2543–2547.

[38] Vilms, J and Kerps, D (1982). Simple stress formula for multilayered thin films on a thick substrate. *Journal of Applied Physics*, *53*(3), 1536–1537.

[39] Glascock, HHII and Webster, H (1983). Structured copper : A pliable high conductance material for bonding to silicon power devices. *IEEE Transactions on Components, Hybrids, and Manufacturing Technology*, *6*(4), 460–466.

[40] Suhir, E (1986). Stresses in bi-metal thermostats. *J. Appl. Mech.(Trans. ASME)*, *53*(3), 657–660.

[41] Suhir, E (1986). Calculated thermally induced stresses in adhesively bonded and soldered assemblies. *ISHM International Symposium on Microelectronics, Atlanta, Georgia.*

[42] Suhir, E (1988). An approximate analysis of stresses in multilayered elastic thin films. *Journal of Applied Mechanics*, *55*(1), 143–148.

[43] Suhir, E (1989). Interfacial stresses in bimetal thermostats. *ASME J. Appl. Mech*, *56*(3), 595–600.

[44] Suhir, E (1995). Global and local thermal mismatch stresses in an elongated bi-material assembly adhesively bonded at the ends. *Symp. on Structural Analysis in Microelectronic and Fiber Optic Systems*. vol. 1195, 101–105.

[45] Gerstle Jr, FP and Chambers, RS (1987). Analysis of end stresses in glass-metal bimaterial strips. Rapport technique, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (USA).

[46] Yin, Wan-Lee (1991). Thermal stresses and free-edge effects in laminated beams : a variational approach using stress functions. *ASME J. Electron. Packag*, *113*, 68–75.

[47] Pao, Yi-Hsin and Eisele, Ellen (1991). Interfacial shear and peel stresses in multilayered thin stacks subjected to uniform thermal loading. *ASME J. Electron. Packag*, *113*, 164–172.

[48] Morgan, HS (1991). Thermal stresses in layered electrical assemblies bonded with solder. *ASME J. Electron. Packag*, *113*(4), 350–354.

[49] Timoshenko, Stephen (1925). Analysis of bi-metal thermostats. *JOSA*, *11*(3), 233–255.

[50] Abeles, Florin (1996). Recherches sur la propagation des ondes électromagnétiques sinusoidales dans les milieux stratifiés. application aux couches minces. *SPIE MILESTONE SERIES MS*, *120*, 558–580.

[51] Larouche, Stéphane and Martinu, Ludvik (2008). Openfilters : open-source software for the design, optimization, and synthesis of optical filters. *Applied optics*, *47*(13), C219–C230.

[52] Larouche, Stéphane and Martinu, Ludvik (2008). Optical filters with prescribed optical thickness and refined refractive indices. *Applied optics*, *47*(22), 4140–4146.

[53] de Denus-Baillargeon, Marie-Maude and Schmitt, Thomas and Larouche, Stéphane and Martinu, Ludvik (2014). Design and fabrication of stress-compensated optical coatings : Fabry–perot filters for astronomical applications. *Applied optics*, *53*(12), 2616–2624.

[54] Larouche, Stéphane and Martinu, Ludvik (2008). Step method : a new synthesis method for the design of optical filters with intermediate refractive indices. *Applied optics*, *47*(24), 4321–4330.

[55] Verly, Pierre G (2008). Hybrid approach for rugate filter design. *Applied optics*, *47*(13), C172–C178.

[56] Delphine Poinot, Sébastien Châtel (2016). Investigation des propriétés de zro2 en fonction de l'épaisseur : collaboration avec la plateforme de nanocaractérisation du cea leti et menapic. *communication privée*.

[57] Klein, Claude A (2000). Comment on "the multilayer-modified stoney's formula for laminated polymer composites on a silicon substrate"[j. appl. phys. 86, 5474 (1999)]. *Journal of Applied Physics*, *88*(9), 5499–5500.

[58] Townsend, PH and Barnett, DM and Brunner, TA (1987). Elastic relationships in layered composite media with approximation for the case of thin films on a thick substrate. *Journal of Applied Physics*, *62*(11), 4438–4444.

[59] Kim, Jin S and Paik, Kyung W and Oh, Seung H (1999). The multilayer-modified stoney's formula for laminated polymer composites on a silicon substrate. *Journal of applied physics*, *86*(10), 5474–5479.

[60] Klein, Claude A and Miller, Richard P (2000). Strains and stresses in multilayered elastic structures : The case of chemically vapor-deposited zns/znse laminates. *Journal of Applied Physics*, *87*(5), 2265–2272.

[61] Timoshenko, Stephen P and Woinowsky-Krieger, Sergius (1959). *Theory of plates and shells*. McGraw-hill.

[62] Klein, Claude A (2000). How accurate are stoney's equation and recent modifications. *Journal of Applied Physics*, *88*(9), 5487–5489.

[63] COMSOL AB. (2007). *Structural Mechanics Module Model Library*. COMSOL AB.

[64] Çetinörgü, Eda and Baloukas, Bill and Zabeida, Oleg and Klemberg-Sapieha, Jolanta E and Martinu, Ludvik (2009). Mechanical and thermoelastic characteristics of optical thin films deposited by dual ion beam sputtering. *Applied optics*, *48*(23), 4536–4544.

[65] Sue, JA (1994). Triaxial stress distribution in a textured titanium nitride coating. *Surface and Coatings Technology*, *68*, 259–265.

[66] Matejicek, J and Sampath, S and Dubsky, J (1998). X-ray residual stress measurement in metallic and ceramic plasma sprayed coatings. *Journal of thermal spray technology*, *7*(4), 489.

[67] Debelle, A and Abadias, G and Michel, A and Jaouen, C (2004). Stress field in sputtered thin films : Ion irradiation as a tool to induce relaxation and investigate the origin of growth stress. *Applied physics letters*, *84*(24), 5034–5036.

[68] Noyan, IC and Huang, TC and York, BR (1995). Residual stress/strain analysis in thin films by x-ray diffraction. *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences*, *20*(2), 125–177.

[69] Kuru, Yener and Wohlschlögel, Markus and Welzel, Udo and Mittemeijer, Eric J (2008). Non-ambient x-ray diffraction residual stress analysis of thin films : tracing nanosize-related effects on thermoelastic constants and identifying sources of residual stresses. *Journal of Applied Crystallography*, *41*(2), 428–435.

[70] Rickerby, DS and Jones, AM and Bellamy, BA (1989). X-ray diffraction studies of physically vapour-deposited coatings. *Surface and Coatings Technology*, *37*(1), 111–137.

[71] Schwarzer, N and Richter, F and Hecht, G (1999). The elastic field in a coated half-space under hertzian pressure distribution. *Surface and Coatings Technology*, *114*(2), 292–303.

ANNEXE A Dérivation de l'équation 2.4

Le but de cette annexe est de montrer explicitement comment obtenir $\mathrm{d}l'^2 = \mathrm{d}l^2 + 2\varepsilon_{ik}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k$, à partir de

$$\mathrm{d}l'^2 = \mathrm{d}l^2 + 2\mathrm{d}x_i\mathrm{d}u_i + \mathrm{d}u_i^2. \tag{A.1}$$

Tous d'abord, notons que $\mathrm{d}u_i = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right)\mathrm{d}x_k$. On peut donc réécrire l'équation A.1

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}l'^2 &= \mathrm{d}l^2 + 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_l}\mathrm{d}x_l\mathrm{d}x_k \\
&= \mathrm{d}l^2 + 2\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_l}\mathrm{d}x_l\mathrm{d}x_k \\
&= \mathrm{d}l^2 + 2\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k + \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\frac{\partial u_l}{\partial x_i}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k \\
&= \mathrm{d}l^2 + \left(2\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\frac{\partial u_l}{\partial x_i}\right)\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k \\
&= \mathrm{d}l^2 + \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\frac{\partial u_l}{\partial x_i}\right)\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k \\
&= \mathrm{d}l^2 + 2\varepsilon_{ik}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k,
\end{aligned} \tag{A.2}$$

avec $\varepsilon_{ik} := \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i}\frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right)$.

ANNEXE B Calcul de la dérivée $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i}$

On a :

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} &= \frac{1}{2}\frac{\sqrt{3}}{4}\frac{1}{\sqrt{\dfrac{\frac{1}{t_sE'_s}+\dfrac{1}{\sum\limits_{r=1}^{q} t_rE'_r}}{\frac{t_s}{E'_s}+\sum\limits_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}}}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\frac{\frac{1}{t_sE'_s}+\dfrac{1}{\sum\limits_{r=1}^{q} t_rE'_r}}{\frac{t_s}{E'_s}+\sum\limits_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}}\right) \\ &= \frac{3}{8k}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\frac{\frac{1}{t_sE'_s}+\dfrac{1}{\sum\limits_{r=1}^{q} t_rE'_r}}{\frac{t_s}{E'_s}+\sum\limits_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}}\right).\end{aligned} \tag{B.1}$$

En utilisant la règle de dérivation des quotients, on obtient :

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} = \frac{3}{8k}\left(\frac{\left(\frac{t_s}{E'_s}+\sum\limits_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\frac{1}{t_sE'_s}+\dfrac{1}{\sum\limits_{r=1}^{q} t_rE'_r}\right)-\left(\frac{1}{t_sE'_s}+\dfrac{1}{\sum\limits_{r=1}^{q} t_rE'_r}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\frac{t_s}{E'_s}+\sum\limits_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)}{\left[\frac{t_s}{E'_s}+\sum\limits_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right]^2}\right). \tag{B.2}$$

En simplifiant et en évaluant les dérivées, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t_i} &= \frac{3}{8k}\left(\frac{1}{\left(\frac{t_s}{E'_s}+\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\frac{1}{\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r}\right)-\frac{\left(\frac{1}{t_sE'_s}+\frac{1}{\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r}\right)}{\left[\frac{t_s}{E'_s}+\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right]^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)\right)\\
&= \frac{3}{8k}\left(\frac{-4k^2}{3}\right)\left(\frac{-1}{\left(\frac{1}{t_sE'_s}+\frac{1}{\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r}\right)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\frac{1}{\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r}\right)+\frac{1}{\left(\frac{t_s}{E'_s}+\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_i}\left(\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)\right)\\
&= \frac{-k}{2}\left(\frac{\sum_{r=1}^{q}E'_r}{\left(\frac{1}{t_sE'_s}+\frac{1}{\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r}\right)\left(\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r\right)^2}+\frac{1}{\left(\frac{t_s}{E'_s}+\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)}\sum_{r=1}^{q}\frac{1}{E'_r}\right)\\
&= \frac{-k}{2}\left(\frac{\sum_{r=1}^{q}E'_r}{\left(\frac{\left(\sum_{r=1}^{q}t_iE'_r\right)^2}{t_sE'_s}+\sum_{r=1}^{q}t_rE'_r\right)}+\frac{1}{\left(\frac{t_s}{E'_s}+\sum_{r=1}^{q}\frac{t_r}{E'_r}\right)}\sum_{r=1}^{q}\frac{1}{E'_r}\right).
\end{aligned} \tag{B.3}$$

ANNEXE C Données techniques sur le substrat N-KZFS2

Data Sheet

SCHOTT

N-KZFS2
558540.255

n_d = 1.55836	ν_d = 54.01	$n_F - n_C$ = 0.010338
n_e = 1.56082	ν_e = 53.83	$n_{F'} - n_{C'}$ = 0.010418

Refractive Indices

	λ [nm]	
$n_{2325.4}$	2325.4	1.52239
$n_{1970.1}$	1970.1	1.53011
$n_{1529.6}$	1529.6	1.53798
$n_{1060.0}$	1060.0	1.54546
n_t	1014.0	1.54625
n_s	852.1	1.54944
n_r	706.5	1.55337
n_C	656.3	1.55519
$n_{C'}$	643.8	1.55570
$n_{632.8}$	632.8	1.55617
n_D	589.3	1.55827
n_d	587.6	1.55836
n_e	546.1	1.56082
n_F	486.1	1.56553
$n_{F'}$	480.0	1.56612
n_g	435.8	1.57114
n_h	404.7	1.57580
n_i	365.0	1.58382
$n_{334.1}$	334.1	1.59259
$n_{312.6}$	312.6	
$n_{296.7}$	296.7	
$n_{280.4}$	280.4	
$n_{248.3}$	248.3	

Constants of Dispersion Formula

B_1	1.23697554
B_2	0.153569376
B_3	0.903976272
C_1	0.00747170505
C_2	0.0308053556
C_3	70.1731084

Constants of Dispersion dn/dT

D_0	$6.77 \cdot 10^{-6}$
D_1	$1.31 \cdot 10^{-8}$
D_2	$-1.23 \cdot 10^{-11}$
E_0	$3.84 \cdot 10^{-7}$
E_1	$5.51 \cdot 10^{-10}$
λ_{TK} [µm]	0.196

Internal Transmittance τ_i

λ [nm]	τ_i (10mm)	τ_i (25mm)
2500	0.276	0.040
2325	0.583	0.260
1970	0.915	0.800
1530	0.976	0.940
1060	0.996	0.991
700	0.998	0.996
660	0.998	0.994
620	0.998	0.994
580	0.998	0.994
546	0.998	0.994
500	0.997	0.992
460	0.995	0.987
436	0.992	0.981
420	0.990	0.975
405	0.987	0.967
400	0.985	0.963
390	0.980	0.950
380	0.971	0.930
370	0.963	0.910
365	0.954	0.890
350	0.915	0.800
334	0.810	0.590
320	0.565	0.240
310	0.246	0.030
300	0.012	
290		
280		
270		
260		
250		

Color Code

λ_{80}/λ_5	34/30
(*= λ_{70}/λ_5)	

Remarks

suitable for precision molding, step 0.5 available

Relative Partial Dispersion

$P_{s,t}$	0.3080
$P_{C,s}$	0.5568
$P_{d,C}$	0.3061
$P_{e,d}$	0.2383
$P_{g,F}$	0.5419
$P_{i,h}$	0.7758
$P'_{s,t}$	0.3056
$P'_{C',s}$	0.6011
$P'_{d,C'}$	0.2552
$P'_{e,d}$	0.2365
$P'_{g,F'}$	0.4814
$P'_{i,h}$	0.7699

Deviation of Relative Partial Dispersions ΔP from the "Normal Line"

$\Delta P_{C,t}$	0.0636
$\Delta P_{C,s}$	0.0280
$\Delta P_{F,e}$	-0.0044
$\Delta P_{g,F}$	-0.0111
$\Delta P_{i,g}$	-0.0440

Other Properties

$\alpha_{-30/+70°C}$ [10^{-6}/K]	4.4
$\alpha_{+20/+300°C}$ [10^{-6}/K]	5.4
T_g [°C]	472
$T_{10^{13.0}}$ [°C]	488
$T_{10^{7.6}}$ [°C]	600
c_p [J/(g·K)]	0.830
λ [W/(m·K)]	0.810
AT [°C]	533
ρ [g/cm³]	2.54
E [10^3 N/mm²]	66
μ	0.266
K [10^{-6} mm²/N]	4.02
HK$_{0.1/20}$	490
HG	3
Abrasion Aa	70
CR	1
FR	4
SR	52.3
AR	4.3
PR	4.2
SR-J	6
WR-J	6

Temperature Coefficients of Refractive Index

	$\Delta n_{rel}/\Delta T$ [10^{-6}/K]			$\Delta n_{abs}/\Delta T$ [10^{-6}/K]		
[°C]	**1060.0**	**e**	**g**	**1060.0**	**e**	**g**
-40/ -20	4.6	5.2	5.7	2.5	3.0	3.5
+20/ +40	4.7	5.3	5.9	3.3	3.9	4.5
+60/ +80	4.8	5.5	6.2	3.8	4.5	5.1

Figure C.1 Données techniques sur le substrat N-KZFS2.