UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

Nº d'ordre 518

50376 1975 17

THESE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE SPÉCIALITÉ

par

BONNEL Bernard

# CONTRIBUTION A L'ETUDE

# DES PROPRIETES OPTIQUES DANS L'INFRA-ROUGE

# DES MILIEUX ISOTROPES ET ANISOTROPES

# INACTIFS ABSORBANTS

PAR DES MESURES DE RACTEURS DE REFLEXION



Soutenue le 6 mars 1975 devant la Commission d'examen

Membres du Jury

M. SCHILTZM. BOILLETM. BILLARDM. MONTEL

Président Rapporteur

Examinateurs

U.E.R. DE PHYSIQUE FONDAMENTALE

Ce travail a été entièrement réalisé dans le laboratoire de Spectroscopie Infra-rouge de l'Université des Sciences et Techniques de Lille, sous la direction de M. le Professeur BOILLET ; je tiens à lui exprimer ici ma profonde reconnaissance pour les constants encouragements et les précieux conseils qu'il m'a toujours donnés.

Je suis particulièrement sensible à l'honneur que m'ont fait M. le Professeur SCHILTZ en acceptant la présidence du jury, M. le Professeur BILLARD et M. le Professeur MONTEL qui ont bien voulu en être membres, et j'espère être digne de leur confiance.

J'adresse enfin tous mes remerciements à ceux qui ont contribué à la réalisation matérielle de ce mémoire, en particulier à Madame NAVREZ qui, avec beaucoup de compétence et de gentillesse, s'est acquittée de la tâche ingrate de la frappe.

### INTRODUCTION

Ce travail comprend deux parties distinctes de volume inégal, puisque la première, relative aux milieux isotropes, est limitée au premier chapitre, les quatre suivants formant la seconde partie.

Les propriétés optiques d'un milieu isotrope absorbant non magnétique dépendent de deux constantes qui sont des fonctions de la longueur d'onde : n l'indice de réfraction, k l'indice d'extinction. Inversement, à l'aide de deux de ces propriétés étudiées expérimentalement, on peut, si l'on connaît les lois qui les relient à n et k, déterminer ces deux constantes, à chaque longueur d'onde, par résolution soit graphique soit numérique du système d'équations. De nombreuses méthodes ont été proposées en choisissant comme grandeurs expérimentales les facteurs de réflexion sur le milieu étudié, à incidence normale ou oblique, pour une onde incidente plane naturelle ou polarisée. Les relations qui servent à obtenir n et k sont alors les relations de Fresnel.

C'est à la mesure des constantes optiques par ce procédé que nous avons tout d'abord travaillé.

Après avoir testé certaines de ces méthodes sur un échantillon de silice vitreuse, nous avons conclu que la détermination de n et k ainsi faite est d'autant moins précise que l'indice d'extinction est élevé, et ce quels que soient les pouvoirs réflecteurs utilisés et le mode de résolution adopté. Une critique fondée sur une discussion graphique montre que ce phénomène est inhérent aux relations de Fresnel.

Nous avons alors développé une méthode qui fait intervenir une autre propriété optique du milieu, à savoir le déphasage entre les composantes d'une vibration elliptique réfléchie par le milieu absorbant, lorsque la vibration incidente est polarisée rectilignement dans une direction quelconque. La même critique appliquée à cette méthode montre que la précision reste bonne si le milieu est très absorbant. Deux modes de résolution (graphique et numérique) sont proposés, ainsi qu'une application à un échantillon de silice dans la région de 9  $\mu$ .

Nous nous sommes ensuite donné pour but de déterminer, par des mesures similaires, le tenseur diélectrique  $\vec{\epsilon}$  d'un milieu cristallín anisotrope (magnétiquement isotrope).

Les travaux de ce genre sur les cristaux anisotropes étant beaucoup moins nombreux, nous avons dû tout d'abord établir l'expression des facteurs de réflexion normale sur une section plane réfléchissante quelconque, d'orientation connue, d'un milieu anisotrope transparent. Cette expression contient les éléments diagonaux de  $\vec{e}$ , aussi avons-nous conclu que ces éléments peuvent être calculés si l'on mesure les facteurs de réflexion normale sur trois plans réflecteurs formant un trièdre orthogonal. Nous avons ainsi établi deux méthodes de détermination des constantes diélectriques principales, valables l'une si le trièdre orthogonal est quelconque, l'autre plus rapide s'il a une orientation particulière par rapport aux axes principaux du cristal. Des calculs faits sur un exemple fictif sont présentés à la fin du mémoire et montrent bien la fidélité et la convergence de ces deux méthodes.

L'extension aux cristaux absorbants a ensuite été faite en considérant que toutes les grandeurs (scalaires et vectorielles) deviennent complexes. Cette transposition réel - complexe est classique dans le cas d'un milieu isotrope ; pour un cristal, nous avons dû la justífier en reprenant les équations de Maxwell tenant compte de l'absorption. Nous avons ainsi été amenés à introduire des " axes principaux complexes " du milieu cristallin absorbant. Une interprétation de ces axes complexes est proposée.

Ce travail s'achève avec une application expérimentale faite sur un échantillon de gypse monoclinique, qui a une bande d'absorption intense vers 9 µ . Les résultats obtenus sont présentés et critiqués. Certaines observations (symétrie des facteurs de réflexion normale, nature rectiligne ou elliptique des vibrations réfléchies ....) confirment la théorie. Enfin, un phénomène observable en région de forte absorption (variation particulière du facteur de réflexion normale quand le cristal tourne autour de la normale au plan réflecteur) est présentée, et s'interprète d'une façon satisfaisante à l'aide des grandeurs complexes.

# CHAPITRE - I -

ETUDE DES MILIEUX ISOTROPES ABSORBANTS

# INTRODUCTION

Dans ce chapître, nous ne nous intéressons qu'aux milieux isotropes, absorbants, non magnétiques. Après avoir rappelé les relations fondamentales de Fresnel donnant les coefficients de réflexion, en incidence oblique, depuis le vide sur une face supposée parfaite de l'échantillon, nous examinons les divers moyens utilisés pour trouver les constantes optiques du milieu à partir de mesures en réflexion, et nous serons amenés à discuter la validité de ces méthodes selon l'importance de l'absorption. Nous décrirons alors une méthode de mesure personnelle pouvant donner des résultats plus précis lorsque l'absorption est élevée.

## 1 - RELATIONS FONDAMENTALES

<u>1,1</u> – Appelons i l'angle d'incidence d'une vibration polarisée rectilignement, dont le champ électrique a une amplitude notée a et vibre dans le plan d'incidence. Après réflexion sur un milieu absorbant, le champ électrique réfléchi reste dans le plan d'incidence, son amplitude est a', telle que [1,2] :

(1)  $\frac{a'}{a} = -\frac{tg (i-r)}{tg (i+r)}$ 

dans laquelle r est un angle complexe, défini par :

(2a)  $\sin i = N \sin r$ 

(2b) N = n - jk

N est l'indice de réfraction scalaire complexe du milieu absorbant, n et k sont les constantes optiques, réelles et positives, de ce milieu. Le rapport a'/a est donc un nombre complexe que nous notons  $r_{\parallel}$ , pour rappeler le parallélisme des champs électriques incident et réfléchi avec le plan d'incidence. Le carré du module de  $r_{\parallel}$  est une grandeur directement mesurable, il s'écrit :  $R_{\parallel} = r_{\parallel} \cdot r_{\parallel}^{*}$ , c'est le facteur de réflexion de la face, pour cette direction de polarisation. C'est une fonction de n, de k et de l'angle i .

- 1 -

En effet, avec les notations (2), la relation (1) devient :

(3) 
$$r_{\parallel} = \frac{\cos r - N \cos i}{\cos r + N \cos i} = \frac{\sqrt{N^2 - \sin^2 i} - N^2 \cos i}{\sqrt{N^2 - \sin^2 i} + N^2 \cos i}$$

2,2 - De même, si l'on considère une vibration rectiligne dont le champ électrique d'amplitude b est normal au plan d'incidence, le champ électrique réfléchi conserve cette direction, son amplitude est b', telle que [1,2] :

(4a) 
$$\frac{b'}{b} = -\frac{\sin(i-r)}{\sin(i+r)} = r_{\perp}$$

soit :

(4b) 
$$r_{1} = \frac{\cos i - N \cos r}{\cos i + N \cos r} = \frac{\cos i - \sqrt{N^{2} - \sin^{2} i}}{\cos i + \sqrt{N^{2} - \sin^{2} i}}$$

2,3 - Si l'angle d'incidence est nul, la distinction entre les deux directions de polarisation n'a plus de sens. Les relations (3) et (4) donnent le même résultat, noté  $r_0$ :

(5a) 
$$r_0 = \frac{1 - N}{1 + N}$$

r<sub>o</sub> est le coefficient complexe de réflexion normale. Il est facile d'exprimer le carré de son module, R<sub>o</sub>, à l'aide des constantes optiques :

(5b) 
$$R_{o} = \frac{(n-1)^{2} + k^{2}}{(n+1)^{2} + k^{2}}$$

# 2 - REVUE DES METHODES DE DETERMINATION DES CONSTANTES OPTIQUES PAR REFLEXION

Les relations (3), (4) et (5) permettent de trouver les constantes optiques du milieu à partir des facteurs de réflexion. Les méthodes de résolution employées pour cela sont nombreuses, et nous n'exposons ici que les principales, celles qui peuvent être mises en oeuvre sur notre appareil. Quel que soit le procédé utilisé, la démarche suivie par les auteurs est la même : mesure de deux facteurs de réflexion, à angles d'incidence et directions de polarisation donnés, puis extraction des constantes optiques par résolution des relations (3), (4) ou (5), soit numériquement, soit graphiquement.

2, 1 – AVERY [3,4] mesure deux facteurs de réflexion, en polarisation  $\parallel$  et 1, à plusieurs incidences ;

2, 2 - SIMON [5,6] mesure les facteurs de réflexion naturels à incidences 20° et 70°;

Avery et Simon trouvent n et k en se servant d'abaques établis à l'avance.

<u>2,3</u> - FLORIN ABELES [7], HUMPHREYS - OWEN [8], mesurent  $R_{\parallel}$  et  $R_{\perp}$  à l'incidence 70°; le premier de ces auteurs calcule numériquement n et k par des formules relativement simples, le second emploie une méthode graphique.

<u>2, 4</u> – ROBINSON [9] mesure R<sub>o</sub> puis un facteur de transmission, et en déduit n et k à l'aide d'un abaque de Smith, c'est-à-dire en identifiant formellement la réflexion des ondes planes sur une substance absorbante avec la propagation dans une ligne de transmission fermée sur une impédance complexe.

2, 5 - QUENEY [10], PONTIER, DECHAMBENOY [11, 12] passent par deux grandeurs intermédiaires, a et  $\varphi$ , telles que :  $(n - jk)^2 = a \exp(-j\varphi)$ , et trouvent une relation liant  $\cos \varphi$ , en fonction du paramètre R<sub>i</sub> (facteur de réflexion naturel à l'incidence i). Leur méthode consiste alors à mesurer R à la même longueur d'onde et pour plusieurs incidences, puis à construire graphiquement les courbes a = f (  $\cos \varphi$  ) correspondantes :

- 3 -

ces courbes doivent se couper en un point dont les coordonnées sont a et  $\cos \varphi$ , dont on tire aisément n et k.

<u>2, 6</u> – QUERRY et al. [13,14,15] mesurent  $R_{\parallel}$  et  $R_{\perp}$  à la même incidence et résolvent le système par ordinateur.

2, 7 - HUNDERI [16] utilise un procédé graphique différant nettement de ceux cités ci-dessus : il mesure  $R_0$ , puis  $R_{\parallel}$  et  $R_1$  à la même incidence, et ce pour plusieurs incidences encadrant i = 60°. Il calcule

alors le terme G ( $i = 60^{\circ}$ ) =  $\left[\frac{1}{R_{\parallel}} \frac{\partial R_{\parallel}}{\partial i} - \frac{1}{R_{\perp}} \frac{\partial R_{\perp}}{\partial i}\right]_{i=60^{\circ}}$ , et se sert de G et de R<sub>o</sub> pour trouver n et k, à l'aide d'abaques.

2, 8 - Notons enfin la méthode de M<sup>me</sup> VINCENT - GEISSE et al. [17,18], qui consiste à mesurer deux fois le facteur de réflexion normale d'une face plane, d'abord nue puis recouverte d'une couche mince d'un diélectrique non absorbant et d'indice de réfraction connu (pentaséléniure d'arsenic).Le système d'équations est résolu par abaques de Smith.

Ce procédé a été également appliqué par BILLARD et al. [19], dans le domaine visible, avec une huile non absorbante. Les constantes optiques sont alors calculées grâce à des relations données par KOENIGSBERGER [20].

## 3 - CRITIQUE DE CES METHODES EN CAS D'ABSORPTION ELEVEE

<u>3, 1 -</u> Si l'on excepte la dernière citée en 2-8, dont l'emploi satisfaisant dans le visible est malaisé dans l'infrarouge, en raison du manque de milieu d'immersion étalonné et de la délicatesse des réglages, toutes les méthodes citées ci-dessus peuvent être appliquées grâce à notre appareillage, qui permet de mesurer des facteurs de réflexion d'échantillons solides à incidence et direction de polarisation quelconques, Nous avons

- 4 -

donc commencé notre travail en nous exerçant à mesurer ceux d'un morceau de silice vitreuse, puis à appliquer la méthode graphique de HUMPHREYS [8] pour en tirer les constantes optiques, dont nous avons retrouvé les valeurs mesurées dans la bande 9µ par SIMON [6]. Nous avons d'ailleurs calculé également ces constantes en utilisant la suite d'étapes suivantes : à partir des expressions de  $R_{\parallel}$  et  $R_{\perp}$  déduites de (3) et (4b), on établit facilement les relations :

(6a) 
$$n^2 = \frac{c + \sqrt{c^2 + d^2}}{2}$$
 (6b)  $k^2 = \frac{-c + \sqrt{c^2 + d^2}}{2}$ 

avec :

(6c) 
$$c = 2 x^2 - y - \sin^2 i$$
, (6d)  $d^2 = 4 x^2 (y - x^2)$ 

(6e) 
$$x = \frac{\cos 2 i (R_{1} - R_{1}) (1 - R_{1})}{2 \cos i [R_{1} (R_{1} + \cos 2i) - R_{1} (1 + R_{1} . \cos i)]}$$

(6f) 
$$y = 2 \cos i \frac{1 + R_1}{1 - R_1} x - \cos^2 i$$

Nous nous sommes alors aperçu que lorsque l'absorption de l'échantillon est forte, la méthode graphique devient très imprécise, en raison de l'exiguité du "carrelage" de l'abaque de Humphreys. Après avoir sans succès employé d'autres procédés comme celui de SIMON [5] (R naturel à 70° et 20°), et celui de QUENEY [10] ( calcul de a et cos  $\varphi$  ), nous sommes parvenus à la conclusion que ce phénomène ne dépend pas du choix de la méthode utilisée, mais est inhérent aux équations de Fresnel : lorsqu'on veut tirer n et k des facteurs de réflexion, les résultats sont peu précis si k est élevé, quel que soit le moyen choisi pour mener cette détermination.

Ceci a déjà été constaté par ENGELSRATH et al. [21], ARMALY et al. [22], et surtout par HUNTER [23], qui s'est livré à une étude assez détaillée de ce phénomène en traçant à l'ordinateur ce qu'il nomme les "courbes d'isoréflectance" dans le plan n, k (ensemble de points de coor-

- 5 -

données n, k qui donnent tous le même facteur de réflexion à l'incidence i ; pour plusieurs incidences, ces courbes doivent être concourantes ; la précision de la "mesure" dépend de la qualité de l'intersection, qui sert de base à la discussion).

Avant d'avoir eu connaissance de la publication de Hunter, nous avions nous-mêmes pris conscience de ce problème, et proposé l'explication suivante, résumée dans une note récente [24] :

<u>3, 2</u> – Supposons, pour simplifier, que nous désirons trouver les constantes optiques du milieu à l'aide de deux facteurs de réflexion, R<sub>o</sub> d'une part, R<sub>||</sub> à une incidence arbitraire i d'autre part ; nous noterons R<sub>||</sub> (i) ce dernier. Les autres cas résultant d'un choix différent seront étudiés plus loin, en 3-5.

3, 2, 1 – Lorsque  $R_0$  est mesuré, existe entre n et k la relation (5b), qui peut se mettre sous la forme :

(7)  $n^2 + k^2 = 2 \frac{1 + R_0}{1 - R_0} n - 1 = An - 1$ 

Il y a une infinité de couples (n,k) donnant un facteur de réflexion normale égal à R<sub>o</sub>. Cependant le choix des valeurs permises n'est pas arbitraire : il est facile de montrer en effet, que cette infinité est bornée.

Portons sur un même système d'axes les courbes  $y_1 = n^2$  et  $y_2 = An-1$ (figure 1) ; la parabole et la droite ont toujours deux intersections dont les abcisses sont notées  $n_{\ell}$  et  $n_L$ . Nous devons toujours avoir  $n^2 + k^2 \ge n^2$ , donc  $y_2 \ge y_1$  : les valeurs permises à n se trouvent dans l'intervalle  $[n_{\ell}, n_L]$ . A chacune de ces valeurs correspond une valeur de k qui est donnée géométriquement par la longueur du segment AB :

(8) 
$$k = \sqrt{y_2 - y_1} = \sqrt{AB}$$

- 6 -

Si le milieu est fortement absorbant, k est élevé et  $R_0$  est proche de l'unité : des valeurs de  $R_0$  de l'ordre de 6 à 8 ne sont pas rares au maximum d'une bande d'absorption. La pente de la droite  $y_2$ est donc grande, et le domaine permis  $[n_l, n_L]$  est étendu : le nombre de couples (n,k) pouvant convenir a priori est donc d'autant plus grand que k est élevé.

<u>3, 2, 2</u> - Pour trouver le couple qui caractérise effectivement l'échantillon, nous mesurons ensuite un facteur de réflexion du type  $R_{\parallel}(i)$ . La solution peut s'obtenir géométriquement, en construisant point par point la courbe  $R_{\parallel}(i) = f(n)$ , grâce à la relation (3), en faisant varier n dans l'intervalle  $[n_{\ell}, n_{L}]$ , et en calculant k pour chaque point grâce à la relation (8) : on construit ainsi la courbe  $R_{\parallel}(i) = f(n)$  en prenant comme paramètre  $R_{0}$  = constante. L'intersection de cette courbe théorique avec l'horizontale d'ordonnée  $R_{\parallel}(i)$  mesuré est un point dont l'abcisse donne la valeur de n qui doit être retenue.

Pour que cette détermination soit précise, il faut que la droite et la courbe possèdent une intersection franche. Or, si l'on choisit l'angle i sans précaution, on obtient en général une disposition analogue à celle de la figure 2 : la courbe  $R_{\mu}$  (i) tend rapidement vers une limite, et si  $R_{\mu}$  (i) est mesuré avec une certaine incertitude il y a un très grand nombre de couples (n,k) pouvant tous convenir.

<u>3, 2, 3 -</u> Pour montrer comment il faut choisir i pour avoir une intersection franche, nous présentons, figure 3, quatre diagrammes théoriques obtenus de la façon décrite en 3-2-2, pour quatre valeurs de  $R_0$  allant croissant. Sur chaque diagramme, nous avons porté quatre courbes  $R_{\parallel}(i) = f$  (n), pour i = 30°, 45°, 60°, 70°. Chaque diagramme est tracé sur l'intervalle [ $n_0$ , $n_1$ ], différant selon la valeur de  $R_0$ .

Nous y voyons que pour une valeur  $R_0$  donnée, la courbe  $R_{\parallel}$  (i) tend vers une limite d'autant plus rapidement atteinte que i est petit. De plus, si  $R_0$  augmente, le nombre de courbes présentant une limite augmente lui -

- 7 -

aussi : ainsi, si  $R_0$  vaut ·2, seules les courbes  $R_{\parallel}$  (30°) et  $R_{\parallel}$  (45°) ont un palier ; si  $R_0$  vaut ·6, seule  $R_{\parallel}$  (70°) décroît régulièrement ; si  $R_0$  vaut ·8, les quatre courbes présentent un palier.

<u>3, 3 -</u> De cette étude il découle que plus R<sub>o</sub> est élevé, plus grand doit être choisi l'angle d'incidence si l'on veut une courbe de pente théorique non nulle. La meilleure courbe est celle qui tend vers zéro si n tend ver n<sub>L</sub>, et il est facile de déterminer l'angle i correspondant. En effet, si n vaut n<sub>L</sub>, la valeur théorique de k est nulle (voir figure 1, A et B sont confondus). La fonction  $r_{\parallel}$  tend vers une limite donnée par la relation (3), dans laquelle N est réel et vaut n<sub>L</sub>. Si n<sub>L</sub> est grand, on peut écrire N<sup>2</sup> - sin<sup>2</sup>i # n<sub>L</sub><sup>2</sup>, et la relation (3) devient :

(9) 
$$r_{\parallel} \# \frac{1 - n_{L} \cos i}{1 + n_{I} \cos i}$$

Le carré de ce terme est la limite atteinte par  $R_{\parallel}(i)$  : cette limite est nulle pour un angle d'incidence  $i_e$  tel que cos  $i_e = 1/n_L$ . Ceci peut être vérifié sur les figures 3c et 3d, où l'on a tracé les courbes  $R_{\parallel}(i_e)$ .

Si l'absorption est forte, l'angle i est très proche de 90° : ainsi, pour  $R_0 = \cdot 6$ , on trouve i = 83°.

Nous en concluons que pour obtenir des mesures exploitables si le milieu étudié est très absorbant, il faut opérer à des incidences rasantes ce qui pose des problèmes pratiques (grande surface d'échantillon, repérage précis de i, influence de la convergence du faisceau incident, etc ....) : la précision de l'exploitation théorique des mesures est alors annihilée par la trop grande incertitude sur la mesure de R<sub>µ</sub>(i).

<u>3, 4</u> — Il est naturellement possible de tenir le raisonnement inverse, c'est-à-dire se fixer une incidence de travail maximum  $i_c$ , imposée par le matériel de mesure, au-delà de laquelle la détermination des facteurs

- 8 -

de réflexion devient délicate, et chercher la valeur de R<sub>o</sub> au-delà de laquelle la courbe  $R_{\parallel}(i_c) = f(n)$  ne s'annulera pas au point d'abcisse  $n_L$ : il suffit de calculer  $n_L = 1/\cos i_c$ , puis A et R<sub>o</sub> en se servant de la relation (7).

Notre appareillage nous permet de faire des mesures jusqu'à l'incidence  $i_c = 70^\circ$ . On obtient alors  $R_o = \cdot 24$ . Bien entendu, cette limite n'est pas critique, la courbe  $R_{\parallel}$  (70°) conserve une pente notable pour des valeurs plus grandes de  $R_o$ , mais il faut bien se rendre compte que la précision sur la détermination des constantes optiques par cette méthode diminue d'autant plus que  $R_o$  devient élevé.

<u>3, 5</u> – Des diagrammes analogues à ceux de la figure 3 peuvent être établis en considérant  $R_{\perp}(i) = f(n)$ , à  $R_{o}$  fixé (figure 4). Ils présentent tous les mêmes particularités constatées précédemment : apparition de paliers au fur et à mesure que  $R_{o}$  augmente. De plus, pour cette direction de polarisation (champ électrique normal au plan d'incidence), il n'est pas possible de trouver un angle i<sub>e</sub> pour lequel la limite lorsque n tend vers  $n_{\perp}$ , est nulle.

Il est aisé de voir que si l'on ne veut pas se servir de  $R_0$ , donc si l'on veut trouver n et k à l'aide de  $R_{\parallel}$  et  $R_{\perp}$  à la même incidence (méthodes de AVERY [3], HUMPHREYS [8]), où  $R_{\parallel}$  à deux incidences différentes, ou toute autre combinaison, la détermination sera tout aussi hasardeuse : en effet, prenons le cas d'un échantillon qui aurait un facteur de réflexion normale  $R_0 = \cdot 8$ , et supposons qu'on veuille trouver ses constantes optiques à l'aide, par exemple, de  $R_{\parallel}$  (70°) et  $R_{\perp}$  (70°). Les courbes des figures 2d et 3d donnent les variations théoriques de ces deux fonctions :  $R_{\perp}$  (70°) tend vers une limite de  $\cdot 927$ , pratiquement atteinte dès que n = 2 ;  $R_{\parallel}$  (70°) varie de  $\cdot 530$  quand n vaut 7, à  $\cdot 52$  quand n vaut 15. Si l'on mesure  $R_{\parallel}$  avec une précision de 2%, les deux valeurs sont également probables, et il y a un domaine commun (de n = 7 jusqu'à n = 15) à l'intérieur duquel les deux facteurs de réflexion sont constants ( aux erreurs d'expérience près), l'un étant égal à  $\cdot 927$ , l'autre à  $\cdot 520$ . Tous les points de ce domaine peuvent convenir comme solution.

- 9 -

Ce raisonnement reste valable si l'on choisit comme données expérimentales deux facteurs de réflexion de même nature, mais à deux incidences différentes, ou bien deux facteurs de réflexion en lumière naturelle (méthode de SIMON [5]).

En résumé, lorsque le milieu possède une bande d'absorption intense, il est courant d'observer un facteur de réflexion normale de l'ordre de •8 : les méthodes de détermination des constantes optiques à l'aide de deux facteurs de réflexion, quels qu'ils soient, nous semblent dans ce cas, devoir être rejetées.

### 4 - MESURES POLARIMETRIQUES

# 4, 1 - Introduction

Les considérations précédentes ont montré que pour trouver les constantes optiques d'un milieu très absorbant, il est nécessaire d'exploiter une grandeur expérimentale autre que les facteurs de réflexion. Notre appareillage nous permettant également de mesurer le déphasage entre les deux composantes d'une vibration elliptique, c'est tout naturellement vers ce paramètre que nous nous sommes tournés.

# 4, 2 - Expression du déphasage en fonction des constantes optiques

Supposons la vibration incidente polarisée dans une direction qui n'est ni parallèle ni normale au plan d'incidence. Cette vibration est la somme géométrique de deux composantes, l'une d'amplitude a située dans le plan d'incidence, l'autre d'amplitude b portée par la normale à ce plan (figure 5a). Puisque l'onde incidente est rectiligne, les deux champs électriques d'amplitude a et b vibrent en phase.

Après réflexion sur une section plane d'un milieu absorbant, a devient a', b devient b' ; les composantes a' et b' conservent respectivement les directions de a et de b, mais elles sont déphasées d'un angle  $\Delta$  qui dépend de n, de k et de l'angle d'incidence i : la vibration réfléchie est elliptique (figure 5b).

- 11 -

Il est aisé de trouver l'expression de  $\Delta$  en fonction de i, n, k :  $\Delta$  est l'argument du nombre complexe a'/b'. Comme a et b sont en phase, le rapport b/a est un nombre réel, et  $\Delta$  est aussi l'argument du nombre complexe z, si :

(10) 
$$z = \frac{a'}{a} / \frac{b'}{b} = \frac{r_{\parallel}}{r_{\parallel}}$$

Nous connaissons (relations(1) et (4a)) les expressions des coefficients complexes  $r_{\parallel}$  et  $r_{\perp}$ . De celles-ci, on tire :

(11) 
$$z = \frac{\cos (i+r)}{\cos (i-r)}$$

Si nous posons :

$$(12a) z = o e^{-j\Delta}$$

nous avons alors :

(12b) tg 
$$\triangle$$
 =  $-\frac{\text{Im}(z)}{\text{Re}(z)}$ 

Utilisons alors les notations de HUMPHREYS [8] :

x = cos i , y = sin i ,  $\lambda$  = n^2 - k^2 - y^2 ,  $\mu^2$  =  $\lambda^2$  + 4 n^2 k^2 Un calcul sans difficulté donne :

(13) 
$$tg |\Delta| = \frac{x y^2 \sqrt{\mu - \lambda}}{\mu x^2 - y^{\mu}}$$

La valeur absolue vient de l'indétermination du signe du radical  $\sqrt{\mu-\lambda}$ . Nous n'en tiendrons pas compte dans la suite, car nous montrerons en 4-4-2, qu'avec la convention choisie dans la relation (12a),  $\Delta$  est toujours positif. D'autre part, nous verrons en 4-5 que nous ne pouvons de toute manière mesurer que  $|\Delta|$ .

### 4, 3 - Exposé d'une méthode graphique personnelle

<u>4,3,1</u> Précisons que notre appareillage ne permet de mesurer que des déphasages  $\Delta$  obtenus pour des incidences i $\leq$ 45°.

Une table de valeurs numériques de tg  $\Delta$  à différentes incidences, n et k variant dans un large domaine, a montré que, à constantes optiques données, tg  $\Delta$ , nul à l'incidence normale, croît régulièrement avec i (figure 6) ; cependant, cette croissance est d'autant plus lente que l'absorption est élevée. Il est donc nécessaire d'éviter de choisir comme paramètres expérimentaux, deux valeurs de  $\Delta$  pour deux incidences différentes, sous peine de retrouver les difficultés décrites en 3.

En définitive, le seul choix possible pour les paramètres expérimentaux est le suivant :

- un déphasage  $\Delta$  mesuré à une incidence quelconque ;
- un facteur de réflexion, quelle que soit sa nature, à une incidence quelconque elle aussi.

<u>4,3,2</u> L'angle d'incidence à laquelle on mesure  $\Delta$  ne doit pas être pris trop petit (puisque  $\Delta$  est nul si i = o, quels que soient n et k). Nous avons donc choisi i = 45°, angle pouvant être obtenu facilement et avec précision sur notre appareil.

Nous avons de même cherché à utiliser le facteur de réflexion le plus simple qui soit, tant par son expression que par sa mesure, donc le facteur de réflexion normale R.

Dans notre méthode, n et k sont donc solutions du système :

$$R_{o} = \frac{(n-1)^{2} + k^{2}}{(n+1)^{2} + k^{2}} , \quad tg \ \Delta \ (i=45^{\circ}) = \frac{\sqrt{(\mu-\lambda)}}{\mu - 1/2}$$

avec  $\lambda = n^2 - k^2 - 1/2$ ,  $\mu^2 = \lambda^2 + 4 n^2 k^2$ 

- 12 -

<u>4,3,3</u> Nous ne sommes pas parvenu à inverser ces équations, aussi présentons-nous une méthode graphique, à l'aide d'abaques (figures 7a,7b,7c). Ceux-ci possèdent un "carrelage" bien rectangulaire sur un très large domaine, et montrent que même en cas d'absorption forte, tg  $\Delta$  varie encore notablement avec n. Ce point se vérifie sur la figure 8, qui représente, comme nous l'avons fait pour les facteurs de réflexion (figures 3 et 4), tg  $\Delta$  en fonction de n à R<sub>o</sub> constant, n variant de n<sub>l</sub> à n<sub>L</sub> : il est clair que même si R<sub>o</sub> vaut •8, on obtient une pente encore appréciable, et si l'on sait mesurer  $\Delta$  avec précision, l'intersection de cette courbe avec l'horizontale d'ordonné tg  $\Delta$  (45°) mesuré fournira des valeurs correctes de n et k. Il n'en était pas de même avec les facteurs de réflexion, pour lesquels la précision des résultats ne pouvait être obtenue qu'en augmentant exagérément l'angle d'incidence, bien au-delà des possibilités expérimentales.

# 4, 4 - Autre méthode utilisant le déphasage

Le procédé décrit ci-dessus présente l'inconvénient de nécessiter une résolution graphique, ce qui peut être fastidieux. Nous allons montrer ici que les constantes optiques peuvent s'obtenir d'une autre manière, utilisant elle-aussi tg & mais permettant une résolution numérique du problème.

4,4,1 Reprenons la relation (12a), et posons  $\rho = tg \psi$ . Il en résulte :

(14) 
$$\rho^2 = tg^2 \psi = z \quad z^{\star} = \frac{r_{||} r_{||}^{\star}}{r_{|} r_{|}^{\star}} = \frac{R_{||}}{R_{1}}$$

Notons bien que  $R_{\parallel}$  et  $R_{\perp}$  sont ici les facteurs de réflexion à la même incidence i, qui est celle où l'on a mesuré  $\triangle$ .

Il est alors possible d'exprimer n et k à l'aide de  $\psi$  et  $\Delta$ ; nous ne rappellerons ici que les grandes lignes de ce calcul, dont la démonstration complète se trouve dans le livre de BORN et WOLF [25] :

Nous savons que :

$$\frac{\cos (i+r)}{\cos (i-r)} = -\frac{1 - \cot g \ i \cdot \cot g \ r}{1 + \cot g \ i \cdot \cot g \ r} \pm tg \ \psi \ e^{-j2}$$

donc :

$$\cot g i. \cot g r = \frac{1 + tg \psi.e}{1 - tg \psi.e^{-j\Delta}} = \frac{\cos 2\psi + j \sin 2\psi \sin \Delta}{1 - \sin 2\psi \cos \Delta}$$

Or, nous pouvons également écrire :

$$\cot g \ i. \ \cot g \ r \ = \ \frac{\cos i \sqrt{1 - \sin^2 r}}{\sin i \ . \ \sin r} \ = \ \frac{\cos i \sqrt{N^2 - \sin^2 i}}{\sin i}$$

On isole alors le radical  $\sqrt{N^2 - \sin^2 i}$ , ainsi exprimé en fonction des trois angles i,  $\psi$ ,  $\Delta$ ; en élevant cette expression au carré et en séparant partie réelle et partie imaginaire, il vient :

(15a) 
$$n^2 - k^2 = \sin^2 i \cdot \left[ 1 + tg^2 i \frac{\cos^2 2 \psi - \sin^2 2 \psi - \sin^2 \Delta}{(1 - \sin 2 \psi \cdot \cos \Delta)^2} \right]$$

(15b) 
$$2nk = \frac{\sin^2 i \cdot tg^2 i \cdot \sin 4\psi \cdot \sin \Delta}{(1 - \sin 2\psi \cdot \cos \Delta)^2}$$

<u>4,4,2</u> De la relation (14), nous déduisons que tg  $\psi$  est toujours inférieur à l'unité, puisque R<sub>||</sub> est plus petit que R<sub>1</sub> (l'égalité ne se produisant que pour i = 0 et i = 90°). Ainsi, l'angle  $\psi$  est compris entre 0 et 45°, donc sin 4 $\psi$  est toujours positif. Le produit n·k devant être positif, nous concluons que l'angle  $\Delta$ , tel que nous l'avons défini dans la relation (12a), est toujours compris entre 0 et  $\pi$ . Les corps transparents ( n>1, k=0) donnent des angles  $\Delta$  tels que sin  $\Delta$  = 0, cos  $\Delta$  = +1, donc  $\Delta$  = 0.

<u>4,4,3</u> Les relations (15a et b) ont été largement utilisées [26 à 31] pour déterminer les constantes optiques et l'épaisseur de couches minces. Nous proposons ici une variante simple, qui semble n'avoir jamais été exploitée, et qui résulte d'un choix particulier de l'angle d'incidence i.

- 14 -

Nous avons dit que la mesure du déphasage la plus commode pour nous était faite à l'incidence i = 45°. Or, il en est de même pour la mesure de tg  $\psi$ ; en effet, à cette incidence, les deux facteurs de réflexion définis en 1-1 et 1-2 sont liés par une loi simple et que l'on retrouve facilement : prenons les expressions de r<sub>||</sub> et r<sub>1</sub> données par les relations (1) et (4a), et formons le produit  $(r_1)^2/r_{||}$ . Nous obtenons :

$$\frac{r_{\perp}^2}{r_{\parallel}} = - \frac{\sin (i-r) \cdot \cos (i-r)}{\sin (i+r) \cdot \cos (i+r)} = - \frac{\sin [2(i-r)]}{\sin [2(i+r)]}$$

En faisant  $i = 45^{\circ}$  dans cette expression, le rapport ci-dessous vaut -1, et nous en tirons :

(16a) 
$$r_{\perp}^{2} = -r_{\parallel}$$

Cette relation vraie pour les coefficients complexes de réflexion prend de l'intérêt si on l'applique aux facteurs de réflexion, car elle impose pour les modules :

(16b) 
$$R_1^2 = R_1$$
 pour i = 45°

Si l'on se reporte à la définition de  $\psi$  (relation 14), nous voyons immédiatement que :

(16c) 
$$tg^2 \psi (i=45^\circ) = R_1$$

Ainsi, dans cette variante les grandeurs à mesurer sont  $R_1$  et tg  $\Delta$ à la même incidence i = 45°. De la relation (16c) on tire la valeur de l'angle  $\psi$ , puis on calcule numériquement les constantes optiques du corps étudié, à l'aide des relations (15) qui s'écrivent maintenant :

(17a) 
$$n^2 - k^2 = \frac{1}{2} \cdot \left[ 1 + \frac{\cos^2 2 \psi - \sin^2 2\psi \cdot \sin^2 \Delta}{(1 - \sin 2\psi \cdot \cos \Delta)^2} \right]$$

(17b) nk = 
$$\frac{1}{4}$$
  $\frac{\sin 4\psi \cdot \sin \Delta}{(1 - \sin 2\psi \cdot \cos \Delta)^2}$ 

# 4, 5 - Mesure d'un déphasage ∆

<u>4,5,1</u> L'appareil qui permet de mesurer  $\Delta$  a déjà été décrit [32]. Rappelons ici qu'il se compose essentiellement de deux parties mobiles (figures 9a et 9b) :

- La première, qui comporte la source globar G, les miroirs M et M, et le polariseur P, peut pivoter autour d'un axe horizontal (axe n°1), ce qui permet-de choisir l'incidence i. L'échantillon étudié est fixé sur un support à la Cardan, réglé de façon que le rayon réfléchi soit toujours vertical : ainsi, lorsque l'ensemble M, M, P est vertical (figure 9a), l'angle d'incidence est minimum et vaut 12<sup>°</sup> environ ; si cet ensemble est horizontal (figure 9b), l'angle d'incidence vaut 45°. Une courbe d'étalonnage permet d'obtenir des positions intermédiaires, mais nous n'en aurons jamais besoin dans ce travail.

- D'autre part, l'ensemble G,  $M_1, M_2$ , plus l'échantillon, peut tourner autour de l'axe vertical noté axe n°2, confondu avec le rayon réfléchi. Cette particularité permet, lorsque l'incidence et la longueur d'onde sont choisis, de faire tourner la vibration réfléchie autour de cet axe. Au cours de cette rotation, la vibration est analysée.

L'analyseur A, les miroirs  $M_3$ ,  $M_4$ , le monochromateur restent toujours fixes : ainsi, la vibration rectiligne qui sort de l'analyseur garde une direction constante au cours de la mesure, et tombe sur le détecteur toujours de la même manière ; seule son amplitude change. L'avantage du procédé est que l'on s'affranchit ainsi des polarisations parasites introduites par  $M_3$ ,  $M_4$  et toute l'optique du monochromateur. Ces défauts existent, mais ils interviennent toujours de la même façon ; la variation de la réponse observée sur le détecteur est due uniquement à la rotation de la vibration.

4,5,2 Les figure 10a et 10b montrent les conventions adoptées pour mesurer  $\Delta$ . La direction de polarisation du faisceau incident est 45°, donc a = b. Si nous appelons A' et B' les carrés des modules des vibrations complexes a' et b' définies en 4-2, A' et B' sont les intensités lumineuses réfléchies pour des directions d'analyse (nous appelons "direction d'analyse" la direction du champ électrique qui sort de l'analyseur) respectivement parallèles et normale au plan d'incidence. A' et B' sont aussi les réponses lues sur l'enregistreur, à un facteur de proportionnalité près qui dépend de l'ouverture de la fente d'entrée, du gain de la chaîne d'amplification, etc ...). L'ellipse réfléchie par l'échantillon absorbant peut donc être considérée comme inscrite dans un rectangle de côtés  $2\sqrt{A'}$  et  $2\sqrt{B'}$ (figure 10b).

Appelons  $\omega$  l'angle que fait le plan d'incidence (ou plus exactement, la droite du plan d'incidence qui est normale au rayon réfléchi) avec la direction d'analyse. Si  $\omega$  n'est pas nul, la vibration qui sort de l'analyseur a une amplitude notée  $\sqrt{X}$ , obtenue en abaissant sur la direction d'analyse la tangente verticale à l'ellipse (figure 10b).

La réponse lue sur l'enregistreur est X. Toutes choses égales par ailleurs (c'est-à-dire longueur d'onde et incidence i bien sûr, mais aussi : gain, fente d'entrée, positions des miroirs, etc ... non modifiés), X ne dépend que de  $\omega$ , et de la forme de l'ellipse, donc de A', B' et  $\Delta$ . Il est facile d'établir la relation suivante :

(18) X (
$$\omega$$
) = A' cos<sup>2</sup> $\omega$  +B' sin<sup>2</sup> $\omega$  -  $\sqrt{A'B'}$ .cos  $\Delta$ .sin 2 $\omega$ 

Pour mesurer  $\Delta$ , il faut d'abord trouver A' et B' (respectivement  $\omega=0$  et  $\omega=\pm90^{\circ}$ ), puis mesurer X pour une valeur quelconque de  $\omega$ . On obtient alors :

(19) 
$$\cos \Delta = \frac{A' \cdot \cos^2 \omega + B' \sin^2 \omega - X(\omega)}{\sin 2\omega \sqrt{A' \cdot B'}}$$

Bien entendu, on améliorera la précision en calculant cos  $\Delta$  pour plusieurs valeurs de  $\omega$ , et en prenant la moyenne des résultats obtenus. De plus, il y a un test simple qui permet de s'assurer de la qualité de l'ellipse : on doit nécessairement avoir :

$$X(\omega) + X(\omega \pm 90^\circ) = A' + B' = constante$$

- 17 -

Ce test permet de contrôler le réglage de l'appareil, en particulier la verticalité du rayon réfléchi par l'échantillon (l'impact du faisceau réfléchi sur le miroir  $M_3$  doit rester immobile au cours de la rotation autour de l'axe n° 2).

La mesure de cos  $\Delta$  est alors faite avec une précision que nous estimons être de l'ordre de 1%. La figure 11 montre la variation de X, puis de  $\sqrt{X}$ , avec  $\omega$ , observée sur l'enregistreur pour une vibration elliptique réfléchie à 1136 cm<sup>-1</sup> (8,80  $\mu$ ) par l'échantillon de silice vitreuse déjà étudié en 3-1.

<u>4,5,3</u> La courbe telle que celle de la figure 11 possède une propriété intéressante résultant du choix de la direction de polarisation (45°) du rayonnement rectiligne incident. Nous avons vu en 4-2 que celui-ci peut se décomposer en deux vibrations d'amplitude a et b, avec ici a = b, et la relation (10) qui donne z devient :

$$z = \frac{a'}{b'} = tg \psi e$$

Soit :

$$tg^2\psi = z.z^* = \frac{a'.a'^*}{b'.b'^*} = \frac{A'}{B'}$$

Ceci est toujours vrai quel que soit l'angle d'incidence. Si de plus celui-ci vaut 45°, la relation (16b) est également vérifiée, et nous obtenons finalement :

$$R_{1}$$
 (i = 45°) =  $\frac{A'}{B'}$ 

Ceci montre qu'il n'est même pas indispensable de mesurer  $R_1$  (45°) : la connaissance de A', B' et  $\Delta$  suffit pour appliquer les relations (17). Ainsi une courbe comme celle de la figure 11 contient-elle en elle-même toutes les informations nécessaires pour trouver les constantes optiques du milieu absorbant.

# 4, 6 - Application expérimentale

Nous avons appliqué notre méthode à la mesure des constantes optiques de notre échantillon de silice vitreuse, dans la région de  $9\mu$ (1100 cm<sup>-1</sup>). Plutôt que de faire tourner le cristal à longueur d'onde fixée, et obtenir ainsi une succession de courbes analogues à celles de la figure 11, nous avons préféré faire un "balayage spectral" de la bande d'absorption, entre 900 cm<sup>-1</sup> et 1100 cm<sup>-1</sup>, pour plusieurs valeurs de  $\omega$  : 0,90°, -45°, -30°, 45°, 60°. Ces enregistrements ont permis de déterminer, à chaque nombre d'onde, A', B', et quatre valeurs de cos  $\Delta$ dont nous avons pris la moyenne. La figure 12 montre les positions de neuf ellipses réfléchies analysées de cette manière (l'une d'elles, la n°6, a déjà été présentée sur la figure 11 sous sa forme "développée", telle qu'elle apparaît sur l'enregistreur ; les autres ont été reconstituées).

Nous avons ensuite mesuré le facteur de réflexion normale  $R_0$  (voir figure 13, qui montre aussi les nombres d'onde correspondant aux neuf ellipses précédentes). Enfin, la figure 14 donne les variations de n et de k déterminés grâce aux abaques (cf. figures 7a, 7b, 7c). Ces résultats sont quelque peu différents de ceux donnés par SIMON [6], surtout pour les valeurs maximum de n et de k (30 % d'écart environ). Pour quelques fréquences, notamment celles des neufs ellipses de la figure 12, nous avons calculé n et k grâce aux relations (17), en prenant  $tg^2 \psi = A'/B'$ : les résultats donnés par ce procédé sont en bon accord avec ceux fournis par la méthode graphique.

### 5 - METHODE DE KRAMERS ET KRONING

Nous allons terminer ce premier chapitre en parlant brièvement d'une méthode qui ne nécessite que la connaissance d'un seul spectre de réflexion, donc qui échappe aux critiques faites plus haut. Les considérations que nous exposons ici sont tirées en grande partie de la thèse de PIRIOU [33].

5,1 Les parties réelle et imaginaire d'une fonction complexe  $\widehat{A}(\sigma)$  = A'( $\sigma$ ) - jA''( $\sigma$ ) peuvent être reliées par des relations obtenues pour la première fois par Kramers et Kroning :

- 19 -

(20a) 
$$A'(\sigma_c) - A'(\infty) = \frac{2}{\pi} P.P. \int_{\sigma}^{+\infty} \frac{\sigma A''(\sigma)}{\sigma^2 - \sigma^2_c} d\sigma$$

(20b) 
$$A''(\sigma_c) = -\frac{2\sigma_c}{\pi} P.P. \int_0^{+\infty} \frac{A'(\sigma) - A'(\sigma)}{\sigma^2 - \sigma_c^2} d\sigma$$

dans lesquelles  $\sigma_c$  est une valeur particulière de la variable  $\sigma_a A'(\infty)$ , la valeur de A' si  $\sigma$  tend vers l'infini, et où P.P. désigne la partie principale de l'intégrale ([33, 34]).

Si À est une fonction traduisant la réaction d'un système phýsique à une perturbation donnée, ces relations très générales sont applicables sous réserve des conditions suivantes [34 à 38] :

- $\hat{A}$  doit être holomorphe ;
- Il doit y avoir une relation de cause à effet entre l'excitation et la réponse du système ;
- La correspondance entre excitation et réponse doit être linéaire.

5,2 La validité de ces hypothèses appliquées à diverses grandeurs physiques (moment magnétique, élasticité, impédance complexe, constantes optiques, etc ....) a été étudiée [39,40,41]. Notamment, les relations (20) ont été intensivement appliquées à l'étude des phénomènes de dispersion, et permettent de trouver les constantes optiques d'un corps absorbant, de la manière suivante :

A l'incidence normale, le rapport des amplitudes des vibrations incidente et réfléchie est (voir relation (5) ) :

(21) 
$$\frac{a'}{a} = \frac{b'}{b} = \frac{1-N}{1+N} = -\sqrt{R_o} e^{-j\varphi} = r_o$$

Nous notons  $\hat{r}_{0} = -\sqrt{R_{0}} \exp(-j\varphi)$  pour avoir une détermination de  $\varphi$  comprise entre 0 et  $\pi$ , ainsi que nous le verrons en 5,3 (relations (26)). Nous pouvons ainsi écrire [42] :

(22) 
$$\log(-r_0) = \log\sqrt{R_0} - j\varphi = A' - jA''$$

R<sub>o</sub> et  $\varphi$  étant des fonctions du nombre d'onde  $\sigma$ , il est possible d'appliquer à la fonction complexe Â=Log (- $\hat{r}_{o}$ ) les formules de Kramers-Kroning.

Remarquons que la relation (20b) peut se simplifier [34]:

$$A''(\sigma_{c}) = -\frac{2\sigma_{c}}{\pi} \left[ P.P. \int_{0}^{+\infty} \frac{A'(\sigma)d\sigma}{\sigma^{2} - \sigma_{c}^{2}} - A'(\infty) \cdot P.P. \int_{0}^{+\infty} \frac{d\sigma}{\sigma^{2} - \sigma_{c}^{2}} \right]$$

Le second terme de ce crochet vaut :

$$A'(\infty) \left[ Log \mid \frac{\sigma + \sigma_{c}}{\sigma - \sigma_{c}} \mid \right]^{+\infty} = 0$$

donc :

(23) 
$$A''(\sigma_c) = -\frac{2\sigma_c}{\pi} P.P. \int_{\sigma}^{+\infty} \frac{A'(\sigma) d\sigma}{\sigma^2 - \sigma_c^2}$$

Soit, dans le cas de la dispersion :

(24) 
$$\varphi(\sigma_c) = -\frac{\sigma_c}{\pi} P.P. \int_{0}^{+\infty} \frac{\log R_o(\sigma)}{\sigma^2 - \sigma_c^2} d\sigma$$

Après intégration par parties, cette relation prend la forme suivante :

(25) 
$$\varphi(\sigma_c) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{+\infty} \log\left(\frac{|\sigma - \sigma_c|}{\sigma + \sigma_c}\right) \cdot \frac{d\left[\log R_0(\sigma)\right]}{d\sigma} d\sigma$$

Ainsi, si on connaît la fonction  $R_o(\sigma)$  pour toutes les fréquences  $\sigma$ , on en déduit  $\varphi$  à une fréquence  $\sigma_c$  en calculant numériquement cette intégrale.

5,3 Lorsque  $\varphi(\sigma_c)$  est connu, les constantes optiques à cette fréquence s'obtiennent facilement à partir de la relation (21). Un calcul simple donne :

- 21 -

(26a) 
$$n = \frac{1 - R_0}{1 + R_0 - 2\sqrt{R_0} \cdot \cos \varphi}$$

(26b) 
$$k = \frac{2\sqrt{R_o} \sin \varphi}{1 + R_o - 2\sqrt{R_o} \cdot \cos \varphi}$$

Le dénominateur étant toujours positif, sin  $\varphi$  doit nécessairement être positif ; avec la convention de signe que nous avons adoptée dans la relation (21), nous avons donc :  $0 \le \varphi \le \pi$ . Un milieu non absorbant ( n > 1, k = 0 ) donnera le déphasage  $\varphi = 0$ .

<u>5,4</u> Cette méthode, intéressante puisque n'exigeant qu'une seule mesure expérimentale, paraît donc rigoureuse, et devrait donner les constantes optiques avec précision. En fait, les résultats sont loin d'être aussi exacts que la théorie semble le promettre, en raison de restrictions pratiques de deux ordres :

- l'incertitude sur la mesure de R<sub>o</sub>, qui intervient avec plus ou moins d'importance en certains points du domaine d'intégration ;
- le domaine d'intégration lui-même, nécessairement limité.

En effet, la mesure de  $R_0$  se fait sur un intervalle limité par deux fréquences encadrant la région d'absorption étudiée. Si l'on partage ce domaine en p intervalles élémentaires non nécessairement égaux, mais tels que dans chacun d'eux  $Log(R_0)$  varie linéairement, la relation (25) s'écrit :

$$(27) \quad \varphi \quad (\sigma_{c}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{p} \left\{ \frac{\log \left[ R_{o}(\sigma_{j+1}) \right] - \log \left[ R_{o}(\sigma_{j}) \right]}{\sigma_{j+1} - \sigma_{j}} \int_{\sigma_{j}}^{\sigma_{j+1}} \log \left[ \frac{|\sigma - \sigma_{c}|}{\sigma_{j} - \sigma_{c}} \right] d\sigma \right\}$$

- 22 -

L'intégration sur l'intervalle  $[\sigma_j, \sigma_j]$  se calcule facilement ; il est d'ailleurs préférable (cf.[33]) d'employer la variable réduite  $x = \sigma/\sigma_c$ , et, si l'on note P(j) la pente de la fonction Log  $[R_o(\sigma)]$  sur cet intervalle, la relation (27) prend la forme finale [33,43] :

(28a) 
$$\varphi(\sigma_{c}) = \frac{\sigma_{c}}{2\pi} \sum_{j=1}^{p} P(j) [F(x_{j+1}) - F(x_{j})]$$

avec :

(28b) F (x) = (x-1) Log |x-1| - (x+1) Log (x+1)

Les relations (28) permettent une résolution numérique du probleme. Notons cependant qu'une publication assez récente [44] présente une méthode semi-graphique pour obtenir  $\varphi$  sans ordinateur.

5,5 Outre la question (que nous n'abordons pas ici) de savoir si  $\hat{r}_{o}$  satisfait aux hypothèses de la fonction théorique  $\hat{A}$ , nous commettons en employant cette méthode deux erreurs systématiques :

- L'approximation Log(R) linéaire sur un court segment, ce qui contraint à prendre un pas d'intégration de plus en plus bref au fur et à mesure que l'on s'approche du maximum d'absorption ;
- La restriction du domaine d'intégration à un intervalle fini, ce qui revient à négliger les bandes d'absorption qui peuvent exister en-deçà et au-delà de ce domaine, et qui en toute rigueur participent à la valeur numérique de φ dans l'intervalle étudié.

Il y a de plus une troisième cause d'erreur non négligeable due à l'incertitude sur la mesure des faibles valeurs de  $R_0$ : au minimum de réflexion, Log  $R_0$  prend des valeurs négatives mais de valeurs absolues élevées, et une petite variation de  $R_0$  suffit à donner une pente P(j) relativement grande ; ces termes ont donc une contribution importante dans le

- 23 -

calcul de  $\varphi$ , et ce d'autant plus que la variable réduite x est proche de l'unité, donc au voisinage de ce minimum lui-même. Or, les régions où R<sub>o</sub> est minimum sont aussi celles où on le mesure le moins bien (précision au moins 5 % si R<sub>o</sub> est inférieur à •01). Il en résulte une erreur dans le calcul de  $\varphi$ , que l'on peut tenter d'éliminer en utilisant d'autres mesures expérimentales (par exemple, mesure directe de k par transmission, puis calcul de R<sub>o</sub>). Cette cause d'erreur a été étudiée en détail par PIRIOU [ 30], qui après avoir intensivement utilisé la méthode de Kramers-Kroning, nous a avoué dans une communication personnelle qu'il s'en détachait de plus en plus.

De même, certains auteurs [ 33,36,37,45 à 49] ont étudié la contribution des basses et hautes fréquences au calcul du déphasage, et ont proposé de pallier le manque de connaissances aux deux extrémités du spectre, soit en extrapolant (judicieusement) le domaine spectral connu, soit en ajoutant à  $\varphi$  des termes correctifs variés. Le nombre et la diversité des solutions proposées montre qu'aucune n'est vraiment meilleure que l'autre. C'est pourquoi nous n'avons pas testé la "méthode K.K" sur un échantillon de matière isotrope. Cependant, nous donnons (voir annexe l2) le programme Fortran qui calcule n et k par application des relations (26) et (28), et qui donne un résultat "brut", c'est-à-dire non retouché par des corrections empiriques. Nous verrons au chapitre 5, en effet, que pour trouver l'ellipsoïde des indices d'un cristal anisotrope, nous avons été contraint d'employer cette méthode ; nous verrons également le désagrément qui en est résulté.

# CHAPITRE - II -

FACTEURS DE REFLEXION NORMALE D'UN CRISTAL ANISOTROPE TRANSPARENT

# INTRODUCTION GENERALE A L'ETUDE DES MILIEUX ANISOTROPES : POSITION DU PROBLEME

<u>1</u> Nous nous proposons maintenant d'utiliser les mesures des facteurs de réflexion pour étudier les propriétés d'un milieu anisotrope, inactif et transparent, et notamment pour déterminer ses constantes diélectriques principales. La suite de cette étude montrera d'ailleurs que les mesures en réflexion normale suffisent pour cette détermination.

On sait que dans un milieu anisotrope le champ électrique  $\vec{E}$  et l'induction électrique  $\vec{D}$  ne sont colinéaires que dans certains cas particuliers. D'une façon générale, il faut écrire  $D = \vec{\epsilon} \cdot \vec{E}$ , où  $\vec{\epsilon}$  est un tenseur de rang 2. On peut montrer que ce tenseur est symétrique ([50],[51] page 663, [52] page 392), donc qu'il existe une base orthonormée dans laquelle sa représentation est diagonale. Si nous notons  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ,  $\epsilon_3$  les éléments diagonaux de  $\vec{\epsilon}$  écrit dans cette base, le milieu anisotrope est entièrement défini par la connaissance de ces trois éléments et par celle des directions des trois axes correspondants (axes principaux). C'est à la détermination de ces six paramètres, en fonction de la longueur d'onde du ravonnement incident, que nous nous attachons ici.

2 - Une étude bibliographique préliminaire nous a montré que les travaux traitant de ce problème ne sont pas très nombreux. On peut citer un article de DRUDE [53] où sont données les expressions des pouvoirs réflecteurs d'un cristal uniaxe, pour trois positions particulières de l'axe optique ; les publications les plus substantielles à notre avis sont celles de MOSTELLER - WOOTEN [54], qui donne le pouvoir réflecteur sous incidence quelconque d'un uniaxe, sur un plan réflecteur normal à l'axe optique, et celle de DAMANY - UZAN [55], qui en fait autant en prenant un plan réflecteur incliné par rapport à cet axe. Plusieurs auteurs, partant des relations générales établies dans les trois articles cités ci-dessus, arrivent par différentes méthodes à déterminer les indices complexes ordinaire et extraordinaire d'un uniaxe absorbant :citons YAMASHUTA [56] pour le nitrate de sodium par les relations de Damany ; ABELES et al. [57] pour un échaptillon de Bi<sub>2</sub> Te<sub>7</sub> S<sub>5</sub>, GREENAWAY et al [58] pour le graphite, tous deux par les relations de Drude ; BERMAN et al. [59] pour le graphite pyrolitique dans le domaine visible, par les relations de Mosteller.

N'ayant trouvé qu'un seul travail (CERVELLE, [60] et [61]) concernant les cristaux biaxes, c'est plus particulièrement à ceux-ci que nous nous sommes intéressés. Pour cela, il nous faut tout d'abord connaître les expressions des facteurs de réflexion en fonction des éléments diagonaux de  $\dot{\epsilon}$ . Or, à cause de la forme diagonale de  $\dot{\epsilon}$ , les propriétés du milieu anisotrope s'écrivent d'une façon simple lorsque toutes les grandeurs vectorielles sont rapportées au repère formé par les axes principaux, que nous notons (R\_). Il en sera de même des facteurs de réflexion normale si le plan réflecteur choisi a une orientation particulière simple par rapport à (R<sub>o</sub>), en particulier s'il est confondu avec l'une des faces de (R<sub>o</sub>). C'est ce qu'ont fait Damany et Uzan pour des cristaux uniaxes. Cette façon de procéder ne peut être retenue si l'on envisage le cas plus général des cristaux biaxes, en raison de phénomène de dispersion des axes : pour des cristaux monocliniques et tricliniques, les axes principaux ont des directions qui dépendent de la longueur d'onde du rayonnement considéré. La dispersion des axes est, d'après BORN et WOLF ([51], p.664, appendice) particulièrement importante en infra-rouge ; c'est pourquoi dans ce domaine, les expressions des facteurs de réflexion sur un plan réflecteur orienté particulièrement par rapport à (R\_), ne sont valables que pour une seule longueur d'onde (ou sur un petit domaine restreint, comme l'a supposé CERVELLE [61]).

<u>3</u> - Ceci nous a amené à introduire un second repère orthonormé, (R), fixe par rapport au cristal, donc indépendant de la longueur d'onde. Les plans réflecteurs utilisés sont les faces de (R). Les propriétés du cristal sont alors connues si l'on détermine :

- les constantes diélectriques principales  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ ;
- la matrice A qui fait passer de (R<sub>0</sub>) à (R), donc qui permet de trouver l'orientation des axes principaux du tenseur diélectrique à partir des axes de (R), que nous appelons "repère expérimental".

- 26 -

Si l'on note 0x, 0y, 0z les axes de (R), et 0X, 0Y, 0Z ceux de  $(R_0)$ , A est une matrice orthogonale que l'on obtient en formant le tableau des neuf cosinus directeurs (voir figure 15, et NYE [62].9) :

	(R <sub>0</sub> )	ÌÌ	Ĵ	Ř	ŗ			
(R)	-	х	Y	Z		1		`
↓	x	Cos $\alpha_1$	$\cos \beta_1$	Cos $\gamma_1$		a <sub>11</sub>	a <sub>12</sub>	a <sub>13</sub>
j	у	Cos a <sub>2</sub>	Cos B <sub>2</sub>	$\cos \gamma_2$	, soit A =	= a <sub>21</sub>	<b>a</b> <sub>22</sub>	<b>a</b> <sub>23</sub>
k	z	Cos a <sub>3</sub>	Cos B <sub>3</sub>	$\text{Cos } \gamma_3$		( a <sub>31</sub>	a <sub>32</sub>	<b>a</b> 33

 $\alpha_1$ ,  $\beta_1$ ,  $\gamma_1$ , par exemple, sont les angles faits par l'axe 0x respectivement avec 0X, 0Y, 0Z.

Nous tirons de ce tableau les formules de changement de coordonnées :

(1a) 
$$x_i = \sum_{j=1}^{3} a_{ij} X_j$$
  
avec  $i = 1$  pour x ou X  
(1b)  $X_i = \sum_{j=1}^{3} a_{ji} x_i$   
 $i = 3$  pour z ou Z

Les coefficients a. sont évidemment liés par les relations suivantes :

(2a) 
$$\sum_{j=1}^{3} a_{ij}^2 = \sum_{j=1}^{3} a_{ji}^2 = 1$$
 pour i = 1, 2, 3

(2b)  $\sum_{\substack{\ell=1\\ k=1}}^{3} a_{i\ell} a_{j\ell} = \sum_{\substack{\ell=1\\ k=1}}^{3} a_{\ell i} a_{\ell j} = 0$  pour  $i \neq j$ 

Ces relations font que A ne possède que trois éléments indépendants ; pour les systèmes cristallins monoclinique et triclinique, ces trois éléments dépendent de la longueur d'onde. Si les positions relatives de (R) et de (R<sub>o</sub>) sont quelconques, aucun des neuf éléments de A n'est nul.

- 27 -

<u>4</u> — A partir des mesures en réflexion faites sur les faces de (R), il y a en définitive six grandeurs à trouver, pour chaque longueur d'onde :  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  et trois coefficients indépendants de A. Pour ce travail, nous nous limitons à des mesures en réflexion normale, et cette restriction sera justifiée au chapitre II, § 3-2.

Dans le chapitre II, nous supposons connus  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  et A, et nous établissons les expressions des facteurs de réflexion normale sur les faces de (R). Les relations trouvées serviront ensuite à établir un processus permettant de remonter à ces paramètres lorsque les facteurs de réflexion sont mesurés ; les étapes de ce processus seront exposées au chapitre III.

Précisons que nous ne considérons que des cristaux magnétiquement isotropes, et dont la perméabilité magnétique relative  $\mu_r$  est voisine de l'unité, donc pour lesquels on peut écrire  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ . D'autre part, dans les chapitres II et III le milieu anisotrope est supposé transparent donc'les éléments du tenseur  $\vec{e}$  sont réels. Les problèmes liés au phénomène d'absorption feront l'objet d'une étude spéciale au chapitre IV.

Enfin, quelques vérifications expérimentales effectuées sur un échantillon monoclinique absorbant seront proposées au chapitre V.

# COEFFICIENTS DE REFLEXION NORMALE D'UN CRISTAL ANISOTROPE TRANSPARENT

### 1 - INTRODUCTION

La démarche suivie pour arriver aux facteurs de réflexion est classique : choix d'une onde plane incidente, équation des ondes réfléchies et transmises, application des conditions aux limites sur la surface de séparation et déduction du rapport des amplitudes de la vibration réfléchie à la vibration incidente.

D'aprèes l'introduction précédente, si nous voulons obtenir des résultats conservant un sens quelle que soit la longueur d'onde envisagée, nous devons systématiquement projeter toutes les grandeurs vectorielles qui vont intervenir dans le repère expérimental (R), qui seul reste fixe si l'on fait varier la fréquence de la vibration incidente.

Nous nous plaçons d'abord dans le cas général d'un repère (R) occupant une position quelconque par rapport à  $(R_0)$ ; les conséquences résultant d'une disposition particulière seront étudiées en 14. D'autre part, nous choisissons comme plan réflecteur le plan xoy : jusqu'en 11 inclus, il ne sera question que de ce plan ; les autres faces yoz et zox seront utilisées en 12, nous serons amenés alors à définir une notation permettant de classer aisément tous les coefficients de réflexion obtenus.

### 2 - DIRECTIONS DE PROPAGATION NORMALE

Pour pouvoir appliquer les conditions de passage, il nous faut tenir compte des structures imposées aux ondes transmises par le milieu anisotrope. Nous pouvons les définir en étudiant préalablement leur propagation normale (la direction de propagation normale est perpendiculaire au plan d'onde), car celle-ci découle de la construction classique d'HUYGENS [63] effectuée à l'aide de la surface des indices (figure 16).
Considérons un rayon incident SO qui (pour l'instant) fait avec la normale Oz au plan réflecteur un angle i quelconque. On prolonge SO de la longueur unité OI, on abaisse la normale IH au plan xoy ; cette normale traverse la surface des indices en deux points A et B ; OA et OB sont les directions de propagation normale des deux ondes transmises. Si l'on appelle N' et N" les indices correspondant à ces deux ondes, les angles r' et r" sont donnés par les relations :

(3)  $\sin i = N' \sin r' = N'' \sin r''$ 

3 - DETERMINATION DES INDICES N' ET N"

3,1 Dans le repère  $(R_0)$ , la surface des indices a pour équation (cf. [52] p. 403, [64] p. 412) :

(4) 
$$(\varepsilon_1 \ X^2 + \varepsilon_2 \ Y^2 + \varepsilon_3 \ Z^2) \ (X^2 + \ Y^2 + \ Z^2) - \varepsilon_1 \ (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) \ X^2$$
  
 $- \varepsilon_2 \ (\varepsilon_3 + \varepsilon_1) \ Y^2 \ - \varepsilon_3 \ (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \ Z^2 \ + \varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3 = 0$ 

Considérons un rayon incident contenu par exemple dans le plan yoz. Les points A et B sont aussi dans ce plan, ils ont pour coordonnées dans (R) (cf. figure 16) :

x = 0, y = 0H = sin i, z = z' pour A et z = z'' pour B.

Nous avons placé le cristal dans le demi-espace z positif, donc z' et z" sont positifs.

Les coordonnées de A et B dans  $(R_0)$  sont obtenues en utilisant la transformation inverse (relation (1b) ), soit :

 $X = a_{21} \sin i + a_{31} z$   $Y = a_{22} \sin i + a_{32} z$   $Z = a_{23} \sin i + a_{33} z$ 

En reportant ces expressions dans (4), on trouve une équation du quatrième degré (nous ne l'écrirons pas), dont les solutions sont z' et z", ce qui détermine complètement la position de A et B dans (R).

<u>3,2</u> Cette équation est difficilement soluble, sauf si l'on se place dans le cas particulier de l'incidence normale. Géométriquement, d'après la construction d'Huygens, la simplification vient du fait que les deux directions de propagation normales sont alors confondues avec Oz. L'équation précédente devient bicarrée :

(5) 
$$z^4 (\epsilon_1 a_{31}^2 + \epsilon_2 a_{32}^2 + \epsilon_3 a_{33}^2) + \epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3$$
  
-  $z^2 [\epsilon_1 (\epsilon_2 + \epsilon_3) a_{31}^2 + \epsilon_2 (\epsilon_3 + \epsilon_1) a_{32}^2 + \epsilon_3 (\epsilon_1 + \epsilon_2) a_{33}^2] = 0$ 

Elle admet deux solutions positives z' et z".

Nous bornerons notre étude à ce cas particulier, et dans toute la suite de ce travail nous ne considérerons que des ondes incidentes planes et d'incidence normale. Les deux ondes transmises ont alors même direction de propagation normale ; les solutions de (5) sont :  $z' = N'_{z}$ , et  $z'' = N''_{z}$ , l'indice z rappelant la direction 0z du rayon incident. Jusqu'au paragraphe l-l, les rayons incidents ont toujours cette direction, il ne peut y avoir de confusion : nous omettrons donc d'écrire cette lettre, dans un but de clarté.

### 4 - CHAMP ELECTRIQUE DANS LE MILIEU ANISOTROPE

Nous allons maintenant établir une relation entre les composantes du champ électrique transmis dans le cristal. Désignons par N l'ensemble des deux solutions de (5) (N = N' ou N = N"). En reprenant les notations du

- 31 -

- 32 -

traité classique de Bruhat ([52], p. 400), nous notons  $p_e$ ,  $q_e$ ,  $r_e$ , les composantes dans ( $R_o$ ) du vecteur unitaire  $\vec{e}$  donnant la direction du champ électrique  $\vec{E}$  associé à la valeur de N choisie ( $\vec{E}$ 'pour N=N',  $\vec{E}$ " pour N=N"). Soient  $\alpha, \beta, \gamma$ , les composantes dans ( $R_o$ ) du vecteur unitaire porté par la direction de propagation normale, que nous appellerons par la suite "vecteur unitaire de propagation". Les composantes de  $\vec{e}$  sont données par la relation classique :

(6) 
$$\frac{(N^2-\varepsilon_1)}{\alpha} p_e = \frac{(N^2-\varepsilon_2)}{\beta} q_e = \frac{(N^2-\varepsilon_3)}{\gamma} r_e$$

Soient  $e_x$ ,  $e_y$ ,  $e_z$  les composantes de e dans le repère expérimental (R). La relation (6) peut être réécrite dans (R), sachant que le vecteur unitaire de propagation y a pour composantes : {0,0,1}, soit :

$$\alpha = a_{31} \qquad \beta = a_{32} , \quad \gamma = a_{33}$$

$$P_{e} = \sum_{i=1}^{3} a_{i1} e_{i} , \quad q_{e} = \sum_{i=1}^{3} a_{i2} e_{i} , \quad r_{e} = \sum_{i=1}^{3} a_{i3} e_{i} ,$$

et la relation (6) s'écrit :

(7) 
$$\frac{(N^2 - \varepsilon_1)}{a_{31}} (a_{11}e_x + a_{21}e_y + a_{31}e_z)$$
$$= \frac{(N^2 - \varepsilon_2)}{a_{32}} (a_{21}e_x + a_{22}e_y + a_{23}e_z)$$
$$= \frac{(N^2 - \varepsilon_3)}{a_{33}} (a_{31}e_x + a_{32}e_y + a_{33}e_z)$$

Les deux égalités de (7) peuvent se mettre sous la forme :

(8a)  $e_y = K e_x$ , et (8b)  $e_z = L e_x$ 

Les relations (8), avec l'identité  $e_x^2 + e_y^2 + e_z^2 = 1$ , définissent sans ambiguité la direction des champs électriques transmis.

Les expressions de K et L s'obtiennent sans difficulté :

(9a) 
$$K = -\frac{(N^2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\frac{a_{11}}{a_{31}} + (N^2 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_1)\frac{a_{12}}{a_{32}} + (N^2 - \varepsilon_3)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\frac{a_{13}}{a_{33}}}{(N^2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\frac{a_{21}}{a_{31}} + (N^2 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_1)\frac{a_{22}}{a_{32}} + (N^2 - \varepsilon_3)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\frac{a_{23}}{a_{33}}}{33}$$

$$= - \frac{\sum_{i=1}^{3} (N^2 - \varepsilon_i) (\varepsilon_j - \varepsilon_k) \frac{a_{1i}}{a_{3i}}}{\sum_{i=1}^{3} (N^2 - \varepsilon_i) (\varepsilon_j - \varepsilon_k) \frac{a_{2i}}{a_{3i}}}$$

dans laquelle j et k ont des valeurs déduites de i par permutation circulaire (par exemple, j=3 et k=1 si i=2).

Avec la même notation :

(9b) 
$$L = + \frac{\sum_{i=1}^{3} (N^2 - \varepsilon_i) (N^2 - \varepsilon_k) \frac{a_{3i}}{a_{3j} \cdot a_{3k}}}{\sum_{i=1}^{3} (N^2 - \varepsilon_i) (\varepsilon_j - \varepsilon_k) \frac{a_{2i}}{a_{3i}}}$$

Ces deux formules donnent sans ambiguité la direction des champs  $\vec{E}'$  et  $\vec{E}''$ , lorsqu'aucun des coefficients a<sub>3i</sub> de la matrice A n' est nul. Si l'un de ces coefficients est nul, cela veut dire que l'axe Oz est normal à l'axe de symétrie électrique du cristal correspondant à la valeur de i. Les relations (9a) et (9b) ne sont plus applicables, mais la direction des vecteurs  $\vec{E}'$  et  $\vec{E}''$  peut alors être trouvée par un raisonnement géométrique : nous retrouverons ce problème à la fin du chapitre, en 14. Le système (9) est en réalité un groupe de quatre relations qui donnent  $\vec{e}'$  si on y fait N = N' (d'où K' et L'), et  $\vec{e}''$  si l'on y fait N = N" (d'où K" et L"). Rappelons qu'elles sont écrites pour une propagation normale suivant l'axe Oz, donc qu'il faut en réalité noter K<sub>z</sub> et L<sub>z</sub>.

5 - RELATION ENTRE LES VECTEURS e' ET e"

La relation (9b) ne sera pas exploitée dans ce travail ; par contre, (9a) est très importante. En effet, K représente la pente de la projection du vecteur  $\vec{E}$  sur le plan xOy, donc sur le plan d'onde. Or, on sait que le champ électrique se projette dans le plan d'onde sur le support de l'induction électrique  $\vec{D}$  : ainsi, K' est la pente de  $\vec{D}$ ', et K" est la pente de  $\vec{D}$ ", par rapport aux axes Ox et Oy. Les deux inductions sont des vecteurs perpendiculaires, donc K'.K" = - 1.

Nous exploiterons ce résultat en 7, en posant

 $K' = \frac{e'y}{e'y} = t$ , soit  $K'' = \frac{e''y}{e''y} = -\frac{1}{t}$ 

6 - EQUATION DES ONDES

Ecrivons maintenant les vecteurs  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  dans les deux milieux. Nous choisissons ici une onde incidente dont le champ électrique est dirigé suivant Ox. Le cas d'un champ parallèle à Oy sera envisagé en 9.

#### 6,1 Onde incidente

Rappelons que cette onde, polarisée rectilignement, existe dans le domaine z<o (vide), et que sa direction de propagation est l'axe Oz dans le sens z croissant. Le cristal occupe le demi-espace z>o . 6,1,1

Le champ électrique incident s'écrit :

(11) 
$$\vec{E} = E \vec{i} \exp [j\omega (t - \frac{\vec{PR}}{C})]$$

avec :

$$\begin{split} & E = \text{amplitude scalaire du champ }; \\ & \vec{1} = \text{vecteur unitaire de l'axe } 0x ; \\ & \vec{P} = \text{vecteur unitaire de propagation, de composantes } (0,0,1) ; \\ & \omega = \text{pulsation de la vibration }; \\ & \vec{R} = \text{vecteur de position }. \end{split}$$

6,1,2 Le champ magnétique incident se déduit de E :

(12) 
$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_{O}C} (\vec{P} \wedge \vec{E})$$

donc :

(13) 
$$\vec{H} = \frac{E}{\mu_0 C} \vec{j} \cdot \exp[j\omega(t - \frac{\vec{PR}}{C})]$$

# 6,2 Onde réfléchie

Ne sachant rien a priori de sa nature, nous la supposons elliptique, et il sera montré plus loin (8-2-1) que dans le cas où l'absorption du même anisotrope est négligeable, l'onde réfléchie reste polarisée rectilignement. mais que son plan de polarisation subit une rotation par rapport à celui de la vibration incidente.

Nous écrivons donc les champs électrique et magnétique réfléchis en décomposant sur les axes 0x et 0y :

- (14a)  $\vec{E}_r = \vec{E}_x + \vec{E}_y$
- (14b)  $\vec{H}_r = \vec{H}_x + \vec{H}_y$

# 6,2,1 Sur l'axe 0x :

(15a) 
$$\vec{E}_{x} = E_{x} \vec{i} \exp \{j [\omega (t - \frac{\vec{P}_{r} \cdot \vec{R}}{C}) + \varphi_{x}]\}$$

où :

 $\vec{E}_x = \text{amplitude de la composante de } \vec{E}_r \text{ sur l'axe } 0x ;$  $\vec{P}_r = -\vec{P} = (0,0,-1), \text{ car l'onde réfléchie se propage dans le sens des z décroissants ;}$  $\varphi_x = \text{différence de phase, sur la surface, entre } \vec{E} \text{ et } \vec{E}_x .$ 

Le champ magnétique est donné par une relation analogue à (12) ; la composante de  $\overrightarrow{H_r}$  qui correspond à  $\overrightarrow{E_x}$  est  $\overrightarrow{H_y}$ , soit :

(15b) 
$$\vec{H}_{y} = \frac{1}{\mu_{o}C} \quad \vec{P}_{r} \Lambda \vec{E}_{x} = \frac{-E_{y}}{\mu_{o}C} \cdot \vec{j} \cdot \exp \{j [\omega(t - \frac{\vec{P}_{r} \vec{R}}{C} + \varphi_{x}]\}$$

(16a) 
$$\vec{E}_y = E_y \cdot \vec{j} \cdot \exp \{j [\omega(t - \frac{\vec{P}_r \vec{R}}{C}) + \varphi_y]\}$$

(16b) 
$$\vec{H}_{x} = \frac{E_{y}}{\mu_{o}C} \cdot \vec{i} \cdot \exp \{ j [\omega(t - \frac{\vec{P}_{r}\vec{R}}{C}) + \varphi_{y}] \}$$

où  $\varphi_{v}$  est la différence de phase sur la surface entre  $\vec{E}$  et  $\vec{E}_{v}$ .

# 6,3 Ondes transmises dans le cristal

Il est inutile de les décomposer sur les axes 0x et 0y, car nous savons que les vibrations transmises sont polarisées rectilignement, les deux plans de polarisation étant normaux entre eux. Les champs électriques sont donc donnés par la relation commune :

(17a) 
$$\vec{E}_t = \vec{e} \cdot E_t \{ \exp j [\omega(t - \frac{N\vec{P}_t\vec{R}}{C}) + \varphi_t ] \}$$

où :

$$\begin{split} \mathbf{E}_{t} &= \text{amplitude scalaire du champ transmis ;} \\ \vec{P}_{t} &= (0,0,1) = \vec{P} \text{ (propagation normale dans le sens z croissant) ;} \\ \boldsymbol{\varphi}_{t} &= \text{différence de phase sur la surface entre } \vec{E} \text{ et } \vec{E}_{t} \\ \vec{e} &= \text{ vecteur unitaire de composantes } \left(\frac{1}{\sqrt{1+K^{2}+L^{2}}}, \frac{K}{\sqrt{1+K^{2}+L^{2}}}\right) \end{split}$$

en utilisant les notations des relations (8) .

Les deux champs électriques transmis se distinguent par les grandeurs E',  $\vec{e}'$ ,  $\varphi'_t$  pour N=N', et E'',  $\vec{e}''$ ,  $\varphi''_t$  pour N=N''.

Les amplitudes  $E'_t$  et  $E''_t$  sont constantes, car on ne tient pas compte de l'absorption du cristal.

Les champs magnétiques transmis s'écrivent :

(17b) 
$$\vec{H}_{t} = \frac{N}{\mu_{o}C} \cdot (\vec{P}_{t} \vec{Ae}) \cdot \exp \{ j [\omega(t - \frac{N\vec{P}_{t}\vec{R}}{C}) + \varphi_{t} ] \}$$

avec  $\vec{P}_t \Lambda \vec{e} = (-e_y, e_x, o)$ 

7 - EQUATIONS DE PASSAGE

A la traversée de la surface de séparation (plan xoy), les composantes tangentielles des champs électrique et magnétique se conservent :

(18a) 
$$\frac{\text{Proj}}{(0x,0y)} \begin{bmatrix} \vec{E} + \vec{E}_r \end{bmatrix} = \frac{\text{Proj}}{(0x,0y)} \begin{bmatrix} \vec{E}_t' + \vec{E}_t'' \end{bmatrix}$$

(18b) 
$$\frac{\text{Proj.}}{(0x, 0y)} \begin{bmatrix} \vec{H} + \vec{H}_r \end{bmatrix} = \frac{\text{Proj.}}{(0x, 0y)} \begin{bmatrix} \vec{H}_t' + \vec{H}_t'' \end{bmatrix}$$

(18a) donne deux relations obtenues par projection sur l'axe 0x, puis sur l'axe 0y, et en faisant z = o dans l'expression du vecteur de position  $\vec{R}$ :

(19a) 
$$E + E_x \exp(j\varphi_x) = E'_t e'_x \exp(j\varphi'_t) + E''_t e''_x \exp(j\varphi''_t)$$

(19b) 
$$E_y \exp(j\varphi_y) = E'_t e'_y \exp(j\varphi'_t) + E''_t e''_y \exp(j\varphi''_t)$$

De la même manière, (18b) donne :

(19c) 
$$E_y \exp(j\varphi_y) = -N' e'_y E'_t \exp(j\varphi'_t) - N'' e''_y E''_t \exp(j\varphi''_t)$$

(19d) 
$$E - E_x \exp(j\varphi_x) = N' e'_x E'_t \exp(j\varphi'_t) + N'' e''_x E''_t \exp(j\varphi''_t)$$

## 8 - COEFFICIENTS DE REFLEXION NORMALE

Le système (19) donne les rapports  $E_x/E$  et  $E_y/E$  des amplitudes des champs réfléchis à celle du champ incident, si l'on élimine tout ce qui se rapporte aux ondes transmises.

# 8-1- Résolution du système (19)

Elle ne pose aucun problème : de (19b) et (19c), on tire  $E'_t$ exp  $(j\varphi'_t)$  et  $E''_t \cdot \exp(j\varphi''_t)$  exprimés en fonction de  $E_y \exp(j\varphi_y)$ . On reporte ces expressions dans (19a) et (19d), pour obtenir deux équations ne contenant que E,  $E_x \exp(j\varphi_x)$ ,  $E_y \exp(j\varphi_y)$ . Les rapports cherchés s'en déduisent aisément.

En posant :

(20a) 
$$L_1 = \frac{1+N''}{N''-N'}$$
,  $\frac{e'_x}{e'_y}$  +  $\frac{1+N'}{N''-N'}$ ,  $\frac{e''_x}{e'_y}$ 

(20b) 
$$L_2 = \frac{N'(1+N'')}{N''-N'} \cdot \frac{e'_x}{e'_y} + \frac{N''(1+N')}{N''-N'} \cdot \frac{e''_x}{e''_y}$$

on obtient :

(20c) 
$$\frac{E_{x}}{E} \cdot \exp(j\varphi_{x}) = \frac{L_{1} - L_{2}}{L_{1} + L_{2}}$$

(20d) 
$$\frac{E_y}{E} \cdot \exp(j\varphi_y) = \frac{2}{L_1 + L_2}$$

Ces expressions se simplifient si l'on utilise la relation (10) concernant les directions des champs transmis. Il en résulte :

(21a) 
$$r_{xx} = \frac{E_x}{E} \cdot \exp(j\varphi_x) = \frac{(1-N')(1+N'')(1/t) + (1+N')(1-N'')t}{(1+N'')(1+N'')(t+1/t)}$$

(21b) 
$$r_{xy} = \frac{E_y}{E} \cdot \exp(j\varphi_y) = \frac{2 (N''-N')}{(1+N')(1+N'')(t+1/t)}$$

r est le coefficient de réflexion normale lorsque polariseur et analyseur sont parallèles à l'axe 0x; r est le coefficient de réflexion normale quand le polariseur est parallèle à 0x, et l'analyseur parallèle à 0y.

- 39-

### 8-2 Remarques

<u>8,2,1</u> N', N" et t sont réels, car le milieu cristallin est transparent. Les grandeurs  $L_1$  et  $L_2$  sont donc réelles, ce qui impose :

 $\varphi_x = k_1 \pi$  ,  $\varphi_y = k_2 \pi$  , soit  $\varphi_x - \varphi_y = k\pi$ 

la vibration réfléchie reste bien rectiligne.

8,2,2 Nous nommerons  $r_{xy}$  " coefficient de réflexion croisé ", puisqu'il est observé quand polariseur et analyseur sont croisés. S'il n'est pas nul, cela prouve que le champ électrique rectiligne réfléchi a une composante non nulle sur l'axe Oy, alors que le champ électrique incident est parallèle à Ox : le plan de polarisation de l'onde réfléchie a donc tourné, par rapport à celui de l'onde incidente, d'un angle  $\gamma_{x}$  tel que :

(22) 
$$\operatorname{tg} \gamma_{\mathbf{x}} = \frac{E_{\mathbf{y}}}{E_{\mathbf{x}}} = \frac{2 (N''-N')}{(1-N')(1+N'')(1/t) + (1-N'')(1+N')(t)}$$

Ce phénomène est inhérent au caractère anisotropique du cristal ; il disparaît si le cristal est isotrope (N'=N"). L'indice x de  $\gamma_x$  rappelle la direction du champ électrique incident.

## 9 - CAS D'UN CHAMP ELECTRIQUE INCIDENT PORTE PAR OU

Nous reprenons les relations (13) à (17) avec les mêmes notations, en y changeant l'orientation des vecteurs unitaires.

- 9-1 Onde incidente
- (23a)  $\vec{E} = E \vec{j} \cdot \exp[j \omega(t \frac{\vec{PR}}{C})]$

(23b) 
$$\vec{H} = -\frac{E}{\mu_0 C} \cdot \vec{i} \cdot \exp[j\omega(t - \frac{\vec{PR}}{C})]$$

# 9-2 Ondes réfléchie et transmise

Elles sont données par les groupes de relations (15) et (16) pour l'onde réfléchie, (17) pour les ondes transmises.

9-3 Equations de passage et coefficients de réflexion normale

9,3,1 Les équations de passage donnent quatre relations :

- (24a)  $E_x \exp(j\varphi_x) = E'_t e'_x \exp(j\varphi'_t) + E''_t e''_x \exp(j\varphi''_t)$
- (24b)  $E+E_y \exp(j\varphi_y) = E'_t e'_y \exp(j\varphi'_t) + E''_t e''_y \exp(j\varphi''_t)$

(24c) 
$$E-E_y \exp(j\varphi_y) = N' E'_t e'_y \exp(j\varphi'_t) + N'' E''_t e''_y \exp(j\varphi''_t)$$

(24d)  $E_x \exp(j\varphi_x) = -N' E'_t e'_x \exp(j\varphi'_t) - N'' E'_t e''_x \exp(j\varphi''_t)$ 

9,3,2 Un calcul analogue au précédent (voir en 8-1) donne :

(25a) 
$$\frac{E_y}{E} = r_{yy} = \frac{(1-N')(1+N'')t + (1-N'')(1+N')(1/t)}{(1+N')(1+N'')(t+1/t)}$$

(25b) 
$$\frac{E_x}{E} = r_{yx} = \frac{2 (N''-N')}{(1+N')(1+N'')(t+1/t)}$$

#### 9,3,3 Remarque

Les deux coefficients de réflexion croisés,  $r_{xy}$  et  $r_{yx}$ , sont égaux. Dans le cas d'un champ électrique incident parallèle à Oy, le plan de polarisation de la vibration réfléchie tourne de l'angle  $\gamma_y$ , avec tg  $\gamma_y = r_{yx} / r_{yy}$ . En général, les angles  $\gamma_x$  et  $\gamma_y$  ne sont pas égaux. 10 - CHANGEMENT DE NOTATION : ECRITURE FINALE DES COEFFICIENTS

Les relations (21) et (25) peuvent être présentées sous une forme plus condensée et plus pratique. Nous posons :

- (26a)  $\frac{1-N'}{1+N'} = p$
- $(26b) \qquad \frac{1-N''}{1+N''} = q$

(26c)  $t = tg \theta$ 

Les coefficients de réflexion normales définis ci-dessous ont une expression simple en fonction de p, q,  $\theta$  :

(27a) 
$$r_{xx} = p \cos^2 \theta + q \sin^2 \theta = \frac{1}{2} [(p+q) + (p-q) \cos 2\theta]$$

(27b) 
$$r_{yy} = p \sin^2 \theta + q \cos^2 \theta = \frac{1}{2} [(p+q) - (p-q) \cos 2\theta]$$

(27c)  $r_{xy} = r_{yx} = \frac{1}{2}$  (p-q) sin 2  $\theta$ 

L'angle  $\theta$  a une signification physique très simple : puisque t est la pente de l'induction électrique  $\vec{D}$ ' transmise sans déformation (cf.5), l'angle  $\theta$  défini en (26c) est l'angle que fait la ligne neutre correspondant à l'indice N', avec l'axe 0x (figure 17). Ainsi, si 0x coïncide avec cette ligne neutre,  $\theta$  est nul et les coefficients de réflexion deviennent :  $r_{xx} = p$ ,  $r_{yy} = q$ ,  $r_{xy} = 0$ . Il n'y a pas alors de rotation du plan de polarisation : le cristal est pseudo-isotrope, d'indice N' et de coefficient de réflexion normale (1-N') / (1+N') pour un champ incident parallèle à 0x, d'indice N" et de coefficient de réflexion (1-N")/ (1+N") si le champ incident est parallèle à 0y. Ces propriétés se retrouvent si  $\theta = 90^{\circ}$ , auquel cas  $r_{xx}$  et  $r_{yy}$  échangent leurs valeurs. Les indices N' et N" sont supérieurs à l'unité, donc p et q sont négatifs, ainsi que r<sub>xx</sub> et r<sub>yy</sub>; par contre, le signe de r<sub>xy</sub> peut être quelconque : il est donné par le sens de rotation du plan de polarisation de la lumière réfléchie (voir relation (22)) : si  $\gamma_x$  est positif, c'est que r<sub>xy</sub> est négatif.

Rappelons que le système (27) est relatif à une propagation normale suivant l'axe Oz.

#### 11 - RECAPITULATION

En résumé, pour une face réflectrice donnée, orientée d'une façon quelconque dans le cristal, nous avons finalement trouvé trois coefficients de réflexion normale, exprimés par rapport à deux axes rectangulaires arbitrairement pris dans cette face. Les trois relations (27) expriment le fait que la vibration réfléchie reste rectiligne, et que son plan de polarisation a subi une rotation par rapport à celui de la vibration rectiligne incidente.

Lorsqu'on se donne un milieu anisotrope par les éléments diagonaux  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  du tenseur  $\vec{\epsilon}$ , et par les axes de symétrie électrique de ce tenseur (repère (R<sub>0</sub>)), les facteurs de réflexion normale d'une section réfléchissante quelconque de ce milieu sont bien définis et peuvent être calculés numériquement par la chaîne d'opérations suivantes :

- On choisit dans le plan réflecteur deux axes rectangulaires 0x et 0y qui, avec la normale 0z à ce plan, formeront le repère (R) ; on projette les vecteurs unitaires des axes de (R) dans le repère (R<sub>0</sub>), pour obtenir les neuf coefficients de la matrice A ;
- On calcule N'<sup>2</sup> et N"<sup>2</sup> en trouvant les racines de l'équation bicarrée (5).
   N' et N" sont les indices des vibrations dont le plan d'onde est paral lèle à x0y et qui se propagent sans altération dans le cristal ;
- On calcule t, pente de l'induction électrique  $\vec{D}$ ', grâce à l'équation (9a) en y faisant N<sup>2</sup> = N<sup>2</sup> ;

- 43 -

- Des relations (26a,b,c) on tire p, q, θ, et les relations (27) donnent les trois coefficients de réflexion normale relatifs au choix de (R). On doit trouver r<sub>xx</sub> et r<sub>yy</sub> négatifs, tandis que le signe de r<sub>xy</sub> est quelconque;
- On obtient enfin les facteurs de réflexion normale en prenant le carré des coefficients précédents.

12 - CAS DES AUTRES FACES DU REPERE (R) : NOTATION EMPLOYEE

Nous serons amenés, dans le chapitre III, à utiliser les facteurs de réflexion normale sur les plans yoz et zox du repère (R) ; indiquons donc dès à présent la notation employée pour les distinguer.

Il est évident que sur les plans réflecteurs yoz et zox, les résultats sont identiques à ceux obtenus sur la face xoy, mais en y faisant une permutation circulaire sur les lettres x, y, z pour les axes, et sur les indices 1, 2, 3 pour les éléments de la matrice A. Ainsi, sur la face yoz par exemple, nous pouvons définir trois coefficients de réflexion normale, observés lorsque le champ électrique incident est parallèle à Oy ou à Oz, et qui se calculent en suivant les étapes exposées en 11, mais en prenant pour N'<sup>2</sup>et N<sup>''2</sup> les racines de l'équation bicarrée déduite de l'équation (5) à l'aide de cette permutation ; de même le paramètre t correspondant se déduit de la relation (9a).

Pour différencier les éléments N', N", t relatifs à une face donnée, nous les noterons N', N", t pour la face yoz, et N', N", t pour la face zox, chaque fois qu'il y aura lieu de les distinguer des éléments N', N" et t, seuls utilisés jusqu'ici.

Les neufs coefficients de réflexion normale se notent alors :

-	propagation	normale	selon	0x	:	r <sub>xyy</sub>	,	r <sub>xzz</sub>	,	r xyz
-	propagation	normale	selon	0y	:	r yzz	,	r <sub>yxx</sub>	,	ryzx
Ŧ	propagation	normale	selon	0z	:	r	,	r	,	r

- 44 -

La première lettre indicée donne la direction de propagation de l'onde incidente, donc le plan réflecteur correspondant ; la seconde donne la direction du polariseur, la troisième celle de l'analyseur. Avec cette notation, les coefficients de réflexion croisés sont ceux dont les trois lettres sont différentes. On passe d'une face à l'autre par une permutation qui amène en première position la lettre donnant la normale à la face désirée.

#### 13 - APPLICATION NUMERIQUE

Nous présentons en annexe l l'expression d'une matrice orthogonale, en fonction de trois angles (notés  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\varphi$ ) qui fixent les positions relatives de (R) et de (R<sub>0</sub>). Nous nous sommes servis de cette expression pour illustrer par un exemple pratique la récapitulation faite en ll ; les résultats de cet exemple se trouvent dans l'annexe **2**.

Nous avons choisi arbitrairement trois éléments diagonaux  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , du tenseur diélectrique, et trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\varphi$ . Nous avons alors calculé les neufs coefficients de réflexion normale définis en 12. Le programme de calcul, qui suit les étapes rappelées en 11, est donné dans l'annexe 8. Nous remarquons que les six coefficients de réflexion non croisés peuvent se grouper deux par deux, selon l'orientation commune du système polariseur-analyseur : ainsi,  $r_{xyy}$  et  $r_{zyy}$  ont des valeurs très proches l'une de l'autre ; de même,  $r_{yzz}$  et  $r_{xzz}$ ,  $r_{zxx}$  et  $r_{yxx}$ . Les coefficients de réflexion croisés sont très faibles, mais les angles de rotation des plans de polarisation valent dans cet exemple plusieurs degrés, donc sont mesurables en grandeur et en signe.

Le schéma terminant l'annexe 2 montre, sur la face xoy, la position des lignes neutres et la direction des champs rectilignes réfléchis.

14 - ETUDE DES CAS PARTICULIERS OU LA MATRICE A POSSEDE DES ELEMENTS NULS

# 14,1 Introduction, position du problème

- 45 -

La détermination des constantes optiques du milieu, dont nous exposerons au chapitre III le principe général, sera sans aucun doute facilitée si le repère (R) a une orientation particulière par rapport à ( $R_o$ ). Nous avons dit dans l'introduction générale qui commençait ce chapitre, qu'une orientation particulière n'est en général réalisée que pour une seule longueur d'onde, en raison du phénomène de dispersion des axes de ( $R_o$ ). Cependant, la position des axes principaux étant soumise aux symétries du milieu cristallin, leurs déplacements sont nécessairement limités par ces éléments de symétrie. Ainsi, un cristal monoclinique par exemple possède un plan de symétrie cristallographique : ce plan est aussi un plan de symétrie électrique, il contient donc deux des trois directions principales du tenseur  $\vec{t}$ ; ces deux axes ne peuvent se déplacer que dans ce plan, le troisième axe lui est constamment perpendiculaire ([52], p. 417). Si nous prenons ce plan de symétrie comme plan réflecteur, les repères (R) et ( $R_o$ ) auront un axe commun, et ceci quelle que soit la longueur d'onde.

Cette particularité entraine dans l'expression des coefficients de réflexion normale établis précédemment, des simplifications qu'il est intéressant d'étudier. Les résultats obtenus nous serviront (ch. III, paragraphe 9) à trouver une méthode plus simple de détermination des constantes optiques.

Une position particulière du repère (R) se traduit par l'existence de zéros dans la matrice A ; nous envisageons d'abord le cas où un seul des éléments a , est nul, puis celui où au-moins deux sont nuls.

#### 14,2 Un des éléments de A est nul

Choisissons par exemple  $a_{31} = 0$  : d'après la signification de cet élément, cela veut dire que les axes 0X et 0z sont perpendiculaires (figure 18). Dans le cas d'une propagation normale suivant 0z, la relation (9a) qui donne les pentes dans le plan d'onde des inductions électriques transmises, est indéterminée. Cette indétermination peut être levée en multipliant (9a) par  $a_{31}$  / $a_{31}$  , soit :

- 46 -

(28) 
$$K_{z} = - \frac{(N_{z}^{2} - \varepsilon_{1}) (\varepsilon_{3} - \varepsilon_{2}) a_{11}}{(N_{z}^{2} - \varepsilon_{1}) (\varepsilon_{3} - \varepsilon_{2}) a_{21}}$$

Si nous prenons  $N_z^{"2}$  différent de  $\varepsilon_1$ , (28) donne la pente  $K_z^"$ qui vaut : -  $a_{11}/a_{21}$ . La pente  $K_z^! = t_z$  correspond nécessairement à la valeur  $N_z^{'2} = \varepsilon_1$ , pour laquelle (28) est indéterminée, et elle vaut :  $a_{21}/a_{11}$ , en vertu de la relation (10).

Ces résultats peuvent être aisément retrouvés par un raisonnement géométrique faisant intervenir l'ellipsoïde des indices. On sait que l'intersection de cet ellipsoïde avec le plan d'onde est une ellipse dont les axes donnent les directions des inductions privilégiées  $\vec{D}'$  et  $\vec{D}''$  se propageant sans déformation dans le cristal (figure 18). Le plan d'onde est ici normal à Oz, donc parallèle à OX : l'un des axes de l'ellipse est OX, l'indice associé à cette vibration est  $N'_z = \sqrt{\varepsilon_1}$ . Le second axe est la droite commune au plan YOZ et au plan d'onde, soit OT. Si P' et P'' sont les sommets des deux axes ainsi trouvés, les champs électriques  $\vec{E}$ ' et  $\vec{E}''$  sont portés par les normales en P' et P'' à l'ellipsoïde des indices : en P', cette normale est évidemment OX, les cosinus directeurs de  $\vec{E}$ ' dans (R) sont donc aussi ceux de OX, soit :  $(a_{11}, a_{21}, o) = (\cos \alpha_1, \cos \alpha_2, o)$ . Nous en tirons la valeur de K'<sub>z</sub> :  $a_{21}/a_{11}$ , associée à N'<sub>z</sub> =  $\sqrt{\varepsilon_1}$ .

# 14,3 Cas d'un plan réflecteur contenant deux axes principaux

Les deux repères (R) et (R<sub>0</sub>) ont alors un axe commun, et on passe de l'un à l'autre par une rotation autour de cet axe (figure 19). Soit Oy, ou OY, cet axe, et  $\omega$  l'angle de rotation. La matrice A s'exprime simplement en fonction de  $\omega$  :

(29) 
$$A = \begin{cases} \cos \omega & 0 & \sin \omega \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \omega & 0 & \cos \omega \end{cases}$$

- 47 -

Si le milieu cristallin est monoclinique,  $\omega$  est une fonction de la longueur d'onde, mais la matrice A conserve la forme écrite ci-dessus, car xoz reste constamment un plan de symétrie électrique.

Appelons  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $N_3$  les indices principaux associés respectivement à OX, OY, OZ. Si  $N_2$  est l'indice moyen, xoz contient en plus les axes optiques.

La figure 19 montre les intersections de l'ellipsoide des indices avec les plans d'onde correspondant aux trois directions de propagation normale 0x, 0y, 0z, ainsi que l'orientation des vibrations privilégiées correspondantes. Toutes les grandeurs sont affectées de la lettre rappelant à quelle propagation elles se rattachent.

## 14,3,1 Propagation normale Oy

L'ellipse a pour axes OX et OZ, les indices correspondants sont  $N'_y = N_1 = \sqrt{\epsilon_1}$ , et  $N''_y = N_3 = \sqrt{\epsilon_3}$ . Ce sont bien les racines de l'équation bicarrée correspondant à cette direction de propagation, déduite de l'équation (5) grâce à la permutation circulaire expliquée en l2 et en y portant les valeurs particulières des éléments de A écrits en (29).  $\vec{D}'_y$  et  $\vec{E}'_y$ sont colinéaires à OZ, d'où les composantes dans (R) des vecteurs unitaires  $\vec{e}'_y$  et  $\vec{e}''_y$ :

 $(30a) \quad \stackrel{\rightarrow}{e'}_{y} = (\cos \omega, 0, -\sin \omega) = (e'_{yx}, e'_{yy}, e'_{yz})$   $(30b) \quad \stackrel{\rightarrow}{e''}_{y} = (\sin \omega, 0, \cos \omega) = (e''_{yx}, e''_{yy}, e''_{yz})$ 

En notant t la pente de la projection de  $\vec{e'}_y$  dans le plan d'onde xoz, conformément à la relation (10), nous obtenons :

(31a)  $t_y = \frac{e'_{yx}}{e'_{yz}} = -\cot g \omega$ 

(31b) 
$$\frac{\frac{e''}{yx}}{\frac{e''}{yz}} = tg \omega = -\frac{1}{t}$$

- 48 -

Les relations (26), qui définissent les nouvelles variables  $p,q,\theta$ , donnent ici :

(32a) 
$$p_y = \frac{1-N_1}{1+N_1} = \frac{1-\sqrt{\epsilon_1}}{1+\sqrt{\epsilon_1}}$$

(32b) 
$$q_y = \frac{1-N_3}{1+N_3} = \frac{1-\sqrt{\epsilon_3}}{1+\sqrt{\epsilon_3}}$$

(32c) 
$$\operatorname{tg} \theta_{y} = t_{y} = -\operatorname{cotg} \omega$$
, so it  $\theta_{y} = \omega + \frac{\pi}{2}$ 

Les coefficients de réflexion normale s'obtiennent grâce à (27) :

(33a) 
$$r_{yzz} = p_y \sin^2 \omega + q_y \cos^2 \omega$$

(33b) 
$$r_{yxx} = p_y \cos^2 \omega + q_y \sin^2 \omega$$

(33c) 
$$r_{yzx} = \frac{q_y - p_y}{2} \sin 2\omega$$

# 14,3,2 Propagation normale Oz

Les axes de l'ellipse sont 0x et 0Y. L'induction électrique  $\vec{D}'_z$ est portée par 0Y et l'indice associé est  $N'_z = N_2 = \sqrt{\varepsilon_2}$ . L'autre valeur,  $N''_z$ , est facilement obtenue à l'aide du produit  $N'^2_z$ .  $N''^2_z$  donné par l'équation bicarrée (5) :

(34) 
$$N_{z}^{"2} = \frac{\varepsilon_{1} \varepsilon_{3}}{\varepsilon_{1} \sin^{2} \omega + \varepsilon_{3} \cos^{2} \omega}$$

- 49 -

Le champ électrique  $\vec{E}'_z$  est colinéaire à  $\vec{D}'_z$  et a donc pour cosinus directeurs dans (R) :

(35a) 
$$\vec{e}'_{z} = (0, 1, 0) = (e'_{zx}, e'_{zy}, e'_{zz})$$

Donc :

(35b) 
$$t_z = tg \theta_z = \frac{e'_{zy}}{e'_{zx}} = \infty$$
, soit  $\theta_z = \frac{\pi}{2}$ 

Par contre, les directions de  $\vec{E}''_z$  et  $\vec{D}''_z$  ne sont pas confondues. Les cosinus directeurs de  $\vec{E}''_z$  peuvent être trouvés, soit au prix d'un calcul faisant intervenir l'équation de la surface des indices et celle de sa normale, soit plus simplement en multipliant la relation (9a) par  $a_{32}$  /  $a_{32}$ , ce qui lève l'indétermination et redonne bien :

$$\frac{e''_{zx}}{e''_{zy}} = \frac{a_{12}}{a_{22}} = 0 = -\frac{1}{t_z}$$

Les coefficients de réflexion normale sont déduits du système (27), dans lequel on fait :

$$P_{z} = \frac{1-N_{2}}{1+N_{2}}$$
,  $q_{z} = \frac{1-N_{z}''}{1+N_{z}''}$   $\theta_{z} = \frac{\pi}{2}$ 

ce qui donne :

 $(36a) r_{zxx} = q_z$ 

(36b)  $r_{zyy} = p_z$ 

 $r_{zxy} = 0$ 

Les champs électriques incident et réfléchi ont donc même direction de polarisation.

# 14,3,3 Propagation normale Ox

Les champs  $\vec{D}'_x$  et  $\vec{E}'_x$  son portés par OY, l'indice correspondant est  $N'_x = N_2 = \sqrt{\epsilon_2}$ . Les cosinus directeurs de  $\vec{E}'_x$  dans (R) sont évidemment les mêmes que ceux de  $\vec{E}'_z$  donnés en (35a) :

(37a) 
$$\overrightarrow{e}_{x}' = (0, 1, 0) = (e_{xx}', e_{xy}', e_{xz}')$$

On en tire :

(37b) 
$$t_x = \frac{e'_{xz}}{e'_{xy}} = 0$$
 donc  $\theta_x = 0$ 

L'induction  $\vec{D}_x''$  est parallèle à Oz, l'indice  $N_x''$  est obtenu de la môme manière que  $N_z''$ . On trouve sans difficulté :

(38) 
$$N_{\rm X}^{\prime\prime 2} = \frac{\varepsilon_1 \ \varepsilon_3}{\varepsilon_1 \ \cos^2 \ \omega + \varepsilon_3 \ \sin^2 \ \omega}$$

Les coefficients de réflexion normale sur le plan y a sont donc :

(39a) 
$$r_{xyy} = p_x = \frac{1-N_2}{1+N_2}$$

(39b) 
$$r_{xzz} = q_x = \frac{1}{1+N'}$$

 $(39c) r_{xyz} = 0$ 

# 24,4 Conclusion

Pour des réflexions normales sur les faces xoy et xoz, et d'une façon générale toutes les faces parallèles à l'axe de symétrie OY, le cristal est toujours pseudo-isotrope, d'indice  $N_2$  si le champ électrique incident est parallèle à OY,  $B_x''$  ou  $N_z''$  s'il lui est normal. Il n'y a jamais dens ce cas de rotation du plan de polarisation. Seul un plan réflecteur normal à l'axe de symétrie est susceptible de fournir un coefficient de réflexion croisé non nul : il faut pour cela que l'angle  $\omega$  ne soit pas un multiple de 90°, donc que les axes expérimentaux 0, et 0, ne coïncident pas avec l'un des axes principaux 0X ou 02.

# 14,5 Application numérique

Ainsi que nous l'avons fait en 13 dans le cas général, nous avons illustré par un exemple numérique les relations (33), (36), (39). Dans cet exemple, qui se trouve à l'annexe 3, nous avons calculé les sept coefficient de réflexion normale non nuls d'un cristal connu par ses constantes diélectriques  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , la position du repère (R) étant fixée par  $\omega$ . Le programme Fortran utilisé pour ce calcul se trouve à l'annexe 9.

# CHAPITRE - III -

DETERMINATION DES CONSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ET DE LA MATRICE A , A PARTIR DE LA MESURE DES FACTEURS DE REFLEXION NORMALE.

#### 1 - INTRODUCTION

On se pose maintenant le problème inverse, c'est-à-dire la détermination des éléments diagonaux de  $\vec{\epsilon}$  et des coefficients  $a_{ij}$  de A, à partir de la mesure des facteurs de réflexion normale. Nous verrons, dans les paragraphes 2 à 8, une méthode générale nécessitant trois plans réflecteurs normaux deux à deux ; cependant, si le cristal possède un plan de symétrie, l'utilisation de ce plan permet une résolution plus rapide du problème. Ce cas particulier est étudié au paragraphe 9.

## 2 - DETERMINATION DES INDICES N' ET N" CORRESPONDANT AUX LIGNES NEUTRES D'UN PLAN REFLECTEUR DONNE

2,1 Appelons 0z la normale à un plan réflecteur quelconque, sur lequel on a choisi deux axes 0x et 0y. Le repère orthonormé 0xyz, (R), a donc par rapport au repère principal (R<sub>0</sub>), une orientation a priori quelconque.

Nous allons montrer que de la mesure des facteurs de réflexion normale sur xoy, on peut tirer les indices  $N'_z$  et  $N''_z$ , ainsi que la pente  $t_z$ des lignes neutres par rapport à 0x. Pour alléger l'écriture, nous omettons de nouveau la lettre z dans tout ce paragraphe 2, puisqu'il n'y sera question que d'une propagation normale selon 0z.

2,2 Nous notons  $R_{xx}$ ,  $R_{yy}$ ,  $R_{xy}$ , avec une majuscule, les trois facteurs de réflexion normale mesurés sur le plan xoy. De ceux-ci, on tire les coefficients de réflexion normale :

(1) 
$$r_{xx} = -\sqrt{R_{xx}}$$
,  $r_{yy} = -\sqrt{R_{yy}}$ ,  $r_{xy} = \pm \sqrt{R_{xy}}$ 

Les coefficients  $r_{xx}$  et  $r_{yy}$  sont en effet toujours négatifs (voir remarque au ch. II, 10). Par contre, le signe de  $r_{xy}$  ne peut être connu grâce à R : il faut le déduire du sens de rotation du plan de polarisation de la lumière réfléchie, c'est-à-dire par exemple, du signe de l'angle  $\gamma_x$ 

- 53 -

(angle fait avec 0x par le champ électrique réfléchi, le champ incident étant parallèle à 0x). La mesure de cet angle est d'ailleurs précieuse, car les facteurs de réflexion croisés sont toujours très faibles (de l'ordre de  $10^{-4}$ ), et il est plus précis de mesurer  $\gamma_x$ , puis de tirer  $r_{xy}$  de la relation (II,22), soit :

(2)  $r_{xy} = r_{xx} tg \gamma_x = -\sqrt{R_{xx}} tg \gamma_x$ 

Nous verrons d'ailleurs (2-5-2, 6) que la connaissance du signe de r n'est nécessaire que pous la détermination des  $a_{ij}$ , mais inutile pour celle de  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ .

2,3 Les relations (II, 27) forment un système de trois équations dont les inconnues sont p, q,  $\theta$ , ou encore N', N", t. La résolution en est simple, elle peut être établie géométriquement à l'aide d'une construction rappelant celle du cercle de Mohr pour l'étude des déformations et des contraintes dans un cristal (voir NYE, [65], et figure 20) :

On porte sur un axe horizontal deux points P et Q d'abcisses respectives OP = p et OQ = q, et on trace le cercle de centre C, de diamètre PQ. On trace le diamètre TR qui fait avec PQ l'angle 20. La longueur OC vaut  $\frac{1}{2}$  (p-q), et les coordonnées de R dans ce graphique sont donc : OA = OC + CR Cos 20, et AR = CR sin 20, soit respectivement r<sub>xx</sub> et r<sub>xy</sub>. De même, l'autre extrémité T a pour coordonnées : r<sub>vv</sub>, - r<sub>xv</sub>.

2,4 Cette construction permet d'inverser le système (II, 27), c'est-àdire de trouver p, q,  $\theta$  en fonction de r<sub>xx</sub>, r<sub>xy</sub>, r<sub>yy</sub>. On est en effet ramené au problème géométrique suivant : les points T et R étant connus par leurs coordonnées, on trace le cercle de diamètre TR qui coupe l'axe horizontal en deux points P et Q dont on cherche les abcisses p et q. La figure 20 donne immédiatement le résultat :

(3a)	p.	*	OP	=	OC + C	P
(3b)	q	=	OQ	=	OC - C	Q
(3c)	tg	2	θ =	AR	/ CA	

avec :

(4a) OC = 
$$\frac{1}{2}$$
 (OB + OA) =  $\frac{1}{2}$  ( $r_{xx} + r_{yy}$ )  
(4b) CP = CQ = CT =  $\frac{1}{2}$  [( $r_{xx} - r_{yy}$ )<sup>2</sup> + 4  $R_{xy}$ ] <sup>1/2</sup>  
(4c) CA = OA - OC =  $\frac{1}{2}$  ( $r_{xx} - r_{yy}$ )

Soit, en tenant compte des signes des coefficients de réflexion :

(5a)  $p = \frac{1}{2} (\lambda - \sqrt{\mu})$ 

(5b) 
$$q = \frac{1}{2} (\lambda + \sqrt{\mu})$$

(5c) 
$$\operatorname{tg} 2 \theta = \frac{2 r_{xy}}{(r_{xx} - r_{yy})}$$

dans lesquelles on a posé :

- (6a)  $\lambda = r_{xx} + r_{yy}$
- (6b)  $\mu = (r_{xx} r_{yy})^2 + 4 R_{xy}$

## 2,5 Remarques

2,5,1 La détermination de p et de q peut être faite sans connaître le signe du coefficient de réflexion croisé  $r_{xy}$ .

2,5,2 La figure 20 a été construite en prenant arbitrairement |p| plus grand que |q|, c'est-à-dire N' supérieur à N". L'autre cas de figure est naturellement possible et conduit à la solution : p = 0C - CP, q = 0C + CQ, en prenant pour OC, CP, CQ, les expressions du groupe (3). Dans ce cas, p et q (donc N' et N") échangent leurs valeurs. Cependant la position de la ligne neutre correspondant à l'indice N' reste bien déterminée : son orientation en effet est donnée par l'angle  $\theta$  (voir II, 10 et figure 16) ; or, la relation (II, 27c) permet de dire que lorsque le signe de r<sub>xy</sub> est connu, le changement de p en q se traduit par un changement du signe de sin 2 $\theta$  ; ce qui change 2 $\theta$  en 2 $\theta \pm \pi$ , donc  $\theta$  en  $\theta \pm \frac{\pi}{2}$  : ainsi, échanger p et q revient à faire tourner l'ensemble des lignes neutres de  $\pm$  90° dans le plan xoy. Il n'y a en définitive qu'une seule détermination possible, et le choix arbitraire que nous avons fait sur la figure 20 est sans importance.

3 - UTILISATION DES AUTRES FACES DU REPERE (R)

Nous allons maintenant faire intervenir les plans réflecteurs xoz et yoz. Nous revenons donc à la notation définie au ch. II, parag. 12.

La mesure des pouvoirs réflecteurs sur ces deux autres faces nous permet de connaître p<sub>y</sub>, q<sub>y</sub>,  $\theta_y$  (donc N', N", t<sub>y</sub>) pour la face xoz et p<sub>x</sub>, q<sub>x</sub>,  $\theta_x$  (N', N", t<sub>x</sub>) pour la face yoz. Les expressions de ces six nouveaux paramêtres sont déduites des relations (5) et (6) par simple permutation circulaire sur les lettres x, y, z, amenant en première position celle qui désigne la direction de propagation normale désirée. Exemple :  $p_x = \frac{1}{2}(\lambda_x - \sqrt{\mu_x})$ avec  $\lambda_x = r_{xyy} + r_{xzz}$ , etc ....

Nous allons montrer que la connaissance de ces neuf paramètres permet de trouver les constantes diélectriques principales et les éléments de la matrice A du cristal non absorbant.

4 - SYSTEME GENERAL A RESOUDRE

Les indices N' et N" sont reliés à  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  et les  $a_{ij}$  par trois équations bicarrées telles que celle écrite en (II,5) pour l'axe Oz, dont les racines sont  $N'_z$  et  $N''_z$ . Si l'on appelle S<sub>z</sub> et P<sub>z</sub> les somme et produit

des racines de l'équation (II,5), il vient :

$$(7a_1) \quad \frac{1}{P_z} = \frac{\varepsilon_1 a_{31}^2 + \varepsilon_2 a_{32}^2 + \varepsilon_3 a_{33}^2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}$$

(7a<sub>2</sub>) 
$$\frac{S_z}{P_z} = \frac{\varepsilon_1 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) a_{31}^2 + \varepsilon_2 (\varepsilon_3 + \varepsilon_1) a_{32}^2 + \varepsilon_3 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) a_{33}^2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}$$

Les deux autres équations bicarrées analogues à (II,5) s'obtiennent en notant  $a_{i1}^{}$ ,  $a_{i2}^{}$ ,  $a_{i3}^{}$  les éléments de la matrice A, avec i = 1 pour une propagation normale selon 0x, et i = 2 pour l'axe 0y. De ces deux équations, nous tirons :

(7b<sub>1</sub>) 
$$\frac{1}{P_x} = \frac{\varepsilon_1 a_{11}^2 + \varepsilon_2 a_{12}^2 + \varepsilon_3 a_{13}^2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}$$

(7b<sub>2</sub>) 
$$\frac{s_x}{P_x} = \frac{\varepsilon_1 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) a_{11}^2 + \varepsilon_2 (\varepsilon_3 + \varepsilon_1) a_{12}^2 + \varepsilon_3 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) a_{13}^2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}$$

(7c<sub>1</sub>) 
$$\frac{1}{P_y} = \frac{\varepsilon_1 \ a_{21}^2 + \varepsilon_2 \ a_{22}^2 + \varepsilon_3 \ a_{23}^2}{\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \varepsilon_3}$$

$$(7c_2) \quad \frac{S_y}{P_y} = \frac{\varepsilon_1 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) a_{21}^2 + \varepsilon_2 (\varepsilon_3 + \varepsilon_1) a_{22}^2 + \varepsilon_3 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) a_{23}^2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}$$

Le groupe (7) est un système de six équations à six inconnues ; sa résolution doit être menée en tenant compte des propriétés de A, écrites dans l'introduction du chapitre II (voir en II, 2). Elle conduit à la détermination de  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  et des carrés des éléments  $a_{ij}$ . Le signe de ces éléments peut ensuite être établi à l'aide du troisième jeu de paramètres trouvés expérimentalement :  $t_x$ ,  $t_y$ ,  $t_z$ , reliés aux  $a_{ij}$  par des relations analogues à (II, 9a).

Remarquons que les grandeurs expérimentales 1/P et S/P qui figurent dans (7) restent inchangées si l'on permute N' et N". L'ambiguïté rencontrée lors de leur détermination (2,5,2) est donc bien sans importance. On peut d'ailleurs obtenir directement 1/P et S/P à partir des facteurs de réflexion normale, sans passer par l'intermédiaire des indices N' et N". En reprenant les expressions de  $\lambda$  et  $\mu$  données en (6), on établit facilement les relations générales :

(8a) 
$$\frac{1}{P} = \left[\frac{4+4\lambda+\lambda^2-\mu}{4-4\lambda+\lambda^2-\mu}\right]^2$$

(8b) 
$$\frac{S}{P} = 2$$
.  $\frac{16 - 8\lambda^2 + \lambda^4 - 2\mu \lambda^2 + \mu^2 + 24\mu}{(4 - 4\lambda + \lambda^2 - \mu)^2}$ 

#### 5 - OBTENTION DES CONSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES

5,1 Nous devons former à partir de (7) un système de trois équations ne contenant plus les  $a_{ij}$ . Deux de ces équations sont immédiatement trouvées en additionnant successivement (7 $a_1$ ), (7 $b_1$ ), (7 $c_1$ ), puis (7 $a_2$ ), (7 $b_2$ ), (7 $c_2$ ), et en appliquant la relation (II,2) :

(9a) 
$$\frac{1}{P_x} + \frac{1}{P_y} + \frac{1}{P_z} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3} = u$$

(9b) 
$$\frac{S_x}{P_x} + \frac{S_y}{P_y} + \frac{S_z}{P_z} = 2 \cdot \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2 + \varepsilon_2 \varepsilon_3 + \varepsilon_3 \varepsilon_1}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3} = v$$

u et v sont deux grandeurs connues par l'expérience.

5,2 La recherche de la troisième équation est plus délicate. Nous n'entrerons pas ici dans le détail des calculs, qui, sans présenter de difficultés particulières, sont longs et fastidieux ; nous nous contentons d'en résumer les étapes :

On part d'une relation entre les éléments a.., donnée en (II,2b), j par exemple :

 $a_{11} a_{21} + a_{12} a_{22} + a_{13} a_{23} = 0$ 

Le système (7) ne fournissant que les carrés des a<sub>ij</sub>, on élève deux fois cette relation au carré, soit :

On remplace dans (10) les expressions des  $a_{ij}^2$  déduites de (7b) et (7c) et exprimées en fonction de  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ .

Or, (10) restant inchangée dans une permutation circulaire sur  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , on est incité à poser :

(11a)  $\sigma_1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$ 

(11b)  $\sigma_2 = \varepsilon_1 \varepsilon_2 + \varepsilon_2 \varepsilon_3 + \varepsilon_3 \varepsilon_1$ 

(11c)  $\sigma_3 = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3$ 

L'intérêt de ce changement de variables est que l'on peut relier  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  à  $\sigma_3$  grâce aux relations (9a) et (9b) d'où finalement une équation où ne figure plus que la variable  $\sigma_3$ . Au terme d'un calcul très long, nous obtenons (10) sous la forme d'une équation (colossale !) du quatrième degré :

(12)  $A \sigma_3^4 + B \sigma_3^2 + C \sigma_3^2 + D \sigma_3 + E = 0$ 

- 60 -

Les expressions des coefficients A, B, C, D, E sont : '

(13) 
$$A = (u^2 v^2 - 4u^3) (u^2 v^2 + \psi^2 + u^2 v^2 - 4a\delta + 4avv + 2uv\psi - 2uv\psi - 4av^2 + 4au) - 2v (u^4 v^3 - 4u^5 v);$$

(14) 
$$B = 36 u^{3}v^{3} - 8u^{2}v^{5} - 8u^{4}v + \psi^{2}(18uv - 4v^{3}) + 2\alpha\delta(8v^{3} - 36uv) + v^{2}(34u^{3}v - 8u^{2}v^{3}) + 4\alpha (18u^{2}v + 4v^{5} - 22uv^{3}) - 4\alpha v (4v^{4} - 18uv^{2}) + 4\delta(4u^{3}v - u^{2}v^{3}) - 4\delta v(4u^{3} - u^{2}v^{2}) - 2v(35u^{3}v^{2} - 8u^{2}v^{4} - 4u^{4}) - 2\psi(4uv^{4} - 17u^{2}v^{2} - 4u^{3}) + 2v\psi (4uv^{3} - 18u^{2}v) ;$$
  
(15) 
$$C = 16v^{6} + 10u^{2}v^{2} - 80uv^{4} - 4u^{3} - 27u^{2} + 108v^{4} - 37u^{2} - 72uv^{2}) + 108v^{4} + 108v^{4}$$

(15) 
$$C = 16v^{6} + 10u^{2}v^{2} - 80uv^{4} - 4u^{3} - 27\psi^{2} + v^{2}(16v^{4} - 27u^{2} - 72uv^{2}) + 108a\delta + 108a(v^{2} - u) - 108avv + 4\delta(4v^{4} - 18uv^{2}) - 4\delta v(4v^{3} - 18uv) - 2v(16v^{5} - 76uv^{3} - 9u^{2}v) - 2\psi(45uv - 4v^{3}) + 54\psi vu ;$$

(16) 
$$D = 104v^3 - 36uv + 108 (vv^2 + \delta v - \delta v) + 54\psi - 2v(108v^2 - 27u);$$

$$(17) \quad E = -27$$
,

dans lesquelles on a posé :

(18a) 
$$\alpha = \frac{1}{P_x \cdot P_y}$$

(18b) 
$$\psi = \frac{S_x + S_y}{P_x \cdot P_y}$$

(18c) 
$$\delta = \frac{S_x \cdot S_y}{P_x \cdot P_y} + \frac{1}{P_x} + \frac{1}{P_y}$$

(18d) 
$$\upsilon = \frac{S_x}{P_x} + \frac{S_y}{P_y}$$

<u>5,3</u> Physiquement, la solution de l'équation 12 doit être unique, car en raison des symétries des équations de départ, une permutation circulaire sur  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  ne change ni l'équation (10), ni  $\sigma_3$ . De plus, (12) traduit en fait la relation (10) élevée à la puissance 4. Il est donc intuitif de penser que (12) est en réalité une équation du premier degré élevée à la puissance 4, donc pouvant s'écrire :

(12 bis) A 
$$(\sigma - \sigma_3)^4 = 0$$

Ce point n'a pu être démontée rigoureusement, en raison de la complexité des coefficients A,B,C,D, mais il a été vérifié sur un grand nombre de cas fictifs, et dans toutes les applications pratiques que nous avons pu faire par la suite. Nous présentons en annexe 4 une série de cas théoriques où, à partir d'un choix de  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  et d'une matrice  $a_{ij}$ , on calcule les coefficients A,B,C,D : on obtient une vérification de l'équation (12) à moins de  $10^{-9}$  près, et l'identification avec le développement de (12bis) est également établie avec une excellente précision, ce qui prouve que dans chacun de ces cas les quatre racines de l'équation (12) sont identiques. Nous admettons donc que la solution de l'équation (12) est :

(19) 
$$\sigma_3 = \frac{-B}{4A} = \sqrt{\frac{C}{6A}} = \sqrt[3]{\frac{-D}{4A}} = \sqrt[4]{\frac{-27}{A}}$$

5,4 Le paramètre  $\sigma_3$  étant connu,  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  peuvent être calculés à l'aide des relations (9), et les constantes diélectriques principales sont les racines de l'équation :

(20)  $\varepsilon^3 - \sigma_1 \varepsilon^2 + \sigma_2 \varepsilon - \sigma_3 = 0$ 

6 - DETERMINATION DES ELEMENTS DE LA MATRICE A

Les carrés a<sup>2</sup><sub>ij</sub> s'obtiennent en fonction des constantes diélectriques principales grâce au même système (7). En se rappelant que la somme des carrés des éléments d'une même ligne vaut 1, et en reprenant une notation déjà utilisée en II,4, les expressions des neuf carrés sont :

- (21a)  $a_{1i}^2 = E_i \left[1 \frac{\varepsilon_i}{P_x} (S_x \varepsilon_i)\right]$
- (21b)  $a_{2i}^2 = E_i \left[1 \frac{\varepsilon_i}{P_y} (S_y \varepsilon_i)\right]$
- (21c)  $a_{3i}^2 = E_i \left[1 \frac{\varepsilon_i}{P_z} (S_z \varepsilon_i)\right]$

avec :

(21d) 
$$E_{i} = \frac{\varepsilon_{j} \varepsilon_{k}}{(\varepsilon_{i} - \varepsilon_{j}) (\varepsilon_{i} - \varepsilon_{k})}$$

dans laquelle j et k ont des valeurs déduites de i par permutation circulaire (par exemple, j=3 et k=1 si i=2).

Pour connaître le signe de chacun de ces coefficients, il faut, en tenant compte des relations (II,2b), choisir arbitrairement le signe de chacun d'eux et recalculer les pentes  $t_x, t_y, t_z$  grâce aux relations du type (II,9a), puis comparer avec les valeurs expérimentales (relation (5c)).

Quelques tests ont cependant montré que de faibles écarts avec les valeurs exactes des constantes diélectriques entrainaient des variations importantes des a<sup>2</sup><sub>ij</sub>. La détermination du signe de ces éléments risque donc d'être délicate, c'est pourquoi nous ne nous étendrons pas sur ce problème, que nous considérons simplement résolu en théorie.

#### 7 - RESUME DE LA METHODE

Lorsqu'un trièdre formé de trois plans réflecteurs normaux deux à deux a été taillé dans le cristal, il faut :

- trouver les coefficients de réflexion normale, en mesurant les facteurs de réflexion normale et les angles de rotation des différents plans de polarisation;
- appliquer les relations (6), (8a) et (8b) pour trouver les termes S/P et 1/P correspondant à chaque face ;
- calculer u et v (relations (9)),  $\alpha$ ,  $\psi$ ,  $\delta$ ,  $\nu$  (relations (18));
- calculer les coefficients A,B,C,D de l'équation du quatrième degré (relations (13) à (17)), que l'on résoud pour trouver  $\sigma_3$  (relation (19));
- en déduire  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  (relations (9));
- former l'équation du troisième degré (20), et la résoudre, ce qui donne  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ .
- appliquer ensuite les relations (21) pour trouver a ...

- 62 -

#### 8 - APPLICATION NUMERIQUE

Le programme Fortran suivant les étapes résumées en 7 (sauf la dernière) se trouve à l'annexe 10 ; nous l'avons employé pour résoudre le cas théorique d'un cristal dont les coefficients de réflexion normale ont déjà été calculés, dans l'annexe 2, à partir de constantes diélectriques principales choisies arbitrairement. Les résultats donnés par ce programme sont présentés à l'annexe 5. La comparaison des annexes 5 et 2 donne immédiatement une idée de la fidélité de la méthode.

Le programme calcule  $\sigma_3$  par les quatre relations (19), puis en fait une moyenne ("valeur moyenne de sigma 3"). Nous constatons que les quatre valeurs obtenues diffèrent de moins de un millième, écart qui peut se justifier par la précision imposée par le calculateur (les variables sont déclarées en complexe simple précision). Nous pouvons dès lors conclure à leur égalité, ce qui confirme l'identification de l'équation (12) avec une équation du premier degré. Dans de nombreux autres cas non rapportés ici, ce résultat remarquable a toujours été retrouvé.

Les constantes diélectriques dont nous sommes partis à l'annexe 2 sont retrouvées avec une précision de l % environ.

9 - ETUDE DES CAS PARTICULIERS DE L'EXISTENCE D'UN PLAN DE SYMETRIE

### 9,1 Introduction

Lorsque l'un des plans réflecteurs du repère (R) contient deux des axes principaux de ( $R_0$ ), nous avons vu (II,14) que les coefficients de réflexion normale ont une expression simple (voir relations (II,33), (II,36), (II,39) ). Si le plan commun aux deux référentiels est un plan de symétrie du cristal, cette disposition particulière de (R) et de ( $R_0$ ) est conservée pour toutes les radiations. Il est donc justifié de développer une méthode qui, en inversant les relations (II,33), (II,36), (II,39), permettra de trouver, pour toute longueur d'onde, les constantes optiques de tous les cristaux possédant un plan de symétrie. Nous verrons d'ailleurs que ce procédé, que nous allons exposer maintenant, a l'avantage sur la méthode générale décrite en 7, de se dispenser des coefficients de réflexion normale, dont la mesure est délicate, ainsi que de l'équation du quatrième degré, ce qui réduit considérablement les calculs.

En conservant les notations du ch. II, paragr. 14, nous appelons xoz le plan de symétrie : les deux référentiels ont alors en commun la direction OY ou Oy.

Nous nous contentons de résumer les étapes à suivre, dont l'établissement ne pose aucun problème :

De (II,34) et (II,38), on tire :

(22a) 
$$\frac{1}{N_z^{"^2}} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_3 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_3) \cos 2\omega}{2 \varepsilon_1 \varepsilon_3} = \left(\frac{1 + r_{zxx}}{1 - r_{zxx}}\right)^2 = A_z$$

(22b) 
$$\frac{1}{N_x^{\prime\prime2}} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_3) \cos 2\omega}{2 \varepsilon_1 \varepsilon_3} = \left(\frac{1 + r_{xzz}}{1 - r_{xzz}}\right)^2 = A_x$$

A<sub>x</sub> et A<sub>z</sub> sont donc connus respectivement grâce aux mesures de R<sub>xzz</sub> et de R<sub>zxx</sub>. On en déduit une première relation entre  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_3$ :

(23)  $A_x + A_z = \frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_3} = C$ 

La somme de (II,33a) et (II,33b) fournit une seconde relation :

(24) 
$$r_{yzz} + r_{yxx} = p_y + q_y = \frac{1 - N_1}{1 + N_1} + \frac{1 - N_3}{1 + N_3} = D$$

C et D sont deux grandeurs connues grâce aux mesures ; de (21) et (22), on peut tirer  $N_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$  et  $N_3 = \sqrt{\varepsilon_3}$  par la chaîne d'opérations suivantes :
(25) (a) 
$$\alpha = \frac{2+D}{2-D}$$
, (b)  $\beta = \frac{D}{2-D}$ , (c)  $\delta = \sqrt{\beta^2 + 2\alpha + C}$ 

(26) (a) 
$$S = \alpha + \delta$$
, (b)  $P = \alpha + \beta S$ , (c)  $\Delta = \sqrt{S^2 - 4P}$ 

(27) (a) 
$$X_1 = \frac{1}{2}$$
 (S- $\Delta$ ) (b)  $X_3 = \frac{1}{2}$  (S+ $\Delta$ )

(28) (a) 
$$N_1 = \frac{1}{X_1}$$
 (b)  $N_3 = \frac{1}{X_3}$ 

9,3 Calcul de 
$$N_2$$
 et de l'angle w

L'indice N<sub>2</sub> s'obtient grâce à R<sub>xyy</sub> ou R<sub>zyy</sub> ( (II,36b), (II,39b) )

(29) 
$$N_2 = \frac{1 - r_{xyy}}{1 + r_{xyy}}$$

Enfin, de (23a) et (23b), on tire :

(30) 
$$\cos 2 \omega = \frac{A_x - A_z}{x_3^2 - x_1^2}$$

### 9,4 Remarques

9,4,1 Nous avons calculé cos 2  $\omega$ , donc nous ne déterminons en fait que  $|\omega|$ : nous retrouvons ici l'inconvénient déjà rencontré dans la méthode générale (voir en 6); celle-ci ne permet de calculer que  $a_{ij}^2$ , donc  $|a_{ij}|$ ; pour trouver le signe de  $a_{ij}$ , il faut se servir du paramètre t connu grâce au coefficient de réflexion croisé. Il en est naturellement de même pour ce cas particulier : ne pas connaître le signe de  $\omega$  revient à déterminer la valeur absolue des éléments de la matrice A écrite en (II,29). Cependant, pour connaître ce signe, il n'est point besoin de connaître la valeur numé-

rique du coefficient croisé r<sub>yzx</sub> : seul son signe nous intéresse ; en effet, la relation (II,33c) nous montre que  $\omega$  et r<sub>yzx</sub> sont de même signe (rappelons que l'on a choisi  $|p_y| > |q_y|$ ). Ainsi, il suffit d'observer la rotation du plan de polarisation de la lumière réfléchie sur la face xoz, lorsque le champ électrique incident est parallèle à Oz : si l'angle  $\gamma_{yz}$  défini par tg  $\gamma_{yz} = r_{yzx} / r_{yzz}$  est négatif, c'est que  $r_{yzx}$ , donc  $\omega$ , est positif, et vice-versa.

<u>9,4,2</u> L'application de cette méthode nous a posé pendant longtemps un problème que nous allons évoquer ici. Si l'on met de côté le calcul de  $\varepsilon_2$ , qui ne soulève pas de difficulté, nous avons utilisé quatre coefficients de réflexion :  $r_{yzz}$ ,  $r_{yxx}$ ,  $r_{xzz}$ ,  $r_{zxx}$ , pour trouver trois grandeurs :  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_3$ ,  $\omega$ . Si l'on se reporte aux relations (22) à (28), on s'aperçoit qu'en réalité, trois grandeurs expérimentales seulement sont nécessaires :  $r_{xzz}$ ,  $r_{zxx}$ , et D =  $r_{yzz}$  +  $r_{yxx}$ . Le calcul inverse des coefficients de réflexion normale à partir des constantes optiques et de  $\omega$  doit redonner exactement  $r_{xzz}$ ,  $r_{zxx}$  et D, mais non nécessairement  $r_{yzz}$  et  $r_{yxx}$ . Ceci vient du fait que l'on a utilisé la somme et la différence des relations (22), mais uni-quement la somme des relations (II,33).

Il existe une autre possibilité de calculer cos 2  $\omega$ , précisément en faisant la différence des équations (II,33). Il vient :

(31) 
$$\cos 2 \omega = \frac{r_{yxx} - r_{yzz}}{p_y - q_y}$$

Si l'on utilise cette valeur de  $\omega$  pour recalculer les coefficients de réflexion, on doit retrouver exactement r<sub>yxx</sub>, r<sub>yzz</sub> et le paramètre C, mais non plus nécessairement r<sub>xzz</sub> et r<sub>zxx</sub>.

Il y a donc une grandeur expérimentale en surnombre : les quatre coefficients de réflexion ne sont pas indépendants, il existe entre eux une relation que l'on peut trouver en égalant les expressions (30) et (31) de cos 2  $\omega$ . Nous obtenons :

- 66 -

$$\frac{2(A_{x} - A_{z})}{R_{yzz} - R_{yxx}} = S(S+P+1),$$

S et P étant liés aux coefficients de réflexion par les relations (22) à (26). Dans une étude expérimentale d'un cristal inconnu, la comparaison des deux valeurs obtenues pour cos 2  $\omega$  peut servir de test renseignant sur la précision des mesures. Nous retrouverons ce point au chapitre V.

#### 9,5 Application numérique

Nous avons appliqué cette nouvelle méthode pour trouver les constantes diélectriques de l'échantillon étudié dans l'annexe 3. Le résultat se trouve dans l'annexe 6, et le programme Fortran utilisé, dans l'annexe 11. Cette détermination a été faite de deux manières :

- a) en appliquant les relations (20) à (28), méthode valable s'il y a un plan de symétrie, les données étant les coefficients de réflexion normale calculés dans l'annexe 3;
- b) à l'aide du programme de l'annexe 10, méthode générale valable dans tous les cas ; nous avons dû alors utiliser le facteur de réflexion croisé r<sub>yzx</sub>, et remplacer par des zéros les facteurs nuls r<sub>xyz</sub> et r<sub>zxy</sub>.

La comparaison des résultats obtenus montre bien la convergence et la fidélité des deux méthodes: les constantes diélectriques initiales sont retrouvées avec une précision de 1/ 1000 environ.

- 67 -

## CHAPITRE - IV -

# ETUDE DES MILIEUX ANISOTROPES ABSORBANTS

#### 1 - INTRODUCTION

Les résultats établis dans les chapitres II et III traduisent les propriétés d'un milieu anisotrope lorsque la longueur d'onde du rayonnement incident est très éloignée d'une bande d'absorption de ce milieu.

Lorsqu'on a affaire à un échantillon absorbant mais isotrope, les traités classiques (BRUHAT [66], BORN,WOLF [67]) disent que les relations établies en le supposant parfaitement transparent, sont encore valables s'il est absorbant, à condition d'y remplacer toutes les grandeurs réelles par des grandeurs homologues complexes. Cette transposition a été énoncée sous le nom de "principe d'extension" par BEREK [68]. Le but de ce chapitre est de montrer que ce principe peut encore être appliqué lorsque le milieu étudié est anisotrope.

Les travaux traitant des cristaux anisotropes absorbants sont peu nombreux. Récitons DAMANY [55] et MOSTELLER, WOOTEN [54], qui ont employé sans démonstration le principe d'extension pour trouver les facteurs de réflexion d'un cristal uniaxe en incidence oblique ; STEPHAN et al. [69], BILLARD et al. [19] proposent une vérification de ce principe, également pour un uniaxe ; RATH, POHL [70] donnent les formes théoriques (établies par ordinateur) que doit posséder la surface des indices selon le degré d'absorption du milieu.

L'application du principe de Berek aux milieux anisotropes pose un problème que peu de gens nous semble-t-il ont abordé : dans le cas d'un cristal transparent, toutes les relations nécessitant le choix d'un référentiel ( équation de la surface des indices, de l'ellipsoïde des indices, etc... ) sont écrites dans la base où le tenseur symétrique  $\vec{\epsilon}$  a une forme diagonale. Lorsque le cristal est absorbant, le tenseur  $\vec{\epsilon}$  devient complexe d'après le principe d'extension ; les parties réelle et imaginaire de ce tenseur peuvent être supposées symétriques, donc chacune d'elles possède un système d'axes orthogonaux dans lequel elle est diagonale. Si la maille du cristal possède peu d'éléments de symétrie, il n'y a aucune raison a priori pour que ces

- 68 -

deux repères soient confondus : la transposition brutale d'une équation telle que celle de l'ellipsoïde des indices par exemple, n'a aucune signification tant que l'on n'a pas défini ce que l'on entend par "axes principaux de  $\vec{\epsilon}$ ".

Si le cristal est uniaxe ou orthorhombique, les deux repères cités ci-dessus coïncident et l'objection que nous venons de faire est sans objet. C'est dans ce cas que se sont placés STEPHAN [69], BILLARD [19], BORN et WOLF [71]. Nous nous proposons d'étudier en détail le passage des grandeurs réelles aux grandeurs complexes, ainsi que la signification physique de ces dernières, dans le cas plus général où les deux repères ne coïncident plus (systèmes monoclinique et triclinique).

2 - LES EQUATIONS DU MILIEU ABSORBANT

2,1 Equations de Maxwell

Elles s'écrivent :

- (1a)  $\overrightarrow{Rot} H = \frac{\overrightarrow{\partial D}}{\partial t} + \overrightarrow{1}$
- (1b)  $\overrightarrow{Rot} E = \frac{\overrightarrow{\partial B}}{\partial t}$

 $\vec{D}$ ,  $\vec{H}$ ,  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$  ont une signification identique à celle donnée aux chapitres précédents :  $\vec{D}$  et  $\vec{E}$  sont encore liés par la relation :

(1c)  $\vec{D} = \vec{\epsilon} \vec{E}$ ,

où  $\vec{\epsilon}$  est un tenseur symétrique à coefficients réels. Nous écrirons encore  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ , ce qui restreint notre étude aux milieux dépourvus de propriétés magnétiques (le tenseur perméabilité  $\vec{\mu}$  du milieu se réduit à la perméabilité magnétique du vide ).

Le caractère absorbant du milieu se traduit par l'apparition d'un courant i qui tient compte des deux phénomènes physiques provoquant l'absorption de l'énergie électromagnétique par le cristal :

- le déplacement des électrons libres sous l'action du champ électrique régnant dans le cristal (absorption métallique) ;
- les vibrations forcées des électrons liés sous l'action de ce même champ (absorption sélective).

Nous pouvons donc écrire :

(2) 
$$\vec{1} = \vec{1}_{g} + \vec{1}_{s}$$

où  $\vec{i}_{l}$  est le courant résultant du déplacement des électrons libres, et  $\vec{i}_{s}$  celui qui est dû aux électrons vibrants.

#### Remarque :

I a en réalité les dimensions d'une densité de courant ; nous continuerons néanmoins à l'appeler "courant", pour la commodité d'expression.

2,2 Expression du courant i en fonction du champ électrique

- 2,2,1 Expression de  $\vec{i}_{e}$  et relations donnant  $\vec{i}_{s}$
- 2, 2, 1, 1 Expression de  $\vec{i}_{g}$

Le courant  $\vec{i}_{g}$  est proportionnel à  $\vec{E}$  :

(3)  $\vec{1}_{\ell} = \vec{\sigma} \vec{E}$ 

La constante de proportionnalité est le tenseur de conductivité  $\vec{\sigma}$ . Nous admettrons avec MOSTELLER [54] qu'il est symétrique (voir aussi LANDAU, LIFCHITZ, [72]). Ses directions principales ne coïncident pas, en général, avec celles de  $\vec{\epsilon}$ , sauf pour les cristaux ayant au moins autant d'éléments de symétrie que les cristaux orthorhombiques (BORN, [72]).

### 2,2,1,2 Equation donnant $\vec{l}_s$

 $\vec{i}_s$  est un courant de vibration. Si nous considérons un type de vibration dans lequel le déplacement des charges vaut  $\vec{s}$ , et si nous appelons  $\rho_c$  la densité de ces charges, nous pouvons écrire :

(4) 
$$\vec{i}_s = \rho_s \vec{s}$$

où s' désigne la vitesse instantanée du déplacement.

Dans un milieu isotrope,  $\vec{s}$  est donné par une équation différentielle du second ordre, à coefficients constants (BRUHAT, [66] p.368) :

(5a) 
$$\vec{ms} + \vec{rs} + \vec{ks} = q \vec{E}$$

où m et q sont les masse et charge de la particule vibrante, k la constante de rappel et r un coefficient d'amortissement.

Nous admettrons que dans un milieu anisotrope,  $\vec{s}$  est donné par une relation identique, dans laquelle m, r, k ont un caractère tensoriel :

(5b) 
$$\overrightarrow{x}$$
  $\overrightarrow{x}$   $\overrightarrow{$ 

Nous ne nous intéresserons pas à la signification physique de ces trois tenseurs. Nous admettrons qu'ils sont eux aussi symétriques.

#### Remarque :

Il peut y avoir plusieurs types de vibrations. Dans ce cas,  $\frac{1}{s}$  est la somme vectorielle des courants produits par chaque type de particule vibrante. Tous les raisonnements de ce chapitre sont faits avec un courant  $\frac{1}{s}$  engendré par une seule vibration.

#### 2,2,2 Expression de $\vec{s}$

Avec la notation condensée d'Einstein, la relation (5b) s'écrit :

(5b bis) 
$$q E_i = m_{ik} \dot{s}_k + r_{ik} \dot{s}_k + k_{ik} s_k$$
,

i et k pouvant prendre, indépendamment l'un de l'autre, trois valeurs correspondant aux trois axes de coordonnées. La relation (5b bis) est donc un système de trois équations donnant les composantes  $s_k$  du vecteur déplacement  $\vec{s}$ . Posons :  $s_k = s_k^o \cos (\omega t - \varphi_k)$ , vibration forcée en réponse au champ électrique monochromatique de composantes  $E_k = E_k^o \cos \omega t$ . Les coefficients des trois relations (5b bis) étant tous réels, on peut résoudre ce système en appliquant la méthode des variables complexes. Nous écrirons donc :

$$(6 a_1) \qquad s_k = R_e. (\tilde{\Delta}_k) \qquad (6 a_2) E_k = R_e. (\tilde{E}_k)$$

avec :

 $(6 b_1) \qquad \overset{\sim}{\Delta}_k = s_k^o \exp \left[j(\omega t - \varphi_k)\right] , \qquad (6 b_2) \qquad \overset{\sim}{E}_k = E_k^o \exp \left[j(\omega t)\right]$ 

s<sub>k</sub> et  $E_k$  sont les parties réelles de deux grandeurs complexes fictives  $\hat{s}_k$  et  $\hat{E}_k$ . Nous signalerons toujours, par la suite, le caractère complexe d'une grandeur (vectorielle ou scalaire) par le signe  $\gamma$ , et par  $\sim$  si cette grandeur complexe est une fonction sinusoïdale du temps.

Nous en déduisosns :

$$\hat{s}_{k} = j \omega \hat{s}_{k}$$
,  $\hat{s}_{k} = -\omega^{2} \hat{s}_{k}$ 

Soit, en reportant dans la relation ( 5b bis ) :

(7) 
$$q \tilde{E}_{i} = (-\omega^{2}m_{ik} + j\omega r_{ik} + k_{ik})\tilde{s}_{k}$$

(7 bis)  $q \stackrel{\sim}{E}_{i} = z_{ik} \stackrel{\sim}{s}_{k}$ ,

dans laquelle z<sub>ik</sub> est un tenseur complexe dont les parties réelle et imaginaire sont symétriques.

En appelant  $\hat{\gamma}$  le tenseur inverse de  $\hat{z}$ , on obtient finalement :

(8) 
$$\tilde{s}_{k} = \gamma_{k\ell} \tilde{E}_{\ell}$$

ou encore :

(8bis) 
$$\overrightarrow{s} = \overrightarrow{\gamma} \overrightarrow{E}$$

Cette expression de  $\vec{s}$  montre que les vibrations forcées ne se font pas dans la direction du champ électrique excitateur, puisque la constante de proportionnalité liant  $\vec{s}$  et  $\vec{E}$  a un caractère tensoriel. Nous ne chercherons pas l'expression de  $\gamma$  en fonction des trois tenseurs définis par les relations (5b) ou (7). Nous admettons que  $\gamma$  est symétrique, et nous considérons  $\vec{s}$  comme défini, formellement, par les relations (8).

Le déplacement effectivement subi par un électron est donc, d'après la relation (6  $a_1$ ) :

$$s_k = R_e.(\hat{\gamma_{kl}} \tilde{E}_l)$$

### 2,2,3 Expression du courant is

D'après la relation (4),  $\dot{i}_{s}$  est un vecteur de composantes :

$$i_{sk} = \rho_s \dot{s}_k = R_e \cdot (\rho_s \dot{s}_k)$$

Comme  $\dot{s}_k^{\nu}$  vaut j  $\omega \overset{\nu}{s}_k$ , on peut écrire :

$$i_{sk} = R_e.(j \omega \rho_s s_k^{\circ}),$$

soit encore :

(9a) 
$$\overrightarrow{i}_{s} = R_{e} \cdot (j \omega \rho_{s} \overset{\rightarrow}{s}) = R_{e} \cdot (\overset{\rightarrow}{i}_{s})$$

en ayant posé :

(9b) 
$$\dot{\gamma}_{s} = j \omega \rho_{s} \dot{\gamma}_{s}$$

On introduit ici un vecteur appelé "courant complexe de déplacement", qui vaut :

- 73 -

(9c) 
$$\vec{i}_{s} = j \omega \rho_{s} \hat{\gamma} \vec{E} = \rho_{s} \hat{\gamma} \vec{E}$$

 $\vec{i}_s$  est fictif ; seule sa partie réelle  $i_s$  a un sens physique.

### 2,2,4 Expression du courant i

Lorsqu'une grandeur vectorielle complexe s'écrit :

$$\vec{A} = \vec{A} \exp [j(\omega t - \varphi)] = \vec{A} + j \vec{A}''$$

on montre sans peine que les parties réelle et imaginaire de À vérifient les relations (voir LEFEVERE-MONTEL [73]) :

(10a) 
$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{A} = -\omega \vec{A}''$$
, et (10b)  $\frac{\partial \vec{A}''}{\partial t} = \vec{A}'' = +\omega \vec{A}$ 

ainsi, si nous posons :

(11a)  $\vec{E} = \vec{E} + j\vec{E}''$  et (11b)  $\vec{\hat{\gamma}} = \vec{\hat{\gamma}} - j\vec{\hat{\gamma}}''$ ,

la relation (9c) devient :

$$\vec{\hat{\gamma}}_{s} = \rho_{s} \left( \vec{\hat{\gamma}} - j \vec{\hat{\gamma}}'' \right) \left( \vec{\hat{E}} + j \vec{\hat{E}}'' \right) ,$$

dont nous tirons, d'après (9a) :

$$\vec{r}_{s} = \rho_{s} \left( \vec{\gamma} \cdot \vec{E} + \vec{\gamma}'' \cdot \vec{E}'' \right)$$

ou encore :

(12) 
$$\vec{i}_{s} = \rho_{s} \left( \vec{\gamma} \cdot \vec{E} + \omega \cdot \vec{\gamma}'' \cdot \vec{E} \right)$$

Les relations (2), (3) et (12) donnent finalement le courant  $\vec{1}$ :

(13) 
$$\vec{1} = (\omega \rho_s \vec{\gamma}'' + \vec{\sigma}) \vec{E} + \rho_s \vec{\gamma} \vec{E}$$

#### 2,3 Equations complexes de Maxwell

2,3,1 Nous allons montrer maintenant que l'équation (1a), qui contient le courant i , donc qui tient compte de l'absorption de la matière, peut se mettre sous la même forme que l'équation correspondant aux milieux transparents.

En effet, la relation (lc) nous donne :

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{D} = \vec{\varepsilon} \vec{E}$$

Donc, compte tenu de l'expression (13), l'équation (1a) devient :

(14) 
$$\overrightarrow{Rot H} = (\overrightarrow{\sigma} + \omega \rho_s \overrightarrow{\gamma}'') \overrightarrow{E} + (\overrightarrow{\epsilon} + \rho_s \overrightarrow{\gamma}) \overrightarrow{E}$$

En utilisant la partie imaginaire  $\vec{E''}$  de la définition (lla), et en appliquant la propriété (lOa), la relation (l4) s'écrit :

$$\overrightarrow{Rot} \overrightarrow{H} = -\omega \left[ \left( \overrightarrow{\vec{e}} + \rho_{s} \overrightarrow{\vec{\gamma}} \right) \overrightarrow{\vec{E}}'' - \left( \overrightarrow{\vec{\sigma}} + \rho_{s} \overrightarrow{\vec{\gamma}}'' \right) \overrightarrow{\vec{E}} \right]$$

$$Rot H = -\omega \left[ \overrightarrow{\vec{e}'} \overrightarrow{\vec{E}''} - \overrightarrow{\vec{e}''} \overrightarrow{\vec{E}'} \right],$$

avec :

(

(16a) 
$$\vec{\epsilon}' = \vec{\epsilon} + \rho_{s} \vec{\gamma}$$
, (16b)  $\vec{\epsilon}'' = \vec{\sigma}_{\omega} + \rho_{s} \vec{\gamma}''$ 

2,3,2 Introduisons maintenant un "tenseur de permittivité complexe",  $\vec{\epsilon}$ , défini par la relation :

(17) 
$$\hat{\epsilon} = \vec{\epsilon}' - j\vec{\epsilon}''$$

Introduisons aussi un "vecteur d'induction complexe", D, défini à partir de É par la relation :

(18) 
$$\vec{\tilde{D}} = \hat{\epsilon} = \vec{\tilde{D}} + j \vec{\tilde{D}}''$$

La relation (15) devient :

(15 bis)  $\overrightarrow{Rot} \overrightarrow{H} = -\omega \overrightarrow{D}'' = \overrightarrow{D}$ ,

après avoir appliqué à  $\vec{D}$ " la propriété (10a).

On voit donc que (15 bis) peut être considérée comme la partie réelle de l'équation complexe :

(19) 
$$\operatorname{Rot} \overset{\rightarrow}{H} = \overset{\rightarrow}{D}$$
,

avec :

(19 bis) 
$$\vec{H} = \vec{H} + j \vec{H}''$$

En effet, la linéarité des dérivées par rapport au temps et aux coordonnées permet d'écrire :

Rot  $\vec{H}$  = Rot  $\vec{H}$  + j Rot  $\vec{H}$ "  $\vec{\nabla}$   $\vec{D}$  =  $\vec{D}$  + j  $\vec{D}$ "

2,3,3 Conclusion

En définitive, l'équation (1a), qui tient compte de l'absorption, est équivalente, compte-tenu de (17) et (18), à l'équation (19), qui est formellement identique à celle qui correspond aux milieux transparents, mais avec des grandeurs vectorielles et tensorielles complexes. Le raisonnement établi ci-dessus montre que, pour des ondes monochromatiques, à chaque équation de Maxwell à termes réels peut être associée une équation équivalente à termes complexes, qui rend compte du phénomène d'absorption (exemple : (1c) donne (18)).

Le problème d'un milieu absorbant se résoud donc, formellement, de la même façon que lorsque le corps est transparent. Cependant, les vecteurs complexes introduits ( $\vec{H}$ ,  $\vec{D}$ ,  $\vec{E}$ ) sont des grandeurs abstraites, fictives. Le passage de (15 bis) à (19) montre que seule la partie réelle de ces vecteurs a une signification physique, et représente la propriété qui règne effectivement dans le cristal.

C'est l'étude de ces vecteurs complexes, puis celle de leur partie réelle, que nous allons entreprendre dans les paragraphes suivants .

#### 3 - SOLUTION DES EQUATIONS DE MAXWELL

#### 3,1 Expression générale et propriétés des solutions

#### 3,1,1 Expression générale

Dans le chapitre II, nous avons écrit directement les vecteurs caractéristiques du milieu transparent sous forme de fonctions sinusoïdales (voir relations (II, 17) ). Puisque les équations du milieu absorbant sont formellement identiques, leurs solutions le seront aussi, mais avec des termes complexes (CAYE et al., [19]). Nous notons donc, par analogue avec les corps transparents, ces solutions sous la forme générale :

(20) 
$$\vec{F} = \vec{F} \Psi = \vec{F} \exp \{ j [(\omega t - \vec{K} R) + \hat{\varphi}] \},$$

dans laquelle  $\hat{F}$  est une "amplitude vectorielle complexe", indépendante du temps et des coordonnées, par analogie avec la "solution transparente".  $\vec{K}$  est un vecteur d'onde complexe, et  $\hat{\varphi}$  un déphasage complexe indépendant de t, x, y, z ;  $\vec{R}$  est le vecteur réel de position (voir LEFEVERE-MONTEL, [73]).  $\vec{F}$ ,  $\vec{K}$  et  $\hat{\varphi}$ , obtenus d'équations à termes complexes, sont nécessairement complexes. Rappelons que le symbole  $\sim$  désigne une grandeur complexe qui varie sinusoïdalement avec le temps et les coordonnées, tandis que  $^{\circ}$  désigne une grandeur qui ne dépend pas de ces variables. C'est la partie réelle de ces grandeurs qui a un sens physique.

#### 3,1,2 Propriétés

On établit sans peine les propriétés suivantes vérifiées par F :

div  $\vec{F} = [\operatorname{div} \vec{F} - j(\vec{K} \cdot \vec{F})] \Psi$ Rot  $\vec{F} = [Rot \hat{F} - j (\hat{K}_{\Lambda} \hat{F})] \Psi$ Soit, puisque nous avons supposé F constant : div  $\overrightarrow{F} = -j \overrightarrow{k} \overrightarrow{F}$ (21a) Rot  $\vec{F} = -j (\vec{k}_{\Lambda} \vec{F})$ (21b) On en tire :  $\overrightarrow{\text{Rot}} (\text{Rot} \overrightarrow{F}) = -j [\overrightarrow{\hat{k}}_{\Lambda} (\text{Rot} \overrightarrow{F})] = -\overrightarrow{\hat{k}}_{\Lambda} (\overrightarrow{\hat{k}}_{\Lambda} \overrightarrow{F})$ (21c) De même, en dérivant par rapport au temps : (22 a)  $\vec{F} = j \omega \vec{F}$  et (22 b)  $\vec{F} = -\omega^2 \vec{F}$ Relation vérifiée par le champ électrique complexe du cristal 3,2,1 Les relations de Maxwell du milieu absorbant sont donc : (23 a)  $\overrightarrow{D} = \widehat{\varepsilon} \overrightarrow{E}$ (23 b)  $\overrightarrow{B} = \mu_0 \overrightarrow{H}$ (23 d) Rot  $\overrightarrow{E} = -\overrightarrow{B}$  $\overrightarrow{\text{Rot}} \stackrel{\rightarrow}{H} = \overset{\rightarrow}{D}$ (23 c)

En appliquant aux rotationnels de H et E la propriété (21 b), et aux dérivées  $\hat{D}$  et  $\hat{H}$  la propriété (22 a), les relations (23 c) et (23 d) deviennent respectivement :

 $\vec{k}_{\Lambda} \vec{H} = -\omega \hat{\epsilon} \hat{E}$ (24 a)  $\vec{\chi} \quad \vec{\chi} \quad \vec{E} = + \mu_0 \quad \omega \quad \vec{H}$ (24 b)

3,2

- 78 -

dont on tire :

(24 c) 
$$\omega^2 \mu_0 \stackrel{\stackrel{\rightarrow}{\epsilon} \stackrel{\rightarrow}{\vec{E}} = - \stackrel{\rightarrow}{\vec{k}} \Lambda (\stackrel{\rightarrow}{\vec{k}} \stackrel{\rightarrow}{\vec{E}})$$

Posons :  $\hat{\epsilon} = \epsilon_0 \hat{\epsilon}_r$ ;  $\hat{\epsilon}_r$  est le tenseur de permittivité relative complexe. En reportant dans (24 c), on fait apparaître le produit  $\epsilon_0 \mu_0$ qui vaut 1/C<sup>2</sup>, soit :

(24 c bis) 
$$\frac{\omega^2}{c_r^2} \stackrel{\overrightarrow{\epsilon}}{\hat{\epsilon}}_r \stackrel{\overrightarrow{k}}{E} = - \stackrel{\overrightarrow{k}}{\hat{k}}_{\Lambda} (\stackrel{\overrightarrow{k}}{\hat{k}}_{\Lambda} \stackrel{\overrightarrow{k}}{E})$$

Nous pouvons donner à cette dernière relation une forme plus simple, en posant :

(25) 
$$\vec{K} = \frac{\vec{X}}{C}$$

où Ñ est l'indice de réfraction vectoriel complexe [73, 74].

Si de plus on simplifie par la fonction du temps ¥, présente dans les deux membres, la relation vérifiée par le champ électrique du cristal s'écrit finalement :

(26) 
$$\vec{\hat{\epsilon}}_{\mathbf{r}} \cdot \vec{\hat{\mathbf{E}}} = - \cdot \vec{\hat{\mathbf{N}}}_{\Lambda} \cdot (\vec{\hat{\mathbf{N}}}_{\Lambda} \cdot \vec{\hat{\mathbf{E}}})$$

La relation (26) a déjà été établie par BORN et WOLF ([71] p.706) pour un milieu anisotrope absorbant dont les tenseurs de permittivité diélectrique  $\vec{\epsilon}$  et de conductivité  $\vec{\delta}$  ont mêmes axes principaux (cristaux au moins orthorhombiques). Elle est l'analogue d'une relation à termes réels, déduite des équations de Maxwell comme nous venons de le faire ([51] p. 665, [64] p. 411), et qui, lorsqu'on y introduit les vecteurs unitaires de  $\vec{E}$  et de  $\vec{N}$ , devient l'équation de la surface des indices écrite dans le

- 79 -

repère orthonormé formé par les trois axes principaux de  $\vec{\epsilon}$  ([52]p.400, [64] p. 412). Pour que ce calcul puisse être fait si le cristal est absorbant, nous devons d'abord préciser ce que devient la notion de vecteur unitaire dans le cas de vecteurs complexes, puis ce que nous entendons par axes principaux de  $\vec{\epsilon}$  lorsque les parties réelle et imaginaire de ce tenseur sont diagonales dans deux bases différentes.

#### 3,3,1 Définition et propriétés d'un vecteur complexe unitaire

Nous dirons qu'un vecteur complexe f est "unitaire au sens complexe" s'il satisfait à la relation :

(27) 
$$\overrightarrow{f}$$
  $\overrightarrow{f}$  = 1

Nous désignerons toujours un tel vecteur par une lettre minuscule. Si  $\hat{f}$  se note  $\vec{f} = \vec{f} + j \vec{f}$ ,  $\vec{f}$  et  $\vec{f}$ " étant deux vecteurs réels, la définition de  $\vec{f}$  entraîne :

(28a)  $f^2 - f^{*2} = 1$ 

(28b)  $f_{.}f'' = 0$ 

La première relation montre que les parties réelle et imaginaire de f ne sont ni l'une ni l'autre des vecteurs unitaires ; la seconde montre que ces deux parties sont orthogonales.

#### 3,3,2 Vecteur complexe quelconque

 $\vec{F} = \vec{F} \cdot \vec{f}$ ,

Un vecteur complexe quelconque  $\hat{F}$  s'écrit alors :

(29)

- 80 -

- 81 -

où  $\vec{F}$  est une "amplitude scalaire complexe". Si  $\vec{F}$  et  $\hat{F}$  se notent respectivement  $\vec{F} = \vec{F} + j \vec{F}$ " et  $\hat{F} = F + j F$ ",  $\vec{F}$ ,  $\vec{F}$ ", F et F" étant des grandeurs réelles, la notation (29) est équivalente à :

(30a) 
$$\mathbf{F} \, \hat{\mathbf{f}} - \mathbf{F}'' \, \hat{\mathbf{f}}'' = \hat{\mathbf{f}}$$

(30b) 
$$\mathbf{P}'' \, \vec{f} + \mathbf{F} \, \vec{f}'' = \vec{F}''$$

Les relations (28) et (30) forment un système de quatre équations dont les inconnues sont  $\vec{f}$ ,  $\vec{f}''$ , F, F''. Nous ne discuterons pas ici l'existence d'une solution, mais nous pouvons affirmer que lorsqu'elle existe, elle est unique. Autrement dit, lorsqu'un vecteur complexe  $\vec{F}$  est donné par ses parties réelle et imaginaire  $\vec{F}$  et  $\vec{F}''$ , il n'y a qu'une seule façon de le représenter à l'aide d'un vecteur unitaire complexe, selon la formule (29).

#### 3,4 Autre écriture de la relation (26)

Il nous paraît donc justifié de recopier la relation (26) en faisant intervenir des vecteurs unitaires complexes. Nous posons donc :

(31a)  $\vec{\hat{N}} = \hat{N} \vec{\hat{p}}$  et (31b)  $\vec{\hat{E}} = \hat{E} \vec{\hat{e}}$ 

où  $\hat{\hat{e}}$  et  $\hat{\hat{p}}$  satisfont à la définition (27).

On obtient sans peine :

(32)  $\vec{\hat{\epsilon}}_r \vec{\hat{e}} = \hat{N}^2 [\vec{\hat{e}} - (\vec{\hat{p}} \vec{\hat{e}}) \vec{\hat{p}}]$ 

#### 4 - SURFACE DES INDICES DANS LE CAS D'UN MILIEU ABSORBANT

A l'aide des grandeurs complexes, sous réserve qu'elles satisfont aux définitions et propriétés que nous avons données, nous avons obtenu une relation qui est formellement identique à celle qui relie les grandeurs réelles correspondantes du milieu transparent ([51] p. 665). Dans la théorie classique des cristaux transparents, l'étape suivante est l'obtention de l'équation de la surface des indices, écrite dans un référentiel dont les axes sont les directions principales du tenseur  $\vec{\epsilon}$ . Avant de poursuivre notre analogie, dans le but d'obtenir la même équation en termes complexes, nous devons d'abord étudier les propriétés d'une base de vecteurs complexes, et les modalités de passage d'une base réelle à une base complexe.

#### 4,1 Changement de base

#### 4,1,1 Définition

Nous définissons une base de vecteurs complexes par le processus suivant :

$$(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}) \longrightarrow (\vec{\hat{u}}, \vec{\hat{v}}, \vec{\hat{w}}),$$

où ( $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$ ,  $\vec{k}$ ) est une base réelle orthonormée, tandis que  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$  et  $\vec{w}$  sont trois vecteurs unitaires au sens complexe défini en (27). Nous notons, comme d'habitude :

 $\hat{\vec{u}} = \vec{u} + j \vec{u}'' , \quad \hat{\vec{v}} = \vec{v} + j \vec{v}'' , \quad \hat{\vec{w}} = \vec{w} + j \vec{w}''$ 

Le passage d'une base à l'autre se fait à l'aide d'une matrice carrée  $\hat{A}$  dont les éléments sont complexes :

avec :

$$(33a) \qquad \hat{a_{ik}} = a_{ik} + j a_{ik}''$$

où encore :

 $(33b) \qquad \hat{A} = A + j A''$ 

Si nous exprimons û par exemple, nous obtenons :

 $\vec{\hat{u}} = \vec{a_{11}} \vec{\hat{i}} + \vec{a_{12}} \vec{\hat{j}} + \vec{a_{13}} \vec{\hat{k}} = \vec{\hat{u}} + \vec{\hat{j}} \vec{\hat{u}}$ 

soit :

 $\vec{u}'' = a_{11}'' + a_{12}'' + a_{13}'' + a_{13}'' + a_{13}''$ 

 $\vec{u} = a_{11}\vec{i} + a_{12}\vec{j} + a_{13}\vec{k}$ 

Ainsi, la partie réelle A de fait passer de la base ( $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ ) à la base ( $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ ), et la partie imaginaire A", de la base ( $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ ) à la base ( $\vec{u}$ ",  $\vec{v}$ ",  $\vec{w}$ ").

#### 4,1,2 Orthonormalisation de la base complexe

Nous disons que la nouvelle base est "orthonormée au sens complexe", si les relations suivantes sont vérifiées :

- (34b)  $\dot{\hat{u}}.\hat{\hat{v}} = \dot{\hat{v}}.\hat{\hat{w}} = \dot{\hat{u}}.\hat{\hat{w}} = 0$

D'après (27), le premier groupe donne par exemple pour  $\hat{u}$ :

(35a)  $u^2 - u''^2 = 1$  et (35b)  $\vec{u} \cdot \vec{u}'' = 0$ 

Le deuxième groupe donne, par exemple pour le produit  $\vec{\hat{u}} \cdot \vec{\hat{v}}$  :

(36a)  $\overrightarrow{u}.\overrightarrow{v}-\overrightarrow{u}''.\overrightarrow{v}''=0$  et (36b)  $\overrightarrow{u}.\overrightarrow{v}''+\overrightarrow{u}''.\overrightarrow{v}=0$ 

En remplaçant  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$ ,  $\vec{u}''$ ,  $\vec{v}'''$  par leur expression en fonction de  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$ ,  $\vec{k}$ , nous obtenons pour le produit  $\hat{\vec{u}} \cdot \hat{\vec{u}}$ :

$$(a_{11}^{2} + a_{21}^{2} + a_{31}^{2}) - (a_{11}^{12} + a_{11}^{12} + a_{31}^{12}) = 1$$
  
et:  
$$a_{11}^{2} + a_{31}^{11} + a_{31}^{2} + a_{31}^{11} = 0$$
  
$$a_{11}^{2} + a_{11}^{2} + a_{31}^{2} = 0$$

que l'on peut rassembler en une seule relation :

(37)  $a_{11}^2 + a_{21}^2 + a_{31}^2 = 1$ 

- 83 -

De même, le développement du produit û.v donne :

(38) 
$$\hat{a_1 a_1} + \hat{a_2 a_2} + \hat{a_3 a_2} = 0$$

Des relations analogues à (37) et (38) peuvent être obtenues en considérant les autres produits scalaires complexes. La matrice  $\widehat{A}$  qui satisfait à ces relations est dite "orthogonale au sens complexe".

#### Remarque :

Les bases ( $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$ ,  $\vec{w}$ ) et ( $\vec{u}$ ",  $\vec{v}$ ",  $\vec{w}$ ") ne sont pas orthonormées, puisqu'aucun de ces vecteurs n'est unitaire. Les parties réelle A et imaginaire A" de ne sont donc pas des matrices orthogonales.

#### 4,2 Surface complexe des indices

4,2,1

Nous avons admis sans démonstration (en 2,2,2) que le tenseur complexe  $\tilde{\gamma}$  est symétrique. Les tenseurs  $\tilde{\vec{t}}$  et  $\tilde{\vec{t}}$  l'étant aussi, le tenseur  $\tilde{\vec{t}}$  défini en (17) est donc symétrique. Nous faisons alors l'hypothèse suivante, qu'il existe une base de vecteurs complexes orthonormée dans laquelle  $\tilde{\vec{t}}$  a une représentation diagonale, les éléments diagonaux étant trois complexes notés  $\hat{\epsilon}_1$ ,  $\hat{\epsilon}_2$ ,  $\hat{\epsilon}_3$ . Ce point, non démontré, peut être justifié par le fait que la base complexe et la matrice complexe qui permet d'y accéder, telles qu'elles sont définies ci-dessus, possèdent des propriétés formellement identiques à celles vérifiées par les grandeurs réelles correspondantes. Nous verrons plus loin, au paragraphe 5, les remarques soulevées par la diagonalisation de  $\tilde{\vec{t}}$ .

4,2,2

Nous pouvons maintenant revenir à la relation (32), et la recopier en projetant les vecteurs  $\hat{\vec{e}}$  et  $\hat{\vec{p}}$  dans la base complexe où  $\hat{\vec{e}}$  est diagonal :

 $\vec{\hat{e}} = \hat{p}_e \vec{\hat{u}} + \hat{q}_e \vec{\hat{v}} + \hat{r}_e \vec{\hat{w}}$   $\vec{\hat{p}} = \hat{\alpha} \vec{\hat{u}} + \hat{\beta} \vec{\hat{v}} + \hat{\gamma} \vec{\hat{w}}$ 

Pour éviter de multiplier les notations, nous confondrons par la suite les tenseurs  $\hat{\epsilon}$  et  $\hat{\epsilon}_r$ , qui sont proportionnels, ce qui revient à faire  $\epsilon_0 = 1$ .

La relation vectorielle complexe (32) donne alors trois relations scalaires :

- (39a)  $\hat{\epsilon}_1 \hat{p}_e = \hat{N}^2 [\hat{p}_e (\vec{\hat{p}} \cdot \vec{\hat{e}}) \hat{\alpha}]$
- (39b)  $\hat{\epsilon}_2 \hat{q}_{\rho} = \hat{N}^2 [\hat{q}_{\rho} (\hat{p} \hat{e}) \hat{\beta}]$
- (39c)  $\hat{\epsilon}_3 \hat{r}_e = \hat{N}^2 [\hat{r}_e (\vec{\hat{p}} \cdot \vec{\hat{e}}) \hat{\gamma}]$

dont on tire :

(40) 
$$\frac{\hat{N}^2 - \hat{\varepsilon}_1}{\hat{\alpha}} \hat{p}_e = \frac{\hat{N}^2 - \hat{\varepsilon}_2}{\hat{\rho}} \hat{q}_e = \frac{\hat{N}^2 - \hat{\varepsilon}_3}{\hat{\gamma}} \hat{r}_e$$

Cette dernière relation correspond à la relation (II,6) écrite en termes réels, et qui permet (cf. BRUHAT, [52]p.400) d'obtenir sans difficulté l'équation de la surface des indices (II,5). Sans refaire ici cette courte démonstration, nous pouvons dire que nous avons obtenu, dans l'espace vectoriel complexe, une relation analogue à celle utilisée dans le chapitre précédent :

(41)  $(\hat{\epsilon}_1 \ \hat{x}^2 + \hat{\epsilon}_2 \ \hat{y}^2 + \hat{\epsilon}_3 \ \hat{z}^2) (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2) - \hat{\epsilon}_1 (\hat{\epsilon}_2 + \hat{\epsilon}_3) \ \hat{x}^2$  $- \hat{\epsilon}_2 (\hat{\epsilon}_3 + \hat{\epsilon}_1) \ \hat{y}^2 - \hat{\epsilon}_3 (\hat{\epsilon}_1 + \hat{\epsilon}_2) \ \hat{z}^2 + \hat{\epsilon}_1 \ \hat{\epsilon}_2 \ \hat{\epsilon}_3 = 0$ 

 $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$ ,  $\hat{Z}$  sont les coordonnées complexes d'un point repéré dans la base ( $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{w}$ ). L'équation (41) est donc celle d'une "surface complexe des indices", exprimée dans un référentiel complexe formé de trois vecteurs unitaires qui donnent les "directions principales complexes" du tenseur  $\hat{\epsilon}$ .

#### 4,3 Conclusion

4,3,1

En fin de compte, nous constatons que, une fois définies et précisées les propriétés des grandeurs vectorielles et des référentiels complexes, nous retrouvons sans difficulté les relations qui nous ont servi de point de départ pour l'étude des cristaux transparents faite aux deux chapitres précédents. Nous pouvons conclure que l'étude des milieux anisotropes absorbants n'offre pas de difficultés supplémentaires à celle des corps transparents : les deux problèmes se mettent en équation et se traitent de la même façon, l'un avec des grandeurs physiques réelles, l'autre avec des grandeurs fictives complexes. Nous considérons donc tous les résultats établis aux chapitres II et III comme valables pour un cristal absorbant, en y faisant la transposition réel →complexe.

#### 4.3.2

Ainsi, les coefficients de réflexion normale d'un anisotrope absorbant sur un plan réflecteur quelconque sont des nombres complexes dont l'expression est donnée par les relations (II,21) et (II,25), dans lesquelles N', N" et t sont complexes, où encore par les relations (II,27). Le fait que t est complexe indique que les champs électriques transmis dans le milieu absorbant sont elliptiques, résultat que nous retrouverons au paragraphe 6. La nature complexe des coefficients peut se vérifier expérimentalement : les déphasages  $\varphi_x$  et  $\varphi_y$  qui figurent dans les relations (II,21) ne sont pas des multiples de π comme nous l'avions établi pour les milieux transparents ( ch. II, remarque 8,2,1). Donc, si le champ électrique incident est parallèle à Ox, le champ réfléchi se décompose sur les axes Ox et Oy (voir (II, 14a, 15a, 16a) ) en deux vibrations dont les phases à la réflexion sont différentes de  $\pi$  et inégales : la vibration réfléchie est donc elliptique. Nous pouvons le constater expérimentalement en mesurant la quantité  $| \varphi_y - \varphi_x |$ , par l'analyse de la vibration réfléchie selon la méthode décrite au chapitre I.

#### 4,3,3

La mesure des coefficients complexes de réflexion normale permet d'obtenir les constantes diélectriques principales  $\hat{\epsilon}_1$ ,  $\hat{\epsilon}_2$ ,  $\hat{\epsilon}_3$  du cristal, ainsi qu'une matrice  $\hat{A}$  dont les éléments  $\hat{a_{ij}}$  font passer du repère réel (R) au repère fictif complexe ( $\hat{R}_0$ ) possédant les propriétés d'orthonormalisation définies en 4,1,2, et dont les "axes" sont les "axes principaux complexes" du tenseur  $\hat{\epsilon}$ . Si les éléments de symétrie du cristal sont au moins ceux du système orthorhombique, les parties réelle et imaginaire de  $\hat{\epsilon}$  ont mêmes axes principaux, et les éléments  $a_{ij}$  sont réels.

#### 4.3,4

Si le cristal absorbant possède un plan de symétrie, l'angle  $\omega$ qui suffit à définir la matrice de passage A (chapitre II, relation (29) ) ne sera complexe que dans le cas du système monoclinique. L'observation de cette matrice (II, (29) ) montre que seul l'axe OY, normal au plan de symétrie, est réel ; les deux autres appartenant à ce plan, sont des axes fictifs complexes.

Quelles que soient les positions des axes réels 0x et 0z dans ce plan, le coefficient de réflexion croisé  $r_{yzx}$  n'est jamais nul puisque l'angle complexe  $\hat{\omega}$  ne peut s'annuler pour une orientation particulière de ces axes : nous en concluons que toutes les vibrations réfléchies par le plan xoy sont elliptiques, quelle que soit la direction du champ électrique rectiligne incident.

#### 4,3,5

Sur les faces xoy et yoz taillées dans ce même cristal, les coefficients de réflexion croisés sont nuls pour un champ rectiligne incident parallèle à Ox, Oy ou Oz : c'est le résultat exprimé par les relations (II,36c) et (II,39c). Dans ces quatre cas, les vibrations réfléchies restent rectilignes, quelle que soit l'importance de l'absorption. Cette propriété a d'ailleurs été utilisée par CERVELLE [61] pour mesurer les facteurs de réflexion d'un cristal de kermésite.

Cependant si, sur l'une ou l'autre de ces deux faces, le champ électrique incident n'est ni normal ni parallèle à Oy, la vibration réfléchie sera elliptique.

Toutes ces propriétés seront vérifiées au chapitre V.

- 87 -

#### 4,4 Application numérique

L'annexe 7 présente un exemple de calcul fait sur un cristal absorbant fictif, possédant un plan de symétrie. Nous avons repris les mêmes calculs que ceux donnés dans les annexes 3 et 6, mais après avoir choisi des constantes diélectriques complexes. Les coefficients complexes de réflexion normale sont d'abord calculés (programme annexe 9) ; à partir de ces coefficients, nous retrouvons les constantes diélectriques de départ, soit par la méthode particulière applicable s'il y a un plan de symétrie (ch. III, paragraphe 9, programme annexe 11), soit par la méthode générale (programme annexe 10). Dans ce dernier cas, l'examen des différentes valeurs de  $\hat{\sigma}_3$  (dont les écarts relatifs sont inférieurs à  $5.10^{-4}$ , tant pour les parties réelles que pour les parties imaginaires), montre que l'équation du quatrième degré est toujours identique à une équation du premier degré. Dans les deux cas de résolution, les constantes diélectriques de départ sont retrouvées à moins de l % près.

5 - REMARQUES SUR LA DIAGONALISATION DU TENSEUR COMPLEXE

Nous avons trouvé précédemment (relations (16) et (17) :

avec : 
$$\vec{\epsilon}' = \vec{\epsilon}' - j\vec{\epsilon}''$$
  
 $\vec{\epsilon}' = \vec{\epsilon} + \rho_s \vec{\gamma}'$  et  $\vec{\epsilon}'' = \vec{\sigma} + \rho_s \vec{\gamma}''$ 

Les quatre tenseurs réels  $\vec{t}, \vec{r}, \vec{\sigma}, \vec{\gamma}''$  ont été supposés symétriques, donc possédant chacun un système de vecteurs propres formant une base orthonormée dans lesquels ils sont diagonaux. Les repères principaux de chacun de ces tenseurs ne coıncident pas nécessairement, sauf dans le cas d'un cristal à haut degré de symétrie. La "diagonalisation" du tenseur complexe  $\vec{t}$  peut de ce fait poser quelques problèmes dont nous allons parler ici.

5.1

Supposons que le changement de base défini par la matrice complexe À ait transformé  $\hat{\vec{\epsilon}}$  en un tenseur diagonal  $\hat{\vec{\epsilon}}$ d dont les éléments diagonaux,  $\hat{\epsilon}_1$ ,  $\hat{\epsilon}_2$ ,  $\hat{\epsilon}_3$ , peuvent être déterminés en étendant aux nombres complexes les méthodes établies au chapitre III.

Ecrivons la relation liant ê et êd . En se rappelant la définition de (voir chapitre II, introduction générale) et en appliquant les lois de transformation des tenseurs (voir NYE, [62] p. 12-13), nous obtenons avec la notation d'Einstein :

(42) 
$$\hat{\epsilon}d_{k\ell} = \hat{a}_{mk} \hat{a}_{n\ell} \hat{\epsilon}_{mn}$$

dans laquelle m et n sont des indices muets, et où  $\hat{\epsilon d}_{k\ell}$  est nul pour  $k\neq\ell$  .

Considérons maintenant les parties réelle et imaginaire  $\vec{\epsilon}'$  et  $\vec{\epsilon}''$ de  $\vec{\epsilon}$ , et appelons respectivement  $\vec{\epsilon}'d$  et  $\vec{\epsilon}''d$  les images diagonales de ces deux tenseurs, chacune associée à un système d'axes qui lui est propre, noté (R') pour  $\vec{\epsilon}'$  et (R'') pour  $\vec{\epsilon}''$ . Si  $\delta'$  et  $\delta''$  sont les matrices orthogonales faisant passer respectivement de (R) à (R') et de (R) à (R''), nous pouvons écrire :

- (43a)  $\varepsilon'_{mn} = \delta'_{mp} \delta'_{nq} \varepsilon'_{pq}$
- (43b)  $\varepsilon''_{mn} = \delta''_{mp} \delta''_{nq} \varepsilon''_{pq}$

Soit, en reportant dans (43) :

 $\hat{\epsilon}d_{kl} = \hat{a}_{mk} \hat{a}_{nl} (\epsilon'_{mn} - j\epsilon''_{mn})$ 

 $\hat{\epsilon}d_{kl} = (\hat{a}_{mk} \hat{a}_{nl} \delta'_{mp} \delta'_{nq} \epsilon'd_{pq}) - j (\hat{a}_{mk} \hat{a}_{nl} \delta''_{mp} \delta''_{nq} \epsilon''d_{pq})$ 

Dans chaque parenthèse, groupons les indices muets par paire (l'ordre des facteurs n'a pas d'importance, puisque tous les termes sont des nombres) :

$$\hat{\epsilon}d_{k\ell} = \left[ \left( \hat{a}_{mk} \delta'_{mp} \right) \left( \hat{a}_{n\ell} \delta'_{nq} \right) \epsilon'd_{pq} \right] - j \left[ \left( \hat{a}_{mk} \delta''_{mp} \right) \left( \hat{a}_{n\ell} \delta''_{nq} \right) \epsilon''d_{pq} \right]$$

Nous obtenons ainsi :

(44) 
$$\hat{\epsilon}d_k = \hat{T}'_{kp} \hat{T}'_{lq} \epsilon'd_{pq} - j \hat{T}''_{kp} \hat{T}''_{lq} \epsilon''d_{pq}$$

où  $\widehat{T}'$  et  $\widehat{T}''$  sont deux matrices complexes dont les éléments sont définis par :

(45a)  $\hat{T}'_{ij} = \hat{a}_{\ell i} \delta'_{\ell j}$ , soit  $\hat{T}' = \hat{A}^{-1} \delta'$ 

(45b)  $\hat{T}''_{ij} = \hat{a}_{li} \delta''_{lj}$ , soit  $\hat{T}'' = \hat{A}^{-1} \delta''$ 

La relation (44) donnant les éléments du tenseur  $\hat{\epsilon} d$  montre que l'on n'a pas en général  $\hat{\epsilon} d = \hat{\epsilon} d - j \hat{\epsilon} d$ , ce qui n'est pas surprenant, puisque les représentations diagonales de  $\hat{\epsilon}$ ' et de  $\hat{\epsilon}$ '' ont lieu dans des bases différentes.

5,2

D'après ce qui a été établi au chapitre III, et justifié au paragraphe 4 de ce chapitre, nous pouvons connaître grâce à la mesure des facteurs de réflexion normale, les éléments du tenseur  $\hat{ed}$  et ceux de la matrice  $\hat{A}$  qui relie le repère expérimental (R) (formé des normales aux trois plans réflecteurs) au repère complexe ( $\hat{R}_{o}$ ) où  $\hat{e}$  est diagonal.

Si l'on veut obtenir les tenseurs réels diagonaux  $\epsilon^{\dagger}d$  et  $\epsilon^{\dagger}d$ , il faut donc :

- trouver l'expression de  $\overline{\hat{\xi}}$  dans le repère (R) en calculant ses éléments grâce à la matrice  $\hat{A}$ :

$$\hat{\epsilon}_{kl} = a_{km} a_{ln} \hat{\epsilon}_{mn}$$

- séparer partie réelle et partie imaginaire du résultat obtenu, ce qui donne les tenseurs réels  $\vec{\epsilon}'$  et  $\vec{\epsilon}''$ ;
- diagonaliser séparément chacun de ces tenseurs.
- 5,3

Nous pouvons alors représenter géométriquement le cristal absorbant à l'aide de deux ellipsoïdes, que nous proposons d'appeler :

- l' "ellipsoïde des parties réelles de  $\vec{\xi}$  ", défini par les trois éléments diagonaux de  $\epsilon^{\vec{f}}$ d et par le repère (R') ; - l'"ellipsoïde des parties imaginaires de  $\vec{\hat{\epsilon}}$ ", défini par les éléments diagonaux de  $\vec{\epsilon}^{\dagger}$ d et par le repère (R").

La donnée de ces deux ellipsoïdes détermine bien les propriétés du cristal absorbant, et ce d'une façon intrinsèque, car ils ne dépendent pas de la base expérimentale (R) qui a servi à les construire. Il revient au même de se donner un milieu absorbant par ces deux ellipsoïdes, ou par les trois constantes diélectriques complexes  $\hat{\varepsilon}_1$ ,  $\hat{\varepsilon}_2$ ,  $\hat{\varepsilon}_3$ , et par la matrice  $\hat{A}$ . Leur intérêt à notre avis est qu'ils permettent une représentation géométrique, graphique, du cristal, à l'aide de deux repères réels, tandis que la base ( $\hat{R}_0$ ) dans laquelle  $\vec{\hat{\epsilon}}$ d est diagonal est complexe, donc ne peut être facilement dessinée.

On passe très simplement d'une représentation du cristal à l'autre, en remontant la chaîne d'opérations établie en 5,2 : lorsque les deux ellipsoïdes sont connus, par les repères (R') et (R"), et les intersections des surfaces avec ces axes, on peut choisir un repère (R) réel, quelconque, et établir les matrices de passage,  $\delta'$  faisant passer de (R) à (R') et  $\delta''$ , de (R) à (R") ; en faisant subir à  $\varepsilon$ <sup>†</sup>d et  $\varepsilon$ <sup>#</sup>d les changements de base définis par  $\delta'$  et  $\delta''$ , on représente ces deux tenseurs dans la même base (R) ; on forme alors le tenseur complexe  $\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}' - j \vec{\varepsilon}''$ ; on diagonalise enfin ce tenseur complexe, ce qui donne les éléments diagonaux de  $\vec{\varepsilon}$  et la matrice  $\hat{A}$  faisant passer de (R) à la base complexe ( $\hat{R}_{o}$ ).

5,4

Nous présentons (annexe 7 bis) une représentation graphique du cristal absorbant étudié dans l'annexe 7, à l'aide des repères (R') et (R"), en suivant les étapes exposées en 5,2. La figure qui termine cette annexe montre les positions relatives de ces deux repères.

Dans la partie pratique de notre travail (chapitre V), nous considérerons le problème résolu par la connaissance de êd et de ( nous ne chercherons pas à trouver (R'), (R"),  $\varepsilon^{\dagger}d$  et  $\varepsilon^{\dagger}d$  pour chaque longueur d'onde)

5,5

Il y a lieu de bien remarquer que les deux ellipsoïdes définis en 5,3 n'ont rien de commun avec " l'ellipsoïde complexe des indices ", que

- 91 -

l'on peut définir avec les éléments diagonaux de  $\overline{\hat{e}d}$  . Ce dernier a pour équation dans la base complexe  $(\hat{R}_{0})$  :

(46) 
$$\frac{\hat{x}^2}{\hat{\epsilon}_1} + \frac{y^2}{\hat{\epsilon}_2} + \frac{\hat{z}^2}{\hat{\epsilon}_3} = 1$$

C'est donc un solide fictif, il n'est qu'une extension dans le cas complexe de l'ellipsoïde classique des indices d'un milieu anisotrope transparent, et il en possède, du moins analytiquement, toutes les propriétés. Les ellipsoïdes des parties réelle et imaginaire de  $\vec{\epsilon}$  ne servent qu'à représenter commodément le cristal absorbant, mais ils n'ont pas d'autre utilité. Si l'on veut appliquer au cristal les résultats établis dans les chapitres précédents (calcul des pouvoirs réflecteurs par exemple), il faut obligatoirement revenir à  $\hat{\vec{e}}$  ou  $\hat{\vec{e}}$ d.

#### INTERPRETATION DES CHAMPS COMPLEXES

Nous avons dit plus haut que les champs électrique È et magnétique  $ec{ extsf{H}}$  du cristal absorbant sont obtenus à partir des vecteurs fictifs complexes E et H, qui ont la forme générale donnée en (20). Il nous reste maintenant à trouver la partie réelle de ces vecteurs complexes, de façon à donner l'expression des champs régnant effectivement dans le cristal.

Expression de  $\vec{E}_t$  et  $\vec{H}_t$ 6.1

$$6,1,1$$
 Expression de  $\vec{E}_{t}$ 

(47)

La relation (20) donne :

$$\vec{\tilde{E}} = \vec{\tilde{E}} \exp \left[ j \left( \omega t - \vec{\tilde{K}} \cdot \vec{\tilde{R}} + \hat{\varphi} \right) \right]$$
Soit, avec
$$K = \frac{\vec{\tilde{N}}\omega}{C} = \frac{\hat{N}\omega}{C} \vec{\tilde{P}} \quad (\text{relations (25) et (31a)}):$$

$$(47) \qquad \vec{\tilde{E}} = \vec{\tilde{E}} \exp \left\{ j \left[ \omega \left( t - \frac{\hat{N} \cdot \vec{\tilde{P}} \cdot \vec{\tilde{R}}}{C} \right) + \hat{\varphi} \right] \right\} = \vec{\tilde{E}} \Psi$$

Si l'on pose :

$$\hat{N} = n - jk$$
,  $\hat{\vec{p}} = \vec{p} + j\dot{\vec{p}}$ ,  $\hat{\varphi} = \varphi + j\varphi$ ,

nous obtenons ;

$$\Psi = \exp \left\{ j \left[ \omega \left( t - \frac{n\vec{p} + k\vec{p}''}{C} R - j \frac{(n\vec{p} - k\vec{p}'')}{C} \vec{R} \right) + \varphi + j \varphi'' \right] \right\}$$

ou encore :

(48a) 
$$\Psi = \exp(j\theta) \cdot \exp[-(\vec{\sigma}\vec{R} + \varphi'')]$$

avec :

(48b) 
$$\theta = \omega \left( t - \frac{n\dot{p} + k\dot{p}''}{C} \cdot \vec{R} \right) + \varphi$$

(48c) 
$$\vec{\sigma} = \frac{\omega}{C} (\vec{kp} - \vec{np''})$$

L'expression du champ complexe  $\stackrel{\stackrel{\scriptstyle (i)}{E}}{E}$  s'écrit alors :

(49) 
$$\hat{\vec{E}} = (\vec{E} + j\vec{E}'') \cdot \exp(j\theta) \cdot \exp[-(\vec{\sigma}\vec{R} + \varphi'')]$$

On en tire le champ électrique  $\vec{E}_t$  régnant dans le cristal :

(50) 
$$\vec{E}_t = e$$
 .  $(\vec{E} \cos \theta - \vec{E}'' \sin \theta)$ 

 $\vec{E}_t$  est donc une fonction sinusoidale du temps et des coordonnées, par la fonction  $\theta$ . Son amplitude est atténuée avec la distance selon le terme exp  $(-\vec{\sigma} \cdot \vec{R})$  : les plans équiamplitude sont normaux à  $\vec{\sigma}$ . D'autre part,  $\vec{E}_t$  se décompose suivant deux directions réelles  $\vec{E}$  et  $\vec{E}$ " en deux composantes en quadrature ; donc :

- si  $\vec{E}$  et  $\vec{E}$ " sont parallèles, la vibration de  $\vec{E}_t$  est rectiligne ; - si  $\vec{E}$  et  $\vec{E}$ " sont orthogonaux, la vibration est circulaire ; - si  $\vec{E}$  et  $\vec{E}$ " ont des directions quelconques, la vibration est elliptique.  $\vec{A}$  est relié à  $\vec{E}$  par une relation écrite en termes réels au chapitre II (relation (II, 17b) ) :

- 94

(51) 
$$\vec{H} = \frac{\hat{N}}{\mu_{o}C} \cdot \vec{\hat{p}}_{\Lambda} \vec{E} = (\vec{H} + j\vec{H}'') \Psi$$

Un calcul analogue conduit à l'expression :

(52) 
$$\vec{H}_{t} = e \qquad (\vec{H} \cos \theta - \vec{H}'' \sin \theta)$$

Les conclusions trouvées pour  $\vec{E}_t$  (nature de la vibration) sont donc vraies pour  $\vec{H}_t$ .

#### 6,2 Indices apparents. Cas d'une onde plane incidente normale

On peut faire apparaître dans  $\theta$  et  $\overrightarrow{\sigma}$  deux indices apparents not et  $k_{c}$  définis par :

(53a) 
$$\vec{np} + \vec{kp''} = \vec{nos}$$

(53b) 
$$\vec{kp} - \vec{np''} = \vec{k} \vec{t}$$

où  $\vec{s}$  et  $\vec{t}$  sont des vecteurs unitaires,  $\vec{t}$  étant un vecteur colinéaire à  $\vec{\sigma}$ .

- Les plans équiamplitude sont normaux à  $\vec{t}$ ; - les plans équiphase sont normaux à  $\vec{s}$ .

Sachant que  $\overrightarrow{p}$  et  $\overrightarrow{p}$ " vérifient les propriétés générales (28) des vecteurs unitaires complexes, il est facile d'établir les relations suivantes:

(54a) 
$$n_0^2 - k_0^2 = n^2 - k^2$$

(54b) 
$$n_0 k_0 (\vec{s} \cdot \vec{t}) = n k$$

On peut donner une signification aux pseudo-indices  $n_0$  et  $k_0$  en étudiant le cas d'une onde plane incidente tombant normalement sur le plan réflecteur.

#### 6,2,2 Cas d'une incidence normale

Dans ce cas, l'onde transmise dans le milieu absorbant reste homogène, puisque ses plans équiamplitude et équiphase sont tous deux parallèles à la surface de séparation. Nous en concluons :

(55) 
$$\overrightarrow{s} = \overrightarrow{t}$$

La relation (54b) devient alors :  $n_0 k_0 = n k$ , dont nous déduisons :

(56a) 
$$n = n_0$$
 (56b)  $k = k_0$ 

soit encore :

(56c) 
$$\hat{N} = \hat{N}_{0}$$

L'indice complexe apparent est donc égal, pour une onde plane d'incidence normale, à l'indice secondaire  $\hat{N}$  associé à la propagation de l'onde dans le cristal (Rappelons que  $\hat{N}$  peut prendre deux valeurs  $\vec{N}$ ' et  $\vec{N}$ ", données en milieu transparent par la construction d'Huyggens).

#### Remarque :

On peut montrer que dans ce cas le vecteur unitaire  $\overrightarrow{\hat{p}}$  est réel. En effet, les relations (53) deviennent :

$$n_{o} \overrightarrow{p} + k_{o} \overrightarrow{p}'' = n_{o} \overrightarrow{s}$$
$$k_{o} \overrightarrow{p} - n_{o} \overrightarrow{p}'' = k_{o} \overrightarrow{s}$$

dont on tire facilement :

(57a) 
$$\vec{p} \cdot \vec{s} = 1$$
 et (57b)  $\vec{p}'' \cdot \vec{s} = 0$ 

 $\vec{p}$ " est donc normal à  $\vec{s}$ , donc appartient au plan d'onde, et  $\vec{p}$  qui lui est orthogonal (propriété (28b) ) est colinéaire à  $\vec{s}$  : cette conclusion, ajoutée à la relation (57a), entraîne nécessairement :  $|\vec{p}| = 1$ , ce qui implique :  $|\vec{p}$ " = 0, puisque  $\vec{p}$  est unitaire au sens complexe.

Les relations qui donnent le champ  $\stackrel{\rightarrow}{E_t}$  s'écrivent donc :

(58a) 
$$\theta = \omega \left(t - \frac{n_{o} \vec{p} \cdot \vec{R}}{C}\right) + \varphi$$

(58b)  $\vec{\sigma} = \frac{\omega}{C} k_0 \vec{p}$ 

(58c) 
$$\vec{E}_t = (\vec{E} \cos \theta - \vec{E}'' \sin \theta) \exp[-(\vec{\sigma} \vec{R} + \varphi'')]$$

Nous obtenons ainsi une loi analogue à celle qui régit les milieux isotropes absorbants ([66] p. 370) : l'amplitude décroît exponentiellement avec la partie imaginaire k<sub>o</sub> de l'indice complexe, tandis que la phase ne dépend que de la partie imaginaire n<sub>o</sub>. 1 - DESCRIPTION DE L'ECHANTILLON

#### 1,1 Choix de l'échantillon

Pour pouvoir appliquer la méthode établie dans les chapitres précédents à un milieu absorbant, nous avons cherché un cristal anisotrope biaxe, monoclinique ou triclinique (les axes cristallographiques devant de préférence varier), pouvant se trouver en dimensions suffisamment grandes pour être taillé suivant un trièdre, et possédant au moins une bande d'absorption dans la région de sensibilité de notre appareil (de l à  $12\mu$ ). Après quelques recherches, il nous est apparu que le gypse naturel pouvait convenir : c'est un sulfate de calcium (C<sub>a</sub> SO<sub>4</sub>, 2 H<sub>2</sub>O) cristallisé dans le système monoclinique, et dont les échantillons monocristallins que l'on peut se procurer ont des dimensions suffisamment étendues dans toutes les directions ; ce dernier point est important, car chaque face du cube doit contenir entièrement l'image du globar G donnée par le miroir M2 (figures 9), qui est un ovale de 16 mm environ.

Ette page vient après la suivante -

- 97 -

La littérature (PAIN et al., [75]) nous apprend qu'entre 2u et  $5\mu$ , le gypse présente deux régions d'absorption, à 3u et à  $4.7\mu$ . Sur notre échantillon, nous avons trouvé en fait, entre  $1\mu$  et  $10\mu$ , trois bandes d'absorption :  $3.1\mu$ ,  $6\mu$  et  $8.3\mu$ . C'est cette dernière bande, qui est très intense et qui est due probablement aux vibrations des groupements  $SO_4$ , que nous avons projeté d'étudier.

#### 1,2 Préparation

1,2,1 Le gypse, monoclinique, possède un plan de symétrie facilement mis en évidence, puisque c'est aussi un plan de clivage important. L'un des axes cristallographiques est toujours perpendiculaire à ce plan, donc est fixe quand la longueur d'onde varie. Les deux autres axes appartiennent à ce plan, et peuvent s'y déplacer.

Dans une bande d'absorption, nous avons vu que la notion d'axes principaux devient complexe, et que l'on peut se ramener à deux "ellipsoïdes" dans deux systèmes d'axes réels orthogonaux distincts. Chacun de

### VERIFICATIONS EXPERIMENTALES

CHAPITRE - V -.

1

ces référentiels obéit aux lois de symétrie du cristal, donc possède un axe fixe normal au plan de clivage.

Si nous prenons ce plan pour l'un des trois plans réflecteurs, nous sommes bien dans le cas particulier étudié au chapitre II, et les coefficients de réflexion normale de chaque face sont donnés par les relations (II,33), (II,36), (II,39). Ce sont ces relations que nous avons cherché à vérifier.

1,2,2 Le morceau de gypse que nous avons utilisé a été taillé en cube dont chaque arête mesure 20 mm environ. L'orthogonalité des faces a été assurée à la coupe grâce à la tête goniométrique de la scie à cristaux. Seules trois faces du cube ont été polies. Les deux faces normales au plan de clivage l'ont été avec de l'abrasif NORTON 600, puis à la soie naturelle imprégnée d'une suspension d'alumine 24 heures, enfin au velours légèrement humide. Le polissage est assez rapide, car le gypse est très tendre, mais demande beaucoup de précautions, car la grande facilité de clivage provoque des cassures. La face de clivage a été simplement polie à l'alumine, et finie au velours.

Certains auteurs (HÄFELE [ 76 ], PIRIOU [ 33 ], thèse p. 83) estiment nécessaire de regénérer la surface par recuit, en raison de la perturbation dans l'arrangement cristallin provoquée par le polissage mécanique. Ayant obtenu d'emblée des anisotropies assez marquées sur chacune de nos faces, nous n'avons pas jugé indispensable de recuire l'échantillon.

1,2,3 Pour conserver les notations des chapitres II et III, la face de clivage est appelée xoz ; elle est donc normale à l'axe principal OY, et contient les axes principaux OX et OZ. Ces deux axes ont été repérés dans le domaine visible sur un microscope polarisant, pour la lumière du sodium. Ils forment avec l'axe Oz des angles de 8° et - 82° (figure 21).

2 - MESURE DES FACTEURS DE REFLEXION

#### 2,1 Appareillage
Il a déjà été sommairement décrit au chapitre I. Rappelons que l'angle minimum d'incidence est en fait  $12^{\circ}$ ; l'analyseur reste toujours fixe, la direction du champ électrique analysé est normale à la fente d'entrée du monochromateur ; le polariseur est également fixe, mais l'ensemble : source, polariseur, échantillon, peut tourner autour de l'axe vertical "axe n° 2 " (figures 9). Si l'on appelle  $\gamma$  l'angle mesurant cette rotation, on voit que lorsque  $\gamma$  est nul (figure 22a) le polariseur et l'analyseur sont parallèles, tandis que si  $\gamma$  vaut 90° (figure 22b) on mesure un facteur de réflexion croisé.

Le spectre de réflexion de référence est celui d'un miroir aluminé. En raison de la très grande différence entre les énergies réfléchies par le cristal et par le miroir, l'intensité du faisceau incident peut être atténuée par des diaphragmes étalonnés : ce procédé a l'avantage de ne modifier ni le gain de l'amplificateur (le détecteur travaille donc avec un maximum de linéarité), ni l'ouverture de la fente d'entrée (on ne modifie pas la résolution spectrale).

## 2,2 Enregistrements et constatations

Nous avons vérifié tout d'abord que les pouvoirs réflecteurs  $R_{zxy}$  et  $R_{xyz}$  sont nuls, ou du moins inférieurs au seuil de sensibilité de l'appareil, comme prévu par les relations (II,36c) et (II,39c). Nous avons alors tracé, entre lµ et 10µ (10000 cm<sup>-1</sup> et 1000 cm<sup>-1</sup>), sept spectres de réflexion normale :  $R_{xyz}$ ,  $R_{xzz}$ ,  $R_{yzz}$ ,  $R_{yxx}$ ,  $R_{zxx}$ ,  $R_{zyy}$ , présentés respectivement sur les figures 23 à 29. On constate bien l'égalité des facteurs de réflexion  $R_{zyy}$  et  $R_{xyy}$  en tous points de la région spectrale étudiée : ces deux grandeurs, comme prévu par les relations (II,36b) et (II,39a), ne dépendent que de la constante optique  $N_2$ .

 $R_{yzx}$  est très faible, souf dans les trois régions d'absorption, dans lesquelles nous avons vérifié, en faisant tourner le cube de 90° autour de 0y, que l'on a bien  $R_{yzx} = R_{yxz}$ .

## 3 - OBTENTION DES COEFFICIENTS DE REFLEXION

Si chaque coefficient est noté d'une façon générale :  $\hat{r} = -\sqrt{R}$ .xexp (-j  $\varphi$ ), nous avons dit au chapitre IV que la mesure des ellipticités

- 99 -

- 100 -

des vibrations réfléchies permet de connaître des quantités de la forme  $| \varphi - \varphi' |$ ,  $\varphi$  et  $\varphi'$  étant les arguments des deux amplitudes complexes réfléchies par une même face dans deux directions perpendiculaires. Cette mesure ne permet donc de calculer ni  $\varphi$ , ni  $\varphi'$ .

Ceci nous a contraint, pour obtenir les arguments de chaque coefficient, à employer la méthode d'inversion de Kramers-Kröning, exposée au chapitre I. Chacun des spectres a été découpé en intervalles d'autant plus petits que la variation de R est rapide, et l'intégrale a été réalisé numériquement (programme Fortran de l'annexe 12). Les résultats :  $\varphi_{xyy}$  ou  $\varphi_{zyy}$ ,  $\varphi_{xzz}$ ,  $\varphi_{yzx}$ ,  $\varphi_{yxx}$ , sont présentés respectivement sur les figures 30 à 34. Nous n'avons pas traité le facteur croisé R<sub>yzx</sub>, trop faible pour donner des résultats précis. Notons que chaque spectre a dû être lissé empiriquement pour éviter que les petits écarts dûs aux incertitudes de mesures n'influent sur le calcul de la dérivée de Log ( $\sqrt{R}$ ).

Les parties réelle et imaginaire ont ensuite été obtenues par la relation générale :

(1)  $\hat{\mathbf{r}} = -\sqrt{\mathbf{R}} \left( \cos \varphi - \mathbf{j} \sin \varphi \right)$ 

# 4 - OBTENTION DES CONSTANTES OPTIQUES PRINCIPALES ET DE LA MATRICE A. CRITIQUE DES RESULTATS

4,1 Puisque l'échantillon possède un plan de symétrie, nous pouvons utiliser la chaîne de calculs définie par les relations (III,22) à (III,30). Ces calculs ont été faits avec le programme de l'annexe 11, depuis 1500 cm<sup>-1</sup> jusqu'à 1000 cm<sup>-1</sup> (6.67µ à 10µ). Les figures 35 à 38 montrent les parties réelle et imaginaire obtenues respectivement pour  $\hat{N}_1$ ,  $\hat{N}_2$ ,  $\hat{N}_3$ et  $\hat{\omega}$ .

Nous voyons que seuls les résultats trouvés pour  $\hat{N}_2$  sont satisfaisants. En effet, la partie réelle  $n_1$  de  $\hat{N}_1$  est légèrement négative entre 1140 cm<sup>-1</sup> et 1180 cm<sup>-1</sup>. Par contre la partie réelle de  $\hat{N}_3$  suit une loi correcte, tandis que la partie imaginaire, positive de 1500  $m^{-1}$  à 1120 cm<sup>-1</sup>, devient négative en-deçà.

La figure 38 montre les variations suivies par les parties réset imaginaire de l'angle  $\hat{\omega}$ . Il est clair qu'à l'intérieur de la bande d'absorption (1100 cm<sup>-1</sup> - 1200 cm<sup>-1</sup>) la partie imaginaire de  $\hat{\omega}$  n'est pas nulle, donc que les axes principaux du tenseur  $\vec{\epsilon}$  situés dans la tau de clivage zox sont bien de nature complexe. Cependant, la médiocrité des résultats obtenus pour  $\hat{N}_1$  et  $\hat{N}_3$ , qui se répercute nécessairement le calcul de cos  $2\hat{\omega}$ , ne permet pas de péciser ce phénomène d'une faços quantitative.

4.2 Nous avons vu au chapitre III (en 9,4,2) que la méthode de callant ci-dessus employée ne nécessite que la quantité :  $\hat{D} = r_{yzz}^{2} + r_{yxx}^{2}$ , car les cinq coefficients de réflexion normale utilisés ne sont pas tous pendants. Lorsqu'on a obtenu  $\hat{N}_1$ ,  $\hat{N}_3$  et  $\hat{\omega}$ , on peut recalculer séparément r et r (relations (II, 33a et b) ). La comparaison des résultate calculés avec les valeurs mesurées peut constituer un test de validité pour la détermination de  $\hat{N}_1$ ,  $\hat{N}_3$  et  $\hat{\omega}$  . Entre 1500 cm<sup>-1</sup> et 1000 cm<sup>-1</sup> nous avons ainsi recalculé R et R : les figures 39 et 40 en super vxx : les figures 39 et 40 en super vxx : posent valeurs numériques et valeurs expérimentales. Dans les deux cas l'accord est satisfaisant, sauf au milieu de la bande d'absorption  $(1170 \text{ cm}^{-1} - 1120 \text{ cm}^{-1})$  où les écarts peuvent atteindre 10 %. Comptetenu du fait que en-dessous de 1100 cm<sup>-1</sup> nous avons obtenu une constant optique  $\hat{N}_3$  de partie imaginaire négative, nous pouvons estimer nos rées tats satisfaisants jusque 1180 cm<sup>-1</sup>; entre 1180 cm<sup>-1</sup> et 1000 cm<sup>-1</sup>,  $\odot$ serait absurde d'en déduire des conclusions quantitatives.

### 5 - CONTROLE DE LA METHODE DE KRAMERS-KRONING

La méthode de calcul des constantes optiques à partir des coefficients complexes de réflexion a été testée sur de nombreux cas fictifs, et sa validité ne peut être mise en doute. Les facteurs de réflexion nom male ont été mesurés plusieurs fois, certaines mesures ayant lieu à plus sieurs semaines d'écart, et nous estimons les connaître avec une précise sion de 1 %, chiffre couramment avancé par d'autres auteurs, sauf dans les régions où ils sont très faibles (inférieurs à 0.05), auquel cas il faut se contenter d'une incertitude relative de 5 à 8 %.

Il semble donc que seul le passage des facteurs de réflexion aux coefficients complexes soit responsable des anomalies rencontrées plus haut. Nous avons donc éprouvé les résultats fournis par la méthode Kramers-Kröning de deux manières :

- numériquement, en effectuant plusieurs calculs de la même phase (celle de  $r_{ZXX}$ ) en modifiant arbitrairement les données expérimentales (bornes d'intégration, et surtout valeur du minimum). Nous nous sommes alors aperçu que la valeur du minimum de réflexion (vers 1280 cm<sup>-1</sup> pour  $R_{ZXX}$ ) a une répercussion importante sur le calcul des phases au voisinage de ce minimum. Ainsi, si on fait varier légèrement (c'est-à-dire dans les limites de la précision avec laquelle on 1'a mesuré) la valeur de  $R_{ZXX}$  en 1260 cm<sup>-1</sup>, on obtient au maximum de réflexion (1230 cm<sup>-1</sup>) des écarts de 30 à 40 % ( $\varphi_{ZXX} = 130^\circ$ , alors que la valeur utilisée pour calculer les constantes optiques est 90°). Ces écarts vont en diminuant lorsque l'on s'écarte de la fréquence du minimum, puisque alors le rapport ( $\sigma + \sigma_c$ ) / ( $\sigma - \sigma_c$ ) tend vers l'unité. Les minimums de réflexion étant mesurés avec une précision relativement basse, on comprend que le calcul des phases par la méthode Kramers-Kröning puisse être erroné.
- expérimentalement, par ellipsométrie. Nous avons dit au chapitre IV que les vibrations réfléchies sur la face xoz (face de clivage) étaient toujours elliptiques, du fait de l'existence du facteur de réflexion croisé non nul. Mesurer l'ellipticité de ces vibrations est facile, mais ne fournit aucune information exploitable, car on détermine ainsi les quantités  $|\varphi_{yzz} - \varphi_{yzx}|$  ou  $|\varphi_{yxx} - \varphi_{yxz}|$ : les phases  $\varphi_{yzz}$  et  $\varphi_{yxx}$ sont calculées par la méthode K.K., mais non  $\varphi_{yzx}$  ou  $\varphi_{yxz}$ , du fait de la petitesse de R en dehors des bandes d'absorption. Nous ne pouvons dans ce cas confronter les phases calculées avec l'expérience.

Cependant, il est possible de créer des vibrations elliptiques sur les deux autres plans réflecteurs, par exemple sur yoz, en y faisant tomber un rayonnement incident dont la direction de polarisation fait avec les axes Oy et Oz un angle de 45° : ceci revient à faire tomber sur le cristal, simultanément, deux vibrations incidentes d'amplitudes égales, en phase, polarisées l'une selon Oy, l'autre selon Oz. La vibration réfléchie se décompose aussi sur les axes Oy et Oz, en deux amplitudes complexes s'écrivant respectivement :

 $\hat{\mathbf{r}}_{xyy} = -\sqrt{R_{xyy}} \cdot \exp(-j\varphi_{xyy})$ , et  $\hat{\mathbf{r}}_{xzz} = -\sqrt{R_{xzz}} \cdot \exp(-j\varphi_{xzz})$ .

C'est donc une ellipse caractérisée par le déphasage  $\Delta = |\varphi_{xyy} - \varphi_{xzz}|$ . Ce déphasage est mesurable,  $\varphi_{xyy}$  et  $\varphi_{xzz}$  ont été calculés par la méthode K.K. : la comparaison est donc possible.

Nous l'avons faite en cinq endroits de la bande d'absorption, sur la face yoz ; la figure 41 montre le montage expérigemental. Les résultats obtenus sont nettement différents : par exemple, pour  $\sigma = 1170 \text{ cm}^{-1}$ , nous mesurons  $\Delta = 63^{\circ}$ , alors que la méthode K.K. donne  $\varphi_{xyy} = 78^{\circ}$  et  $\varphi_{xzz} = 107^{\circ}$ .

Il paraît donc certain que c'est la méthode K.K. qui est responsable des mauvais résultats obtenus. Les causes d'erreurs inhérentes à cette méthode sont multiples et ont déjà été énoncées au chapitre I : influence prépondérante des petites valeurs du pouvoir réflecteur, influence de l'étendue du domaine d'intégration. Le gypse possède en effet d'autres bandes d'absorption entre  $20\mu$  et  $30\mu$  (HOMLER et al., [77] ), que nous n'avons pu étudier. Ces bandes contribuent sans aucun doute à la grandeur des phases dans la région de  $9\mu$ , et ce dans une proportion que nous ne connaissons pas.

## 6 - ROTATION DE L'ECHANTILLON AUTOUR DE L'AXE OY

Nous terminons ce présent travail en décrivant un phénomène que nous avons observé en faisant tourner le cristal autour de l'axe OY, les directions du polariseur et de l'analyseur étant fixes et parallèles ( figure 42 ).

6,1 Si l'on appelle  $\alpha$  l'angle fait par l'axe Oz solidaire du cristal avec la direction commune de polarisation et d'analyse, le coefficient de réflexion normale mesuré dans ces conditions s'écrit, en accord avec la relation (II,27a) :

(2) 
$$r(\alpha) = \frac{1}{2} [p_y + q_y + (p_y - q_y) \cos 2(\theta_y + \alpha)]$$

Lorsque  $\alpha$  est nul, on mesure r ; s'il vaut 90°, r(90°) = r .

Si le cristal est transparent,  $p_y$ ,  $q_y$  et  $\theta_y$  sont des quantités réelles et r ( $\alpha$ ) varie sinusoïdalement avec une période égale à  $\pi$ . On n'observe donc, pour le facteur de réflexion normale R( $\alpha$ ), que deux extrémums, un maximum et un minimum, lorsque l'on fait tourner le cristal de 180°.

Or, dans la bande d'absorption, on constate qu'au cours d'une rotation de 180° la variation de R avec  $\alpha$  est une courbe à quatre extrémums, deux maximums et deux minimums, en général non distants de 90°. La figure 43 présente une telle courbe, observée à la fréquence 1176 cm<sup>-1</sup> (8.50 µ).

6,2 Nous allons montrer que ceci peut s'expliquer à l'aide des paramètres complexes du cristal. En effet, dans cette hypothèse le coefficient complexe  $\hat{\mathbf{r}}$  ( $\boldsymbol{\alpha}$ ) doit s'écrire :

(3) 
$$\hat{\mathbf{r}}(\alpha) = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{q}}_{\mathbf{y}} + (\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{q}}_{\mathbf{y}}) \cos 2 (\hat{\theta}_{\mathbf{y}} + \alpha)]$$

- 104 -

Le facteur de réflexion normale mesuré est le module de  $\hat{r}$  ( $\alpha$ ) :

(4) 
$$R(\alpha) = \hat{r}(\alpha) \cdot \hat{r}(\alpha)$$

le symbole \* désignant la quantité complexe conjuguée.

Si nous posons :

$$2 \alpha = u$$
, angle réel ;  
 $\cos 2 \theta_y = a + j a''$ ,  $\sin 2 \theta_y = b + j b''$   
 $\hat{p}_y + \hat{q}_y = s + j s''$ ,  $\hat{p}_y - \hat{q}_y = d + j d''$ 

nous obtenons alors :

 $2 \hat{r} (u) = s + A \cos u + B \sin u + j (s'' + C \cos u + D \sin u)$ = r + j r''

avec :

$$A = ad - a''d'' \qquad B = -(bd - b''d'')$$
$$C = a''d + ad'' \qquad D = -(b''d + bd'')$$

D'où l'on déduit :

 $4 R (u) = r^2 + r''^2$ 

La dérivée de cette fonction selon la variable u s'obtient sans peine :

$$4 \frac{\partial R}{\partial u} = 2 \text{ (Bs+Ds'') } \cos u - 2 \text{ (As+Cs'') } \sin u$$
$$+ (B^2 + D^2 - A^2 - C^2 \text{ ) } \sin 2 u + \text{ (AB+CD) } \cos 2 u$$

Ceci peut finalement s'écrire :

(5) 
$$4 \frac{\partial R}{\partial u} = L \sin (2u + \lambda) - M \sin (u-\mu)$$

avec :

2 (As + Cs") = M cos  $\mu$  , 2 (Bs + Ds") = M sin  $\mu$ (B<sup>2</sup> + D<sup>2</sup> - A<sup>2</sup> - C<sup>2</sup>) = L cos  $\lambda$  , (AB + CD) = L sin  $\lambda$ 

Lorsque l'on fait tourner le cristal de 0° à 180°, u varie de O à 2  $\pi$ , et les angles qui annulent la dérivée écrite ci-dessus peuvent être obtenus géométriquement par l'intersection des deux sinusoïdes (figure 44). Selon les valeurs de  $\lambda$ ,  $\mu$ , L, M, celles-ci peuvent avoir deux, trois ou quatre points communs dans l'intervalle [0,2 $\pi$ ], et chaque intersection correspond à un changement de signe de la dérivée. Les abcisses de ces points ne sont en général pas orthogonales.

6,3 Nous n'avons pas cherché à approfondir dans le détail cette propriété du cristal anisotrope absorbant. Nous avons simplement remarqué qu'elle apparaît uniquement lorsque l'absorption est élevée : entre  $1200 \text{ cm}^{-1}$  et  $1100 \text{ cm}^{-1}$  pour le gypse ; en dehors de cet intervalle, la courbe R ( $\alpha$ ) ne présente que deux extrémums. La figure 45 montre un diagramme polaire représentant quatre variations de cette nature, observées à quatre fréquences différentes prises au milieu de la bande d'absorption.

6,4 Notons que si les constantes optiques  $\hat{N}_1$  et  $\hat{N}_3$ , et l'angle  $\hat{\omega}$ du cristal, sont connus, il est possible de calculer numériquement les valeurs de R ( $\alpha$ ) pour n'importe quelle valeur de  $\alpha$ , par la relation (3). Nous l'avons fait, pour la fréquence 1190 cm<sup>-1</sup> (8.40 µ), en utilisant les valeurs numériques de  $\hat{N}_1$ ,  $\hat{N}_3$  et  $\hat{\omega}$  calculées précédemment à cet endroit. La figure 46 est une superposition du diagramme polaire obtenu grâce à ce calcul, avec le diagramme expérimental déjà reproduit sur la figure 45. L'accord est excellent. Pour les autres fréquences étudiées sur la figure 45, la concordance est beaucoup moins bonne, ce qui peut s'expliquer par la mauvaise précision avec laquelle nous avons obtenu les paramètres du cristal, en-dessous de 1180 cm<sup>-1</sup>.

- 106 -

6,5 Pour l'une de ces fréquences (1176 cm<sup>-1</sup>), nous avons pu chercher empiriquement les valeurs de  $\hat{N}_1$ ,  $\hat{N}_3$  et  $\hat{\omega}$  qui redonnent point par point la variation de R avec  $\alpha$  observée expérimentalement. Cette recherche a été menée sur simulatrice Hewlett - Packard associée à une table traçante. Nous avons ainsi trouvé :

$$\hat{N}_1 = .08 - j$$
,  $\hat{N}_3 = .12 - .2j$ ,  $\hat{\omega} = 27^\circ + j * 1^\circ .43$ ,

alors que les valeurs données par le programme (de l'annexe 11) sont :

$$\hat{N}_1 = -.061 - j * 1.506$$
,  $\hat{N}_3 = .239 - j + .447$ ,  $\hat{\omega} = 27^\circ + j * 4^\circ$ 

Les valeurs obtenues par tâtonnement sont donc sensiblement différentes des valeurs calculées ; elles forment avec les résultats obtenus aux points antérieurs ( $\sigma > 1176 \text{ cm}^{-1}$ ) des courbes qui restent continues, et elles ont l'avantage de faire disparaître la partie réelle négative de  $\hat{N}_1$ . Enfin, elles peuvent être utilisées pour recalculer les facteurs de réflexion normale R<sub>zxx</sub> et R<sub>xzz</sub> sur les deux autres faces du cristal (relations (II,34), (II,36a), (II,38) et (II,39b)) : les résultats obtenus sont très peu différents (moins de 5 %) des mesures expérimentales de ces facteurs, ce qui confirme notre opinion sur le fait que, dans notre méthode de détermination, seul l'emploi de la méthode Kramers - Kröning nous a empêché d'atteindre les valeurs exactes des constantes optiques du cristal.

### CONCLUSION

Nous avons dans ce travail donné les expressions des facteurs de réflexion normale d'un cristal anisotrope transparent, sur une section réflectrice quelconque de ce cristal, et mis en évidence une rotation du plan de polarisation de la lumière réfléchie. De la mesure de ces facteurs de réflexion sur trois plans réflecteurs normaux deux à deux, nous avons établi une chaîne de calculs permettant de remonter aux valeurs propres du tenseur diélectrique, ainsi qu'à la matrice de passage liant les axes principaux de ce tenseur au repère de mesure. Dans le cas où le cristal peut être taillé d'une façon particulière indépendante de la longueur d'onde (utilisation d'un plan de symétrie cristallographique), nous avons établi aussi une méthode plus rapide permettant d'obtenir les mêmes paramètres du milieu. Des vérifications numériques ont prouvé la validité et la convergence de ces deux méthodes.

L'adaptation de ces deux techniques de mesure à un milieu anisotrope absorbant peut être faite en considérant que toutes les grandeurs qui définissent le cristal sont complexes. Pour justifier cette hypothèse, nous avons dû donner un sens aux vecteurs complexes qui interviennent alors dans la théorie, en particulier aux vecteurs unitaires complexes qui donnent la direction des axes principaux complexes du tenseur  $\vec{\epsilon}$ . De cette hypothèse nous avons déduit des propriétés que doivent vérifier les ondes réfléchies par le milieu absorbant (vibrations elliptiques sur le plan de symétrie, rectilignes sur les autres, intensités réfléchies identiques pour toutes les vibrations incidentes parallèles à l'axe de symétrie, etc - - ). Ces propriétés ont pu être observées expérimentalement. De plus, des calculs numériques ont montré, là encore, la validité des méthodes établies.

Seul l'emploi de la méthode Kramers - Kröning nous a empêché d'obtenir les coefficients complexes de réflexion normale, et donc de terminer l'étude du cristal de gypse avec l'obtention de ses constantes diélectriques.

En résumé, le seul obstacle qui rend cette détermination médiocre pour l'instant est le passage des facteurs de réflexion aux coefficients complexes. Cette difficulté ne sera surmontée que lorsqu'on saura mesurer avec précision le déphasage à la réflexion de chacune des ondes réfléchies, c'est-à-dire l'argument de chaque coefficient complexe. La méthode polarimétrique ne fournissant que des différences de phases, il faudra sans doute, pour obtenir l'argument lui-même, recourir à des mesures interférométriques.

- 110 -

#### ANNEXE 1

EXPRESSION D'UNE MATRICE ORTHOGONALE



L'axe OX est repéré par les angles  $\beta$  et  $\phi$ . L'intersection de xOy avec le plan perpendiculaire en O à OX est la ligne (N) appelée ligne nodale : OY et OZ sont dans ce plan, OY fait avec la ligne nodale l'angle  $\alpha$ .

cos¢.cosß - sinß.cosa sina.sinß - sina.sin¢.cosß - sinφ.cosα.cosβ  $\cos\phi.sin\beta$ cosβ.cosa  $-\cos\beta.\sin\alpha$ Δ = - sinα.sinφ.sinβ - sinφ.sinβ.cosα sin¢ sina.cos¢ cos¢.cosa

## ANNEXES

ΕТ

BIBLIOGRAPHIE

COEFFICIENTS DE REFLEXION NORMALE (CAS GENERAL)

11 --

On a choisi : $\alpha = 10^{\circ}$  $\phi = 20^{\circ}$  $\beta = 30^{\circ}$ et : $\varepsilon_1 = 1.5$  $\varepsilon_2 = 1.7$  $\varepsilon_3 = 1.9$ donc : $N_1 = 1.225$  $N_2 = 1.304$  $N_3 = 1.378$ 

Les angles  $\phi$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  donnent les positions relatives des deux repères (R<sub>o</sub>) et (R) selon la figure de l'annexe l, et permettent de calculer la matrice A.

Axe Ox :N'\_x = 1.37293N''\_x = 1.27711
$$t_x = -2.22638$$
 $r_{xyy} = -.12765$  $r_{xzz} = -.15121$  $r_{xyz} = .01325$  $\gamma_{xy} = -5.93^{\circ}$  $\gamma_{xz} = -5.01^{\circ}$ 

Axe Oy:  

$$N'_{y} = 1.36903$$

$$N''_{y} = 1.24186$$

$$t_{y} = -.32269$$

$$r_{yzz} = -.15126$$

$$r_{yxx} = -.11240$$

$$r_{yzx} = .01400$$

$$\gamma_{yz} = -5.29^{\circ}$$

$$\gamma_{yx} = -7.10^{\circ}$$

Axe 0z:





ANNEXE 2

ANNEXE 3	COEFFICIENTS DE	REFLEXION NORMALE (CAS I	)'UN PLAN DE SYMETRIE)
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
On a choisi : et :	$\varepsilon_1 = 1.5$ $\omega = 22.86^{\circ}$	$\varepsilon_2 = 1.7$ (cos2 $\omega$ = .69813)	ε <sub>3</sub> = 1.9
Axe Ox :	r =13188	$r_{1} =14947$	$\mathbf{r} = 0$ .
Axe Oy :	r <sub>yzz</sub> =15033	xzz r =10979 yxx	$r_{yzx} =02079$
Axe Oz :	r <sub>zxx</sub> =10900	r <sub>zyy</sub> =13188	$r_{zxy} = 0$ .

- 112 -



Nous avons choisi quatre jeux de constantes diélectriques formant des ensembles suffisamment différents :

Jeu n°l :	$\varepsilon_1 = .2$	$\epsilon_2 = .3$	ε <sub>3</sub> = .4	$(\sigma_3 = .024)$
Jeu n°2:	$\varepsilon_1 = .5$	ε <sub>2</sub> = .6	$\epsilon_3 = .7$	$(\sigma_3 = .315)$
Jeu n°3:	$\varepsilon_1 = 1$	$\varepsilon_2 = 1.5$	$\epsilon_3 = 2$	$(\sigma_3 = 3)$
Jeu n°4:	ε <sub>1</sub> = 5	ε <sub>2</sub> = 6	ε <sub>3</sub> = 7	$(\sigma_3 = 210)$

Nous avons également choisi quatre matrices différentes, calculées selon l'expression générale de l'annexe 1 :

A 1	:	$\alpha = 10^{\circ}$	$\beta = 30^{\circ}$	$\phi = 20^{\circ}$
A <sub>2</sub>	:	$\alpha = 20^{\circ}$	$\beta = 30^{\circ}$	$\phi = 40^{\circ}$
A <sub>3</sub>	:	$\alpha = 40^{\circ}$	$\beta = 50^{\circ}$	$\phi = 30^{\circ}$
A,	:	$\alpha = 60^{\circ}$	$\beta = 70^{\circ}$	$\phi = 50^{\circ}$

Pour chaque jeu de constantes et pour chaque matrice, nous avons calculé les coefficients A, B, C, D de l'équation, ce qui fait seize vérifications.

Le tableau suivant montre les résultats obtenus. Chaque case donne de haut en bas : A, B/A, C/A, D/A, -27/A, et z tel que :

$$z = A\sigma_3^4 + A\sigma_3^3 + C\sigma_3^2 + D\sigma_3 - 27$$

L'observation de z montre qu'il est toujours inférieur ou égal à  $10^{-9}$ , donc que l'équation est satisfaite dans tous les cas.

D'autre part, pour montrer qu'elle admet une racine d'ordre 4, nous l'avons comparé au développement de  $(x - \sigma_3)^4$ :

$$(x - \sigma_3)^4 = \sigma x^4 - 4\sigma_3 x^3 + 6\sigma_3^2 x^2 - 4\sigma_3^3 x + \sigma_3^4$$

Nous avons obtenu les résultats suivants :

-114 -

$\frac{Jeu n^{\circ} 1}{4\sigma_{3}} = .096$	$6\sigma_3^2 = 3.546 \ 10^{-3}$	$4\sigma_3^3 = 5.5301 \ 10^{-5}$	$\sigma_3^4 = 3.318.10^{-7}$
$\frac{Jeu \ n^{\circ} \ 2}{4\sigma_3} = 1.26$	$6\sigma_3^2 = .5954$	$4\sigma_3^3 = .125$	$\sigma_3^4 = 9.8456 \ 10^{-3}$
<u>Jeu n° 3</u> : 40 <sub>3</sub> = 12	$6\sigma_3^2 = 54$	$4\sigma_3^3 = 108$	$\sigma_3^4 = 81$
<u>Jeu n° 4</u> : 40 <b>g</b> = 840	$6\sigma_3^2 = 2.646 \ 10^{+5}$	$4\sigma_3^3 = 3.704 \ 10^{+7}$	$\sigma_3^4 = 1.945 \ 10^{+.9}$

Nous constatons que les termes B/A, C/A, D/A, -27/A sont respectivement identiques à 4 $\sigma_3$ ,  $6\sigma_3^2$ ,  $4\sigma_3^3$ ,  $\sigma_3^4$ , à moins de 1/1000<sup>ième</sup> près qui représente une erreur due au calcul. Ce résultat est valable quelle que soit la matrice A : les cases du tableau juxtaposées horizontalement contiennent à peu près les mêmes nombres.

Nous en concluons :

 $Ax^{4} + Bx^{3} + Cx^{2} + Dx - 27 = A(x - \sigma_{3})^{4} = 0 \ si \ x = \sigma_{3}$ ,

cece étant vrai quelle que soit la matrice qui a servi à calculer A, B, C, D, donc indépendant de l'orientation des trois plans réflecteurs dans le cristal : quelle que soit l'orientation de la coupe choisie, l'équation a toujours la même unique racine  $\sigma_3$ .

	AJ **	A2	A3	A4 - 115
	-7.826 10 <sup>7</sup>	$-7.834 10^{7}$	-7.789107	-7,926 107
ε, = .2	$-9.695 10^{-2}$	$-9.693 10^{-2}$	$-9.706 10^{-2}$	$-9.664 10^{-2}$
$\varepsilon_{a} = .3$	$3.525 \ 10^{-3}$	$3.523 \ 10^{-3}$	$3.533 \ 10^{-3}$	$3.502 \ 10^{-3}$
$\varepsilon_{\Lambda} = .4$	-5.695 10 <sup>-5</sup>	-5.690 10 <sup>-5</sup>	$-5.715 10^{-5}$	-5.640 10 <sup>-5</sup>
$\sigma_3 = .024$	3.450 10 <sup>-7</sup>	3.447 10 <sup>-7</sup>	3.467 10 <sup>-7</sup>	3.406 10 <sup>-7</sup>
	3.517 10 <sup>-10</sup>	7.341 10 <sup>-10</sup>	2.597 10 <sup>-10</sup>	2.452 10 <sup>-10</sup>
	$-2.686 10^3$	-2.689 10 <sup>3</sup>	-2.680 10 <sup>3</sup>	-2.707 10 <sup>3</sup>
ε <sub>1</sub> = .5	-1.267	-1.267	-1.267	-1.264
ε <sub>2</sub> = .7	6.016 10 <sup>-1</sup>	6.012 10 <sup>-1</sup>	6.022 10 <sup>-1</sup>	5.993 10-1
ε <sub>3</sub> = .9	-1.270 10 <sup>-1</sup>	$-1.269 \ 10^{-1}$	$-1.272 10^{-1}$	-1.263 10-1
σ <sub>3</sub> = .315	1.005 10 <sup>-2</sup>	1.004 10 <sup>-2</sup>	1.007 10 <sup>-2</sup>	.997 10 <sup>-2</sup>
	8.536 10 <sup>-11</sup>	1.432 10 <sup>-10</sup>	2.597 10 <sup>-11</sup>	4.401 10 <sup>-11</sup>
	-3.206 10 <sup>-1</sup>	-3.209 10 <sup>-1</sup>	-3.190 10 <sup>-1</sup>	-3.247 10 <sup>-1</sup>
ε <sub>1</sub> = 1	-1.212 10 <sup>+1</sup>	-1.212 10+1	-1.213 10 <sup>+1</sup>	-1.208 10 <sup>+1</sup>
ε <sub>2</sub> = 1.5	5.507 10 <sup>1</sup>	5.505 10 <sup>1</sup>	5.521 10 <sup>1</sup>	5.472 10 <sup>1</sup>
ε <sub>3</sub> = 2	-1.112 10 <sup>2</sup>	-1.111 10 <sup>2</sup>	-1.116 10 <sup>2</sup>	-1.102 10 <sup>2</sup>
σ <sub>3</sub> = 3	8.423 10 <sup>1</sup>	8.414 10 <sup>1</sup>	8.463 10 <sup>1</sup>	8.316 10 <sup>1</sup>
	3.108 10 <sup>-10</sup>	6.856 10 <sup>-10</sup>	3.138 10 <sup>-10</sup>	2.334 10 <sup>-10</sup>
•	-1.385 10 <sup>-8</sup>	-1.385 10 <sup>-8</sup>	-1.385 10 <sup>-8</sup>	$-1.387 10^{-8}$
ε <sub>1</sub> = 5	-8.406 10 <sup>2</sup>	-8.405 10 <sup>2</sup>	-8.406 10 <sup>2</sup>	$-8.402  10^2$
ε <sub>η</sub> = 6	2.650 10 <sup>5</sup>	2.649 10 <sup>5</sup>	2.650 10 <sup>5</sup>	2.648 10 <sup>5</sup>
$\varepsilon_3 = 7$	-3.712 10 <sup>7</sup>	-3.710 10 <sup>7</sup>	-3.712 10 <sup>7</sup>	-3.708 10 <sup>7</sup>
σ <sub>3</sub> = 210	1.950 10 <sup>9</sup>	1.949 109	1.950 10 <sup>9</sup>	1.947 10 <sup>9</sup>
-	1.329 10 <sup>-12</sup>	3.283 10 <sup>-12</sup>	1.066 10 <sup>-14</sup>	1.135 10 <sup>-11</sup> BUS

ANNEXE 5

CALCUL DES ELEMENTS DIAGONAUX DU TENSEUR E

A PARTIR DES COEFFICIENTS DE REFLEXION NORMALE

Les coefficients viennent de l'exemple théorique étudié à l'annexe 2.Dans cette annexe, on avait choisi :

 $\epsilon_1 = 1.5$   $\epsilon_2 = 1.7$   $\epsilon_3 = 1.9$ 

Tous les résultats donnés par le programme sont des nombres complexes notés :

(partie réelle, partie imaginaire)

COEFFICIENTS DE REFLEXION : (.01326 , .00000) AXE ØX : (-.12765,.00000) (-.15121,.00000) (-.15126,.00000) (-.11240,.00000) (.01400,.00000) AXE ØY : AXE ØZ : (-.11225,.00000) (-.12753,.00000) (.01035,.00000) VALEURS DE A-B-C-D : (-.04896 , .00000) ( .94916 , .00000) (-6.89772 , .00000) (22.28662 , .00000) CALCUL DE SIGMA 3 : (4.84700 , .00000) (4.84590 , .00000) (.00000 , .00000) (4.84607 , .00000) VALEUR MØYENNE : (4.84632 , .00000) 1 = : (5.10132 , .00000) SIGMA 2 = : (8.63230 , .00000) SIGMA 1 = :VALEURS DES CONSTANTES DIELECTRIQUES : (1.91903 , .00000) (1.51155 , .00000) (1.67073 , .00000)

- 117 -

DANS LE CAS PARTICULIER D'UN PLAN DE SYMETRIE

Les données viennent de l'annexe 3, dans laquelle on avait calculé les coefficients de réflexion normale en choisissant :

 $\epsilon_1 = 1.5$   $\epsilon_2 = 1.7$   $\epsilon_3 = 1.9$   $\cos 2\omega = .69813$ 

#### 1- Calcul direct par la méthode particulière du chapitre II, §9 :

Le programme de l'annexe 11 fournit les résultats suivants :

N 1	= (1.22522, 0.)	soit :	$\varepsilon_1 = (1.50116, 0.)$
<sup>N</sup> 2	= (1.30388, 0.)	soit :	$\epsilon_2 = (1.70010, 0.)$
<sup>N</sup> 3	= (1.37780, 0.)	soit :	$\epsilon_3 = (1.89833, 0.)$
cos2ω	= ( .70358, 0.)		

## 2- Calcul par utilisation du programme général :

On a complété par des données manquantes ( $r_{yyz}$  et  $r_{yyx}$ ) par des zéros : CØEFFICIENTS DE REFLEXIØN : AXE ØX : (-.13188,.00000) (-.14947,.00000) (.00000,.00000) AXE ØY : (-.15033.00000) (-.10979,.00000) (-.02079.00000) AXE ØZ : (-.10900.00000) (-.13188.00000) (.00000,.00000) VALEURS DE A-B-C-D : ( -.04899 , .00000) (.94945 , .00000) (-6.89980 , .00000) (22.29053 '.00000) CALCUL DE SIGMA 3 : (4.84518 , .00000) (4.84498 , .00000) (.00000 , .00000) (4.84524 , .00000) VALEUR MØYENNE : (4.84513 , .00000) SIGMA 1 = : (5.10024 , .00000) SIGMA 2 = : (8.63031 , .00000) VALEURS DES CØNSTANTES DIELECTRIQUES : (1.90474 , .00000) (1.50245 , .00000)

#### APPLICATION DES METHODES DE DETERMINATION

AU CAS D'UN CRISTAL ANISOTROPE ABSORBANT

#### 1- CALCUL DES COEFFICIENTS COMPLEXES DE REFLEXION NORMALE :

Nous calculons d'abord les coefficients de réflexion normale d'un cristal anisotrope absorbant sur trois plans réflecteurs disposés selon le cas particulierétudié au chapitre II, §9 (axes OY et Oy confondus).

Nous partons des données suivantes :

$$\widehat{\epsilon_1} = (.6, -1.5)$$
  
 $\widehat{\epsilon_2} = (.4, -1.7)$   
 $\widehat{\epsilon_3} = (.2, -1.9)$   
 $\cos 2\widehat{\omega} = (.69813, .34907)$   
soit  $\widehat{\omega} = (25^{\circ} 15', 12^{\circ} 30')$ 

Le programme de l'annexe 9 donne alors :

Axe Ox :	(~.15491, .34057	) (18993, .35	.0 (081)	,	.0	)
Axe Oy :	(18771, .35262	) (12607, .32	(0	1228,	<b>.03</b> 753	;)
Axe Oz :	(12790, .11437	) (15491, .34	.057) (.0	,	.0	)

2- CALCUL DIRECT DES CONSTANTES OPTIQUES (PROGRAMME DE L'ANNEXE 11)

A l'aide des données calculées ci-dessus, ce programme fournit les résultats suivants :

 $\widehat{N}_{1} = (1.05219, -.71278) \quad \text{soit} \quad \widehat{\varepsilon}_{1} = (.59905, -1.49996)$   $\widehat{N}_{2} = (1.03589, -.82052) \quad \text{soit} \quad \widehat{\varepsilon}_{2} = (.39982, -1.69998)$   $\widehat{N}_{3} = (1.02771, -.92464) \quad \text{soit} \quad \widehat{\varepsilon}_{3} = (.20123, -1.90052)$  $\cos 2\widehat{\omega} = (.70060, .34723)$  3-

#### SECOND CALCUL DES CONSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES

Nous pouvons également, comme il a été fait dans l'annexe 6 pour un cristal transparent, calculer les constantes diélectriques principales de cet exemple fictif en utilisant le programme général de l'annexe 10. Dans ce cas, on complète par des zéros les données manquantes  $(r_{xyz}^{\wedge} \text{ et } r_{zxy}^{\wedge})$ .

```
CØEFFICIENTS DE REFLEXION :

AXE 0X : (-.15491,.34057) (-.18993,.35081) (.00000,.00000)

AXE 0Y : (-.18771,.35262) (-.12607,.32181) (-.01228,.03753)

AXE 0Z : (-.12790,.32011) (-.15491,.34057) (.00000,.00000)

VALEURS DE A-B-C-D :

(.03079, .00870) (.57724, -.37763)

(.76399,.5.52487) (-13.16284,-15.10889)

CALCUL DE SIGMA 3 :

(-3.53898, 4.06608) (-3.54006, 4.06514)

(.00000, .00000) (-3.54016, 4.06432)

VALEUR MØYENNE : (-3.53973, 4.06518)

SIGMA 1 = : (1.19968, -5.10010) SIGMA 2 = : (-8.19023, -4.15949)

VALEURS DES CØNSTANTES DIELECTRIQUES :

(.60177, -1.50031)

(.20146, -1.90248)

(.39646, -1.69731)
```

Les deux méthodes redonnent bien les constantes diélectriques initiales.

Nous sommes partis du cas théorique de l'annexe 7 :

$$\vec{\hat{e}d} = \begin{bmatrix} \hat{e}_1 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{e}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{e}_3 \end{bmatrix}$$
 et  $\hat{A} = \begin{bmatrix} \cos \hat{\omega} & 0 & \sin \hat{\omega} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \hat{\omega} & 0 & \cos \hat{\omega} \end{bmatrix}$ 

avec :

$$\hat{\epsilon}_1 = (.6, -1.5)$$
  $\hat{\epsilon}_2 = (.4, -1.7)$   $\hat{\epsilon}_3 = (.2, -1.9)$   
et :  $\hat{\omega} = (25^\circ 15', 12^\circ 30')$ 

Nous allons écrire l'expression du tenseur  $\hat{\epsilon}$  dans la base réelle (R), puis diagonaliser séparément ses parties réelle et imaginaire de façon à faire apparaitre les ellipsoïdes définis au chapitre IV § 5-3.

# Expression du tenseur $\hat{\epsilon}$ dans la base réelle expérimentale :

on se	Sert de 1	expi	ession (ci	• p. 90)	: <sup>ɛ</sup> ij <sup>=</sup>	aik ji	l <sup>.εα</sup> kl,s	010	:	
	.46981	0	22693		+1.49056	0	+.11183			-
Ê =	0	.4	о	- j.	о	+1.7	0	-	ε' -	j.ε"
	22693	0	.33019		+.11183	0	1.90944			

Diagonalisation de  $\varepsilon'$ :

→.		63740	0	0			.80439	0	.59411
ε'd	=	. 0	.40004	0	۲'۵	=	0	1	о
		0	0	.16256			59411	0	.80439
		L					$\mathbf{X}$		

Angle de la direction principale associée à  $\epsilon'd_{11}$  avec l'axe 0x :

 $\theta_{c}^{*} = \operatorname{Arc.cos}(.80439) = 36^{\circ} 27^{\circ}$ 

- 121 -





Angle de la direction principale associée à  $\epsilon$ "d<sub>11</sub> avec l'axe 0x :  $\theta$ " = Arc.cos(.97008) = 14° 3'

D'où la représentation du cristal absorbant à l'aide des deux "ellipsoïdes" définis au chapitre IV, §5-3 :



ANNEXE 8

CALCUL DES NEUF CØEFFICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE POUR UNE POSITION QUELCONQUE DU REPERE (R) SUBROUTINE INDICE(E1,E2,E3,U1,U2,U3,Z1,Z2) CALCUL DES INDICES N' ET N" DES VIBRATIØNS PRIVILEGIEES COMPLEX E1, E2, E3, U1, U2, U3, Z1, Z2, DEL, DEL2, C1, C2, C3 C1=E1\*U1\*U1+E2\*U2\*U2+E3\*U3\*U3 C2=E1\*(E2+E3)\*U1\*U1+E2\*(E3+E1)\*U2\*U2+E3\*(E1+E2)\*U3\*U3 🖙 C3=E1\*E2\*E3 DEL2=C2\*C2-4.\*C1\*C3 -e t-f - -----DEL=CSQRT(DEL2) 21 = (C2 + DEL) / (2 + C1)Ð 22=(C2-DEL)/(2.\*C1) WRITE(108,5)21,22 FØRMAT(2F10.5) B RETURN -----END SUBROUTINE PENTE(E1, E2, E3, U1, U2, U3, U4, U5, U6, U7, U8, U9, T; Z) CALCUL DE LA PENTE T DE L'INDUCTION ELECTRIQUE COMPLEX E1, E2, E3, U1, U2, U3, U4, U5, U6, U7, U8, U9, T, Z, C1, C2, C3 C1=(T-E1)\*(E2-E3)/U7 O C2=(T-E2)\*(E3-E1)/U8 C3=(T-E3)\*(E1-E2)/U9 Z=-(C1+U1+C2+U2+C3+U3)/(C1+U4+C2+U5+C3+U6) O-----WRITE(108,3)Z FØRMAT(2F10.5) RETURN END SUBRØUTINE CØEFF(U1,U2,U3) CALCUL DES TRØIS CØEFFICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE COMPLEX U1, U2, U3, P, Q, C1, C2, C3, Z1, Z2, Z3 C1=CSQRT(U1) C2=CSQRT(U2) P=(1+-C1)/(1++C1) Q=(1.-C2)/(1.+C2) C3=1+U3\*U3 В Z1=(P+Q\*U3\*U3)/C3 Z2=(P\*U3\*U3+Q)/C3 Z3=(P-Q)\*U3/C3 ٩ WRITE(108,4)C1,C2,Z1,Z2,Z3 FØRMAT(4F10.5,/,3(2F10.5,/)) RETURN B ter and terrarian and terr END COMPLEX V1, V2, V3, AL, PH, BE, A11, A12, A13, A21, A22, 1A23, A31, A32, A33, TG, SI2, SI, CØ, N1, N2 READ(105,10)N FØRMAT(13) K=1 8 READ(105,1)V1,V2,V3,AL,PH,BE 1 FØRMAT(2F10.5) CALCUL DES ELEMENTS DE LA MATRICE DE PASSAGE N2=CCØS(PH) N1=CSIN(PH) CØ=CCØS(AL)

R

- 122 -

		-
a man an a		D
	TG=CC0S(BE)	
·. ·· ·	SI=CSIN(BE)	
	A11=N2*TG	
	A12=-1.*SI*C0-PH*N1*TG	
	A13=PH*SI-N1*C0*TG	
	A21=N2*SI	-
	$A22 = 16 \times 60 - PH \times N1 \times S1$	
		Ð
	A32=PH*N2	
a i si si	A33=N2*CØ	
	WRITE(108,2)A11,A12,A13,A21,A22,A23,A31,A32,A33	<b>-</b>
2	FØRMAT(6F10.5)	
	CALL INDICE(V1,V2,V3,A11,A12,A13,N1,N2)	
	CALL PENTE(V1, V2, V3, A21, A22, A23, A31, A32, A33, A11, A12, A13, N1, TG)	
	CALL COEFF(N1,N2,TG)	
	CALL INDICE( $V1$ , $V2$ , $V3$ , $A21$ , $A22$ , $A23$ , $N1$ , $N2$ )	
	(ALL FENTE(VI)V2)V3)A3I)A32)A33)A1I)A12)A13)	
	CALL COFFF(N1.N2,TG)	
	CALL INDICE( $V1$ , $V2$ , $V3$ , $A31$ , $A32$ , $A33$ , $N1$ , $N2$ )	
	- CALL PENTE(V1, V2, V3, A11, A12, A13, A21, A22, A23,	
	1A31, A32, A33, N1, TG)	
	CALL COEFF(N1,N2,TG)	
	K=K+1	
	IF(K-N)25,25,30	0
30	S 10P	
and the second se		0
DONNE	es :	
N	EST LE MAMPRE DIEVECUITIANE DU DEGEDANNE	
	V2. V3 SONT LES CONSTANTES DIFLECTRIQUES PRINCIPALES	
AL	V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES; PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1.	•
AL	<pre>&gt;&gt; V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; ., PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1.</pre>	
AL	<pre>&gt;&gt; V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; ., PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1.</pre>	
AL LE-PR	V2; V3 SØNT LES CØNSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS;	
AL LE-PR PØUR	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS	
AL LE-PR PØUR CØEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS 'ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL LE PR POUR COEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS, CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL LE-PR PØUR CØEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS, CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL LE PR POUR COEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES ; ., PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N'', LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL EEPR POUR COEFF	, V2; V3 SØNT LES CØNSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL EEPR PØUR CØEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI PROGRAMME ; , V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL EE PR POUR COEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI PRØGRAMME ; , V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL EE PR POUR COEFF	, V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DI PRØGRAMME ; , V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL EE PR PØUR CØEFF	<pre>&gt;&gt; V2; V3 SØNT LES CØNSTANTES DU PROGRAMME ; , V2; V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. @GRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.</pre>	
AL EEPR POUR COEFF	<pre>&gt; V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; ., PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. 20GRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS, CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.</pre>	
AL EE PR POUR COEFF	<pre>&gt; V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.</pre>	
AL EEPR POUR COEFF	<pre>cst LE NOMBRE D'EXECUTIONS DU PROGRAMME ; , V2, V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; ., PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE. BUSA</pre>	
AL EEPR PØUR CØEFF	ROWTHRE D'EXECUTIONS DU PROGRAMME ; , V2; V3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE.	
AL EE PR POUR COEFF	ROGRAMME CALCULE D'ABORD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N", LA PENTE T ET LES TROIS ICIENTS DE REFLEXIÓN NORMALE.	
AL EEPR POUR COEFF	BUST LE NOMBRE D'EXECUTIONS DU PROGRAMME ; . V2; V3 SØNT LES CONSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES ; . PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A; PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N'', LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE. BUST	
AL LE PR POUR COEFF	BUS CE NOMBRE D'EXECUTIONS DU PROGRAMME ; , V2; V3 SØNT LES CONSTANTES DI ELECTRIQUES PRINCIPALES ; , PH, BE SØNT LES ANGLES D'EULER DEFINIS DANS L'ANNEXE 1. RØGRAMME CALCULE D'ABØRD LES ELEMENTS DE LA MATRICE A, PUIS; CHAQUE FACE, LES INDICES N' ET N'', LA PENTE T ET LES TRØIS ICIENTS DE REFLEXIØN NØRMALE. BUS	

ANNEXE 9

D CALCUL DES CØEFFICIENTS DE REFLEXION NORMALE D DANS LE CAS D'UN PLAN DE SYMETRIE ---- Control of the second se in a conservation de la conservatio - ----------COMPLEX E1, E2, E3, C0, XYY, XZZ, ZXX, YZZ, YXX, YZX, 1N1, N2, N3, P, Q, SI READ(105,1)N - 12-C ł FØRMAT(13) K=1 25 READ(105,2)E1,E2,E3,C0 Ð 2 FØRMAT(2F8.5) N1=CSQRT(E1) N2=CSQRT(E2) Ð N3=CSQRT(E3) XYY=(1-N2)/(1+N2) P=(1-N1)/(1+N1)D Q = (1 - N3) / (1 + N3)N1 = P + QN2=(P-Q)\*CQθ YZZ=(N1-N2)/2 YXX=(N1+N2)/2 SI=CSQRT(1.-CØ\*CØ) YZX=(Q-P)\*S1/2. N3=2\*E1\*E3 P=E1+E3Ð -Q=(E1-E3)\*C0 N2=N3/(P+Q) N1=CSQRT(N2) . D ----XZZ = (1 - N1) / (1 + N1)N2=N3/(P-Q) N1=CSQRT(N2) -----ZXX=(1-N1)/(1+N1) WRITE(108,3)XYY,XZZ,ZXX,YZZ,YXX,YZX 3 FØRMAT(6F10.5,/,6F10.5) D K=K+1 IF(K-N)25,25,30 STØP n 0 ------. . . . END د المراجع معرف المراجع . . Anna Anna I I I I С - E . . . Anne and a second secon NNEES : U N EST LE NOMBRE D'EXECUTIONS DU PROGRAMME E1, E2, E3 SØNT LES CØNSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES ;  $CO^{-} = COS(2.*OMEGA).$ 0 6)

- 124

ANEXE 10

-----

··-· ·· .

- 125 -· · · · · · · · · · · ·

	CALCUL DES CONSTANTES DIELECTRIQUES PRINCIPALES
	CONJAISSANT LES COEFFICIENTS DE REFLEXION NORMALE
······································	
	and an anna an an anna a falaice ann an anna a' stairte ann a' stàirte ann anna anna an <u>dhe muc</u> ha anna an an an a Anna anna anna anna an
C	SUBROUTINE NELLY $(X, Y, Z, S, P)$
	COMPLEX FA, GU, OA, S, P, X, Y, Z
	GU=(X-Y)*(X-Y)+4.*Z*Z
	0A=(44.*FA+FA*FA-GU)*(44.*FA+FA*FA-GU)
	S=2.*(168.*FA*FA+FA*FA*FA*FA-2.*GU*FA*FA
	$P=(A_{+}+A_{+}*FA+FA+FA+FA+G11)*(A_{+}+A_{+}*FA+FA+FA+FA+G11)/(A_{+})$
	WRITE(108,200)X,Y,Z,S,P
200	FORMAT(6F10.5,/,4F10.5)
	RETURN
	UMPLEX 51, 52, 53, P1, P2, P3, U1, U2, U3, U4, U5, RXYY, RXZZ, RXYZ,
1	RYZZ, RYXX, RYZX, RZXX, RZYY, RZXY
	READ(105,10)N
10	FØRMAT(13)
25 - 1	READ(105,1)RXYY, RXZZ, RXYZ, RYZZ, RYXX, RYZX, RZXX,
1	FØRMAT(6F8,5)
	CALL NELLY(RXYY, RXZZ, RXYZ, S1, P1)
	CALL NELLY (RYZZ, RYXX, RYZX, S2, P2)
	CALL NELLY(RZXX,RZYY, KZXY, S3, P3)
	CALCUL DE ALPHA, DELTA, PSI, NU, U ET V
	DEI = S1 + S2 + P1 + P2
The second secon	PSI=P1*S2+P2*S1
1	NU=S1+S2
	WRITE(108,201)ALP, DEL, PSI, NU
201 1	0KMA1(2F10.5)
	V1 = (S1 + S2 + S3)/2
	US=U1+U1
	1/2=V1*V1
	U3=U2+U1
The second secon	
	J4=02+02
t	J5=U3+U2
	V5=V3*V2
C	CALCUL DES CØEFFICIENTS A, B, C, D
	$\frac{12 \times 111 \times 11}{12} = \frac{1}{12} \times \frac{1}{12}$
14	23+110+110-4++ALF+DEL+4++ALF+NU+VI-2++UI+NU+PSI +2++U1+V1+PSI-4++ALF+V2+4+ALP+113+2++N1+(1)
24	4*V3-4•*U5*V1)
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	8=36•+U3+V3-8•+U2+V5-8•+U4+V1+PSI+PSI
14 14	k(18.*U1*V1-4.*V3)
a di seria d	2 · * ALP* DEL*(8 · * V3-36 · * U1 * V1) + NU* NU*
1	134++U3+V1"8+#U2#V3)

2+4.\*ALP\*(18.\*U2\*V1+4.\*V5-22.\*U1\*V3)-4. 2\*ALP\*NU\*(4.\*V4-18.\*U1\*V2) 3+4.\*DEL\*( (.\*U3\*V1-U2\*V3)-4.\*NU\*DEL\*(4 3.\*U3-U2\*V2)-2.\*NU\*(35.\*U3 4\*V2-8.\*U2\*V4-4.\*U4)-2.\*PSI\*(4.\*U 41\*V4-17.\*U2\*V2-4.\*U3) 5+2.\*NU\*PSI\*(4.\*U1\*V3-18.\*U2\*V1) ~~ C=16.\*V3\*V3+10.\*U2\*V2-80.\*U1\*V4-4.\*U3 127.\*PSI\*PSI+NU\*NU\*( 116 \*\* V4-27 \*\* U2-72 \*\* U1 \*\* V2) + 108 \*\* ALP\*DEL 1+108 • \* ALP\*(V2-U1) 2-108 • \* ALP \* NU \* V1 + 4 • \* DEL \* (4 • \* V4 - 18 • \* U1 \* 2V2) - 4. \* DEL \* NU\* (4. \* V3 3-18.\*U1\*V1)-2.\*NU\*(16.\*V5-76.\*U1\*V3-9. 3\*U2\*V1)-2.\*PSI\*(45.\*U1\*V1 4-4.\*V3)+54.\*PSI\*NU\*U1 D=104.\*V3-36.\*U1\*V1+108.\*(NU\*N 1U\*V1+DEL\*V1-DEL\*NU) 2+54.\*PSI-2.\*NU\*(108.\*V2-27.\*U1) E=-27. CALCUL DES RACINES DE L'EQUATION DU QUATRIEME DEGRE U2=-B/(4.\*A) V3=C/(6.\*A) U3=CSQRT(V3) V4=-D/(4.\*A) U4=0 V5=-27./A V2=CSQRT(V5) U5=CSQRT(V2) CHOIX DE LA DETERMINATION DES RACINES CARREES C COMPLEXES C W1=REAL(U2) W2=REAL(U3) W3=REAL(U5) IF(W1\*W2)300,301,301 300 U3=-1.\*U3 301 IF(AINT(W1)-AINT(W3))304,305,304 304 V2=(0.,1.)U5=U5\*V2 W3=REAL(U5) IF(W1\*W3)302,303,303 305 302 US=-1.\*U5 C CALCUL DE SIGMA 3 MØYEN, SIGMA 1 ET SIGMA 2 303 V2=(U2+U3+U4+U5)/3. V3=U1\*V2 V4=V1\*V2 WRITE(108,170)RXYY,RXZZ,RXYZ,RYZZ,RYXX,RYZX, IRZXX, RZYY, RZXY WRITE(108,172)A, B, C, D WRITE(108,173)U2,U3,U4,U5 WRITE(108,174)V2 FORMAT(5x, 16HVALEUR MOYENNE :, 2F10.5, WRITE(108,175)V3,V4 WRITE(108,176) 176 FØRMAT(38HVALEURS DES CØNSTANTES DIELECTRIQUES :) B=-V3 C = V4D = -V2

- 126 -

- 127 -PI=3.141592654 С RESOLUTION DE L'EQUATION DU TROISIEME DEGRE ---------P1=C-B+B/3. P2=2.\*B\*B\*B/27.-B\*C/3.+D B=-B/3. A=-4.\*P1/3. C=CSQRT(A) -3, E A=3.\*P2/(C\*P1) S1=(1.,0.) S2=(0.,1.) WI=REAL(A) W2=AIMAG(A) == 1F(W2)50,51,50 The American Stream 51 IF(W1-1.)52,12,52 52 IF(W1+1.)50,13,50 50 U1=1.-A\*A P3=CSQRT(UT) W1=REAL(P3)/REAL(A) V1=(0.,0.) V1=V1+S1\*ATAN(W1) WI=AIMAG(P3)/REAL(A) W2=(1.+W1)/(1.-W1)V1=V1+S2\*ALØG(W2)/2. G0T014 0 12 V1=0 (20) The second rest of a second second rest of an anti-field second rest of a second re GØTØ14 13 V1=PI 14 VI=V1/3. S1=C\*CCØS(V1)+B S2=C\*CCØS(V1+2.\*PI/3.)+B S3=C\*CCØS(V1+4+\*PI73+)+B WRITE(108,15)S1,S2,S3 =15 FØRMAT(2F10.5) K=K+1 IF(K-N)25,25,30 -----172 FØRMAT('VALEURS DE A-B-C-D :',/,2(3X,4F10.5,/)) FORMAT('CALCUL DE SIGMA 3 : 5/52(3X)4F10.5,7)) 173 175 FORMAT('SIGMA 1 = :')2F10.5,5X,'SIGMA 2 = :', -----12F10.5) 170 FORMATC'COEFFICIENTS DE REFLEXION :', 7, 3X, 1'AXE 0X : ', 3(2X, 2F8.5), /, 3X, 'AXE 0Y : ', 3(2X, 2F8.5), /, T3X, 'AXE ØZ :', 3(2X, 2F8.5)) 30 STOP END 1414

ANNEXE 11

- 128 -

	in an	CALCUL DES CONSTANTES OPTIQUES PRINCIPALES ET DE L'ANGLE	
		OMEGA EN FONCTION DES COEFFICIENTS DE REFLEXION	
<ul> <li>Control of the second se</li></ul>			n na sta s Sina
	CEMPI	LEX AX, AZ, C, D, ALPHA, BETA, DE1, DE2, DE3, RXYY, RXZZ,	
	IS,P,X Cempi	X1,X3,E1,E2,E3,C0,SI,N1,N2,N3,RZXX,RYZZ,RYXX LEX XYY,XZZ,ZXX,YZZ,YXX	
	DIME	NSIØN XYY(100), XZZ(100), ZXX(100), YZZ(100),	
<pre>bindpart setup control of the bindpart control of the bindpart bindpart control of the bindpart bindpart control of the bindpart bindpart control of the bindpart control</pre>	READ	(555,1)N	
T	FØRMA	AT(I3)	. 21
	1YXX()	(353,2)(Aff(I), X22(I), 2XX(I), Y22(I), I), I=1,N)	
2	FØRMA	AT(10F6.4)	
<u> </u>	DØ201	l=1,N,1	
C		UL DES CONSTANTES OPTIQUES NI ET N3	
	AZ=()	1.+ZXX(I))*(1.+ZXX(I))/((1ZXX(I))*(1ZXX(I)))	
		+AZ Z(1)+YXX(1)	(
	ALPHA	A=(2.+D)/(2D)	
	BETA=	=D/(2D) BETA*BETA+2.*AI PHA+C	- (
	DE3=0	CSORT(DE1)	······································
	S=BET P=ALF	TA+DE3 PHA+BETA+S	
	DE2=S	5*5-4*P	
	X1 = (S)	350R1(DE2) S+DE1)/2	
	X3=(S	S-DE1)/2	
	N3=1/	/X3	1
C	CALCU	JL DE N2, CØS(2*ØMEGA), SIN(2*ØMEGA)	
	CØ=(A	AZ-AX)/(X1*X1-X3*X3)	
	SI=CS WRITF	SQRT(1-C0*C0) S(108-5)L-N1-N2-N2-C0-ST	
5	FØRMA	4T(' ',/,I3,6(3X,F8.5),/,'***',4(3X,F8.5))	
C	CALCU	JL DES CINQ CØEFFICIENTS DE REFLEXIØN	
	P=(1-	·N1)/(1+N1)	
	S=(1- E1=P+	·N3)/(1+N3) ·S	
	E2=(P	>-S) ∗CØ	L.
	RYXX=	(E1+E2)/2	
	E1=N1	*N1	
Nacanana Anna Ang a	N3=2*	(E1*E3	
The second secon	P=E1+ S=(E1	E3 -E3)*C0	
	·		

- 129 -N2=N3/(P+5) N1=CSQRT(N2) RXZZ=(1-1)/(1+N1) N2=N3/(P-S) N1=CSQRT(N2) RZXX=(1-N1)/(1+N1) WRITE(108,3)RXYY,RXZZ,RZXX,RYZZ,RYXX 3 FØRMAT(\* . ',6(3X,F8.5),/,3X,4(3X,F8.5)) CONTINUE 20=-STØP END -DØNNEES : N EST LE NØMBRE DE PØINTS DE CALCUL (N<100) ; XYY, XZZ, ZXX, YZZ, YXX SONT LES CINQ COEFFICIENTS DE REFLEXION J LE PRØGRAMME CALCULE LES CØNSTANTES ØPTIQUES N1, N2, N3 DU CRISTAL, AINSI QUE COS(2\*OMEGA) ET SIN(2\*OMEGA), PUIS RECALCULE A L'AIDE DE CES VALEURS LES CINQ COEFFICIENTS DE REFLEXIÓN INITIAUX. 

ANNEXE 12

- 130 -

CALCUL DES DEPHASAGES PAR LA METHØDE DE KRAMERS-KRØNING DØNNEES : N EST LE NØMBRE DE PØINTS DE CALCUL (N<100) ; R = FACTEURS DE REFLEXION NORMALE ; A = LØNGUEUR D'ØNDE EN MICRØNS. DIMENSION R(100), A(100), P(100), Z(20) READ(555,1)(Z(I),I=1,20),N FØRMAT(20R1,/,3X,13) 1 WRITE(108,2)(Z(I),I=1,20),N FORMAT(4X,/,10X,20R1,/,'NOMBRE DE POINTS :',13 READ(555,3)(A(I),R(I),I=1,N)FORMAT(5(2X, F5.2, F5.3)) DØ4I=1,N,1 CALCUL DES NØMBRES D'ØNDE A(I)=10000./A(I) -4 -----N1=N-1 C1 = ALØG(R(1))DØ5I=1,N1,1 C CALCUL DES PENTES DE LØG(R) C2=ALØG(R(I+1))P(I) = (C2 - C1) / (A(I+1) - A(I))C1 = C2PI=3.141592654 DØ109J=1,N1,1 C BOUCLE DE CALCUL DE PHI POUR CHAQUE NOMBRE D'ONDE PHI=0 X = A(1) / A(J)IF(X-1)6,7;6 C1=-(X+1.)\*ALØG(X+1.) GØTØ8 ABS0 = ABS(X - 1.)6 C1=(X-1.)\*ALØG(ABS0)-(X+1.)\*ALØG(X+1.) 8 DØ110I=1,N1,1 BOUCLE DE CALCUL DE PHI POUR UN NOMBRE D'ONDE X=A(I+1)/A(J)IF(X-1)9,10,9 10 C2=-(X+1.)\*ALØG(X+1.) ----GØTØ11 9 ABS0=ABS(X-1.) C2=(X-1.)\*ALØG(ABSØ)-(X+1.)\*ALØG(X+T 11 PHI=PHI+P(I)\*(C2-C1) C1=C2 110 PHI=PHI\*A(J)/(2.\*PI) ABS0=SQRT(R(J)) ----C1=ABSØ\*CØS(PHI) C2=ABS0\*SIN(PHI) PHI=PHI\*180./PI О WRITE(108,12) J, A(J), R(J), PHI, C1, C2 12 FØRMAT(13,2X,F7,2,5(2X,F10,5)) 109 CONTINUE 0 STØP END

#### BIBLIOGRAPHIE

Abréviations de quelques revues citées :

Ann. der Phys. : Annalen der Physik
Br. Jr. Ap. Phys. : British Journal of Applied Physics
B.S.F.M.C. : Bulletin de la Société Française de Minéralogie et de Cristallographie
C.R.A.S.P. : Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences de Paris
F. der M. : Fortschritte der Mineralogie
Jr. Chem. Phys. : Journal of Chemical Physics
J.O.S.A. : Journal of the Optical Society of America
Jr. Phys. Rad. : Journal de Physique et le Radium
J.P.S.J.: Journal of the Physical Society of Japan
Proc. Phys. Soc. : Proccedings of the Physical Society

1	BRUHAT,	Cours	ď	'Optique,	Masson	Ed.	1959,	p.	335	à	337.
---	---------	-------	---	-----------	--------	-----	-------	----	-----	---	------

- 2 BORN, WOLF, Principles of Optics, Pergamon Press Ed. 1959, p. 39.
- 3 AVERY, Proc. Phys. Soc., 1951, t. 64, p. 1087.
- 4 AVERY, idem, 1952, t. 65, p. 425.
- 5 SIMON, J.O.S.A., 1951, t.41 n° 5, p.336 et p.730.
- 6 SIMON, MAC-MAHON, Jr. Chem. Phys., 1953, t. 21 n° 1, p. 23.
- 7 ABELES, Revue d'Optique, 1952, t. 31 n° 3, p. 127.
- 8 HUMPHREYS-OWEN, Proc. Phys. Soc., 1961, t. 77 n° 5, p. 949.
- 9 ROBINSON, Proc. Phys. Soc., B, 1952, t. 65, p. 910.
- 10 QUENEY, Annales de Géophysique, 1966, t. 22 n° 4, p.628.
- 11 PONTIER, DECHAMBENOY, Annales de Géophysique, 1965, t. 21, p. 462.

- 131 -

.12	PONTIER, DECHAMBENOY, idem, 1966, t. 22, p. 633.
13	Q ERRY, J.O.S.A., 1969, t. 59, p. 876.
14	QUERRY, CURNUTTE, WILLIAMS, J.O.S.A., 1969, t. 59, p. 1299.
15	QUERRY, RUSK, WILLIAMS, J.O.S.A., 1971, t. 61, p. 895.
16	HUNDERI, Applied Optics, 1972, t. 11 n° 7, p. 1573.
17	VINCENT-GEISSE, Journal de Physique, 1964, t. 25, p. 291.
18	VINCENT-GEISSE, idem, 1967, t. 28,p. 26.
19	CAYE, CERVELLE, BILLARD, B.S.F.M.C., 1970, t. 93, p. 72.
20	KOENIGSBERGER, Ann. der Phys., 1913, t. 43, p. 1205.
21	ENGELSRATH, LOWENSTEIN, Applied Optics, 1966, t. 5 n° 4, p. 565.
22	ARMALY, OCHOA, LOOK, Applied Optics, 1972, t. 11 n° 12, p. 2907.
23	HUNTER, J.O.S.A., 1965, t. 55 n° 10 part. 1, p. 1197.
24	BONNEL, C.R.A.S.P., 1972, t. 274, p. 736.
25	BORN, WOLF, Op. Cit., p. 616.
26	SIROHI, Applied Optics, 1971, t. 10 n° 10, p. 2369.
27	ASPNES, STUDNA, Applied Optics, 1971, t. 10 n° 5, p. 1024.
28	LOESCHER, Applied Optics, 1971, t. 10 n° 5, p. 1031.
29	LILJENVALL, MATTEWSON, Applied Optics, 1970, t. 9 n° 6, p. 1489.
30	SCHMIDT, J.O.S.A., 1970, t. 60 n° 4, p. 490.
31	DIGNAM, MOSKOVITS, Applied Optics, 1970, t. 9 n° 8, p. 1868.
32	BASUYAUX, BOILLET, Revue d'Optique, 1968, t. 47 n° 4, p. 173.
33	PIRIOU, thèse, Paris 1968, p. 30 et p. 114. Optica Acta, 1968, t. 15 n° 3, p. 271.
34	AYANT, BORG, Fonctions Spéciales, Dunod 1971, ch. 4.
35	LANDAU, LIFCHITZ, Electrodynamique des milieux continus, Mir 1969,

p. 336.

.

ti 🛃

36	BOWLDEN, WILMSHURTS, J.O.S.A., 1963, t. 53, p. 1073.
37	STERN, Solid States Physics, 1963, t. 15, p. 327.
38	PETERSON, KNIGHT, J.O.S.A., 1973, t. 63 n° 10, p. 1238.
39	VAN KAMPEN, LURCAT, Jr. Phys. Rad., 1961, t. 22, p. 179.
40	SHARNOFF, American Journal of Physics, 1964, t. 32, p. 40.
41	WIGNER, Optical Properties of Solids, Ac. Press Ed. 1966.
42	ABELES, MATHIEU, Annales de Physique, 1958, Série 13, t. 3, p. 1.
43	PINAN-LUCARRE, Thèse, Paris 1970.
44	BALKANSKI, BESSON, J.O.S.A., 1965, t. 55 n° 2, p. 200.
45	ROESSLER, Br. Jr. Ap. Phys., 1965, t. 16, p. 1119.
46	ROESSLER, idem, 1966, t. 17, p. 1313.
47	ANDERMANN, CARON, DOWS, J.O.S.A., 1965, t. 55, p. 1210.
48	MONTANER, GALTIER, DELOUPY, C.R.A.S.P., 1968, t. 266, p. 1268.
49	SCHATZ, MAEDA, KOZIMA, Jr. Chem. Phys., 1963, t. 38 nº 11, p. 2658.
50	LANDAU, LIFCHITZ, Op. cit., p. 84.
51	BORN, WOLF, Op. cit., p. 662 à 670.
52	BRUHAT, Op. cit., p. 391 à 420.
53	DRUDE, Ann. der Phys., 1887, t. 32, p. 584.
54	MOSTELLER, WOOTEN, J.O.S.A., 1968, t. 58 n° 4, p.511.
55	DAMANY, UZAN, Optica Acta, 1970, t. 17 n° 2, p. 131.
56	YAMASHITA, J.P.S.J., 1972, t. 33 n° 5, p. 1407.
57	ABELES, WASHBURN, SOONPAA, J.O.S.A., 1973, t. 63 n° 1, p. 104.
58	GREENAWAY, HARBEKE, BASSANI, TOSSATI, Physical Review, 1969, t. 178, p. 1340
59	BERMAN, KERCHNER, ERGUN, J.O.S.A., 1970, t. 60 n° 5, p. 646.

Sector States

,
60	CERVELLE, B.S.F.M.C., 1971, t. 94, p. 486.
61	CERVELLE, idem, 1972, t. 95, p. 464.
62	NYE, Propriétés Physiques des Cristaux, Dunod Ed. 1961, p. 9 à 13
63	BRUHAT, Op. cit., p. 467.
64	LANDAU, LIFCHITZ, Op. cit., p. 411-412.
65	NYE, Op. cit., p. 44.
66	BRUHAT, Op. cit., p. 366 à 370.
67	BORN, WOLF, Op. cit., p. 610.
68	BEREK, F. der M., 1937, t. 22, p. 1.
69	STEPHAN, LE CALVEZ, ROBIN, C.R.A.S.P., 1967, t. 265, p. 281.
70	RATH, POHL, Optik, 1970, t. 32, p. 266.
71	BORN, WOLF, Op. cit., p. 705.
72	LANDAU, LIFCHITZ, Op. cit., p. 129.
73	LEFEVERE, MONTEL, Optica Acta, 1973, t. 20 n° 2, p. 97.
74	LEFEVERE, MONTEL, C.R.A.S.P.1971, t. 273, p. 329.
75	PAIN, DUVAL, LECOMTE, C.R.A.S.P., 1953, t. 237, p. 238.
76	VON HAFELE, Z. für Nat., 1963, t. 18a,p. 331.
77	HOHLER, LUTZ, Z. für Naturforsch., A, 1968, t. 33 n° 5, p. 708.







Figure - 2 - : Variation de  $R_{\parallel}$  (60<sup>o</sup>) avec n sur le domaine  $(n_{\ell}, n_{L})$  défini par  $R_{o}$  = .6 = constante .









Figure - 4 b -





Figure - 5 a - : vibration incidente





Figure - 6 - : Variation de tg  $\Delta$  avec l'angle d'incidence et le coefficient d'absorption.



BUS

°









Figure - 9 a - : Dispositif expérimental ( incidence  $12^{O}$  )



BUS

Figure - 9 b - : Dispositif expérimental ( incidence  $45^{\circ}$  )



Figure - 10 a - : Mesure du déphasage d'une vibration elliptique.



Figure - 10 b - : Mesure du déphasage d'une vibration elliptique







Figure - 12 - : Vibrations réfléchies dans la bande 9  $\mu$  par la silice vitreuse. 1 : 1310 cm<sup>-1</sup> - 2 : 1295 cm<sup>-1</sup> - 3 : 1280 cm<sup>-1</sup> - 4 : 1246 cm<sup>-1</sup> - 5 : 1200 cm<sup>-1</sup> 6 : 1136 cm<sup>-1</sup> - 7 : 1080 cm<sup>-1</sup> - 8 : 990 cm<sup>-1</sup> - 9 : 920 cm<sup>-1</sup> -













Figure - 16 - : Construction d'Huygens pour un milieu anisotrope.

÷

BUS





Figure - 17 - : Position des lignes neutres dans le plan d'onde.





Figure - 18 - : Champs transmis quand as t = 0

l'ellipse 1 est l'intersection de l'ellipsoïde des indices avec le plan YOZ (équation  $\frac{y^2}{N_2^2} + \frac{Z^2}{N_3^2} = 1$ ), l'ellipse 2 est l'intersection de cet

ellipsoïde avec le plan d'onde xoy. Ces deux ellipses se coupent en p", donc  $\vec{D}$ " est porté par OP",  $\vec{E}$ " appartient au plan YOZ et est porté par la normale en P" à l'ellipse 1.



Oz , CZ , OT , OY sont coplanaires

OX, Ox, OT, Oy sont coplanaires.





BUS

• • • • •	intersection	de	l'ellipsoïde	des	indices	avec	yoz	(prop.	normale	Ох	)
	"		"	,,	,	"	zox	~	"	Oy	)
····,····,····,	"		"	,,	,	"	хоу	"	"	Oz	)



Bigare 20 : Construction du cercle de Mohr pour trouver N', N", t connaissant les coefficients de réflexion normale sur une face.







Figure 22 a - : Mesure de R<sub>yxx</sub>. L'appareil est schématisé vu de dessus. Les miroirs M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub>, M<sub>3</sub>, M<sub>4</sub> des figures 9 ne sont pas représentés. Le bras supportant M<sub>1</sub> et M<sub>2</sub> est toujours vertical (incidence minimum) - En traits gras, partie mobile.



Figure - 22 b - : Mesure de R<sub>yxz</sub> .






































Figure - 41 - : Analyse d'une vibration elliptique sur la face voz ... En gras, partie mobile.













 $----- y = M \sin(u - \mu)$ 



(BUS)



Figure - 45 - : Variation du pouvoir réflecteur avec la rotation de l'échantillon pour quatre fréquences de la bande d'absorption.





