

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université M. MAMMERY de Tizi-Ouzou
Faculté des Sciences Exactes
Département de Physique

THESE DE DOCTORAT

En
Physique

Thème

*Développement de codes de calcul à base de la
méthode modale de Fourier pour des applications
en nano-optique*

Présentée par :
Mr YALA Hakim

Soutenue le 22 mai 2011 devant le jury composé de :

Mr O. LAMROUS	Professeur–Univ. Tizi-Ouzou	Président
Mr B. GUIZAL	Professeur–Univ. Montpellier 2	Rapporteur
Mr M. D. MITICHE	Maître de conférences–Univ. Tizi-Ouzou	Rapporteur
Mr A. BELKHIR	Maître de conférences–Univ. Tizi-Ouzou	Examineur
Mr A. BOUDA	Professeur–Univ. Béjaïa	Examineur
Mr Y. ZEBBOUDJ	Professeur–Univ. Béjaïa	Examineur

*À mon défunt père et à ma mère
À ma femme et mes deux enfants*

Remerciements

Mes premiers remerciements s'adressent bien évidemment à mes deux encadreurs : Mr MITICHE Moh Djerdjjer, Maître de conférences à l'université de Tizi-Ouzou, et Mr GUIZAL Brahim, Professeur des universités à l'Université Montpellier 2 (France). Je les remercie grandement pour leur gentillesse et leur disponibilité le long de toutes ces années. Qu'ils sachent qu'ils sont devenus pour moi plus que des encadreurs. Je tiens à remercier, tout particulièrement, Mr B. GUIZAL pour son dévouement exceptionnel, sa rigueur scientifique, son soutien et son enthousiasme communicatif sans failles et de m'avoir fait bénéficier de son expérience en méthodes numériques et de ses propres techniques, peu communes, de programmations. Ce travail ne serait jamais arrivé à son terme sans l'aide précieuse dont il m'a fait bénéficier. Je ne le remercierais jamais assez de m'avoir fait confiance depuis le début, d'avoir accepté de travailler avec moi sans me connaître assez et de m'avoir permis et faciliter mon séjour, dans différents laboratoires, en France pendant deux années. Franchement, les mots ne suffisent pas pour lui exprimer toute ma reconnaissance et toute ma gratitude. C'est grâce à lui que j'ai beaucoup progressé pendant ces quatre dernières années. Qu'il sache qu'il est devenu pour moi un très proche Ami.

Je remercie Mr LAMROUS Omar d'avoir accepté de présider mon jury de soutenance. Comme je remercie très chaleureusement MM. ZEBBOUDJ Youcef, BOUDA Ahmed et BELKHIR Abderrahmene de m'avoir fait l'honneur de participer au jury et consacré une partie de leur temps à l'étude de ce mémoire.

Je tiens à remercier sincèrement toutes les personnes (enseignants, thésards et secrétaires), du département d'optique P. M. Duffieux de l'Institut FEMTO-ST (Besançon), en particulier celles de l'équipe nano-optique, pour leur aide, leur soutien et leur formidable accueil. Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux Professeurs FADI Baida et GHARBI Tidjani pour toute l'aide qu'ils m'ont procuré. Qu'ils trouvent ici toute ma reconnaissance et toute ma sympathie. Je remercie également le Professeur Frédéric ZOLLA de l'institut Fresnel de la faculté Saint-Jérôme (Marseille) de m'avoir accueilli dans son laboratoire pour un stage d'un mois. Je voudrais aussi remercier vivement les membres du Groupe d'Études des Semi-conducteurs (GES) de l'Université Montpellier 2 de m'avoir accueilli pendant six mois au sein de leur laboratoire. Particulièrement, je tiens à remercier très chaleureusement le Professeur Didier FELBACQ et le Directeur du Laboratoire Olivier BRIOT pour leur accueil et leur disponibilité.

Mes remerciements les plus chaleureux vont aussi à tous mes amis, notamment A. MEZEGHRANE, A. BELKHIR, H. AIT AMOKHTAR, H. ELAMINE et R. ZEGARI qui m'ont aidé et soutenu pendant les moments difficiles.

Je remercie également le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique Algérien pour la bourse à l'étranger qu'il m'a octroyé et l'université de Béjaïa pour le financement de mes nombreux stages en France.

Les mots de remerciements ne sont pas assez grands, ni forts pour exprimer ce que m'apporte ma propre famille en terme de joie et de réconfort. Que ma femme et mes enfants sachent à quel point je les aime.

Table des matières

Remerciements	2
Liste des figures	7
Liste des tableaux	8
Introduction générale	10
1 Formalisme théorique – Équations de base	14
1.1 Équations de Maxwell	14
1.2 Équations constitutives	15
1.3 milieux absorbants	16
1.4 Convention temporelle adoptée	17
1.5 Équation de propagation du champ électromagnétique	18
1.6 Conditions aux limites d’interfaces	19
1.7 Réseau multicouche	19
1.7.1 Polarisation	20
1.7.2 Développement de Rayleigh et Equation des réseaux	21
1.7.3 Ordres de diffractions propagatifs et évanescents	24
1.7.4 Efficacités de Diffraction	25
1.8 Revue des méthodes utilisées dans l’optique diffractive	27
1.9 Conclusion	29
2 Méthode Modale de Fourier Classique	30
2.1 Position du problème	31
2.2 Méthode modale de Fourier	32
2.2.1 Cas transverse électrique (TE ou s)	33
2.2.2 Cas transverse magnétique (TM ou p)	39
2.3 Calcul des amplitudes des champs diffractés	43
2.3.1 Conditions de continuité du champ électromagnétique	43
2.3.2 Algorithme de la matrice T	45
2.3.3 Algorithme de la matrice S	47
2.4 FMM et PML	51
2.5 FMM et métaux	56
2.6 Conclusion	59

3	<i>Méthode Modale de Fourier Paramétrique</i>	60
3.1	Formulation du problème aux valeurs propres	
	Version Granet-Vallius	61
3.1.1	Changement de variables–Nouveau système de coordonnées	61
3.1.2	Polarisation TM	62
3.2	Reformulation du problème aux valeurs propres	66
3.2.1	Polarisation TM	66
3.3	Résultats numériques	68
3.4	FMM paramétrique pour des structures comprenant des couches homogènes .	71
3.4.1	Position du problème	71
3.4.2	Résultats numériques	74
3.5	Conclusion	77
	Conclusion générale	78
	Bibliographie	81

Table des figures

1.1	Conditions aux limites d'interfaces	19
1.2	Exemple d'un réseau de périodicité 1D	20
1.3	Schéma représentatif des vecteurs d'onde des ordres de diffraction [23].	25
2.1	Discrétisation du réseau suivant y (<i>staircase approximation</i>). Chaque couche a une épaisseur $h_q = y_{(q+1)} - y_q$ et une permittivité ϵ_q supposée constante. La discrétisation doit être aussi fine que possible pour approcher le profil exact du réseau.	32
2.2	Réseau binaire (τ est le facteur de remplissage, compris entre 0 et 1)	33
2.3	Champ électromagnétique dans les différents milieux.	38
2.4	Continuité des composantes du champ électromagnétique à travers les interfaces du réseau.	41
2.5	Convergence de l'efficacité de diffraction du réseau binaire métallique en polarisation TM. $\theta = 30^\circ$, $d = h = \lambda_0$, $\epsilon_q = (0.22 + 6.71j)^2$, $\epsilon_i = \epsilon_t = 1$, $\tau = 0.5$	43
2.6	La matrice $S^{(q)}$ relie les amplitudes entrantes dans la couche q aux amplitudes sortantes	48
2.7	Distribution spatiale de l'intensité du champ magnétique.	51
2.8	Distribution spatiale de l'intensité du champ électrique E_x	51
2.9	Convergence des ordres de diffraction R_{-1} et T_{-1}	51
2.10	Efficacités de diffraction comme fonctions de la longueur d'onde.	51
2.11	Exemple d'une structure 2D avec des PML rectangulaires	53
2.12	Source ponctuelle. Distribution du champ E_z , partie réelle.	53
2.13	Norme du champ magnétique sur deux périodes	55
2.14	Norme de la composante E_x du champ électrique sur deux périodes	55
2.15	Illustration du phénomène de Gibbs : Développement de Fourier de la permittivité relative d'un réseau lamellaire pour $\epsilon_r = -100$ et $M = 10$ (en pointillé) et $M = 50$ (en continu).	56
2.16	Géométrie du problème de diffraction rapporté dans [78] : $\theta = 30^\circ$, $\lambda = 0.6328\mu m$, $d = h = 0.5\mu m$, $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_q = \epsilon_t = -100$	57
2.17	Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage, $\tau = c/d$ (polarisation TM).	57
2.18	Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage (1000 valeurs pour τ à intervalles identiques entre $1nm$ et $499nm$) pour deux ordres de troncature (a) : $M = 15$ et (b) : $M = 30$. Mêmes paramètres que dans [78], mais $\epsilon_q = \epsilon_t = (0.05 + 10j)^2$	58

3.1	Dépendance entre les variables x et u . En pointillés, nous avons utilisé une seule transition; $C_x = 0.9d$ dans l'espace- x et dans l'espace- u $C_u = 0.5d$. En ligne continue, nous avons utilisé deux transitions; $C_{x1} = 0.1d$ et $C_{x2} = 0.9d$ dans l'espace- x et $C_{u1} = 0.3333d$ et $C_{u2} = 0.6666d$ leurs correspondantes dans l'espace- u	63
3.2	Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec (a) : FMM classique et (b) : FMM paramétrique (Version Granet-Vallius). Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 400.	69
3.3	Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec la nouvelle formulation, équation (3.16). Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 400.	69
3.4	Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec la FMM paramétrique (a) : Nouvelle formulation et (b) : Ancienne formulation. Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 2000.	70
3.5	Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec la nouvelle formulation, équation (3.16). Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 400.	70
3.6	Géométrie du problème de diffraction. Chaque couche peut être soit homogène soit un réseau lamellaire de même période d	71
3.7	Temps de calcul des différents problèmes aux valeurs propres en fonction du nombre d'harmoniques de Fourier retenus.	75

Liste des tableaux

3.1	Comparaison entre les valeurs propres calculées : (a) Directement par le solveur aux valeurs propres et (b) En utilisant l'équation (3.26). $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_t = 2.25$. . .	76
3.2	Comparaison entre les valeurs propres calculées : (a) Directement par le solveur aux valeurs propres et (b) En utilisant l'équation (3.26). $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_t = (0.22 + 6.71j)^2$	76

- *Le jour se lève,*
- *Sais-tu pourquoi le cri du coq se fait entendre ?*
- *Le miroir de l'aube te dit qu'une nuit de ton existence s'en est allée.*
- *Le jour se lève,*
- *Tu n'as encore rien appris.*

Omar Khayyâm – Al Rubâ'iyât (les quatrains)

Introduction générale

L'optique a progressé et évolué à travers quatre générations : l'optique conventionnelle, la micro-optique, l'optique intégrée et récemment la nano-optique (nanophotonique). Bien qu'elle soit une science très ancienne, elle n'a connu son véritable essor que durant le dernier quart du siècle dernier. Les premiers travaux ont été attribués à l'école d'Alexandrie (Euclide ; 325-265, Av. J.-C.). Cependant, la réforme de l'optique a été entreprise par les savants musulmans de la période médiévale avec, à leur tête Al-Kindi (801-873) et surtout Ibn Al-Haytham connu sous le nom d'Alhazen (965-1040). Cet illustre savant a véritablement posé les bases de l'optique moderne avec son approche expérimentale de la propagation de la lumière. C'est lui qui a distingué pour la première fois entre l'optique géométrique et l'optique physiologique. Il a, en effet, introduit l'expérimentation dans la physique et surtout apporté les bases pour comprendre les phénomènes lumineux et maîtriser la propagation (réflexion et réfraction) de la lumière, dont la loi a été obtenue par son prédécesseur, Ibn Sahl [1]. L'héritage de ce savant éminent nous a été transmis surtout à travers son œuvre majeure dont le livre principal est *Kitab al Manazir* (le Livre de l'Optique)[2] qui a été traduit en Latin et diffusé en occident au début du 13ème siècle. Ce livre qui était une référence incontournable jusqu'au 17ème siècle, a influencé les travaux sur l'optique de la plupart des savants de la renaissance, tels que Roger Bacon (1214-1292) et Johannes Kepler (1571-1630). Cependant, ni l'ouverture de la voie de développement de l'optique moderne, ni ce qui est sorti de celle-ci au cours du XVIIe siècle n'a marqué une rupture fondamentale avec le passé. La transition du moyen âge à l'optique moderne a été une évolution et non pas une révolution.

Aujourd'hui, les nanotechnologies constituent le but d'une multitude de recherches. La maîtrise des techniques de fabrication des nano-structures, aux propriétés physiques inédites, ouvre, en effet, la voie à des applications qui marquent le début d'une ère technologique absolument innovante. L'optique a bénéficié de ces avancées technologiques et a pris une autre tournure depuis qu'on a démontré, de manière indépendante par Yablonovitch [3] et John [4], que, théoriquement, on pourrait concevoir des matériaux artificiels qui montreraient des bandes interdites photoniques (BIP), par analogie à celles des électrons qui sont responsables du comportement des semi-conducteurs et des isolants. La BIP est un domaine de fréquences pour lequel il n'existe pas d'ondes électromagnétiques susceptibles de se propager au sein du

cristal photonique. On a espéré, en fait, que celui-ci permettrait le contrôle des photons comme cela a été réalisé pour les électrons dans les semi-conducteurs.

Également, l'explosion des télécommunications dans les années 80 a permis à l'optique de devenir une technologie incontournable. Depuis, la recherche s'est orientée vers le développement de nouveaux produits optiques intégrés afin de répondre à la demande toujours accrue en matière de composants optoélectroniques intégrés, en particulier pour les télécommunications optiques. Aujourd'hui, l'utilisation de l'optique touche des domaines stratégiques aussi variés que le spatial et le militaire mais aussi les domaines de la vie quotidienne comme le stockage de données (CD, DVD, . . .), la métrologie, le biomédical, etc. Désormais, la nanophotonique rend possible l'apparition de nouveaux composants permettant la génération, le traitement, la maîtrise et le contrôle de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde ou même inférieure à celle-ci. Pour cela, elle est devenue un champ de recherche très actif et on peut affirmer, sans ambages, que le 21ème siècle sera celui de la photonique alors qu'il était celui de l'électronique au 20ème siècle, malgré que l'optique intervient en complément de l'électronique et non en concurrent. En fait, l'idée de base derrière laquelle se profile l'intérêt d'utiliser le photon plutôt que l'électron provient des fréquences optiques très élevées qui permettent une large bande passante et offrent une capacité de transmission de données inégalée.

Les réseaux de diffraction (les cristaux photoniques par exemple) sont des structures périodiques qui possèdent des propriétés de dispersion et de décomposition de la lumière. Les premières applications de ceux-ci étaient destinées à la spectroscopie. Leurs propriétés de décomposition de la lumière étaient connues, mais les interprétations ont été faites dans le cadre de la théorie ondulatoire scalaire, non encore électromagnétique. Après les travaux de Maxwell qui ont unifié l'optique et l'électromagnétisme, Rayleigh en 1907 est parvenu à expliquer la phénoménologie du réseau grâce à son développement exprimant les champs sous forme de sommes d'ondes planes [5]. Ce développement a permis de calculer les efficacités de diffraction associées aux différents ordres diffractés par le réseau. Il a permis aussi de montrer que l'énergie diffractée dans les différentes directions dépend de la polarisation du champ électromagnétique. Enfin, il a introduit la notion d'onde évanescente (solution des équations de Maxwell), dont l'intérêt s'est révélé aujourd'hui grandiose dans de nombreux domaines comme la microscopie en champ proche et la transmission exaltée [6, 7]. Cependant, ce développement, qui porte aujourd'hui le nom de Rayleigh, n'est valable que dans les milieux homogènes où la permittivité diélectrique est constante. Depuis, plusieurs méthodes théoriques ont été développées pour l'optique diffractive.

Aujourd'hui, du point de vue théorique, des avancées considérables ont été aussi réalisées, notamment dans le domaine numérique. En effet, la puissance des ordinateurs qui est de plus en plus croissante a permis aux chercheurs de résoudre, via les méthodes numériques existantes ou créées et développées nouvellement, des problèmes qui, dans le passé récent, paraissaient

impossibles à traiter. Les matériaux nano-structurés présentent des dimensions de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde, nous nous retrouvons alors dans le domaine raisonnant pour lequel il n'existe pas de solutions approchées fiables [8]. Pour résoudre le problème de manière rigoureuse, il faut donc résoudre les équations de Maxwell dans toute leur généralité et cela ne peut se faire que par le biais de la modélisation numérique. De plus, et pour des raisons économiques, les conceptions et les réalisations de nano-composants optiques sont, pratiquement, toujours précédées par des calculs analytiques ou, ce qui se passe dans la plupart des cas, par des simulations numériques, vu les géométries diverses des domaines de calcul et la difficulté des équations à résoudre. Ces codes de calculs, une fois validés, peuvent nous renseigner sur la faisabilité, l'utilité et la nécessité de telles réalisations ou expériences. La simulation numérique est, par conséquent, considérée comme le substitut des expériences qui sont souvent coûteuses et difficiles à mettre en œuvre.

Les problèmes électromagnétiques de conception et d'analyse sont traités dans les domaines dits temporel et fréquentiel. Dans la première approche on travaille dans l'espace direct alors que dans la deuxième on travaille dans l'espace réciproque de Fourier. Dans la littérature, la méthode numérique la plus souvent utilisée, en tant que méthode temporelle, est la FDTD (*Finite Difference Time Domain*). Cette méthode est générale et fournit des solutions exactes, mais très coûteuse en temps de calcul et très consommatrice en taille mémoire. Parmi les méthodes travaillant dans le domaine fréquentiel, il en est une : la méthode modale de Fourier (FMM, *Fourier Modal Method*), qui se distingue par sa simplicité de mise en œuvre, son efficacité et la rapidité des codes de calcul qui en sont issus. La précision de la solution obtenue dépend uniquement du nombre de termes retenus dans les développements en séries de Fourier des champs avec, toujours comme critère de convergence, la satisfaction de la conservation de l'énergie. C'est une méthode rigoureuse et physique qui permet, en pratique, de suivre la répartition de l'énergie entre les différents modes de la structure. Ces caractéristiques ont fait de la FMM l'une des méthodes les plus populaires dans la communauté des scientifiques de l'optique diffractive. Cependant, comme toutes les méthodes numériques, la FMM présente des problèmes d'instabilités notamment dans le cas des réseaux métalliques en polarisation TM.

Le travail entrepris dans le cadre de cette thèse vise, en partie, à répondre à ces difficultés d'instabilités. Il porte sur la réalisation de codes numériques à base de la méthode modale de Fourier, pour applications en nano-optique. Nous voulons construire un modèle fiable, rigoureux et général qui nous permettra par la suite de l'appliquer à des structures plasmoniques, sub-longueur d'onde, à la microscopie en champ proche, etc.

Le premier chapitre consiste en un rappel des concepts de base de l'électromagnétisme et de la photonique, nécessaires pour la compréhension des chapitres suivants.

Dans le deuxième chapitre, nous avons développé en détail la méthode modale de Fourier et nous avons rappelé ses différents problèmes d'instabilités et les solutions apportées jusqu'alors. Pour l'adapter aux structures finies dans l'espace (ou apériodiques), nous avons introduit le concept des couches parfaitement adaptées (PML, *Perfectly Matched Layers*). Celles-ci sont introduites de manière très simple sous forme d'un changement de variables dans le plan complexe.

Le dernier chapitre porté sur la FMM paramétrique. Cette dernière est une amélioration de la FMM originale, principalement pour surpasser le problème d'instabilité rencontré dans le cas des structures métalliques en polarisation TM. Elle permet également une accélération de la convergence. Ainsi, nous avons rappelé cette méthode sous sa formulation initiale, puis nous avons exposé une nouvelle formulation qui s'est montrée encore plus stable. Enfin, nous avons traité le cas des structures comprenant des couches homogènes, où nous avons proposé une procédure de résolution permettant d'économiser un temps de calcul considérable.

Chapitre 1

Formalisme théorique – Équations de base

L'électromagnétisme est basé sur les équations de Maxwell. Celles-ci ont été écrites dans un premier temps par un ensemble de scientifiques et à partir de l'expérience, mais J. W. Maxwell a eu le mérite de les regrouper et de les compléter pour en faire un modèle consistant et cohérent. Bien qu'il s'agit ici de phénomènes du comportement de la lumière et de la réponse optique de différents réseaux à l'échelle nano, il est intéressant de noter que l'électromagnétisme classique est largement suffisant pour répondre à beaucoup de questions sans avoir recours à la théorie quantique du champ électromagnétique.

Le but de ce chapitre est de rappeler les notions de base de l'électromagnétisme et de la photonique. Nous nous sommes intéressés, particulièrement, à la propagation et à la diffraction du champ électromagnétique par des réseaux périodiques structurés à l'échelle de la longueur d'onde. Ces notions sont, en fait, très utiles pour la compréhension de la méthode modale de Fourier, dont le développement et l'amélioration font l'objet de cette thèse.

1.1 Équations de Maxwell

Les équations de Maxwell décrivent la propagation des ondes électromagnétiques dans le vide, mais aussi dans la matière, en présence des sources de rayonnement, à l'aide de quatre champs :

- * \vec{E} le champ électrique
- * \vec{D} l'induction électrique
- * \vec{H} le champ magnétique
- * \vec{B} l'induction magnétique

En coordonnées cartésiennes, les équations de Maxwell macroscopiques pour un milieu inhomogène et isotrope s'écrivent [9] :

–Loi de Maxwell-Faraday

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.1)$$

–Loi de Maxwell-Ampère

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \quad (1.2)$$

–Loi de Gauss (électricité)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (1.3)$$

–Loi de Gauss (magnétisme)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.4)$$

ρ et \vec{J} représentant les densités de charges et de courant dans le milieu matériel, respectivement.

Les équations (1.1) et (1.2) impliquent 6 équations scalaires, associées aux 6 composantes des champs \vec{E} et \vec{H} . Pour des champs harmoniques, ces deux équations sont suffisantes pour chercher les solutions en champs électrique et magnétique ; les conditions de divergence (1.3) et (1.4) se déduisent directement des deux premières (1.1) et (1.2). En effet, en prenant la divergence de (1.1) et de (1.2) et sachant que $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{A}) = 0$ quelque soit le vecteur \vec{A} , on déduit les relations (1.3) et (1.4).

1.2 Équations constitutives

Aux équations précédentes, il faut ajouter les équations constitutives caractérisant les différents milieux matériels constituant le domaine considéré. Pour un milieu linéaire, homogène et isotrope, les relations liant les champs électromagnétiques aux inductions sont données par :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \quad (1.5)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \quad (1.6)$$

Où ϵ_r et μ_r sont la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique relatives du milieu matériel. ϵ_0 et μ_0 sont leurs valeurs respectives dans le vide : $\epsilon_0 = (36\pi 10^9)^{-1} F/m$ et $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} H/m$.

Dans les milieux anisotropes, ϵ_r et μ_r sont des tenseurs 3×3 ; c'est-à-dire que les vecteurs \vec{E} et \vec{D} (ainsi que \vec{H} et \vec{B}) ne sont pas colinéaires. Ce changement est suffisant pour modifier les équations (1.1)–(1.4) dans le cas des matériaux anisotropes. Cependant, dans tout ce do-

cument nous ne nous intéresserons qu'aux milieux linéaires et isotropes.

La relation de Maxwell-Ampère (1.2) implique que la dérivée temporelle de \vec{D} possède la dimension d'une densité de courant, appelée courant de déplacement. Ce courant est induit de la polarisation dipolaire des molécules du matériau, alors que le courant de conduction \vec{J} est induit par le déplacement des charges libres présentes dans le matériau (métaux, semi-conducteurs, etc.). Le courant de déplacement a été ajouté à l'équation (1.2) pour que les équations de Maxwell deviennent compatibles avec l'équation de conservation de la charge, donnée par :

$$\operatorname{div}\vec{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \quad (1.7)$$

1.3 milieux absorbants

Dans le cas de milieux dispersifs et absorbants, la permittivité relative n'est plus un réel mais un complexe. De plus, elle dépend de la fréquence ω . Elle s'écrit d'une manière générale [10] :

$$\epsilon_r = \epsilon_1 + j\epsilon_2 \quad (1.8)$$

La partie réelle de ϵ_r a pour origine les électrons liés aux atomes ou molécules qui se déplacent autour de leurs positions d'équilibre sous l'action du champ (courant de déplacement) et sa partie imaginaire est liée aux flux des électrons dans le milieu matériel (courant de conduction). En tenant compte de la contribution des charges libres et en supposant que l'intensité du courant est faible, \vec{J} vérifie la loi d'Ohm :

$$\vec{J} = \sigma\vec{E} \quad (1.9)$$

Où σ est la conductivité électrique du milieu. La permittivité relative devient (équation de Maxwell-Ampère) alors :

$$\epsilon_r \equiv \epsilon_r + j\frac{\sigma}{\epsilon_0\omega} \quad \text{avec} \quad j = \sqrt{-1} \quad (1.10)$$

En pratique, pour les milieux dispersifs où la permittivité dépend de la fréquence ω , généralement, on utilise, selon le matériau métallique et le domaine des fréquences considérés, le modèle de Drude ou celui de Drude-Lorentz. Nous donnons ici les expressions de la permittivité diélectrique sans toutefois décrire ces modèles qu'on peut trouver largement dans la littérature.

– Pour le modèle de Drude, la permittivité relative a pour expression :

$$\epsilon_D(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + j\omega\Gamma_D)} \quad (1.11)$$

Avec $\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m \epsilon_0}}$ la fréquence plasma des électrons de masse m et de charge e . ϵ_∞ représente la permittivité du milieu à des fréquences infinies, généralement prise égale à 1. Γ_D est un coefficient d'amortissement, appelé également fréquence de collision ; il est inversement proportionnel au temps de relaxation, $\Gamma_D = \frac{1}{\tau}$.

– Dans le cas du modèle de Drude–Lorentz, ϵ_D a pour expression :

$$\epsilon_D(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + j\omega\Gamma_D)} - \frac{\Delta_\epsilon \Omega_L^2}{(\omega^2 - \Omega_L^2 + j\omega\Gamma_L)} \quad (1.12)$$

ϵ_∞ , ω_p , Γ_D , Γ_L , Ω_L et Δ_ϵ sont des paramètres propres au matériau considéré. Pour l'or par exemple [11] :

$\epsilon_\infty = 9,0685$, $\omega_p = 1,3544 \cdot 10^4 THz$, $\Gamma_D = 115,3593 THz$ dans le cas du modèle de Drude.
 $\epsilon_\infty = 5,9673$, $\omega_p = 1,3280 \cdot 10^4 THz$, $\Gamma_D = 100,0283 THz$, $\Gamma_L = 658,8548 Hz$,
 $\Omega_L = 4,0845 \cdot 10^3 THz$ et $\Delta_\epsilon = 1,09$ dans le cas du modèle de Drude–Lorentz.

Mais dans nos programmes, nous avons utilisé les données expérimentales du modèle proposé dans la référence [12].

Remarque :

Le signe de la partie imaginaire de ϵ_r dépend du choix de la convention temporelle adoptée.

1.4 Convention temporelle adoptée

Nous nous plaçons dans le cadre du régime harmonique et nous adoptons la convention temporelle $e^{-j\omega t}$. Alors toutes les grandeurs dépendantes du temps ont pour forme l'expression suivante :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-j\omega t} \quad (1.13)$$

Où ω est la fréquence angulaire.

Avec cette convention, dériver par rapport au temps équivaut à multiplier par le facteur $-j\omega$. Cependant, pour cette convention, la partie imaginaire de la permittivité, pour une onde propagative, doit être positive. Prendre une partie imaginaire négative conduirait en fait à un gain dans le matériau.

1.5 Équation de propagation du champ électromagnétique

En prenant le rotationnel de l'équation de Maxwell–Faraday et en écrivant \vec{H} en fonction de \vec{E} à l'aide de l'équation de Maxwell–Ampère, on obtient l'équation de propagation du champ électrique qui, dans le cas le plus général, s'écrit :

$$\vec{\nabla} \wedge \left(\frac{1}{\mu_r} \vec{\nabla} \wedge \vec{E} \right) - k_0^2 \epsilon_r \vec{E} = j\omega\mu_0 \vec{J} \quad (1.14)$$

De même, on obtient pour le champ magnétique :

$$\vec{\nabla} \wedge \left(\frac{1}{\epsilon_r} \vec{\nabla} \wedge \vec{H} \right) - k_0^2 \mu_r \vec{H} = \vec{\nabla} \wedge \vec{J} \quad (1.15)$$

Où $k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le vecteur d'onde dans le vide. $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$ est la vitesse de la lumière dans le vide.

Dans un milieu uniforme, en utilisant l'identité $\vec{\nabla} \wedge (\vec{\nabla} \wedge \vec{A}) = \vec{\nabla} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} - \nabla^2 \vec{A}$, les équations (1.14) et (1.15) s'écrivent :

$$\Delta \vec{E} + k^2 \vec{E} = \vec{\nabla} \left(\frac{\rho}{\epsilon} \right) + j\omega\mu \vec{J} \quad (1.16)$$

$$\Delta \vec{H} + k^2 \vec{H} = -\vec{\nabla} \wedge \vec{J} \quad (1.17)$$

Où $k = k_0 n$, avec $n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$ est l'indice de réfraction du milieu.

Dans ces équations, les termes de gauche correspondent aux variations spatiales et temporelles du champ électromagnétique ; la partie gauche de ces équations traduit donc la propagation du champ électromagnétique. Les termes de droite sont à l'origine de celui-ci ; ce sont les termes sources. Pour l'équation en champ électrique (1.16), le premier de ces termes sources indique que les champs statiques sont induits par la présence de charges. Ainsi, on retrouve l'équation de Poisson dans le cas statique ($\partial_t = 0$) et celle de Laplace en absence de charges ($\rho = 0$).

En absence de charges et de courants, les équations précédentes deviennent :

$$\Delta \vec{\psi} + k^2 \vec{\psi} = 0 \quad \text{Avec} \quad \vec{\psi} \equiv (\vec{E}, \vec{H}) \quad (1.18)$$

Cette équation représente les trois composantes du champ vectoriel, dont chacune satisfait à l'équation d'onde scalaire, appelée également équation d'Helmholtz.

La solution la plus souvent utilisée est l'onde plane, dont l'expression générale est donnée par :

$$\vec{\psi} = \vec{\psi}_o e^{j\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (1.19)$$

\vec{r} est le vecteur position du point où l'onde est observée.

L'avantage d'utiliser les ondes planes, comme nous le verrons dans les chapitres suivants, est qu'elles peuvent servir de base sur laquelle nous pouvons projeter le champ électromagnétique de la structure (les modes de la structure).

1.6 Conditions aux limites d'interfaces

Les équations de Maxwell ne peuvent pas être résolues sans spécifier les conditions aux limites sur les interfaces de séparations entre les différents milieux constituant le domaine d'étude. Ces conditions peuvent être obtenues de différentes manières [8], mais elles aboutissent toutes aux mêmes relations suivantes :

$$\vec{n} \wedge (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) = 0 \quad (1.20)$$

$$\vec{n} \wedge (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) = \vec{J}_s \quad (1.21)$$

$$\vec{n} \cdot (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) = \rho_s \quad (1.22)$$

$$\vec{n} \cdot (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) = 0 \quad (1.23)$$

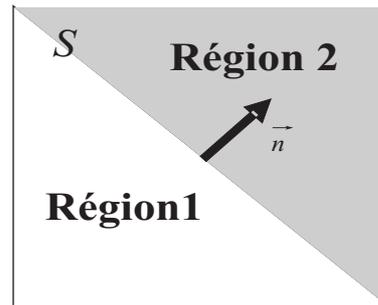


FIG. 1.1 – Conditions aux limites d'interfaces

Où \vec{J}_s et ρ_s sont, respectivement, les densités de courant et de charges sur l'interface de séparation S . \vec{n} est un vecteur unitaire normale à l'interface.

Ainsi, en absence de courant, les composantes tangentielles des champs électrique et magnétique sont continues à travers toute surface. Par contre, même en absence de charges, les composantes normales de ces champs sont discontinues.

1.7 Réseau multicouche

On considère que tous les plans moyens (interfaces entre les différents milieux) sont perpendiculaires à l'axe des y . Cet axe est orienté du milieu d'incidence vers le milieu de transmission (Fig.1.2). Chaque couche est constituée d'un milieu diélectrique, éventuellement métallique, linéaire et isotrope. Un milieu q est repéré par sa permittivité relative $\epsilon_r^{(q)} = \epsilon_q$. Ainsi, toute grandeur associée à ce milieu sera indexée par la lettre q . L'épaisseur d'une couche est exprimée

simplement comme la différence des coordonnées des plans moyens successifs : $h_q = y_{q+1} - y_q$. Dans tout ce document, le milieu d'incidence, ainsi que les champs correspondants, sont indexés par la lettre "i" et le milieu de transmission et les champs associés par "t". Le champ électromagnétique réfléchi est indexé par la lettre "r". Également, dans toute la suite de ce document, nous travaillerons en absence de charges et de courants. Dans le cas des métaux, la conductivité électrique sera intégrée dans la permittivité relative du milieu.

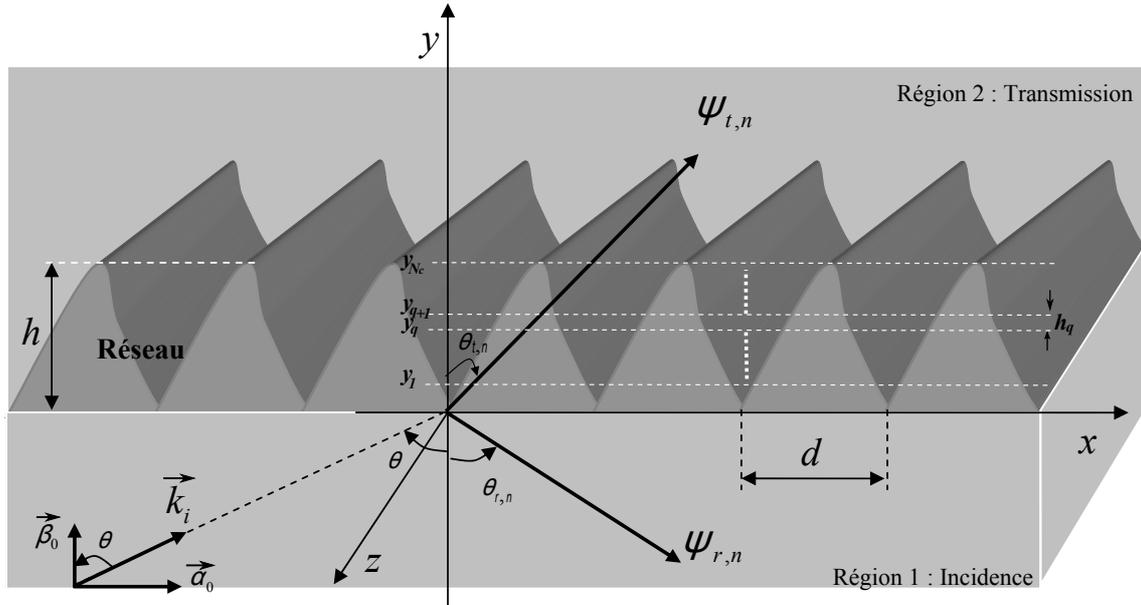


FIG. 1.2 – Exemple d'un réseau de périodicité 1D

1.7.1 Polarisation

On introduit le plan d'incidence comme étant le plan défini par le vecteur d'onde \vec{k} et l'axe normal aux interfaces, Oy . Ce plan d'incidence permet de définir deux types de polarisations :

- Dans le cas où le champ électrique est perpendiculaire au plan d'incidence, la polarisation est dite transverse électrique, TE ou s.
- Dans le cas où c'est le champ magnétique qui est perpendiculaire au plan d'incidence, la polarisation est dite transverse magnétique, TM ou p. Dans ce cas, le champ électrique est dans le plan d'incidence.

Dans cette situation, le vecteur d'onde ne possède que deux composantes, $\vec{k} = (k_x, k_y, 0)$, la diffraction est dite classique. Par contre, dans le cas où le vecteur d'onde \vec{k} n'appartient pas au plan transverse au réseau (ici le plan $z = 0$) ; c'est-à-dire $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, la diffraction est

dite conique. Cependant, dans tout ce travail, nous ne nous considérerons que le premier cas, la diffraction classique, où le réseau est supposé invariant suivant l'axe Oz , ce qui implique que $\frac{\partial}{\partial z} = 0$.

1.7.2 Développement de Rayleigh et Equation des réseaux

On définit le champ diffracté comme étant la différence entre le champ total $\psi(x, y)$ et le champ incident $\psi_i(x, y) = e^{j(\alpha_0 x + \beta_0 y)}$ [8, 13, 14] :

$$\psi_d(x, y) = \psi(x, y) - \psi_i(x, y) \quad (1.24)$$

ψ se réfère à E_z ou à H_z , selon que la polarisation est TE ou TM respectivement. L'onde plane incidente vérifie l'équation d'Helmholtz partout. Par conséquent, le champ diffracté vérifie également cette équation :

$$\Delta\psi_d + k_i^2\psi_d = 0 \quad (1.25)$$

Où $k_i = k_0 n_i$ est le vecteur d'onde dans le milieu incident.

On peut montrer que ψ_d est une fonction pseudo-périodique [8], de même période d que le réseau, vérifiant les conditions aux limites sur les interfaces ainsi que la condition de radiation, stipulant que ψ_d doit être fini quand y tend vers l'infini. Il est donné par :

$$\psi_d(x, y) = \phi(x, y) \cdot e^{j\alpha_0 x} \quad (1.26)$$

Avec :

$$\phi(x + d, y) = \phi(x, y) \quad (1.27)$$

$\phi(x, y)$ est une fonction périodique, donc développable en séries de Fourier :

$$\phi(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \phi_n(y) \cdot e^{j\frac{2\pi}{d}nx} \quad (1.28)$$

Où la somme porte sur tous les entiers relatifs n . Les coefficients de Fourier ϕ_n sont donnés par :

$$\phi_n(y) = \frac{1}{d} \int_0^d \phi(x, y) \cdot e^{-j\frac{2\pi}{d}nx} dx \quad (1.29)$$

En remplaçant (1.28) dans (1.26), on obtient :

$$\psi_d(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \phi_n(y) \cdot e^{j\alpha_n x} \quad (1.30)$$

Où :

$$\alpha_n = \alpha_0 + \frac{2\pi}{d}n = \alpha_0 + nK \quad (1.31)$$

$K = \frac{2\pi}{d}$ est le vecteur pulsation spatiale du réseau. L'équation donnée par (1.31) constitue la fameuse formule des réseaux.

En reportant l'expression de ψ_d dans l'équation d'Helmholtz (1.25) et en projetant sur la base $e^{j\alpha_n x}$, on obtient pour tout entier relatif n :

$$\frac{d^2 \phi_n}{dy^2} + \beta_i^2 \phi_n = 0 \quad (1.32)$$

Avec :

$$\beta_{i,n}^2 = k_i^2 - \alpha_n^2 \quad (1.33)$$

Les valeurs de $\beta_{i,n}$ sont données par :

$$\beta_{i,n} = \begin{cases} \sqrt{k_i^2 - \alpha_n^2} & \text{si } k_i \geq \alpha_n \\ j\sqrt{\alpha_n^2 - k_i^2} & \text{si } k_i < \alpha_n \end{cases} \quad (1.34)$$

La solution la plus générale de (1.32) est :

$$\phi_n(y) = B_n e^{j\beta_{i,n} y} + R_n e^{-j\beta_{i,n} y} \quad (1.35)$$

C'est la somme de deux ondes : une onde montante et une onde descendante. Dans un milieu homogène limité spatialement, une couche, ces ondes sont nécessaires pour décrire le champ diffracté. Cependant, dans la région 1, qui est semi-infinie, la condition de radiation implique que $B_n = 0$, d'où :

$$\psi_d(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} R_n e^{j(\alpha_n x - \beta_{i,n} y)} \quad (1.36)$$

Cette expansion en ondes planes du champ diffracté a été utilisée pour la première fois par J.W.S. Rayleigh [5]. Depuis, et pour cette raison, elle porte le nom de *développement de Rayleigh*.

Pour une onde propagative, $|\frac{\alpha_n}{k_i}| \leq 1$ ce qui peut nous permettre d'écrire [8] :

$$\frac{\alpha_n}{k_i} = \sin(\theta_n) \quad , \quad -\frac{\pi}{2} \leq \theta_n \leq \frac{\pi}{2} \quad (1.37)$$

$$\frac{\beta_{i,n}}{k_i} = \cos(\theta_n) \quad (1.38)$$

Par conséquent, l'équation (1.36) devient :

$$\psi_d(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \psi_n(x, y) \quad (1.39)$$

Où :

$$\psi_n(x, y) = R_n e^{jk_i(\sin(\theta_n)x - \cos(\theta_n)y)} \quad (1.40)$$

Ce qui implique que $\theta_n \equiv \theta_{r,n}$ est l'angle de diffraction de l'ordre n . R_n est son amplitude. Des équations (1.37) et (1.38), la formule des réseaux (1.31) peut s'écrire encore :

$$k_i \sin(\theta_n) = k_i \sin(\theta) + nK \quad (1.41)$$

Finalement, le champ total dans la région d'incidence s'écrit :

$$\psi_i(x, y) = e^{j(\alpha_o x + \beta_o y)} + \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} R_n e^{j(\alpha_n x - \beta_{i,n} y)} \quad (1.42)$$

De même, nous pouvons montrer [8] que dans la région de transmission, en dehors de la zone de modulation ($y > h$), le champ électromagnétique est pseudo-périodique et qu'il peut être décrit par le développement de Rayleigh. Il s'écrit :

$$\psi_t(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} T_n e^{j(\alpha_n x + \beta_{t,n} y)} \quad (1.43)$$

Avec :

$$k_t \sin(\theta_{t,n}) = k_i \sin(\theta) + nK \quad (1.44)$$

Il faut noter que la composante tangentielle du vecteur d'onde du champ diffracté se conserve à travers toutes les interfaces du réseau. en effet, de (1.41) et (1.44), il découle :

$$\alpha_n = k_i \sin(\theta_{r,n}) = k_t \sin(\theta_{t,n}) \quad (1.45)$$

Remarquons que cette dernière équation n'est qu'une généralisation de la loi de réfraction d'Ibn Sahl [1], connue comme loi de Snell–Descartes dans la littérature. En effet, dans le cas d'un dioptre plan, où $\theta_r = \theta_i$, la loi de réfraction est donnée par :

$$k_i \sin(\theta_i) = k_t \sin(\theta_t) \quad (1.46)$$

Les efficacités de diffraction dépendent de R_n et T_n . La question qui s'impose dès lors est : comment déterminer les amplitudes R_n et T_n ? Il est clair qu'il n'est pas possible de les déterminer sans calculer le champ dans la zone de modulation, i.e. le réseau. La méthode de Rayleigh suppose valable les développements (de Rayleigh) de type (1.36) ou (1.43) dans les régions non-homogènes entre les reliefs des interfaces ; la zone de modulation. La validité de cette hypothèse a fait couler beaucoup d'encre ; elle a fait l'objet de longues discussions, voir même de polémiques [15]–[22]. Actuellement, il est admis, qu'en toute rigueur, le développement de Rayleigh n'est valable que dans les milieux homogènes. C'est pour cela que d'autres méthodes, dites rigoureuses, sont apparues. Parmi elles, la *Méthode Modale de Fourier (FMM)* que nous exposerons en détail dans le chapitre suivant.

1.7.3 Ordres de diffractions propagatifs et évanescents

La diffraction de la lumière incidente, par un réseau quelconque, dans des directions clairement distinguées est exprimée par la formule des réseaux. Chacun des développements donnés en (1.36) et (1.43) contient des ondes propagatives et évanescentes, dépendantes des valeurs de n de l'équation des réseaux (1.31). Le vecteur réseau $K = \frac{2\pi}{d}$ est ajouté ou soustrait de α_0 pour former la composante horizontale du vecteur d'onde de l'ordre diffracté ; n fois pour le n ème ordre de diffraction. Comme les longueurs des vecteurs d'onde des ordres diffractés sont égales et limitées, le nombre d'ordres propagatifs est limité [23] et les autres sont évanescents. En effet, pour des valeurs importantes de n , $|\sin(\theta_n)| > 1$. Par conséquent, β_n est imaginaire pure. L'ordre de diffraction correspondant est évanescent. Il est proportionnel à

$$e^{j\alpha_n x} \cdot e^{-\sqrt{\alpha_n^2 - k_m^2} y}$$

C'est une onde qui se propage le long de l'axe Ox , mais qui décroît exponentiellement en fonction de y . Ces ordres ne peuvent pas être détectés à des distances supérieures à quelques longueurs d'onde, mais ils jouent un rôle prépondérant en microscopie du champ proche, guides d'ondes ou réseaux de fibres par exemple. Cependant, ces ordres doivent être pris en compte dans toute théorie électromagnétique rigoureuse.

Pour des valeurs de n telles que $|\sin(\theta_n)| \leq 1$, les ordres de diffraction correspondant, comme nous l'avons déjà signalé plus haut, sont propagatifs. Le n ème ordre est une onde plane de

direction \vec{k}_n et d'amplitude proportionnelle à

$$e^{\vec{k}_n \cdot \vec{r}} = e^{j(\alpha_n x - \beta_n y)}$$

Avec $\beta_n = \sqrt{k_m^2 - \alpha_n^2}$, un réel.

Quand n est nul, le réseau se comporte comme un miroir ; toutes les longueurs d'ondes du champ diffracté étant superposées. La figure ci-dessous résume les différents cas cités ci-dessus.

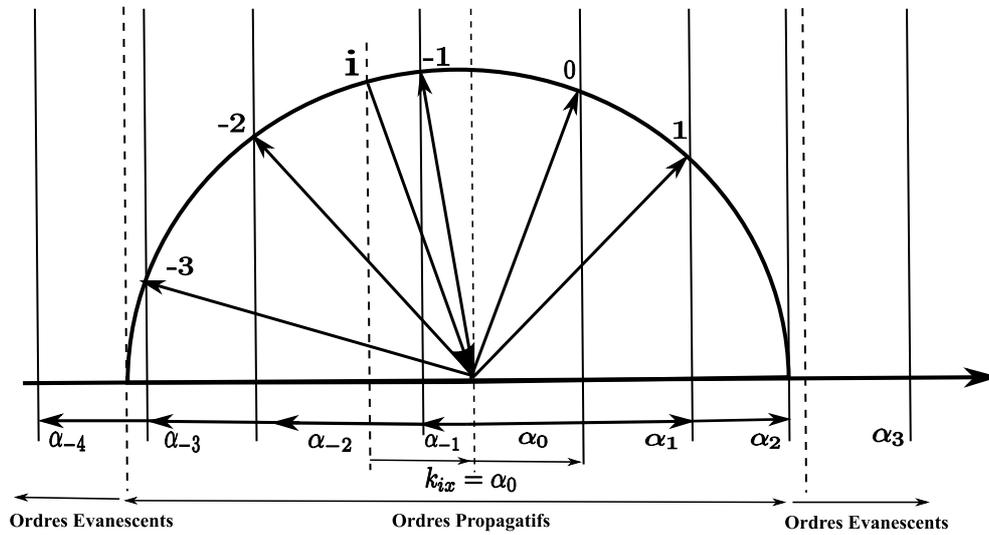


FIG. 1.3 – Schéma représentatif des vecteurs d'onde des ordres de diffraction [23].

1.7.4 Efficacités de Diffraction

L'équation des réseaux détermine les directions des ordres diffractés, mais elle ne nous renseigne pas sur les énergies transportées par ces derniers. La grandeur physique qui caractérise la façon dont la puissance du champ incident est distribuée entre les différents ordres est appelée efficacité de diffraction. Celle-ci est définie comme étant le rapport entre le flux d'énergie d'un ordre n particulier à travers une surface donnée Σ et le flux correspondant de l'ordre incident à travers cette même surface. D'autre part, il est bien connu que le flux du vecteur de Poynting à travers Σ est égal à la puissance transmise par le champ électromagnétique à travers cette surface (la puissance rayonnée à travers la surface Σ). Le vecteur de Poynting est défini par :

$$\vec{P} = \vec{E} \wedge \vec{H} \quad (1.47)$$

Lorsqu'on adopte le régime harmonique du champ électromagnétique, i.e. représentation complexe, le raisonnement se fait généralement sur les valeurs moyennes, calculées sur une période, plutôt que sur les valeurs instantanées. Pour cela, on définit le vecteur de Poynting complexe :

$$\vec{P} = \frac{1}{2} \vec{E} \wedge \vec{H}^* \quad (1.48)$$

Où \vec{H}^* est le complexe conjugué de \vec{H} .

La puissance moyenne traversant une surface Σ est alors donnée par le flux de la partie réelle du vecteur \vec{P} à travers celle-ci.

Soient Φ_i et Φ_n^d les flux à travers Σ , du vecteur de Poynting associés respectivement à l'onde incidente et au n ème ordre diffracté. L'efficacité de diffraction est définie alors par :

$$e_n = \frac{\Phi_n^d}{\Phi_i} \quad (1.49)$$

Les calculs donnent pour les efficacités de diffraction r_n et t_n de l'ordre n réfléchi et transmis, respectivement, les expressions suivantes :

$$r_n = Re\left(\frac{\beta_{r,n}}{\beta_{i,0}}\right) |R_n|^2 \quad (1.50)$$

$$t_n = Re\left(\eta \cdot \frac{\beta_{t,n}}{\beta_{i,0}}\right) |T_n|^2 \quad (1.51)$$

Où Re désigne la partie réelle. $\eta = 1$ pour une onde de polarisation TE et $\eta = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_t} = \left(\frac{n_i}{n_t}\right)^2$ dans le cas de polarisation TM.

L'une des premières règles pour vérifier l'exactitude du calcul effectué provient des lois de base de la physique : la conservation de l'énergie (energy balance criterion, en Anglais). En effet, on peut montrer que la somme des efficacités des ordres propagatifs doit être égale à l'unité [8]. Autrement dit, l'énergie incidente est égale à l'énergie diffractée.

$$\sum_n e_n = 1 \quad (1.52)$$

Avec $e_n = r_n$ (ou t_n).

Dans le cas des milieux absorbants, il faut ajouter les pertes au premier membre de l'équation précédente.

1.8 Revue des méthodes utilisées dans l'optique diffractive

La résolution analytique des équations de Maxwell est rare ; les solutions n'existent que dans certains cas canoniques où les géométries sont simples et présentant un certain nombre de symétries. Dès lors, l'étude de structures électromagnétiques impose d'avoir recours à la modélisation numérique. Dans le cas particulier qui nous intéresse, à savoir l'optique diffractive à l'échelle nano, les théoriciens n'ont pas cessé de chercher les méthodes de calculs les plus efficaces possibles, car le problème est d'autant plus ardu du fait que les matériaux nanostructurés sont de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde [8]. Pour ce type de structures, il est nécessaire de résoudre les équations de Maxwell dans toute leur généralité. Un exposé détaillé de toutes les méthodes existantes dépasse le cadre de cette thèse, néanmoins, nous donnerons dans ce qui suit un aperçu général des méthodes les plus populaires.

Les problèmes électromagnétiques de conception et d'analyse sont traités dans les domaines dits temporels et fréquentiels. Dans la première approche, on travaille dans l'espace direct alors que dans la deuxième on travaille dans l'espace de Fourier. Ces méthodes peuvent être également classées, de manière générale, en deux grandes familles : celles discrétisant l'espace et le temps et les méthodes modales. La première famille consiste à résoudre les équations de Maxwell en discrétisant la structure étudiée par un maillage. Les méthodes les plus répandues pour ce type d'approche sont la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD, *Finite difference time domain*) et la méthode des éléments finis (FEM, *Finite Element method*). Dans la littérature, la méthode numérique la plus souvent utilisée, en tant que méthode temporelle, est la FDTD. Celle-ci a été introduite en 1966 par Yee [24]. L'algorithme sur lequel elle repose résout les équations de Maxwell en discrétisant à la fois l'espace et le temps [25]. Sa formulation théorique est simple et les résultats qu'elle offre sont d'une grande précision pour un large éventail de problèmes électromagnétiques. Toutefois, elle présente l'inconvénient majeur de nécessiter un grand nombre de variables, donc de mémoire de l'ordinateur, ce qui peut conduire à des temps de calcul prohibitifs, notamment à 3 dimensions.

La méthode des éléments finis est une méthode fréquentielle, mais discrétisant l'espace [14]. Cette méthode a été étendue au domaine temporel, FEMTD. Celle-ci discrétise l'espace en éléments finis et le temps en différences finies. C'est une méthode hybride. La FEM fonctionne sous l'hypothèse que toute fonction sur un domaine global peut être approchée par une série de fonctions opérant sur un nombre fini de petits sous-domaines, appelés éléments finis. Contrairement à la FDTD, elle présente l'avantage de discrétiser convenablement le domaine de calcul aussi complexe soit-il (minimisation de l'erreur de discrétisation géométrique). En effet, elle a la possibilité de traiter n'importe quel type de géométrie et d'inhomogénéité matériel sans aucune restriction et sans avoir besoin de changer la formulation utilisée ou le code machine [14]. La discrétisation des équations de Maxwell conduit à un système algébrique dont le nombre d'inconnus est proportionnel au nombre de nœuds du maillage. La résolution, par des méthodes directes ou itératives, du système matricielle ainsi obtenu conduit à la détermination

des valeurs de la solution des équations de départ en chaque nœud du maillage. C'est une méthode très précise. Cependant, comme la FDTD, elle est principalement limitée dans le cas des gros systèmes [26]. En effet, les matrices auxquelles conduit la FEM sont très grandes et creuses (pleine de zéros), notamment dans le cas des maillages très affinés. Le stockage de ce type de matrice n'est pas aisé. Et puis, dans certains cas, comme celui des équations de Maxwell harmoniques, le système d'équations doit être préconditionné et réorganisé de manière appropriée [27]. Par conséquent, une grande quantité de mémoire et un temps de calcul important sont nécessaires. Un autre problème de la FEM, dans le cas des réseaux de diffraction, est celui de la présence des singularités du champ électromagnétique. Dans ces cas, la convergence de la FEM est très lente [26].

La deuxième famille est celle des méthodes modales. Celles-ci consistent, en général, en la projection des champs électrique et magnétique sur les modes propres de la structure. Les méthodes modales sont aussi des méthodes fréquentielles. Il en existe plusieurs. Parmi les plus populaires on peut citer la méthode différentielle [28], la méthode des transformations de coordonnées (appelée méthode C) [29, 30] et la méthode modale de Fourier (FMM) [31]–[33]. C'est cette dernière qui nous intéresse dans ce travail de thèse. Le chapitre 2 de ce mémoire est consacré complètement à cette méthode. Néanmoins, il est intéressant de donner un bref aperçu historique de celle-ci.

Tamir, Wang et Olivier [34]–[36] semblent les premiers à avoir utilisé la FMM, au milieu des années 60. Cependant, du fait que leur étude est limitée aux variations du profil sinusoïdal de la permittivité diélectrique (réseaux de volume) en polarisation transverse électrique (TE), leur traitement ne comportait pas les vraies opérations de matrice. Le même problème, en polarisation transverse magnétique (TM), a été étudié presque au même moment par Yeh, Casey et Kaprielian [37]. Leur travail est porté sur les caractéristiques de la propagation des ondes dans un milieu stratifié sinusoïdal. Par conséquent, ils n'ont pas eu besoin de la solution complète du problème aux valeurs propres. Burckhardt [38] a été le premier, en 1966, à présenter une formulation matricielle complète de la FMM. Bien que lui également se borna aux milieux stratifiés sinusoïdaux, sa formulation était suffisamment générale pour qu'elle soit appliquée à d'autres formes de milieux stratifiés, telle que réalisée par Kaspar [39] en 1973. Ne connaissant pas le travail de Burckhardt, en 1975, Peng, Tamir et Bertoni [40] l'ont réaménagé et, plus important, ont fait une tentative de justifier la validité de la FMM. Cependant, leur conclusion semble être trop prudente. Ignorant apparemment le travail de Peng, Tamir et Bertoni, Knop [31], plus tard, a appliqué la méthode aux réseaux en relief-surfaces rectangulaires. Entre 1981 et 1986, Moharam et Gaylord ont appliqué la FMM pour analyser des réseaux de volume (variation continue de la permittivité) à surfaces inclinées [32], des réseaux en relief (variation discontinue de la permittivité) de profils arbitraires en polarisations TE et TM [33, 41], les montages coniques [42] et le réseau métallique [43]. Le réseau anisotrope de périodicité 1D a d'abord été traité par Rokushima et Yamakita [44] en

1983. A 2D, le réseau croisé isotrope a été analysé par Han et al. [45] et par Nojonen et Turunen [46], puis par Lifeng Li plus tard [53].

Aujourd'hui, la méthode modale de Fourier est devenue une des méthodes les plus efficaces pour la modélisation de la diffraction des ondes électromagnétiques par des réseaux périodiques, notamment après les travaux qui ont conduit à l'élaboration des règles de factorisation de Fourier [47]–[49], qui ont amélioré de manière drastique la convergence de la méthode. Son idée de base est assez simple : Les champs électromagnétiques et la permittivité diélectrique du réseau sont développés en séries de Fourier, transformant ainsi le problème électromagnétique aux valeurs limites dans l'espace réel en un problème aux valeurs propres dans l'espace de Fourier [50]. C'est une méthode physique permettant l'analyse des échanges d'énergie entre les modes. Il est à noter également que l'intégration analytique des équations de Maxwell dans une direction de l'espace (celle de la périodicité) permet la modélisation d'objets très étendus dans cette direction. C'est l'un des avantages majeur des méthodes modales en général par rapport aux méthodes discrétisant l'espace. De plus, sa formulation théorique utilise des mathématiques élémentaires et sa mise en œuvre numérique ne nécessite pas de techniques numériques sophistiquées. Ces caractéristiques font de la FMM une des méthodes les plus populaires dans le domaine de l'optique diffractive. Cependant, comme toutes les méthodes numériques, la FMM n'est pas exempte d'un certain nombre de problèmes, d'instabilité et de convergence surtout, que nous avons rapporté en détail dans le chapitre suivant.

1.9 Conclusion

Le but de ce chapitre est de rappeler l'essentiel des notions de l'électromagnétisme classique et de la photonique, nécessaires pour la compréhension des chapitres suivants. Ainsi, nous avons rappelé les équations de Maxwell et les équations constitutives décrivant la propagation du champ électromagnétique dans le vide et dans les matériaux. La notion du réseau périodique est introduite de façon à donner un aperçu rapide sur la position du problème de diffraction et surtout pour distinguer les deux modes fondamentaux de polarisation, à savoir la polarisation transverse électrique (TE ou s) et la polarisation transverse magnétique (TM ou p). Nous avons également rappelé l'expression de Rayleigh explicite du champ électromagnétique dans les zones homogènes de la structure étudiée ainsi que les efficacités de diffraction en réflexion et en transmission obtenues via la normalisation du vecteur de Poynting. Le chapitre suivant, où nous avons utilisé toutes ces notions, traite la méthode modale de Fourier (FMM) qui est une méthode théorique très rigoureuse pour l'analyse du problème de diffraction, en général, et pour le calcul des efficacités de diffraction, en particulier.

Chapitre 2

Méthode Modale de Fourier Classique

Ce chapitre offre une description détaillée de la *méthode modale de Fourier* (FMM pour *Fourier Modal Method en Anglais*), connue également par RCWA (*Rigorous Coupled Wave Analysis*). Elle constitue un outil de calcul très performant pour analyser la diffraction, mais aussi la propagation, de la lumière à travers tout type de réseau (diélectrique, métallique, semi-conducteur, etc.) périodique, apériodique ou fini dans l'espace. C'est une méthode électromagnétique rigoureuse, car elle résout les équations de Maxwell dans toute leur généralité sans recourir à des approximations¹; l'intégration de ces équations se fait presque analytiquement. C'est l'une des méthodes les plus utilisées dans la théorie de diffraction. Le principe de la FMM repose sur l'utilisation des séries de Fourier pour décrire la permittivité et la perméabilité des milieux périodiques considérés. Le champ électromagnétique, qui est pseudo-périodique, est décomposé en séries de Fourier généralisées.

Depuis son introduction pour les réseaux de diffraction monodimensionnels [31] et suite aux travaux de Moharam et Gaylord [32, 33, 41, 43] au début des années 80, cette approche a été généralisée pour traiter les réseaux de diffraction anisotropes [51, 52], les réseaux bipériodiques [46, 53] et même les structures apériodiques à travers le concept des couches parfaitement adaptées (PML pour *perfectly matched layers*) [54]. Jusqu'à nos jours, on n'a pas cessé d'apporter des améliorations à cette méthode et ce travail de thèse s'inscrit justement dans cette optique; apporter quelques briques supplémentaires à l'édifice de la FMM [55, 56]. Le premier problème sérieux dont souffrait la méthode est celui des instabilités numériques dues à l'utilisation de l'algorithme dit de la *T-matrix*. Il a été surmonté par l'introduction de l'algorithme, désormais connu sous l'appellation *S-matrix*, et de quelques unes de ses variantes [47, 57]. Le second problème fut celui de la lente convergence des séries de Fourier dans le cas de polarisation TM. Celui-ci est dû à l'utilisation erronée des règles de factorisation de Fourier. Il a

¹Mis à part la troncature des séries de Fourier utilisées pour décrire les composantes du champ électromagnétique et les permittivités des milieux considérés.

fallu attendre le milieu des années 90 pour que ce problème, qui a tant limité l'utilisation de la FMM, soit résolu. D'abord d'une manière empirique [47, 48] pour les réseaux lamellaires, puis tout un travail mathématique de Lifeng Li [49] qui a donné une démonstration claire des règles de factorisation des séries de Fourier. Ces travaux ont été étendus au cas des réseaux à profils continus, ainsi qu'à des milieux anisotropes [58, 59]. Cependant, bien que la mise en œuvre théorique de la FMM soit simple, son implémentation numérique directe, sans prendre quelques précautions, conduit inéluctablement à des instabilités numériques, voir même à des résultats aberrants.

Dans ce qui suit, dans un premier temps, nous exposerons la méthode FMM en détail avec les précautions à prendre, surtout en polarisation TM, pour avoir une meilleure convergence mais aussi pour avoir un code numériquement plus stable. Puis, nous exposerons la manière la plus simple d'introduire les PMLs pour l'étude des réseaux finis et aperiodiques. Et enfin, nous présenterons les problèmes de la méthode dans le cas des réseaux métalliques ainsi que les solutions apportées jusqu'alors.

2.1 Position du problème

Le calcul des efficacités de diffraction constitue le premier problème des réseaux. Nous avons vu dans le premier chapitre que, hors de la zone de modulation (le réseau), les ordres de diffraction sont donnés simplement par le développement de Rayleigh.

- Dans la région d'incidence, le champ électromagnétique réfléchi est donné par :

$$\psi_r(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} R_n e^{j(\alpha_n x - \beta_{r,n} y)} \quad (2.1)$$

- Dans la région de transmission, il s'écrit :

$$\psi_t(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} T_n e^{j(\alpha_n x + \beta_{t,n} y)} \quad (2.2)$$

Le problème des réseaux consiste ainsi en la recherche des amplitudes R_n et T_n de ces ordres de diffraction. Pour pouvoir calculer les efficacités correspondantes, il faudra résoudre les équations de Maxwell dans la zone modulée. La méthode modale de Fourier, que nous exposerons ci-dessous, est l'une des méthodes les plus rigoureuses et fiables souvent utilisée dans ce type de problème. Pour effectuer le calcul, on décompose, au préalable, la structure étudiée en tranches, d'épaisseurs données h_q , suivant la direction de périodicité (voir Fig.2.1). Puis nous cherchons les solutions des équations de Maxwell, dans chaque couche, sous formes de modes. Celles-ci sont raccordées, par la suite, les unes aux autres via l'algorithme *S-matrix*.

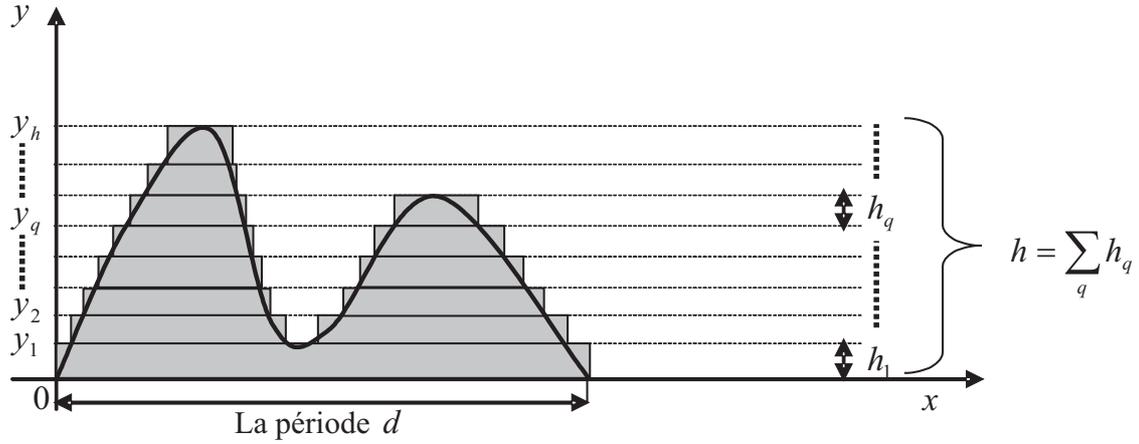


FIG. 2.1 – Discrétisation du réseau suivant y (*staircase approximation*). Chaque couche a une épaisseur $h_q = y_{(q+1)} - y_q$ et une permittivité ϵ_q supposée constante. La discrétisation doit être aussi fine que possible pour approcher le profil exact du réseau.

Une fois que toutes les amplitudes de tous les ordres sont obtenues, en particulier les R_n et T_n , les efficacités de diffraction pour tous les ordres propagatifs peuvent être calculées. Rappelons que celles-ci sont données par les flux des vecteurs de Poynting des modes réfléchis et transmis, normalisés à celui du mode incident.

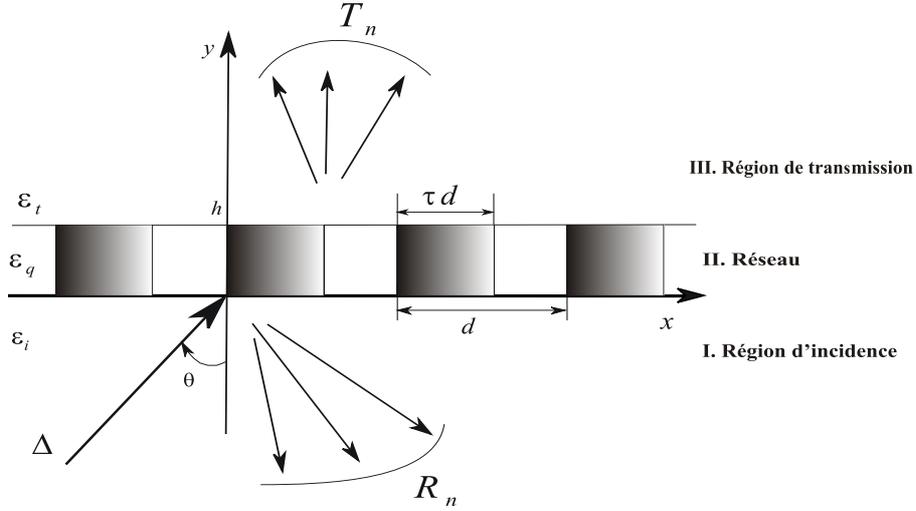
Nous commencerons donc par exposer la méthode dans le cas d'un réseau périodique à une couche et nous la généraliserons par la suite aux réseaux multicouches. Rappelons, toutefois, que nous travaillons dans le domaine des fréquences optiques, i.e. $\mu_r = 1$, et que les milieux sont linéaires et isotropes.

2.2 Méthode modale de Fourier

Reprenons les équations de Maxwell (1.1) et (1.2). En coordonnées cartésiennes, elles se développent comme suit :

$$\begin{aligned}
 \partial_y E_z - \partial_z E_y &= j\omega\mu_0 H_x & \partial_y H_z - \partial_z H_y &= -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_x \\
 \partial_z E_x - \partial_x E_z &= j\omega\mu_0 H_y & \partial_z H_x - \partial_x H_z &= -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_y \\
 \partial_x E_y - \partial_y E_x &= j\omega\mu_0 H_z & \partial_x H_y - \partial_y H_x &= -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_z
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

A cause de l'invariance du système par translation le long de l'axe $0z$, i.e. $\partial_z = 0$, le système d'équations précédent se sépare en deux groupes indépendants.


 FIG. 2.2 – Réseau binaire (τ est le facteur de remplissage, compris entre 0 et 1)

L'un correspond à la polarisation s ou TE (le champ électrique est parallèle à $0z$) :

$$\begin{cases} \partial_y E_z = j\omega\mu_0 H_x \\ - \partial_x E_z = j\omega\mu_0 H_y \\ \partial_x H_y - \partial_y H_x = -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_z \end{cases} \quad (2.4)$$

L'autre concerne la polarisation p ou TM (le champ magnétique est parallèle à $0z$) :

$$\begin{cases} \partial_y H_z = -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_x \\ - \partial_x H_z = -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_y \\ \partial_x E_y - \partial_y E_x = j\omega\mu_0 H_z \end{cases} \quad (2.5)$$

Nous supposons qu'une onde plane monochromatique, de longueur d'onde λ_0 dans le vide et d'amplitude égale à l'unité, est incidente sous un angle θ dans le milieu I ($y < 0$) et se propage dans la direction des y positifs (voir Fig.2.2).

2.2.1 Cas transverse électrique (TE ou s)

Les composantes du champ magnétique H_x et H_y s'obtiennent à partir des deux premières équations du système (2.4) :

$$\begin{cases} H_x = (j\omega\mu_0)^{-1}\partial_y E_z \\ H_y = -(j\omega\mu_0)^{-1}\partial_x E_z \end{cases} \quad (2.6)$$

En reportant ces deux équations dans la dernière du système (2.4), on obtient l'équation de propagation du champ électrique :

$$-\partial_x \left(\frac{1}{j\omega\mu_0} \partial_x E_z \right) - \partial_y \left(\frac{1}{j\omega\mu_0} \partial_y E_z \right) = -j\omega\epsilon_0\epsilon_r E_z$$

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} = -k_0^2 \epsilon_r E_z \quad (2.7)$$

Avec $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0} = \omega c^{-1}$.

– Champs dans la région d'incidence

Dans le milieu I (région d'incidence), le champ électrique est égal à la somme des champs incident $e^{j(\alpha_0 x + \beta_0 y)}$ et réfléchi donné en (2.1). Il s'écrit :

$$E^{(1)}(x, y) = E_i(x, y) + E_r(x, y)$$

$$= e^{j(\alpha_0 x + \beta_0 y)} + \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} R_n e^{j(\alpha_n x - \beta_{r,n} y)}$$

Avec : $\alpha_0 = k_i \sin(\theta)$, $\beta_0 = k_i \cos(\theta)$ où $k_i = k_0 n_i$ est le vecteur d'onde dans le milieu incident. L'expression précédente du champ peut se mettre sous la forme plus générale suivante :

$$E^{(1)}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} e^{j(\alpha_n x + \beta_{r,n} y)} \delta_{n0} + \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} R_n e^{j(\alpha_n x - \beta_{r,n} y)} \quad (2.8)$$

Où δ_{n0} est le symbole de Kronecker. Les α_n sont donnés par la formule des réseaux :

$$\alpha_n = \alpha_0 + K n \quad (2.9)$$

$K = \frac{2\pi}{d}$ est le vecteur pulsation spatiale du réseau.

La composante $\beta_{r,n}$ est déduite à partir du vecteur d'onde du milieu, k_i :

$$\alpha_n^2 + \beta_{r,n}^2 = k_i^2$$

D'où :

$$\beta_{r,n} = \begin{cases} \sqrt{k_i^2 - \alpha_n^2} & \text{si } k_i \geq \alpha_n \\ j\sqrt{\alpha_n^2 - k_i^2} & \text{si } k_i < \alpha_n \end{cases} \quad (2.10)$$

Avec $Real(\beta_{r,n}) \geq 0$ et $Imag(\beta_{r,n}) \geq 0$. En effet, les signes des racines ont été choisis pour respecter les conditions d'ondes sortantes.

– Champs dans la région de transmission

Le champ électrique dans le milieu homogène III est donné par l'équation (2.2) :

$$E^{(3)}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} T_n e^{j\beta_{t,n}(y-h)} \cdot e^{j\alpha_n x} + \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \Delta'_n e^{-j\beta_{t,n}(y-h)} \cdot e^{j\alpha_n x} \quad (2.11)$$

Avec Δ' un vecteur nul, que nous avons introduit pour des raisons de symétrie.

Comme nous pouvons le remarquer, dans cette expression nous avons introduit l'épaisseur h de la couche pour simplifier l'écriture des conditions aux limites. Les $\beta_{t,n}$ sont déterminés à partir du vecteur d'onde du milieu $k_t = k_0 n_t$ exactement comme dans la section précédente.

– Champs dans la zone modulée

A l'intérieur du réseau ($0 \leq y \leq h$), le théorème de Floquet–Bloch permet d'écrire le champ électrique sous forme d'une série de Fourier généralisée :

$$E^{(2)}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} E_n(y) e^{j\alpha_n x} \quad (2.12)$$

Ce champ vérifie l'équation d'Helmholtz (2.7) :

$$\Delta E^{(2)}(x, y) + k_0^2 \epsilon_r(x) E^{(2)}(x, y) = 0 \quad (2.13)$$

La permittivité du réseau est par définition périodique, $\epsilon_r(x+d) = \epsilon_r(x)$. Son développement en séries de Fourier est donné par :

$$\epsilon_r(x) = \sum_{p=-\infty}^{p=+\infty} \epsilon_p \cdot e^{jKpx} \quad (2.14)$$

Le second terme du premier membre de l'équation (2.13) s'écrit, d'après (2.12) et (2.14), comme suit :

$$\begin{aligned}\epsilon_r(x)E^{(2)}(x, y) &= \left(\sum_p \epsilon_p e^{jKpx} \right) \left(\sum_n E_n e^{j\alpha_n x} \right) \\ &= e^{i\alpha_0 x} \left(\sum_p \epsilon_p e^{jKpx} \right) \left(\sum_n E_n e^{jKnx} \right)\end{aligned}$$

C'est un produit de deux séries de Fourier qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$\epsilon_r(x)E^{(2)}(x, y) = \sum_n \left(\sum_p \epsilon_{n-p} E_p \right) e^{j\alpha_n x} \quad (2.15)$$

En reportant (2.15) et (2.12) dans (2.13), on obtient :

$$\begin{aligned}\left(\sum_n -\alpha_n^2 E_n e^{i\alpha_n x} \right) + \left(\sum_n \frac{d^2 E_n}{dy^2} e^{i\alpha_n x} \right) + k_0^2 \sum_n \left(\sum_p \epsilon_{n-p} E_p \right) e^{i\alpha_n x} &= 0 \\ \sum_n \left[-\alpha_n^2 E_n + \frac{d^2 E_n}{dy^2} + k_0^2 \left(\sum_p \epsilon_{n-p} E_p \right) \right] e^{i\alpha_n x} &= 0\end{aligned}$$

Enfin, par projection sur la base $(e^{j\alpha_n x})$, on obtient :

$$-\alpha_n^2 E_n + \frac{d^2 E_n}{dy^2} + k_0^2 \sum_p \epsilon_{n-p} E_p = 0, \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (2.16)$$

C'est un système infini d'équations différentielles couplées dont la résolution permet d'avoir les harmoniques spatiales, $E_n(y)$. En conséquence, nous dirons que nous avons effectué une intégration analytique des équations de Maxwell (2.4).

– Problème aux valeurs propres

Les séries de Fourier décrivant le champ électrique et la permittivité diélectrique sont infinies. Á ce niveau, les équations décrivant le champ électromagnétique sont toujours rigoureuses puisque les sommations se font sur un nombre infini de termes. Cependant, pour des raisons d'implémentation numérique, ces séries doivent être tronquées de $-M$ à $+M$ en

espérant, toutefois, qu'elles convergent vers les valeurs exactes. Á condition que $N = 2M + 1$ soit assez grand, tous les auteurs qui ont travaillé sur les méthodes utilisant les séries de Fourier ont considéré que ce processus est valable.

Soit M l'ordre de troncature, i.e. $n \in [-M, M]$ ainsi que pour p . La composante du champ électrique dépendant de y est alors un vecteur colonne de N valeurs :

$$\mathcal{E} = [E_{-M}, \dots, E_0, \dots, E_M]^T$$

La somme qui apparaît dans l'équation (2.16) peut s'écrire sous forme matricielle comme suit :

$$\begin{array}{ccccccc} \hline p = -M & \dots & p = 0 & \dots & p = M & & \\ \hline \epsilon_0 E_{-M} & \dots & \epsilon_{-M} E_0 & \dots & \epsilon_{2M} E_M & & \\ \epsilon_M E_{-M} & \dots & \epsilon_0 E_0 & \dots & \epsilon_{-M} E_M & & \\ \epsilon_{2M} E_{-M} & \dots & \epsilon_M E_0 & \dots & \epsilon_0 E_M & & \\ \hline \end{array}$$

D'où :

$$\sum_p \epsilon_{n-p} E_p = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \dots & \epsilon_{-2M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \epsilon_{2M} & \dots & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{-M} \\ \vdots \\ E_M \end{pmatrix} = [|\epsilon|] \mathcal{E} \quad (2.17)$$

$[|\epsilon|]$ est la matrice Toéplitz de la permittivité ϵ_r , c'est-à-dire une matrice dont l'élément (i, j) est la composante de Fourier $(i - j)$ de ϵ_r .

L'équation (2.16) peut se mettre alors sous la forme :

$$\frac{d^2 \mathcal{E}(y)}{dy^2} = \mathcal{A}_{TE} \mathcal{E}(y), \quad \forall n \in [-M, M] \quad (2.18)$$

Avec :

$$\mathcal{A}_{TE} = \text{diag}(\alpha_n^2) - k_0^2 [|\epsilon|] \quad (2.19)$$

C'est un problème aux valeurs propres ; l'intégration de l'équation différentielle (2.16) se fait donc par le calcul des valeurs et vecteurs propres de la matrice \mathcal{A}_{TE} .

Nous cherchons des solutions en ondes planes :

$$\mathcal{E}(y) = e^{Xy} U_0$$

L'équation (2.18) permet d'écrire :

$$X^2 \mathcal{E}(y) = \mathcal{A}_{TE} \mathcal{E}(y) \quad \Rightarrow \quad X^2 = \mathcal{A}_{TE}$$

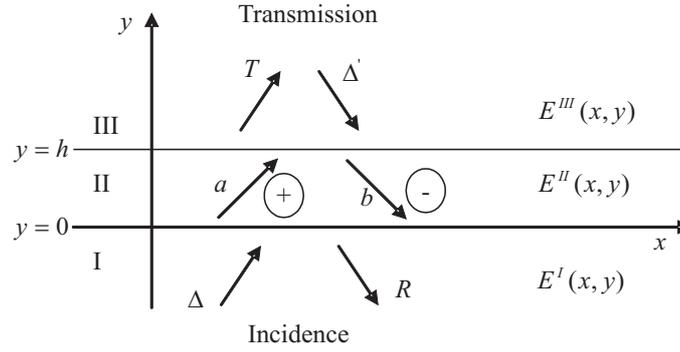


FIG. 2.3 – Champ électromagnétique dans les différents milieux.

\mathcal{A}_{TE} est diagonalisable :

$$X^2 = \mathcal{A}_{TE} = PD^2P^{-1} \Rightarrow X = \pm PDP^{-1}$$

P est une matrice contenant l'ensemble des vecteurs propres correspondants aux valeurs propres du vecteur D .

D'après ce résultat, deux solutions sont possibles pour $\mathcal{E}(y)$:

$$\mathcal{E}_1(y) = Pe^{+Dy}P^{-1}U_1 \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_2(y) = Pe^{-Dy}P^{-1}U_2$$

La dépendance en y de \mathcal{E} est alors une combinaison linéaire de ces deux solutions :

$$\mathcal{E}(y) = P(e^{Dy}U_1 + e^{-Dy}U_2)P^{-1}$$

C'est une écriture cyclique ou matricielle ; la dimension de P est $(2M+1) \times (2M+1)$ et D est une matrice diagonale de même dimension que P , dont les éléments sont les valeurs propres. Cette équation peut se mettre sous une forme plus générale comme suit :

$$\mathcal{E}(y) = P(e^{Dy}a + e^{-Dy}b) \quad (2.20)$$

Où $a = [a_{-M}, \dots, a_0, \dots, a_M]^T$ et $b = [b_{-M}, \dots, b_0, \dots, b_M]^T$ sont les amplitudes des ondes montantes et descendantes dans la couche du réseau (voir Fig. 2.3).

Dans le cas d'un réseau multicouches (Fig.2.1), le champ dans la couche q de permittivité ϵ_q est donné simplement par :

$$\mathcal{E}_q(y) = P_q \left[e^{D_q(y-y_{(q-1)})}a_q + e^{-D_q(y-y_{(q-1)})}b_q \right] \quad , \quad y_{(q-1)} \leq y \leq y_q \quad (2.21)$$

D'après les équations (2.12) et (2.20), l'expression générale du champ électrique dans la zone de modulation s'écrit :

$$E^{(2)}(x, y) = \sum_n \left[\sum_p P_{np} (a_p e^{D_p y} + b_p e^{-D_p y}) \right] e^{j\alpha_n x} \quad (2.22)$$

Les amplitudes a et b sont déterminées en utilisant la continuité des composantes tangentielles des champs \vec{E} et \vec{H} . Les composantes H_x et H_y se mettent sous une forme analogue à celles du champ électrique. En effet, d'après les équations (2.6), dans la zone de modulation par exemple, les composantes du champ magnétique ont pour expressions :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_x^{(2)}(x, y) = (j\omega\mu_0)^{-1} \sum_n \left[\sum_p P_{np} D_p (a_p e^{D_p y} - b_p e^{-D_p y}) \right] e^{j\alpha_n x} \\ H_y^{(2)}(x, y) = -(j\omega\mu_0)^{-1} \sum_n (j\alpha_n) \left[\sum_p P_{np} (a_p e^{D_p y} + b_p e^{-D_p y}) \right] e^{j\alpha_n x} \end{array} \right. \quad (2.23)$$

Avant d'examiner l'algorithme de résolution permettant d'obtenir les amplitudes R , T , a et b , donc les efficacités de diffraction, examinons d'abord le cas transverse magnétique qui est plus difficile que le cas précédent, TE.

2.2.2 Cas transverse magnétique (TM ou p)

La méthodologie à suivre est exactement la même que celle que nous avons exposé plus haut. Pour cette polarisation (p), la réponse de la structure peut être obtenue en trouvant les solutions de l'équation suivante :

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{\epsilon_r(x)} \vec{\nabla} H_z(x, y) \right] + k_0^2 H_z(x, y) = 0 \quad (2.24)$$

C'est la même équation que l'on obtiendrait en utilisant le système (2.5).

Comme dans le cas TE, le champ magnétique dans les différents milieux s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_z^{(1)}(x, y) = \sum_n (e^{j\beta_{r,n} y} \delta_{n0} + R_n e^{-\beta_{r,n} y}) e^{j\alpha_n x} \\ H_z^{(2)}(x, y) = \sum_n \left[\sum_p P_{np} (a_p e^{D_p y} + b_p e^{-D_p y}) \right] e^{j\alpha_n x} \\ H_z^{(3)}(x, y) = \sum_n \left(T_n e^{j\beta_{t,n}(y-h)} + \Delta'_n e^{-\beta_{t,n}(y-h)} \right) e^{j\alpha_n x} \end{array} \right. \quad (2.25)$$

Les composantes du champ électrique sont déduites à partir de (2.5) :

$$\begin{cases} E_x(x, y) = -(j\omega\epsilon_0)^{-1} \frac{1}{\epsilon_r} \partial_y H_z \\ E_y(x, y) = (j\omega\epsilon_0)^{-1} \frac{1}{\epsilon_r} \partial_x H_z \end{cases} \quad (2.26)$$

Dans le réseau, les harmoniques spatiales $H_n(y)$ de H_z vérifient l'équation différentielle suivante :

$$\frac{1}{\epsilon_r(x)} \sum_n \frac{d^2 H_n(y)}{dy^2} e^{j\alpha_n x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\epsilon_r(x)} \frac{\partial}{\partial x} \sum_n H_n(y) e^{j\alpha_n x} \right) - k_0^2 \sum_n H_n(y) e^{j\alpha_n x} \quad (2.27)$$

La permittivité diélectrique $\epsilon_r(x)$ est donnée par l'équation (2.14).

L'intégration de cette équation se fait également par le calcul des valeurs et vecteurs propres d'une matrice \mathcal{A}_{TM} . Á priori, dans l'espace de Fourier, la matrice \mathcal{A}_{TM} peut être exprimée comme suit :

$$\mathcal{A}_{TM} = \llbracket \epsilon_r \rrbracket \left\{ \llbracket \alpha \rrbracket \llbracket \frac{1}{\epsilon_r} \rrbracket \llbracket \alpha \rrbracket - k_0^2 I_d \right\} \quad (2.28)$$

Où $\llbracket \alpha \rrbracket$ est une matrice diagonale dont les éléments sont les α_n . $\llbracket \epsilon_r \rrbracket$ et $\llbracket \frac{1}{\epsilon_r} \rrbracket$ sont les matrices Toeplitz associées à $\epsilon_r(x)$ et à son inverse, respectivement. I_d est la matrice identité.

Cette formulation, comme nous l'avons signalé dans l'introduction de ce chapitre, a limité l'utilisation de la FMM pendant longtemps. En effet, les résultats obtenus convergent très lentement, en particulier dans le cas des réseaux métalliques ; des instabilités numériques apparaissent en TM alors qu'elles sont inexistantes en TE. Dans la référence [65], les auteurs ont attribué la mauvaise convergence de la méthode en TM à l'utilisation des séries de Fourier pour la permittivité et le champ électromagnétique dans le réseau. Plus tard, en 1996, on a démontré [47, 48], d'une manière empirique, que la faible convergence de la FMM en TM est plutôt liée à la formulation inadéquate du problème aux valeurs propres. Le problème est lié, en fait, au processus de troncature, inévitable pour l'implémentation numérique de la méthode. En effet, ce processus de troncature ne préserve pas la continuité de certaines composantes du champ électromagnétique aux points de discontinuités de la permittivité du réseau (Fig. 2.4). Au cours de la même année, le travail remarquable de Lifeng Li [49] a complété les travaux cités plus haut en fournissant une base mathématique solide pour cette nouvelle formulation. Lifeng Li a établi les règles de factorisation de Fourier appropriées à prendre absolument en compte lors du processus de troncature pour préserver cette continuité.

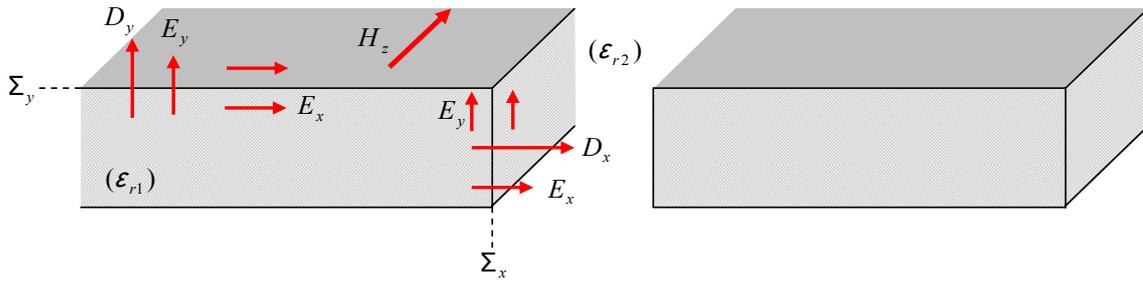


FIG. 2.4 – Continuité des composantes du champ électromagnétique à travers les interfaces du réseau.

– Règles de factorisation de Fourier

Soient deux fonctions $f(x)$ et $g(x)$, bornées, périodiques et continues par morceaux ainsi que leurs dérivées, telle que $h(x) = f(x)g(x)$. La règle de Laurent, pour un ordre de troncature M donné, stipule que les coefficients de Fourier de la fonction $h(x)$ sont donnés par :

$$h_n = \sum_{p=-M}^{p=M} f_{n-p} g_p \quad (2.29)$$

Pour simplifier les expressions mathématiques, introduisons les notations complexes. Nous désignons par $[g]$ le vecteur construit avec les composantes de Fourier de $g(x)$ et par $[[\epsilon_r]]$ la matrice Toeplitz dont l'élément (n, m) est le coefficient de Fourier f_{n-m} . L'équation (2.29) devient :

$$[h] = [[f]][g] \quad (2.30)$$

Cette règle a été appliquée, sans précautions particulières, pendant des années. Et c'était la cause principale de la mauvaise convergence dans le cas TM. C'est cette règle qui a été utilisée pour avoir l'équation (2.28). Le problème vient du fait que, dans certains cas, le processus de troncature induit des erreurs sur la reconstruction de la fonction $h(x)$, obtenues à partir de ses harmoniques de Fourier. C'est là qu'intervient justement le travail remarquable de Lifeng Li en dérivant trois théorèmes d'une importance considérable [49] :

- Le produit de $f(x)$ et $g(x)$ peut être factorisé selon la règle de Laurent si les deux fonctions ne présentent pas, simultanément, des discontinuités aux mêmes points.
- Si $h(x)$ est continue tandis que $f(x)$ et $g(x)$ sont discontinues aux mêmes points, il convient alors d'utiliser la règle inverse de Laurent :

$$[h] = [[\frac{1}{f}]]^{-1}[g] \quad (2.31)$$

- Si les trois fonctions sont discontinues au même point, ni la règle de Laurent ni son inverse ne peut être utilisée.

Pour exposer la nouvelle formulation du problème aux valeurs propres de la FMM, reprenons le système d'équations (2.5) sous la forme suivante :

$$\epsilon_r \tilde{E}_x(x, y) = \frac{1}{k_0^2} \partial_y H_z \quad (2.32)$$

$$\tilde{E}_y(x, y) = -\frac{1}{k_0^2} \frac{1}{\epsilon_r} \partial_x H_z \quad (2.33)$$

$$\partial_y \tilde{E}_x = -H_z - \frac{1}{k_0^2} \partial_x \left(\frac{1}{\epsilon_r} \partial_x H_z \right) \quad (2.34)$$

Avec $\tilde{E}_x = E_x/(j\omega\mu_0)$ et $\tilde{E}_y = E_y/(j\omega\mu_0)$.

Ce système d'équations, couplées, différentielles du premier ordre est équivalent à l'équation différentielle du deuxième ordre donnée en (2.27).

Sur la figure (2.4), on peut vérifier facilement que le produit $\epsilon_r \tilde{E}_x$ dans l'équation (2.32) est continu, puisqu'il est proportionnel à la composante normale à la surface Σ_x du vecteur déplacement électrique, D_x . En outre, dans l'équation (2.34), $(1/\epsilon_r)\partial_x H_z$ est aussi continu, car il est proportionnel à E_y qui est, dans ce cas, purement tangentiel. Ainsi, la règle inverse (2.31) doit être appliquée pour les deux équations (2ème théorème de Li).

En tenant compte de ces résultats, la reformulation du problème aux valeurs propres conduit à une matrice \mathcal{A} légèrement différente de celle de l'ancienne formulation. Elle s'écrit :

$$\mathcal{A}_{TM} = \left[\left[\frac{1}{\epsilon_r} \right] \right]^{-1} \{ [\alpha] \left[\left[\epsilon_r \right] \right]^{-1} [\alpha] - k_0^2 I_d \} \quad (2.35)$$

C'est l'expression empirique précédemment proposée [47, 48] dans le cas des réseaux lamellaires. Les expressions (2.28) et (2.35) sont équivalentes tant que les sommations se font sur un nombre infini d'harmoniques de Fourier. Dans le cas où les séries sont tronquées, comme nous pouvons le constater sur la figure (2.5), où nous avons rapporté la convergence de l'ordre zéro de diffraction via, à la fois, l'ancienne et la nouvelle formulation, (2.28) et (2.35) respectivement, il est clair que la nouvelle formulation assure une meilleure convergence.

Cette nouvelle formulation a permis donc une amélioration drastique des performances de la méthode FMM. Cette dernière a été appliquée rapidement au calcul de la diffraction par des réseaux croisés [53] ainsi qu'au calcul du diagramme de bande des cristaux photoniques [60].

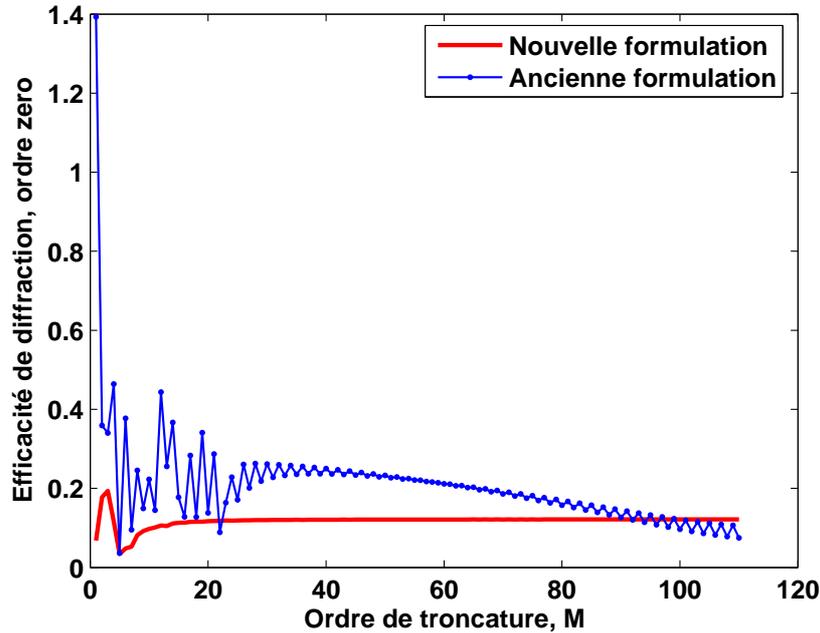


FIG. 2.5 – Convergence de l’efficacité de diffraction du réseau binaire métallique en polarisation TM. $\theta = 30^\circ$, $d = h = \lambda_0$, $\epsilon_q = (0.22 + 6.71j)^2$, $\epsilon_i = \epsilon_t = 1$, $\tau = 0.5$

2.3 Calcul des amplitudes des champs diffractés

Une fois les vecteurs et valeurs propres (modes propres) sont déterminés partout, le problème se réduit à celui de la détermination des amplitudes des modes. Pour l’exemple du réseau binaire précédent, nous devons résoudre le problème pour les quatre inconnues : R , a , b et T . L’implémentation des conditions aux limites sur les interfaces de séparation entre les différentes couches constituant le réseau permet d’avoir un système d’équations algébriques liant ces amplitudes de diffraction. Plusieurs algorithmes de résolution du système algébrique qui en découle existent. Cependant, nous n’exposerons ci-dessous que les plus populaires, à savoir l’algorithme de la matrice T et celui de la matrice de diffraction S.

2.3.1 Conditions de continuité du champ électromagnétique

Les amplitudes de diffraction sont calculées en résolvant le système d’équations algébriques qu’on obtient à partir de l’implémentation des conditions de continuité du champ électromagnétique à travers les interfaces de séparation des différents milieux. En effet, dans le cas du réseau binaire, figure (2.2), en absence de charges et de courants, les composantes tangentielles du champ doivent être continues au passage des interfaces $y = 0$ et $y = h$: E_z et H_x pour la polarisation TE et H_z et E_x dans le cas TM. Les équations qui en découlent pour les deux polarisations, TE et TM respectivement, sont groupées dans le système suivant :

Polarisation **TE**

 Polarisation **TM**
 $\forall x, \quad x \in [0, d];$

$$\left\{ \begin{array}{l} E_z^{(1)}(x, 0) = E_z^{(2)}(x, 0) \\ H_x^{(1)}(x, 0) = H_x^{(2)}(x, 0) \end{array} \right\} \quad y = 0 \qquad \left\{ \begin{array}{l} H_z^{(1)}(x, 0) = H_z^{(2)}(x, 0) \\ E_x^{(1)}(x, 0) = E_x^{(2)}(x, 0) \end{array} \right\} \quad y = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} E_z^{(2)}(x, h) = E_z^{(3)}(x, h) \\ H_x^{(2)}(x, h) = H_x^{(3)}(x, h) \end{array} \right\} \quad y = h \qquad \left\{ \begin{array}{l} H_z^{(2)}(x, h) = H_z^{(3)}(x, h) \\ E_x^{(2)}(x, h) = E_x^{(3)}(x, h) \end{array} \right\} \quad y = h \qquad (2.36)$$

Ces équations peuvent être regroupées dans le système suivant :

$$y = 0 \left\{ \begin{array}{l} \sum_n (\delta_{n0} + R_n) e^{j\alpha_n x} = \sum_n \left[\sum_p P_{np} (a_p + b_p) \right] e^{j\alpha_n x} \\ \sum_n j\beta_{r,n} (\delta_{n0} - R_n) e^{j\alpha_n x} = \sum_n \left[\sum_p P'_{np} (a_p - b_p) \right] e^{j\alpha_n x} \end{array} \right.$$

$$y = h \left\{ \begin{array}{l} \sum_n \left[\sum_p P_{np} (a_p e^{D_p h} + b_p e^{-D_p h}) \right] e^{j\alpha_n x} = \sum_n (T_n + \Delta'_n) e^{j\alpha_n x} \\ \sum_n \left[\sum_p P'_{np} (a_p e^{D_p h} - b_p e^{-D_p h}) \right] e^{j\alpha_n x} = \sum_n j\beta_{t,n} (T_n - \Delta'_n) e^{j\alpha_n x} \end{array} \right.$$

 Où : $P'_{np} = \left(\frac{1}{\epsilon_r} \right)_{np} P_{np} D_p$ pour TM et $P'_{np} = P_{np} D_p$ pour TE.

En notation matricielle, celui-ci devient :

$$y = 0 \left\{ \begin{array}{l} \Delta + R = P(a + b) \\ j\beta_r (\Delta - R) = P' (a - b) \end{array} \right. \qquad (2.37)$$

$$y = h \left\{ \begin{array}{l} P(\phi a + \phi^{-1} b) = T + \Delta' \\ P'(\phi a - \phi^{-1} b) = j\beta_t (T - \Delta') \end{array} \right. \qquad (2.38)$$

Avec : $\Delta = [\dots, 0, 1, 0, \dots]^T$, $R = [\dots, R_{-1}, R_0, R_1, \dots]^T$, $T = [\dots, T_{-1}, T_0, T_1, \dots]^T$, $\phi = e^{Dh}$, $P' = PD$ pour TE et $P' = \left[\frac{1}{\epsilon_r} \right] PD$ pour TM, $\beta_r = \text{diag}(\beta_{r,n})$, $\beta_t = \text{diag}(\beta_{t,n})$ et Δ' est un vecteur nul.

Dans le cas d'un réseau stratifié de plusieurs couches (Fig.2.1), les conditions de passage ou de continuité sur la frontière $y_{(q+1)}$, séparant les couches (q) et $(q+1)$, sont données par les relations récursives suivantes :

$$\begin{cases} P_q [\phi_q a_q + \phi_q^{-1} b_q] = P_{(q+1)} [a_{(q+1)} + b_{(q+1)}] \\ P'_q [\phi_q a_q - \phi_q^{-1} b_q] = P'_{(q+1)} [a_{(q+1)} - b_{(q+1)}] \end{cases} \quad (2.39)$$

Avec : $\phi_q = e^{D_q h_q}$, $P'_q = P_q D_q$ pour TE et $P'_q = \left[\frac{1}{\epsilon_q} \right] P_q D_q$ pour TM.

Ces équations sont générales. Elles s'appliquent à tout réseau pouvant être approché par un empilement de sous-couches ; *staircase approximation*. Ces relations récurrentes sont très utiles dans la construction automatique de la matrice de diffraction globale permettant le passage de la région d'incidence à la région de transmission. Ce sera l'objet des sections suivantes.

Le système (2.37)–(2.38) peut être résolu de différentes manières. La manière la plus naïve est de résoudre le système algébrique selon l'équation suivante :

$$\mathbf{A}X = \mathbf{B} \quad \text{Avec} \quad X = [R \quad a \quad b \quad T]^T$$

L'expérience a montré que cette manière de procéder est très instable et que le temps nécessaire pour la résolution devient important quand l'ordre de troncature est élevé.

2.3.2 Algorithme de la matrice T

Comme signalé plus haut, une fois que les modes propres sont déterminés partout, le problème se réduit à la détermination des amplitudes de ces modes. L'implémentation des conditions aux limites sur l'interface $y_{(q+1)}$ a donné naissance au système d'équations (2.39). Sous forme matricielle, celui-ci s'écrit :

$$\begin{pmatrix} P_{(q+1)} & P_{(q+1)} \\ P'_{(q+1)} & -P'_{(q+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{(q+1)} \\ b_{(q+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_q & P_q \\ P'_q & -P'_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_q & 0 \\ 0 & \phi_q^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix}$$

Ou encore :

$$\begin{pmatrix} a_{(q+1)} \\ b_{(q+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{(q+1)} & P_{(q+1)} \\ P'_{(q+1)} & -P'_{(q+1)} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} P_q & P_q \\ P'_q & -P'_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_q & 0 \\ 0 & \phi_q^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix}$$

Finalement :

$$\begin{pmatrix} a_{(q+1)} \\ b_{(q+1)} \end{pmatrix} = \mathcal{T}^{(q)} \begin{pmatrix} a_q \\ b_q \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

Avec :

$$\mathcal{T}^{(q)} = \tilde{\mathcal{T}}^{(q)} \Phi^{(q)} \quad (2.41)$$

Où :

$$\tilde{\mathcal{T}}^{(q)} = \begin{pmatrix} P_{(q+1)} & P_{(q+1)} \\ P'_{(q+1)} & -P'_{(q+1)} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} P_q & P_q \\ P'_q & -P'_q \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

$$\Phi^{(q)} = \begin{pmatrix} \phi_q & 0 \\ 0 & \phi_q^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

$\tilde{\mathcal{T}}^{(q)}$ et $\mathcal{T}^{(q)}$ représentent les matrices de transfert d'interface et de couche, respectivement.

À ce niveau, il est naturel et mathématiquement plus simple de procéder à la résolution du problème de réseau en utilisant l'algorithme dénommé *T-matrix*. Celui-ci est obtenu par l'utilisation répétée de l'équation (2.40). Comme nous pouvons le remarquer, cet algorithme consiste à joindre les amplitudes des champs transmis aux amplitudes des champs incidents. En passant d'une couche à l'autre, nous arriverons enfin à :

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^{(N_c+1)} \mathcal{T}^{(N_c)} \dots \mathcal{T}^{(q)} \dots \mathcal{T}^{(0)} \quad (2.44)$$

telle que :

$$\begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \Delta \\ R \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \Delta \\ R \end{pmatrix} = \eta \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

Où $\eta = \mathcal{T}^{-1}$ et N_c est le nombre de couches constituant le réseau.

Les amplitudes T et R sont données alors par :

$$\begin{cases} T = \eta_{11}^{-1} \Delta \\ R = \eta_{21} \eta_{11}^{-1} \Delta \end{cases} \quad (2.46)$$

Une fois ces amplitudes sont calculées, nous utilisons les équations (1.50) et (1.51) pour déterminer les efficacités de tous les ordres de diffraction propagatifs.

Cependant, il est bien connu que l'algorithme *T-matrix* est numériquement instable quand l'épaisseur du réseau et la dimension de la matrice de transfert sont larges [62]–[64]. Cette instabilité est, généralement, attribuée à la présence des fonctions exponentielles de plus en plus croissantes. Le problème provient, en fait, des modes évanescents et de l'évaluation numérique des termes en exponentielle de l'équation (2.43) qui peuvent être très grands ou très petits en même temps. Il est à noter, également, que calculer les matrices $\mathcal{T}^{(q)}$ sur des tranches minces de la couche puis faire le produit de celles-ci afin d'obtenir la matrice \mathcal{T} globale ne résout en rien ce problème de conditionnement, car l'algorithme accumule l'ampleur de ces fonctions exponentielles [57].

2.3.3 Algorithme de la matrice S

Pour surmonter le problème de conditionnement et d'instabilité cités plus haut, plusieurs approches ont été proposées [57, 62, 63, 64, 66]. Parmi celles-ci, l'approche de la matrice de diffraction S (*scattering-matrix*) est l'une des plus populaires. Bien qu'elle a été utilisée auparavant, dans le régime des micro-ondes par exemple, il a fallu attendre la fin des années 80 pour voir cette approche appliquée au domaine optique. Il existe plusieurs façons de la mettre en œuvre. Celle que nous avons choisi relie les amplitudes entrantes aux amplitudes sortantes, Fig.(2.6) :

$$\begin{pmatrix} a_{(q+1)} \\ b_q \end{pmatrix} = S^{(q)} \begin{pmatrix} b_{(q+1)} \\ a_q \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

En utilisant le système (2.39), il est facile de vérifier que l'expression de $S^{(q)}$ est donnée par :

$$S^{(q)} = \begin{pmatrix} I_d & 0 \\ 0 & \phi_q \end{pmatrix} \tilde{S}^{(q)} \begin{pmatrix} I_d & 0 \\ 0 & \phi_q \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

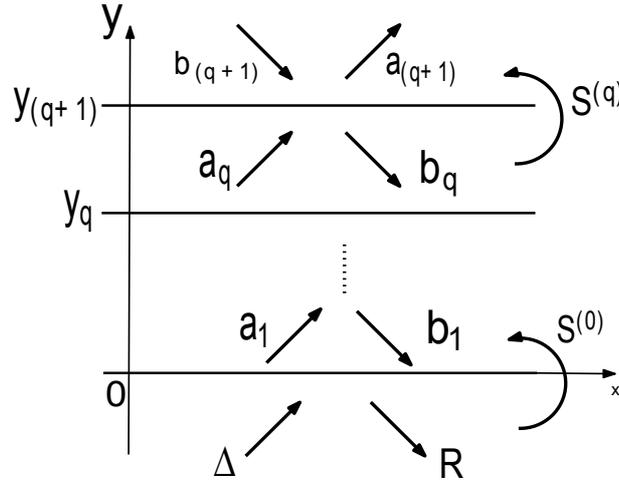


FIG. 2.6 – La matrice $S^{(q)}$ relie les amplitudes entrantes dans la couche q aux amplitudes sortantes

Avec :

$$\tilde{S}^{(q)} = \begin{pmatrix} P_{(q+1)} & -P_q \\ P'_{(q+1)} & P'_q \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -P_{(q+1)} & P_q \\ P'_{(q+1)} & P'_q \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

L'interprétation physique de $S^{(q)}$ et $\tilde{S}^{(q)}$ est similaire à celle de $\mathcal{T}^{(q)}$ et $\tilde{\mathcal{T}}^{(q)}$.

La stabilité de l'algorithme *S-matrix* est enracinée dans la construction de la matrice de couche, $S^{(q)}$. En effet, avec cette formulation, nous pouvons montrer [57] que le problème de conditionnement de l'algorithme *T-matrix* est enlevé; Les ϕ_q sont arrangés de telle sorte qu'il n'y ait plus accumulation des exponentielles lors de la construction de la matrice de diffraction totale S .

Outre sa stabilité numérique, La matrice $S^{(q)}$ présente l'avantage d'avoir une signification physique importante puisqu'elle représente les échanges d'énergie qui ont lieu à chaque interface entre les différents modes. Cet aspect devient manifeste lorsqu'on réécrit l'équation (2.47) sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} a_{(q+1)} \\ b_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^{q+1} & T^{q+1} \\ T^q & R^q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{(q+1)} \\ a_q \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

À titre d'exemple, les sous matrices R^{q+1} et T^{q+1} sont les matrices de réflexion et de transmission qui donnent l'amplitude des ordres transmis dans la couche $(q+1)$ comme résultants de la réflexion, sur les q premières couches, de l'onde réfléchie dans la couche $(q+1)$ et de la transmission, à travers les q premières couches, de l'onde incidente dans le milieu 0, région d'incidence.

Combinaison des matrices S

Nous avons vu plus haut que le calcul de la matrice $S^{(q)}$ de la couche q se fait par la résolution d'un système linéaire, équation (2.39). Ce système récurrent est utilisé pour obtenir toutes les autres matrices correspondant à toutes les autres couches constituant le réseau de diffraction. Selon le besoin, ces matrices peuvent être stockées ou non. Si nous nous intéressons, par exemple, aux tracés des cartes du champ électromagnétique, le stockage des matrices de couche est nécessaire pour la détermination de l'ensemble des amplitudes de champ qui vont nous permettre via les relations (2.8), (2.21), (2.11) et (2.6) de propager le champ dans tout l'espace.

Ces différentes matrices ainsi calculées, stockées ou non, doivent être par la suite concaténées pour obtenir la matrice S globale du réseau :

$$\begin{pmatrix} T \\ R \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \Delta' \\ \Delta \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

Où :

$$S = S^{(0)} \star \dots \star S^{(q)} \star \dots \star S^{(Nc+1)} \quad (2.52)$$

$S^{(0)}$ est la matrice de diffraction correspondant à l'interface entre le milieu incident et la première couche du réseau. $S^{(Nc+1)}$ est celle correspondant à l'interface entre la dernière couche du réseau et la région de transmission. Le produit \star , appelé *Redheffer star product* [67], n'est pas le produit habituel de deux matrices [57]. Pour mettre en clair ce produit dans l'algorithme *S-matrix*, considérons les trois matrices $S^{(q)}$, $S^{(q+1)}$ et S^c , de dimension $2N \times 2N$, telles que :

$$S^c = S^{(q)} \star S^{(q+1)}$$

D'après ce produit, les éléments de la matrice S^c , qui sont eux mêmes des matrices $N \times N$, sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{11}^c = S_{11}^{(q)} + S_{12}^{(q)} \left[I_d - S_{11}^{(q+1)} S_{22}^{(q)} \right]^{-1} S_{11}^{(q+1)} S_{21}^{(q)} \\ S_{12}^c = S_{12}^{(q)} \left[I_d - S_{11}^{(q+1)} S_{22}^{(q)} \right]^{-1} S_{12}^{(q+1)} \\ S_{21}^c = S_{21}^{(q+1)} \left[I_d - S_{22}^{(q)} S_{11}^{(q+1)} \right]^{-1} S_{21}^{(q)} \\ S_{22}^c = S_{22}^{(q+1)} + S_{21}^{(q+1)} \left[I_d - S_{22}^{(q)} S_{11}^{(q+1)} \right]^{-1} S_{22}^{(q)} S_{12}^{(q+1)} \end{array} \right. \quad (2.53)$$

I_d est la matrice identité, de dimension $N \times N$.

Cet ensemble d'équations constitue les formules récursives nécessaires pour cascader successivement les matrices de diffraction, en passant du milieu d'incidence jusqu'au milieu de transmission, pour obtenir ainsi la matrice de diffraction totale S . Une fois ce calcul effectué, les amplitudes des ordres de diffraction transmis, dans la région de transmission, et celles des ordres de diffraction réfléchis, dans le milieu incident, s'obtiennent simplement à partir de l'équation (2.51)² :

$$\left\{ \begin{array}{l} T = S_{12} \Delta \\ R = S_{22} \Delta \end{array} \right. \quad (2.54)$$

Sachant que Δ' est un vecteur nul.

La connaissance de R et T permet de calculer les efficacités de diffraction de tous les ordres propagatifs, équations (1.50) et (1.51). Elle permet, également, le calcul des amplitudes du champ électromagnétique a_q et b_q dans les différentes couches constituant le réseau ; c'est-à-dire les tracés des cartes de champ. Á titre d'exemple, nous avons représenté sur les figures (2.7) et (2.8) le champ magnétique et la composante E_x du champ électrique, respectivement, en polarisation TM dans le cas du réseau binaire considéré plus haut, figure (2.2).

Sur la figure (2.9), nous avons rapporté la convergence des ordres de diffraction R_{-1} et T_{-1} en fonction de l'ordre de troncature M et, sur la figure (2.10), leurs évolutions en fonction de la longueur d'onde du faisceau incident ainsi que les pertes dues à l'absorption correspondante. Toutes ces courbes ont été obtenues en utilisant les mêmes paramètres physiques et géométriques que ceux de la figure (2.5).

² Á faire la différence entre T et R et ceux apparaissant dans l'équation (2.50)

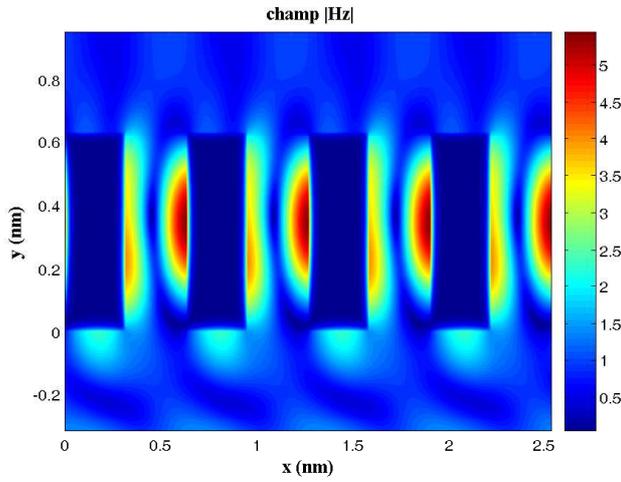


FIG. 2.7 – Distribution spatiale de l'intensité du champ magnétique.

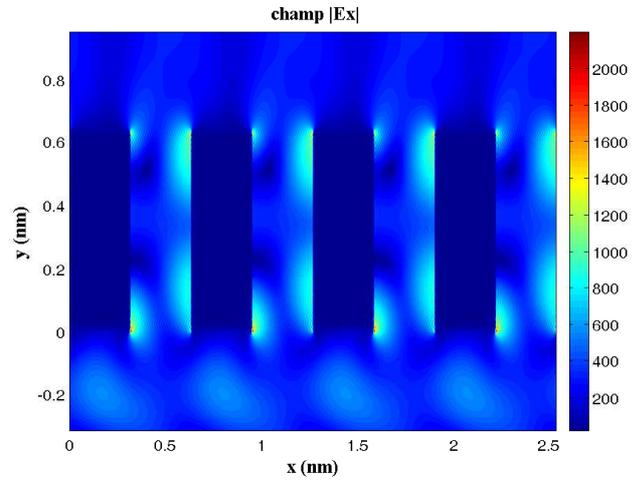


FIG. 2.8 – Distribution spatiale de l'intensité du champ électrique E_x .

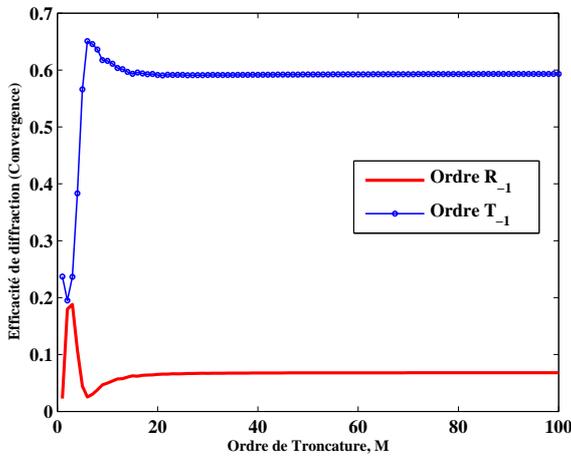


FIG. 2.9 – Convergence des ordres de diffraction R_{-1} et T_{-1}

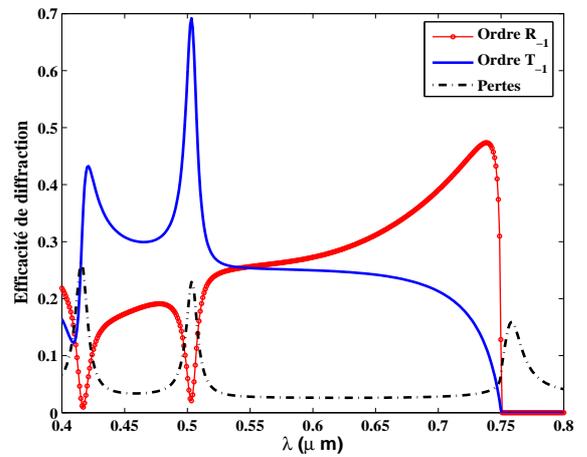


FIG. 2.10 – Efficacités de diffraction comme fonctions de la longueur d'onde.

2.4 FMM et PML

La méthode décrite ci-dessus est une méthode conçue pour les réseaux. Elle calcule, par définition, la diffraction par des objets périodiques. Qu'en est-il alors pour des objets apériodiques ou finis dans l'espace? La réponse à cette question se trouve dans les conditions aux limites à adopter pour délimiter la fenêtre de calcul. En effet, pour appliquer nos codes

réseaux, il nous faut, en premier lieu, périodiser artificiellement la structure étudiée. En second lieu, il faut s'assurer que les périodes "numériques" ainsi obtenues soient complètement indépendantes électromagnétiquement les unes des autres, c'est-à-dire que le champ transmis entre deux périodes adjacentes doit être nul. Avec ces conditions, nous pouvons être sûr que le champ électromagnétique se répète périodiquement, de sorte que sa décomposition en séries de Fourier trouve sa justification mathématique. Actuellement, nous savons que cela ne peut se faire que par l'introduction des conditions aux limites absorbantes (ABC pour *absorbing boundary condition*) aux bords de chaque période. Ces ABC doivent vérifier les conditions d'ondes sortantes ; elles doivent décrire la propagation des champs vers l'infini sans aucune réflexion vers le domaine de calcul, car il s'agirait sinon d'un champ purement numérique sans aucune origine physique, provoquant ainsi des perturbations dans le domaine de calcul entier. Avec toutes ces conditions, nous pouvons nous assurer que le champ obtenu numériquement soit bien la solution physique que nous cherchions.

Les ABC ont fait l'objet de nombreuses recherches depuis les années 70, particulièrement pour la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) et la méthode des éléments finis (FEM) [25][68]–[71]. Plusieurs approches physiques distinctes ont été avancées. Cependant, la méthode la plus efficace et la plus subtile est la méthode des couches parfaitement adaptées (PML) introduite par Berenger en 1994 [72]. Cette technique consiste à entourer le domaine de calcul par des couches, d'épaisseurs finies, constituées d'un matériau absorbant artificiel, exemple de la figure (2.11). En effet, on a montré que le champ diffusé dans le domaine de calcul pénètre dans la PML sans réflexion et cela quelque soit son angle d'incidence, sa polarisation et sa longueur d'onde, figure (2.12). Depuis, cette technique est devenue très populaire et très utilisée par la communauté scientifique comme conditions aux limites absorbantes. Au début, cette approche est conçue pour la FDTD en coordonnées cartésiennes. Puis, elle a été étendue à trois dimensions par Katz et al. [73]. L'approche de Sacks et al. [74] assimile les PML à des milieux magnétiques anisotropes. Une autre formulation très intéressante des PML a été introduite par Chew et al. [75]–[77] via le concept des coordonnées complexes étirées (CCS pour *complex coordinate stretching*) qui est, essentiellement, le prolongement analytique des variables du champ électromagnétique dans l'espace complexe. C'est cette approche que nous avons choisi pour nos codes réseaux à base de la FMM, car l'approche initiale de Berenger, qui est fondée sur la séparation des composantes du champ en deux sous-composantes (i.e. $\psi_z = \psi_{zx} + \psi_{zy}$), n'est pas adaptée à une mise en œuvre modale.

Les CCS représentent un simple changement de variables dans le milieu entourant le domaine de calcul (milieu physique). Par ce changement de variables, on a montré que la PML permet l'absorption de l'onde sans aucune réflexion sur les bords du domaine physique, décrivant ainsi la propagation de la lumière à l'infini. De plus, avec les CCS, les équations de Maxwell gardent la même forme dans la couche PML (de même que pour l'équation d'Helm-

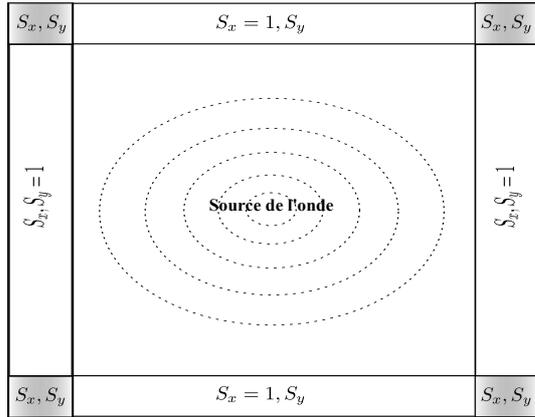
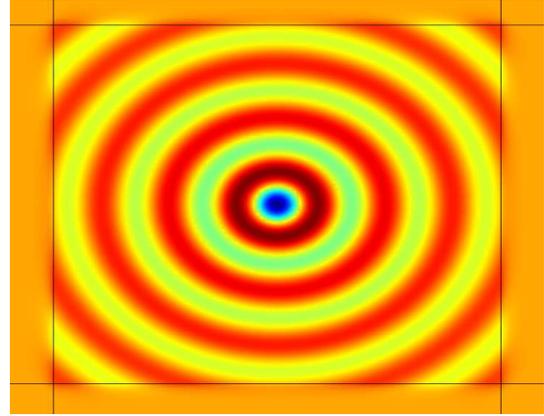


FIG. 2.11 – Exemple d’une structure 2D avec des PML rectangulaires


 FIG. 2.12 – Source ponctuelle. Distribution du champ E_z , partie réelle.

holtz) et que l’onde peut avoir n’importe quelle longueur d’onde et n’importe quel angle d’incidence.

À l’intérieur de la PML, le changement de variables complexes a pour expression [76] :

$$\tilde{x} = \int_0^x S_x(x') dx' \quad , \quad \tilde{y} = \int_0^y S_y(y') dy' \quad , \quad \tilde{z} = \int_0^z S_z(z') dz' \quad (2.55)$$

Avec :

$$S_x(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_{physique} \\ 1 + j\sigma_x(x) & \text{si } x \in \Omega_{PML} \end{cases} \quad (2.56)$$

Où Ω_{PML} est le milieu PML entourant le domaine de calcul, $\Omega_{physique}$. Des équations similaires se tiennent pour S_y et S_z . La variable σ_x est le degré de liberté ajouté pour que l’onde incidente soit absorbée dans la couche PML. Pour retrouver l’équation originale dans le domaine physique, σ_x doit être nulle. Pour éviter les réflexions numériques parasites, la fonction σ_x doit être une fonction graduellement croissante dans la PML. L’expression communément utilisée est l’expression polynomiale suivante :

$$\sigma_x = \left(\frac{X_{plm}}{e} \right)^m \sigma_{max} \quad (2.57)$$

X_{pml} représente la profondeur dans la région PML, mesurée à partir de l’interface domaine de calcul–PML. e désigne l’épaisseur de la couche PML et m dénote le degré de la loi polynomiale, dont la valeur est généralement prise égale à 2.

Avec le changement de variables (2.55), les dérivées partielles dans l'espace complexe sont alors :

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = \frac{1}{S_x(x)} \frac{\partial}{\partial x} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} = \frac{1}{S_y(y)} \frac{\partial}{\partial y} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} = \frac{1}{S_z(z)} \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.58)$$

L'équation d'Helmholtz modifiée dans la région PML en coordonnées cartésiennes et à 2D s'écrit alors :

En polarisation TE

$$(\vec{\nabla}_s \cdot \vec{\nabla}_s) E_z + k_0^2 \epsilon_r E_z = 0 \quad (2.59)$$

En polarisation TM

$$\vec{\nabla}_s \cdot \left[\frac{1}{\epsilon_r} \vec{\nabla}_s H_z \right] + k_0^2 H_z = 0 \quad (2.60)$$

Avec :

$$\vec{\nabla}_s = \frac{1}{S_x(x)} \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{1}{S_y(y)} \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y \quad (2.61)$$

Dans ce travail de thèse, nous nous intéressons au réseaux 2D mais de périodicité 1D, suivant la variable x . La PML à introduire dans nos codes est, par conséquent, uniquement suivant cette direction. En suivant la même procédure que ci-dessus, les matrices A_{TE} et A_{TM} , résultant de la projection dans l'espace de Fourier des équations issues du problème aux valeurs propres en polarisation TE et TM s'écrivent, respectivement :

$$\mathcal{A}_{TE} = \left[\left[\frac{1}{S_x} \right] \right] [\alpha] \left[\left[\frac{1}{S_x} \right] \right] [\alpha] - k_0^2 \left[\left[\epsilon_r \right] \right] \quad (2.62)$$

$$\mathcal{A}_{TM} = \left[\left[\frac{1}{\epsilon_r} \right] \right]^{-1} \left\{ \left[\left[\frac{1}{S_x} \right] \right] [\alpha] \left[\left[\epsilon_r \right] \right]^{-1} \left[\left[\frac{1}{S_x} \right] \right] [\alpha] - k_0^2 I_d \right\} \quad (2.63)$$

Les vecteurs propres et les valeurs propres de ces matrices sont, respectivement, les modes propres et les constantes de propagation correspondantes de la structure étudiée. Ceux-ci, comme nous l'avons signalé plus haut, forment une base sur laquelle nous développons le champ électromagnétique. Les amplitudes de ce dernier sont obtenues par l'algorithme de la matrice de diffraction S via l'implémentation des conditions aux limites sur les interfaces de séparation entre les différentes couches constituant le réseau.

Sur la figure (2.13), nous avons rapporté le tracé de l'intensité du champ magnétique d'une fente métallique unique définie par sa hauteur $h = 300nm$ et sa largeur $F = 200nm$. Le rayonnement incident est une onde plane de longueur d'onde $\lambda = 700nm$, sous incidence normale. Le matériau considéré est l'Or. L'épaisseur de la couche PML est $e = \lambda/2$. Pour les mêmes paramètres, la figure (2.14) présente l'intensité de la composante horizontale du champ électrique, E_x , à $150nm$ au dessus de la fente. Comme nous pouvons le constater directement sur ces figures, le champ électromagnétique décroît de façon exponentielle dans la région PML. L'absorption démarre de zéro au bord intérieur de la PML pour atteindre son maximum en son bord extérieur. De plus, ces figures montrent que le champ électromagnétique se répète de façon périodique d'une fenêtre de calcul à l'autre sans qu'il y ait de contamination ou d'influence entre elles. Pour conclure, nous dirons que ce type de PML répond exactement aux conditions citées plus haut pour l'application de nos codes réseaux. Toutefois, nous devons noter que les PML, sous toutes leurs formes, n'absorbent pas les ondes rasantes, mais celles-ci ne sont pas gênantes du moment qu'elles ne sont pas réfléchies vers le domaine de calcul.

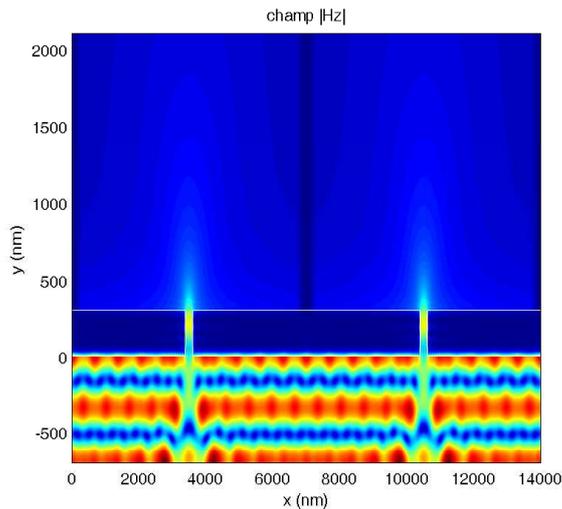


FIG. 2.13 – Norme du champ magnétique sur deux périodes

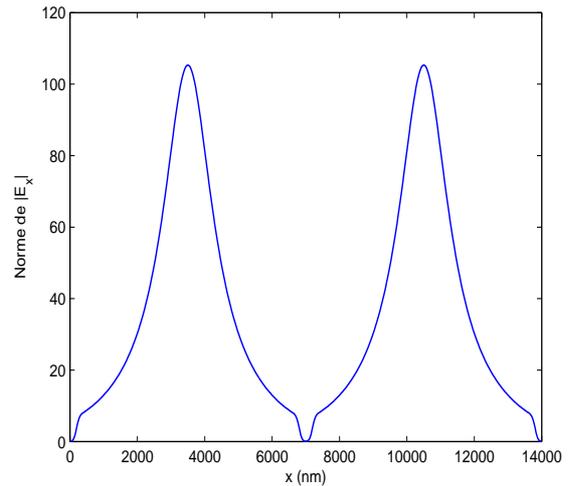


FIG. 2.14 – Norme de la composante E_x du champ électrique sur deux périodes

Remarque :

En l'absence des PML, le champ électromagnétique dans les régions homogènes est donné par le développement de Rayleigh. Ce n'est plus le cas en présence des PML, car ces régions ne sont plus homogènes. De ce fait, le problème aux valeurs propres doit être résolu dans toutes les régions où les PML sont présentes.

2.5 FMM et métaux

La méthode modale de Fourier, détaillée dans ce chapitre, est l'une des méthodes les plus utilisées pour traiter une variété de problèmes demandant une analyse rigoureuse. En effet, elle a été appliquée avec succès à plusieurs types de réseaux diélectriques et métalliques. Pour ces derniers, des instabilités numériques, notamment en polarisation TM, ont limité son utilisation pendant longtemps. Cette difficulté a été surmontée par la découverte des règles correctes de factorization de Fourier [47]–[49]. Des résultats numériques ont montré effectivement l'efficacité de cette méthode pour des réseaux métalliques très réfléchissants dans le domaine visible. Cependant, même lorsqu'elle est équipée de ces raffinements, il reste un problème inhérent à la méthode elle-même en raison de son utilisation des séries de Fourier : la vitesse de convergence dépend directement du contraste de la permittivité diélectrique dans la région modulée. Celui-ci est lié au phénomène bien connu de Gibbs aux points de discontinuités de la permittivité. Pour un réseau lamellaire, la discontinuité de la permittivité induit une forte variation du champ électromagnétique [61]. La figure (2.15) illustre le phénomène de Gibbs observé lorsque la série de Fourier reconstruisant la permittivité ϵ_r est tronquée. Dans le chapitre suivant, nous verrons comment nous avons pu surmonter cette ultime difficulté.

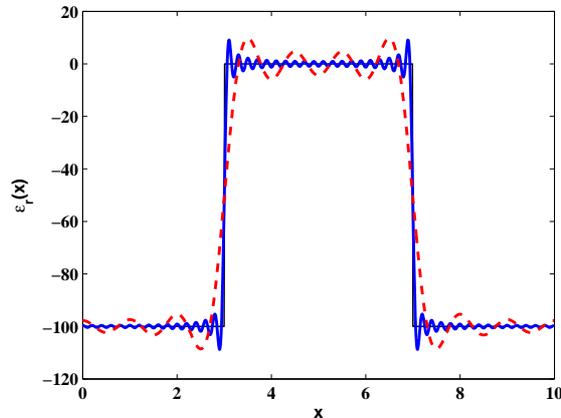


FIG. 2.15 – Illustration du phénomène de Gibbs : Développement de Fourier de la permittivité relative d'un réseau lamellaire pour $\epsilon_r = -100$ et $M = 10$ (en pointillé) et $M = 50$ (en continu).

Les métaux, en raison de leurs nombreuses applications, sont d'un grand intérêt en nano-optique. A titre d'exemples, ils ont été utilisés en microscopie du champ proche, dans la transmission exaltée sub-longueur d'onde et dans la plasmonique [6, 7]. Dans de nombreuses applications, l'une des caractéristiques les plus essentielles est l'efficacité de diffraction du réseau, qui a été analysée par de nombreuses techniques théoriques. Les réseaux métalliques sont bien connus pour leur efficacité de diffraction élevée qui est liée à la forte conductivité du

métal. Beaucoup de travaux antérieurs ont supposé que le métal a une conductivité infinie. Bien que ce soit presque vrai pour les micro-ondes, il est manifestement erroné dans la région visible du spectre. Pour ces courtes longueurs d'onde, les propriétés électromagnétiques du matériau doivent être représentées par sa permittivité complexe. En théorie, les modèles de Drude et de Drude-Lorentz sont souvent utilisés pour décrire cette permittivité.

La méthode modale de Fourier, telle que nous l'avons décrite ci-dessus, donne pleine satisfaction dans le cas des réseaux métalliques dans la gamme visible des longueurs d'onde. Cependant, Popov et al. [78] ont découvert récemment des problèmes d'instabilité numérique, en polarisation TM, quand on utilise les métaux nobles à faibles pertes, tels que l'argent ou l'or, dans le domaine proche de l'infra-rouge et cela même en tenant compte des règles de factorisation de Fourier établies par Li [49]. En effet, dans cette gamme du spectre de longueurs d'onde, des artefacts numériques indésirables, qui sont absents en polarisation TE, émergent en polarisation TM de l'analyse par la FMM, ou sa variante la méthode différentielle, des réseaux métalliques très conducteurs. Le réseau lamellaire et les paramètres géométriques et physiques utilisés sont donnés sur la figure (2.16). Ce sont les mêmes que ceux de la référence [78]. La figure (2.17) montre le résultat numérique obtenu par la FMM pour un réseau d'indice de réfraction $n = 0 + 10j$. Sur cette figure, nous avons rapporté l'efficacité de diffraction de l'ordre -1 en fonction du taux de remplissage τ . Nous avons utilisé un ordre de troncature $M = 15$, correspondant à 31 coefficients de Fourier, et 400 valeurs pour τ à intervalles identiques entre $1nm$ et $499nm$.

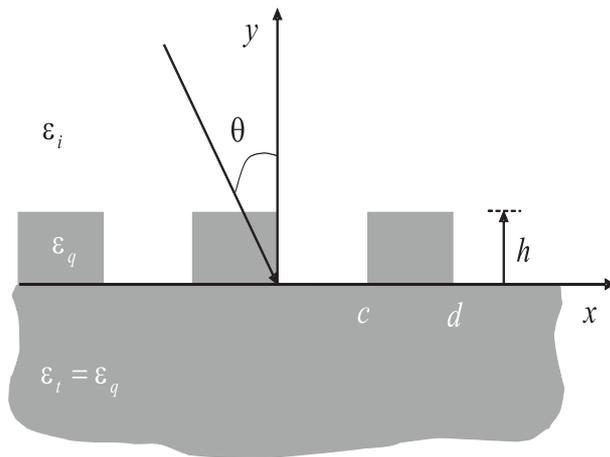


FIG. 2.16 – Géométrie du problème de diffraction rapporté dans [78] : $\theta = 30^\circ$, $\lambda = 0.6328\mu m$, $d = h = 0.5\mu m$, $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_q = \epsilon_t = -100$.

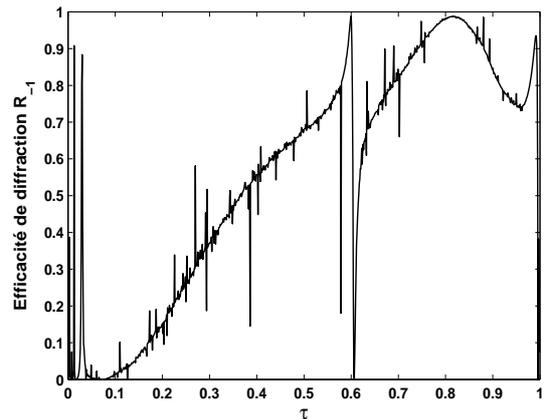


FIG. 2.17 – Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage, $\tau = c/d$ (polarisation TM).

Depuis, un certain nombre de solutions ont été suggérées pour surmonter cette difficulté particulière et pour éliminer les artefacts numériques indésirables [78, 81, 82, 79, 80]. Popov et al. [78] ont attribué l'apparition de ces artefacts numériques au mauvais conditionnement de la matrice Toeplitz du profile de la permittivité. Ces auteurs ont proposé deux approches différentes pour contourner le problème, mais n'ont pas pu obtenir des résultats satisfaisants. Récemment, Lyndin et al. [81] ont établi le lien entre les instabilités et les modes parasites correspondant aux valeurs propres instables d'ordres élevés. Ils ont proposé une procédure consistant en l'identification et filtrage de ces modes parasites. Cette technique n'est pas entièrement satisfaisante, car elle nécessite un suivi systématique de ces modes. Plus récemment, Khavasi et al. [79] ont attribué le problème à la non validité, *stricto sensu*, des règles de factorisation de Fourier lorsque la permittivité diélectrique du réseau présente à la fois des valeurs réelles positives et négatives. Ils ont proposé une solution consistant en une légère modification de la permittivité négative en ajoutant une petite partie imaginaire. Cette idée a été déjà rapportée, de manière indirecte, par Watanabe dans [82]. Mais, comme ils l'ont montré eux-mêmes, avec cette astuce il est nécessaire d'avoir un nombre de troncature élevé si l'on veut éliminer la quasi-totalité des instabilités, figure (2.18). Résultat qui pouvait être obtenu sans modifier la permittivité, pourvu que le nombre de coefficients de Fourier retenus soit élevé. Finalement, par un simple changement de variables permettant d'augmenter la discrétisation au voisinage des points de discontinuités de la permittivité, nous verrons dans le chapitre suivant comment nous avons pu surmonter ce problème [55].

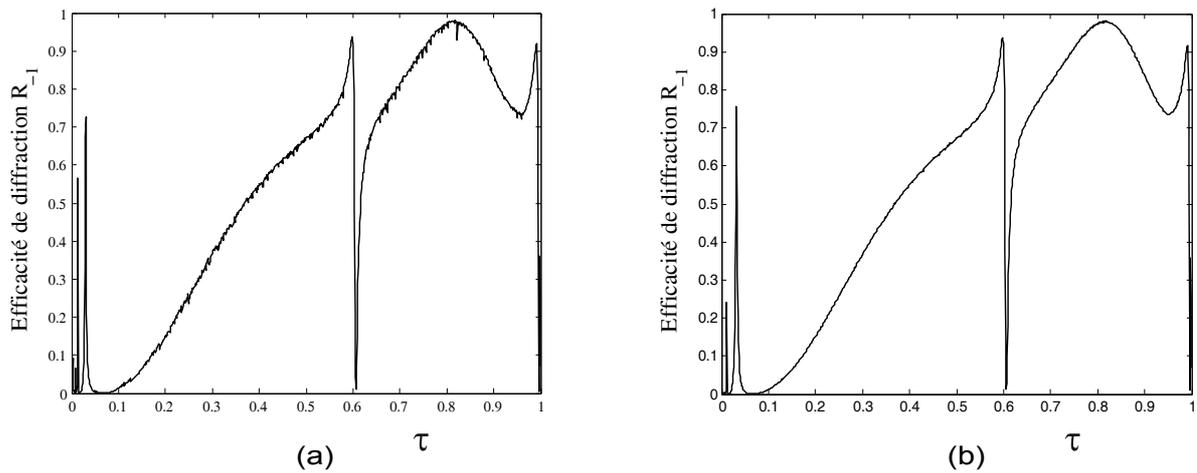


FIG. 2.18 – Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage (1000 valeurs pour τ à intervalles identiques entre $1nm$ et $499nm$) pour deux ordres de troncature (a) : $M = 15$ et (b) : $M = 30$. Mêmes paramètres que dans [78], mais $\epsilon_q = \epsilon_t = (0.05 + 10j)^2$.

2.6 Conclusion

Nous venons de présenter la méthode FMM ainsi que les considérations mathématiques à prendre absolument en compte pour s'affranchir des instabilités numériques, notamment en polarisation TM. Cette méthode permet de calculer les efficacités de diffraction en exprimant le champ à l'intérieur du réseau sous la forme d'une somme d'ondes couplées. L'extension de cette méthode aux réseaux aperiodiques ou finis dans l'espace se fait d'une manière très simple à l'aide des *Complex coordinate Stretching*, une autre interprétation équivalente des couches parfaitement adaptées (PML).

La FMM est une méthode d'analyse très rigoureuse des problèmes de diffraction. Sa formulation théorique utilise des mathématiques élémentaires, et sa mise en œuvre numérique ne nécessite pas de techniques sophistiquées. Ces caractéristiques font de la FMM l'une des méthodes les plus populaires dans le domaine de l'optique diffractive. Cependant, la méthode FMM souffre toujours du problème d'instabilité numérique dans le cas des réseaux métalliques très conducteurs. Ce problème est lié au phénomène de Gibbs et il est inhérent à la méthode elle-même en raison de son utilisation des séries de Fourier pour développer le champ électromagnétique et la permittivité diélectrique du réseau. Dans le chapitre qui va suivre, à l'aide de la représentation paramétrique des axes de coordonnées, nous verrons comment nous avons pu surmonter ce problème et comment la convergence de la méthode est rendue encore plus rapide. Cette nouvelle formulation de la FMM est dénommée *FMM paramétrique*.

Dans la suite de ce document, nous nous focalisons sur le cas de la polarisation TM, car ce cas, en partie à cause de la présence des singularités du champ électromagnétique aux bords du réseau, est plus difficile à calculer que celui de la polarisation TE. Ainsi, la polarisation TM est très appropriée pour montrer la robustesse de toute méthode numérique.

Chapitre 3

Méthode Modale de Fourier Paramétrique

Ce chapitre a pour objectif de décrire les dernières améliorations ou développements apportés à la méthode FMM pour surmonter les problèmes d'instabilités numériques rencontrés dans le cas des réseaux métalliques en polarisation TM. Entre autres, il constitue la réponse aux problèmes cités à la fin du chapitre précédent.

Comme nous l'avons signalé plus haut, la convergence de la FMM dépend directement du contraste de la permittivité diélectrique dans la région modulée. En effet, celui-ci se révèle être terriblement ennuyeux du fait que le développement de Fourier du profil discontinu de la permittivité diélectrique doit être inévitablement tronqué dans les calculs numériques et, en conséquence, souffre du phénomène de Gibbs. Ceci a conduit à des vitesses de convergence extrêmement faibles et à des calculs erronés, à moins qu'un grand nombre de composantes de Fourier soit considéré. Ce problème existe même si la méthode est équipée de tous les raffinements apportés jusqu'alors. Cependant, une manière élégante d'atténuer cette dernière restriction a été proposée par Granet [83] qui a présenté le concept de la résolution spatiale adaptative, la FMM paramétrique. Il consiste en l'utilisation d'un nouveau système de coordonnées qui augmente la résolution spatiale au niveau des discontinuités du profil de la permittivité en étirant les coordonnées autour d'elles. Ce stratagème mathématique a amélioré sensiblement le taux de convergence et a déjà montré son utilité dans l'analyse des réseaux lamellaires et trapézoïdaux à des fréquences optiques [83, 84, 85]. Cependant, cette approche nécessite la résolution du problème aux valeurs propres même dans les régions homogènes (les conditions aux limites sont écrites dans le nouvel espace), ce qui représente un coût de calcul supplémentaire pour la méthode. Il est important de souligner que la solution du problème aux valeurs propres est l'étape la plus fastidieuse dans le processus numérique de la FMM ; son temps de calcul est proportionnel à $(2M + 1)^3$, où M est l'ordre de troncature. Il est alors souhaitable de l'éviter ou de le minimiser autant que possible. Dans [85], Vallius et al. ont modifié l'approche de Granet afin :

- (i) D'être en mesure de traiter les réseaux multicouches.
- (ii) D'éviter la résolution des problèmes aux valeurs propres dans les régions homogènes.

L'idée principale dans [85] est de résoudre le problème aux valeurs propres pour chaque couche du réseau avec son propre système de coordonnées et de ramener ensuite tous les champs à l'espace original où les conditions aux limites sont implémentées. L'inconvénient majeur de cette technique est qu'elle nécessite le calcul des matrices de transformation qui, une fois introduites dans l'algorithme de la matrice de diffraction S (via les conditions aux limites), détruit la stabilité de cet algorithme en raison de leur nature mal-conditionnée. En outre, le calcul des matrices de transformation pour chaque couche présente des calculs supplémentaires, dont le coût est non négligeable.

Dans ce qui suit, nous allons montrer que la méthode modale de Fourier équipée du concept de la résolution spatiale adaptative (ASRFMM, pour *Adaptive Spatial Resolution Fourier Modal Method*) est plus stable que la FMM classique. En premier lieu, nous allons rappeler la formulation du problème aux valeurs propres présentée par Granet–Vallius [83, 85], puis nous allons proposer une formulation encore plus stable qui s'est avérée converger plus uniformément et a été plus économique en temps de calcul que la précédente [55]. En travaillant toujours dans l'espace transformé, nous allons avancer une formule permettant de déduire les valeurs propres dans toutes les régions homogènes du réseau à partir de la connaissance de la solution dans l'une d'entre elles [56]. De ce point de vue, toutes les régions homogènes sont équivalentes puisque leurs valeurs propres associées partagent les mêmes vecteurs propres. Là encore, en évitant la résolution des problèmes aux valeurs propres dans les couches homogènes du réseau, on réussit à réduire considérablement le temps de calcul global nécessaire à la résolution du problème de diffraction.

3.1 Formulation du problème aux valeurs propres

Version Granet-Vallius

3.1.1 Changement de variables–Nouveau système de coordonnées

Dans la FMM classique, la discrétisation de l'espace est uniforme quelque soit le profil de la permittivité diélectrique. Raison pour laquelle le phénomène de Gibbs apparaît et donc la mauvaise convergence de la méthode. Pour surmonter cette limitation, un système de coordonnées est choisi de telle sorte que la cartographie de l'espace correspond aux variations de la fonction périodique de la permittivité diélectrique. Ainsi, la représentation paramétrique des axes de coordonnées permet la résolution spatiale adaptée, augmentant ainsi la discrétisation aux voisinages des transitions de la permittivité ϵ_r . Avec cette représentation, la convergence de la méthode devrait être améliorée d'une manière substantielle [83, 85]. Dans ce travail, le nouveau système de coordonnées adopté est celui proposé par Vallius et al. [85]. Dans le

cas des réseaux de périodicité $1D$, le changement de variable à effectuer est $x = F(u)$ telle que :

$$x(u) = F(u) = a_1 + a_2u + \frac{a_3}{2\pi} \sin \left[2\pi \frac{u - u_{\ell-1}}{u_\ell - u_{\ell-1}} \right], \quad u_{\ell-1} \leq u \leq u_\ell \quad (3.1)$$

Où :

$$a_1 = \frac{u_\ell x_{\ell-1} - u_{\ell-1} x_\ell}{u_\ell - u_{\ell-1}} \quad (3.2)$$

$$a_2 = \frac{x_\ell - x_{\ell-1}}{u_\ell - u_{\ell-1}} \quad (3.3)$$

$$a_3 = G(u_\ell - u_{\ell-1}) - (x_\ell - x_{\ell-1}) \quad (3.4)$$

Avec $G = f(u_\ell) - f(u_{\ell-1})$, où $f(u) = \partial x / \partial u$. (G est généralement pris égal à 10^{-4} ou 10^{-5})

Les x_ℓ sont les points de transition dans l'espace- x et les u_ℓ sont leurs homologues dans l'espace- u . Entre les transitions $(\ell - 1)$ et ℓ , la fonction $F(u)$ ci-dessus est utilisée pour correspondre entre les deux espaces (x, y, z) et (u, y, z) . Autour de ces transitions, une variation donnée Δu de u devrait aboutir à une variation Δx beaucoup plus faible de x .

La figure (3.1) illustre le changement de variables ci-dessus, équation (3.1), pour le cas d'une seule transition (ligne discontinue) et pour celui de deux transitions (ligne continue). Comme nous pouvons le constater sur cette figure, quelque soit les positions des discontinuités dans l'espace- x , leurs homologues dans l'espace- u occupent des positions telles que la période d est divisée en parties égales selon le nombre de transitions, ce qui permet de décrire mieux la permittivité à l'aide du développement de Fourier. Également, nous pouvons constater que la nouvelle fonction définie de u est une fonction périodique avec la même période que la permittivité diélectrique du réseau, et que sa dérivée est minimale au niveau des discontinuités.

3.1.2 Polarisation TM

Considérons la géométrie du problème de diffraction invariante suivant z , voir la figure (1.2) ou (2.1). Les milieux dans les régions d'incidence et de transmission sont supposés homogènes avec des permittivités diélectriques ϵ_i et ϵ_t , respectivement. Dans la région 2 (le réseau), la permittivité diélectrique est supposée périodique dans la direction x avec la période d . La région 2 est subdivisée en N_c couches : dans chacune de celles-ci, la permittivité peut être modulée de façon arbitraire suivant x , mais supposée constante suivant y et invariante dans la direction z . La structure est éclairée à partir de la région d'incidence par une onde plane de longueur d'onde dans le vide λ et sous l'angle d'incidence θ . Puisque le problème est complètement invariant suivant z , toutes les dérivées partielles par rapport à z disparaissent dans les équations de Maxwell, ce qui conduit aux deux polarisations fondamentales TE et

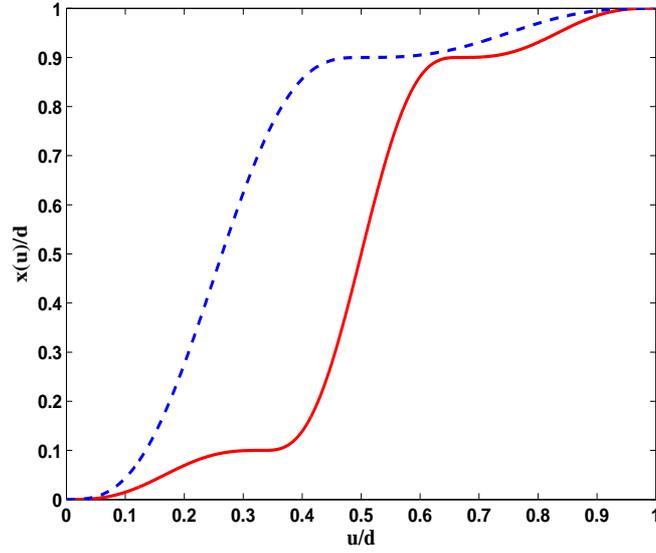


FIG. 3.1 – Dépendance entre les variables x et u . En pointillés, nous avons utilisé une seule transition ; $C_x = 0.9d$ dans l'espace- x et dans l'espace- u $C_u = 0.5d$. En ligne continue, nous avons utilisé deux transitions ; $C_{x1} = 0.1d$ et $C_{x2} = 0.9d$ dans l'espace- x et $C_{u1} = 0.3333d$ et $C_{u2} = 0.6666d$ leurs correspondantes dans l'espace- u .

TM [8]. Mais, comme nous l'avons signalé à la fin du chapitre précédent, nous ne considérons ici que le cas de polarisation TM.

Pour résoudre complètement le problème de diffraction, nous devons calculer le champ électromagnétique partout. Dans l'espace- x et en polarisation TM, le champ H_z est solution de l'équation d'onde suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial}{\partial x} H_z \right) + \frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial^2}{\partial y^2} H_z + k_0^2 H_z = 0 \quad (3.5)$$

$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le vecteur d'onde dans le vide.

Le champ électrique $\vec{E}(E_x, E_y)$ est déduit de H_z via les équations de Maxwell :

$$\begin{cases} E_x = -(j\omega\epsilon_0)^{-1}(1/\epsilon_r)\partial_y H_z \\ E_y = (j\omega\epsilon_0)^{-1}(1/\epsilon_r)\partial_x H_z \end{cases} \quad (3.6)$$

Dans les milieux homogènes, la solution générale de l'équation (3.5) est une superposition d'ondes planes (développement de Rayleigh, voir chapitre 1). Ce n'est pas le cas dans la région

de modulation où la permittivité diélectrique n'est pas constante. Dans ce milieu, la solution est calculée en résolvant un problème aux valeurs propres (voir chapitre 2).

Dans la FMM conventionnelle, le champ électromagnétique et la permittivité diélectrique sont développés en séries de Fourier en coordonnées cartésiennes, où la discrétisation de l'espace est uniforme. Étant donné que plus de points de discrétisation sont nécessaires là où les champs changent rapidement et peu de points sont nécessaires là où les champs varient lentement, cette discrétisation uniforme est inefficace dans le cas des réseaux de permittivités à fort contrastes. Dans la FMM paramétrique, utilisant la technique de résolution spatiale adaptative [83, 85], la coordonnée le long de la direction de périodicité est transformée de sorte que plus de points de discrétisation soient placés autour des discontinuités de la permittivité diélectrique. Par conséquent, le nombre d'harmoniques spatiales nécessaires pour réaliser une précision donnée est sensiblement réduit. Ainsi, une meilleure convergence de la méthode peut être réalisée en choisissant un nouvel espace de Fourier, où la variable x est remplacée par u . La dépendance entre les variables x et u est donnée par les équations paramétriques qui mènent à de nouvelles équations aux valeurs propres. L'un des changements de variables possibles est celui donné par l'équation (3.1). En conséquence, dans l'espace- u , l'équation d'onde (3.1) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{a(u)} \frac{\partial}{\partial u} H_z \right) + b(u) \frac{\partial^2}{\partial y^2} H_z + k_0^2 f(u) H_z = 0 \quad (3.7)$$

Où :

$$\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial u} = \frac{1}{f(u)} \frac{\partial}{\partial u} \quad \text{avec} \quad f(u) = \frac{\partial x}{\partial u} \quad \text{est la fonction de résolution.}$$

$$a(u) = \epsilon_r(u) f(u)$$

$$b(u) = \frac{f(u)}{\epsilon_r(u)}$$

Dans l'espace- u , le champ est aussi pseudo-périodique avec la période d . Ainsi, chaque mode peut être présenté sous la forme :

$$H_z(u, y) = \sum_n H_n(y) e^{j\alpha_n u} \quad (3.8)$$

La formulation matricielle du problème aux valeurs propres est obtenue en suivant les mêmes étapes que dans la FMM classique (voir chapitre 2). Ainsi, la matrice pour laquelle les valeurs propres sont calculées est donnée par :

$$\mathcal{A}_{TM} = [[b]]^{-1} \{ [\alpha][[a]]^{-1}[\alpha] - k_0^2[[f]] \} \quad (3.9)$$

$[[a]]$, $[[b]]$ et $[[f]]$ sont les matrices Toeplitz des fonctions $a(u)$, $b(u)$ et $f(u)$, respectivement. $[\alpha] = \text{diag}(\alpha_n)$, où $\alpha_n = k_0\sqrt{\epsilon_i}\sin(\theta) + 2\pi n/d$, $n \in \mathbb{Z}$.

A noter que les α_n sont identiques dans l'espace- u et dans l'espace- x parce que l'onde plane incidente, exprimée en terme de la variable u , obéit à l'équation de propagation (3.7) et que la fonction $x(u)$ est aussi périodique avec la même période d .

Comme nous pouvons le constater clairement dans l'expression (3.9), l'avantage principal de ce changement de variables est que nous n'avons plus besoin des coefficients de Fourier du profil exact de la permittivité diélectrique, mais plutôt de ceux du profil transformé de celle-ci $f(u)\epsilon_r(u)$. De même, la matrice Toeplitz de l'inverse de la permittivité ϵ_r^{-1} est remplacée par celle de la nouvelle fonction $\frac{f(u)}{\epsilon_r(u)}$. Ces fonctions devraient être assez régulières pour garantir la convergence rapide de leurs séries de Fourier correspondantes. De ce fait, ce changement de coordonnées a une conséquence directe sur la convergence de la FMM paramétrique.

Après avoir résolu le problème aux valeurs propres, le champ dans la couche q du réseau s'écrit comme suit :

$$H_z^{(q)}(u, y) = \sum_n \left[\sum_p P_{np}^{(q)} \left(a_p^{(q)} e^{D_p^{(q)}(y-y_{(q-1)})} + b_p^{(q)} e^{-D_p^{(q)}(y-y_{(q-1)})} \right) \right] e^{j\alpha_n u} \quad (3.10)$$

$$y_{(q-1)} \leq y \leq y_q$$

Où $P^{(q)}$ est la matrice contenant l'ensemble des vecteurs propres de la matrice $\mathcal{A}_{TM}^{(q)}$ et $D^{(q)}$ est le vecteur contenant les valeurs propres associées. $a^{(q)}$ et $b^{(q)}$ sont les amplitudes, encore inconnues, à déterminer une fois que les conditions aux limites sont dûment appliquées.

Il est intéressant de noter que les valeurs propres exactes ne dépendent pas de la représentation des coordonnées choisies, par contre les vecteurs propres dépendent du choix du système de coordonnées et doivent donc être projetés sur une même base afin de pouvoir appliquer les conditions de continuité du champ électromagnétique. De ce fait, et pour revenir à l'espace- x , le terme $e^{j\alpha_n u}$ dans l'équation (3.10), dépendant de l'emplacement des transitions dans chaque couche du réseau, doit être projeté sur la base de Fourier commune de l'espace- x . Ceci peut être facilement réalisé en utilisant la matrice de transformation $[K]$, dont l'élément (p, m) s'écrit [85] :

$$[K]_{pm} = \frac{1}{d} \int_0^d f(u) \exp[-j\alpha_p x(u) + j\alpha_m u] du \quad (3.11)$$

Ainsi, tout vecteur $\Psi^{(u)}$, défini dans le système de coordonnées (u, y, z) , peut être transformé dans le système cartésien original (x, y, z) comme suit :

$$\Psi^{(x)} = [K]\Psi^{(u)} \quad (3.12)$$

Dans l'espace- x et en polarisation TM, les conditions aux limites à l'interface $y = y_q$ s'écrivent :

$$\begin{cases} H_z^{(q)}(x, y_q) = H_z^{(q+1)}(x, y_q) \\ \frac{1}{\epsilon_r^{(q)}} \frac{\partial}{\partial y} H_z^{(q)} = \frac{1}{\epsilon_r^{(q+1)}} \frac{\partial}{\partial y} H_z^{(q+1)} \end{cases} \quad (3.13)$$

En appliquant l'algorithme *S-matrix*, décrit au chapitre 2, la matrice de diffraction $S^{(q)}$ correspondante est donnée par :

$$S^{(q)} = \begin{pmatrix} I_d & 0 \\ 0 & \phi_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{(q+1)}^{(x)} & -P_q^{(x)} \\ Q_{(q+1)}^{(x)} D_{(q+1)} & Q_q^{(x)} D_q \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -P_{(q+1)}^{(x)} & P_q^{(x)} \\ Q_{(q+1)}^{(x)} D_{(q+1)} & Q_q^{(x)} D_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_d & 0 \\ 0 & \phi_q \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Avec $P^{(x)} = [K]P^{(u)}$ et $Q^{(x)} = [K]Q^{(u)}$ où $Q^{(u)} = \frac{1}{\epsilon_r} P^{(u)}$.

Il est important de noter que, pour des raisons de stabilité de la méthode, le produit $Q = \epsilon_r^{-1} P$ doit être calculé dans l'espace- u et puis transformé dans l'espace- x via l'équation (3.12) et, non pas en employant les règles de factorisation de Fourier dans l'espace- x [85].

A noter, également, que le calcul de la matrice de projection $[K]$ doit se faire pour chacune des couches du réseau car la base de Fourier $e^{j\alpha_n u}$ y est différente pour chacune d'entre elles, sauf si, dans toutes les couches, les permittivités diélectriques correspondantes présentent les mêmes singularités.

La suite de la procédure de résolution du problème de diffraction suit les mêmes étapes que la FMM classique ; l'équation matricielle (3.14) est la formule de récurrence à utiliser pour calculer les amplitudes du champ électromagnétique et donc les efficacités de diffraction.

3.2 Reformulation du problème aux valeurs propres

3.2.1 Polarisation TM

Nous venons de décrire la méthode modale de Fourier paramétrique telle qu'elle a été rapportée par Granet [83] et modifiée par Vallius et Honkanen [85] pour pouvoir l'appliquer à des structures multi-couches. Cette formulation, comme nous le verrons dans la section

suivante, est beaucoup plus stable que celle de la FMM classique. Cependant, en dépit de tous les avantages qu'offre cette stratégie, la matrice de transformation $[K]$ est de nature mal-conditionnée et, par conséquent, peut causer des instabilités numériques lorsqu'elle est inversée dans les calculs, notamment lorsque le nombre de troncature nécessaire est élevé [86]. Malheureusement, tous les algorithmes récursifs, inconditionnellement stables, incluant la méthode des matrices de diffraction S exigent l'inversion de la matrice $[K]$. De plus, le calcul de cette dernière et la projection du champ électromagnétique dans la base de l'espace- x dans chaque couche du réseau avant l'implémentation des conditions aux limites nécessite un temps de calcul beaucoup plus important que la FMM classique.

Pour éviter cette ultime instabilité et pour diminuer le temps de calcul nécessaire, nous avons proposé une nouvelle formulation du problème aux valeurs propres qui, en réalité, se dégage naturellement après le passage dans l'espace- u . En effet, après le changement de variables (3.1), l'équation d'onde (3.5) devient :

$$\frac{1}{\epsilon_r(u)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} H_z(u, y) = - \left\{ \frac{1}{f(u)} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{\epsilon_r(u)} \frac{1}{f(u)} \frac{\partial}{\partial u} \right) + k_0^2 \right\} H_z(u, y) \quad (3.15)$$

La projection de cette équation dans la base de Fourier $e^{j\alpha_n u}$, en utilisant la notation matricielle habituelle et les règles de factorisation de Fourier correctes, donne :

$$\frac{d^2}{dy^2} \mathbf{H}_z = \mathcal{A}_{TM} \mathbf{H}_z$$

Où :

$$\mathcal{A}_{TM} = \left[\left[\frac{1}{\epsilon_r} \right] \right]^{-1} \left\{ \left[\left[f \right] \right]^{-1} [\alpha] \left[\left[\epsilon_r \right] \right]^{-1} \left[\left[f \right] \right]^{-1} [\alpha] - k_0^2 I_d \right\} \quad (3.16)$$

Dans cette formulation, nous avons abandonné les fonctions $a(u)$ et $b(u)$ utilisées dans [83, 85], bien que leur introduction est justifiée du point de vue spectral. En effet, ces fonctions sont plus régulières que $\epsilon_r(u)$ et $1/\epsilon_r(u)$ et, par conséquent, leurs séries de Fourier devraient converger plus rapidement. Cependant, ce que nous pensons être une nouvelle formulation, équation (3.16), semble être beaucoup plus stable que celle donnée par l'équation (3.9). Comme nous l'avons déjà signalé, cette nouvelle formulation est celle qui apparaît naturellement de la factorisation de Fourier de l'équation de propagation (3.15) sans arrangements additionnels. La comparaison entre les deux formulations est rapportée dans la section suivante.

Notre stratégie consiste, également, en la résolution du problème de diffraction entièrement dans l'espace- u . En effet, contrairement à Vallius et tous les auteurs qui l'ont suivi, nous calculons une seule fois la fonction de résolution $f(u)$ pour tout le problème traité. Pour

cela, nous utilisons un seul système de coordonnées $x(u)$ pour toutes les couches de la structure; nous avons considéré, par ordre croissant en x , toutes les transitions des permittivités diélectriques de toutes les couches. Par ce procédé, ce qui est une discontinuité vraie pour une couche peut être vraie ou fictive pour une autre, ce qui n’altère nullement les calculs. Cette façon de procéder a le grand avantage d’utiliser la même base de Fourier pour toutes les couches, ce qui permet d’écrire les équations de continuité du champ électromagnétique à travers les interfaces sans projeter celui-ci sur la base commune de l’espace- x . Donc, dans ce cas, il est nécessaire de résoudre le problème aux valeurs propres dans chaque couche et même dans les milieux homogènes d’incidence et de transmission. Ce n’est qu’une fois que le calcul est terminé que nous projetons le champ électromagnétique dans l’espace- x original, ce qui évite l’inversion de la matrice $[K]$. Cette stratégie, en plus d’éviter le problème d’instabilité lié à la matrice de projection $[K]$, présente l’avantage de la réduction, de manière considérable, du temps de résolution.

3.3 Résultats numériques

Pour démontrer l’efficacité et la stabilité de la méthode proposée, l’exemple du réseau lamellaire métallique, étudié par Popov et al. [78] et rappelé à la fin du chapitre précédent, est considéré. La figure (3.2-a) rappelle le résultat obtenu par la FMM classique. Elle montre l’évolution de l’ordre de diffraction -1 en fonction du taux de remplissage $\tau = c/d$, voir figure (2.16) pour les paramètres géométriques et physiques du problème de diffraction. Le même calcul, mais en utilisant la FMM paramétrique (version Granet-Vallius) est rapporté à la figure (3.2-b). Dans ces deux calculs, nous avons utilisé un ordre de troncature $M = 15$ (i.e. 31 harmoniques de Fourier retenus) et $N_s = 400$ points de discrétisation, régulièrement espacés dans l’intervalle $[0.01, 0.99]$. Nous pouvons clairement voir que le nombre de modes artéfactuels (*spurious modes*) est inférieur pour la FMM paramétrique, ce qui indique que cette formulation est naturellement plus stable que la FMM originale. À noter que nous avons utilisé une valeur réelle purement négative de la permittivité diélectrique ($\epsilon_r = -100$) et sans aucun filtrage de valeurs propres. Doubler le nombre de points de discrétisation révèle que le nombre d’artéfacts numériques, avec la FMM classique, est beaucoup plus important et qu’en même temps leur amplitude est plus forte, alors que pour la FMM paramétrique le nombre d’artéfacts reste limité et sont, essentiellement, confinés dans la partie droite de la courbe après la valeur de $\tau = 0.6$.

Dans le but d’enlever complètement ces instabilités numériques, nous avons revu la formulation du problème aux valeurs propres donnée par l’expression (3.9) et nous l’avons remplacé par celle donnée en (3.16) qui, inopinément, s’avère converger plus uniformément. La comparaison entre les figures (3.2-b) et (3.3), où les mêmes ordre de troncature ($M = 15$) et nombre de points pris pour τ ($N_s = 400$) sont utilisés, confirme ce résultat.

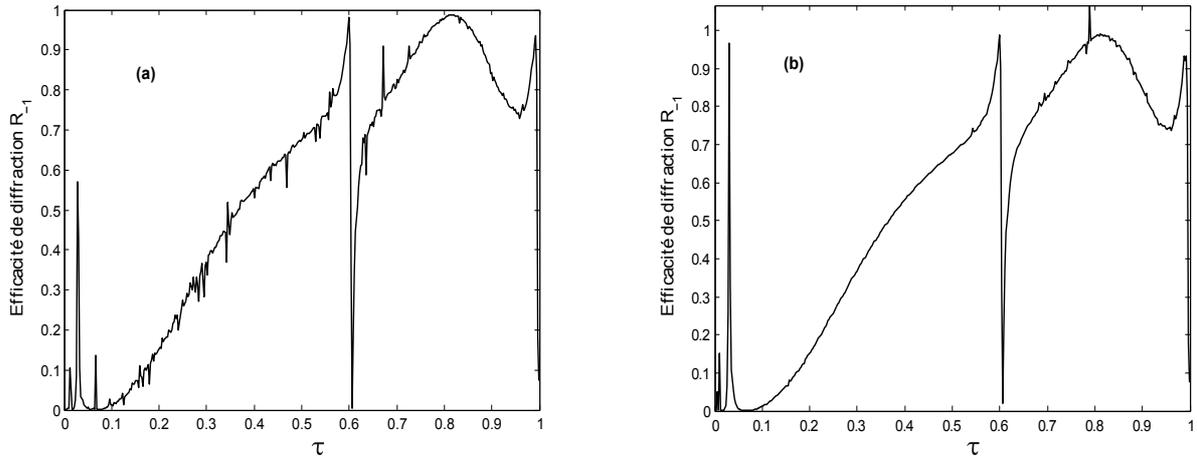


FIG. 3.2 – Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec (a) : FMM classique et (b) : FMM paramétrique (Version Granet–Vallius). Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 400.

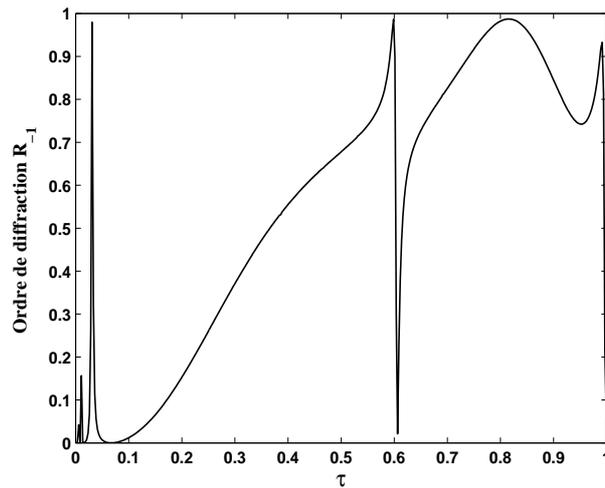


FIG. 3.3 – Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec la nouvelle formulation, équation (3.16). Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 400.

Doubler le nombre de points N_s de τ ne change pas la figure (3.3); la nouvelle courbe est presque exactement superposée à l'ancienne. Évidemment, si on augmente davantage le nombre de points N_s quelques instabilités insignifiantes apparaissent, éventuellement. Dans le cas présent, il faut utiliser 2000 points pour pouvoir les observer. Ceci est illustré dans la figure (3.4-a), où, pour raison de comparaison, nous avons ajouté la même courbe, figure (3.4-b), calculée via l'ancienne formulation de la FMM paramétrique. Nous voudrions souligner que ces artéfacts peuvent être enlevés en augmentant l'ordre de troncature (à $M = 30$ dans cet exemple). Enfin, notons que pour comparer les deux formulations de la FMM paramétrique,

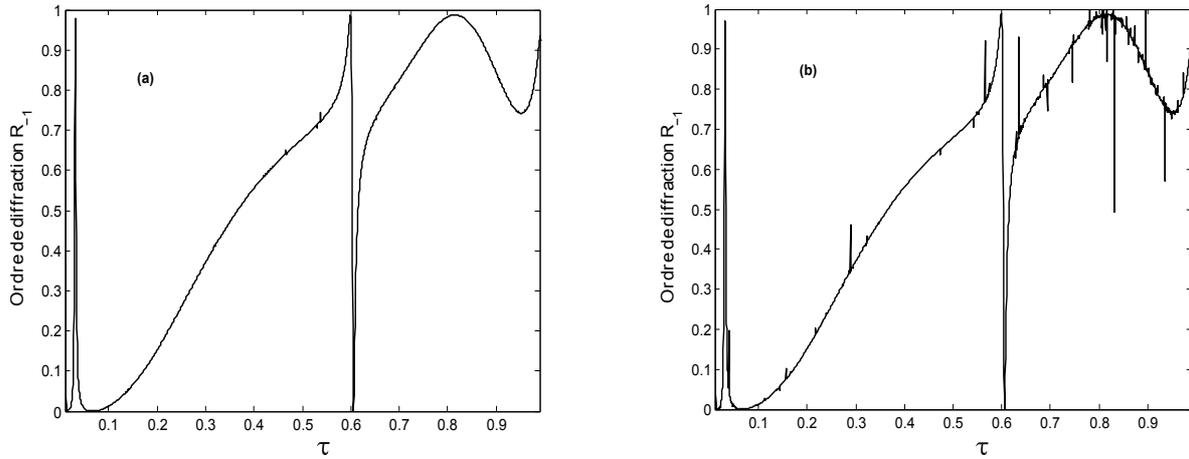


FIG. 3.4 – Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec la FMM paramétrique (a) : Nouvelle formulation et (b) : Ancienne formulation. Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 2000.

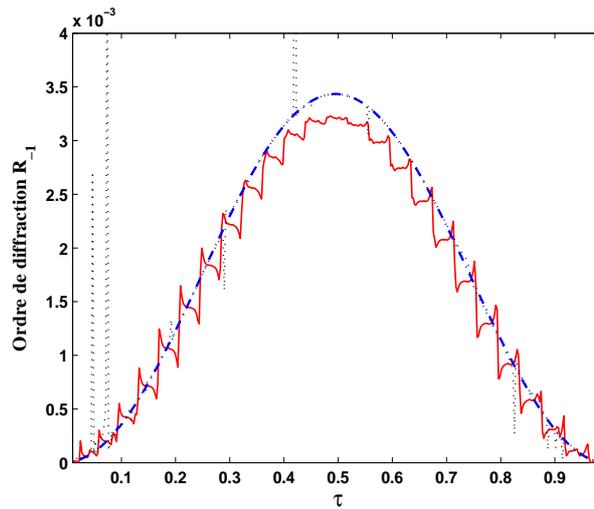


FIG. 3.5 – Ordre de diffraction R_{-1} en fonction du taux de remplissage calculé avec la nouvelle formulation, équation (3.16). Le nombre de coefficients de Fourier retenu est 31 et celui des points de discrétisation de l'intervalle de τ est 400.

les coefficients de Fourier des fonctions $f(u)$, $a(u)$ et $b(u)$ utilisés ont été calculés analytiquement pour éviter toute interférence avec d'autres algorithmes telle que la transformée de Fourier rapide (FFT), par exemple.

Un autre aspect des modes artéfactuelles est que leur influence est très énergique pour les structures minces. On s'attend à ce que leur nombre augmente quand on réduit l'épaisseur du réseau. Pour cela, nous avons mis notre formulation à l'épreuve en divisant l'épaisseur originale par 100. La figure (3.5) montre les résultats correspondants calculés par la FMM

paramétrique–nouvelle formulation (courbe à tiret épais, $M = 20$) et comparés à ceux de l’ancienne formulation (courbe en pointillés minces, $M = 20$) et de la FMM classique (courbe continue). Dans le cas de cette dernière, nous avons utilisé des pertes significatives dans l’indice de réfraction $n = 1 + 10j$ et $M = 25$. Naturellement, un ordre de troncature supérieur lissera la courbe de la FMM classique. Toutefois, les valeurs de l’ordre de diffraction R_{-1} sont inférieures aux véritables valeurs. Ce dernier résultat démontre la stabilité remarquable de la nouvelle formulation de la FMM paramétrique.

3.4 FMM paramétrique pour des structures comprenant des couches homogènes

3.4.1 Position du problème

La structure étudiée est représentée sur la figure (3.6). Elle est constituée d’une pile de réseaux lamellaires de même période d , où des couches homogènes se situent entre les deux milieux homogènes de permittivités ϵ_i et ϵ_t des régions d’entrée et de sortie, respectivement. La structure entière est invariante dans la direction z . Une onde plane monochromatique de longueur d’onde λ illumine la structure sous un angle d’incidence θ . Le vecteur d’onde correspondant est noté $k_0 = 2\pi/\lambda$.

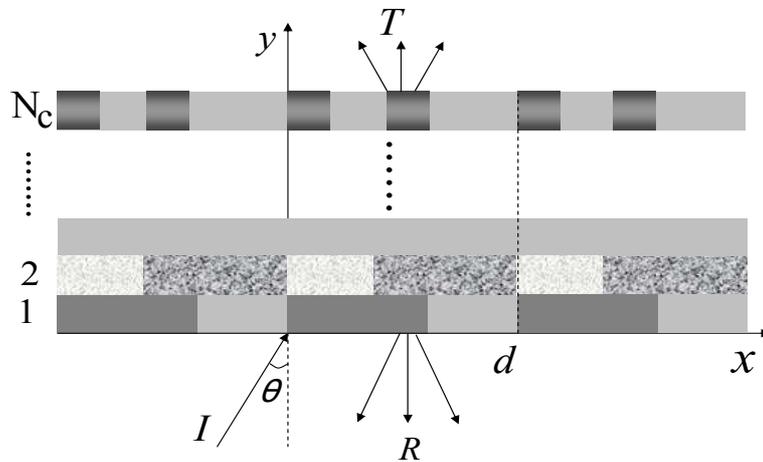


FIG. 3.6 – Géométrie du problème de diffraction. Chaque couche peut être soit homogène soit un réseau lamellaire de même période d .

Comme nous pouvons le constater sur la figure (3.6), l’espace, suivant y , est divisé en $(N_c + 2)$ régions : Les milieux d’entrée et de sortie qui sont supposés homogènes et les N_c différentes couches. La première chose à faire est de résoudre les équations d’onde partout, puis trier les solutions afin de construire les différents champs (incident, réfléchi, transmis ...) avant l’implémentation des conditions aux limites. Dans la FMM classique, les équations d’onde

pour les deux polarisations (TE et TM) s'écrivent :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2} E_z + \frac{\partial^2}{\partial y^2} E_z + k_0^2 \epsilon(x) E_z = 0 & (TE) \\ \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial}{\partial x} H_z + \frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} H_z + k_0^2 H_z = 0 & (TM) \end{cases} \quad (3.17)$$

En utilisant les notations matricielles habituelles et les vraies règles de factorization de Fourier, ces équations s'écrivent dans l'espace de Fourier comme suit :

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dy^2} E_z = \{\alpha^2 - k_0^2 [|\epsilon|\}] E_z = \mathcal{A}_{TE} E_z & (TE) \\ \frac{d^2}{dy^2} H_z = [|\frac{1}{\epsilon}|]^{-1} \{\alpha [|\epsilon|\}]^{-1} \alpha - k_0^2 I_d\} H_z = \mathcal{A}_{TM} H_z & (TM) \end{cases} \quad (3.18)$$

Où $\alpha = \text{diag}(\alpha_n)$ et $\alpha_n = k_0 \sqrt{\epsilon_i} \sin(\theta) + 2\pi n/d$, $n \in \mathbb{Z}$. Les vecteurs $E_z(y)$ et $H_z(y)$ contiennent les composantes de Fourier des champs.

Les deux équations du système (3.18) peuvent se mettre sous la forme générale suivante :

$$\frac{d^2}{dy^2} \psi = \mathcal{A} \psi = P D^2 P^{-1} \psi \quad (3.19)$$

Où D^2 est une matrice diagonale formée par les valeurs propres de la matrice \mathcal{A} et P est la matrice des vecteurs propres associés.

Les solutions sont données par (cf. Chapitre 2) :

$$\psi(y) = P \{e^{Dy} a + e^{-Dy} b\}, \quad \frac{d}{dy} \psi(y) = PD \{e^{Dy} a - e^{-Dy} b\} \quad (3.20)$$

Utilisant maintenant le nouveau système de coordonnées introduit dans [83], où la variable x est remplacée par u à travers la représentation paramétrique $x = F(u)$. Avec ces notations, le système (3.17) devient [55] :

$$\begin{cases} \frac{1}{f} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{f} \frac{\partial}{\partial u} E_z \right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} E_z + k_0^2 \epsilon(u) E_z = 0 & (TE) \\ \frac{1}{f} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{\epsilon(u)} \frac{1}{f} \frac{\partial}{\partial u} H_z \right) + \frac{1}{\epsilon(u)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} H_z + k_0^2 H_z = 0 & (TM) \end{cases} \quad (3.21)$$

Et dans l'espace de Fourier avec la notation matricielle habituelle :

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dy^2} E_z = \left([[f]]^{-1} \alpha [[f]]^{-1} \alpha - k_0^2 [[\epsilon]] \right) E_z = \mathcal{A}_{TE} E_z & (TE) \\ \frac{d^2}{dy^2} H_z = [[\frac{1}{\epsilon}]]^{-1} \left([[f]]^{-1} \alpha [[\epsilon]]^{-1} [[f]]^{-1} \alpha - k_0^2 I_d \right) H_z = \mathcal{A}_{TM} H_z & (TM) \end{cases} \quad (3.22)$$

Les solutions peuvent être formulées exactement comme dans l'équation (3.20) en terme de valeurs propres et vecteurs propres associés.

Comme cela a été indiqué plus haut, nous choisissons de travailler complètement dans l'espace u et d'utiliser un seul système de coordonnées $x = F(u)$ pour toutes les couches de la structure. Dans ce cas, il est nécessaire de résoudre le problème aux valeurs propres dans toutes les couches, y compris les régions d'entrée (incidence) et de sortie (transmission). Commençons par la région d'entrée où le système d'équations (3.22) se réduit à la seule formule suivante :

$$\frac{d^2}{dy^2} \psi_i = \left([[f]]^{-1} \alpha [[f]]^{-1} \alpha - k_0^2 \epsilon_i I_d \right) \psi_i = \mathcal{A}_i \psi_i \quad , \quad \psi_i = E_z^i \quad \text{ou} \quad H_z^i \quad (3.23)$$

Où ψ_i peut être exprimé, comme dans (3.20), en termes de la matrice des valeurs propres D_i et celle des vecteurs propres associés P_i .

Si l'on considère, maintenant, une quelconque autre couche homogène q de permittivité relative ϵ_q , alors nous pouvons écrire :

$$\begin{cases} \mathcal{A}_i = [[f]]^{-1} \alpha [[f]]^{-1} \alpha - k_0^2 \epsilon_i I_d \\ \mathcal{A}_q = [[f]]^{-1} \alpha [[f]]^{-1} \alpha - k_0^2 \epsilon_q I_d \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{A}_q = \mathcal{A}_i + k_0^2 (\epsilon_i - \epsilon_q) I_d \quad (3.24)$$

En multipliant à droite par P_i et à gauche par son inverse, on obtient :

$$P_i^{-1} \mathcal{A}_q P_i = D_i^2 + k_0^2 (\epsilon_i - \epsilon_q) I_d \quad (3.25)$$

Puisque $\mathcal{A}_i = P_i D_i^2 P_i^{-1}$.

De ce dernier résultat, il est aisé de voir que P_i diagonalise aussi \mathcal{A}_q pour les valeurs propres données par :

$$D_q^2 = D_i^2 + k_0^2 (\epsilon_i - \epsilon_q) I_d \quad (3.26)$$

En conséquence, il est clair maintenant, que toutes les régions homogènes sont équivalentes à celle d'entrée puisqu'elles partagent les mêmes vecteurs propres. C'est un résultat original. Pour des structures présentant plusieurs couches homogènes, ce résultat permet de réduire considérablement le temps de calcul. En effet, dans ces cas, il suffit de résoudre une seule fois le problème aux valeurs propres. Les vecteurs propres ainsi obtenus sont les mêmes pour toutes les autres couches homogènes et les valeurs propres correspondantes sont déduites via l'équation (3.26).

Pour les autres couches de la structure où la permittivité diélectrique est une fonction présentant des singularités, la procédure de résolution est la même que celle décrite ci-dessus. Le but de cette partie est de montrer que la résolution du problème aux valeurs propres peut être évitée pour les structures contenant des couches homogènes et, par conséquent, le temps de calcul considérablement réduit. Dans ce qui suit, nous présentons les résultats numériques permettant de valider l'utilisation de l'équation (3.26) et montrant le temps de calcul gagné en évitant la résolution du problème aux valeurs propres.

3.4.2 Résultats numériques

Nous allons maintenant donner deux exemples pour montrer que :

- * Les valeurs propres calculées par l'utilisation de l'équation (3.26) sont presque exactement celles obtenues en résolvant entièrement le problème aux valeurs propres.
- * Le gain du temps de calcul peut être considérable.

Nous considérons un réseau lamellaire, tel que celui correspondant à la couche 1 sur la figure (3.6), avec un point de discontinuité situé à $c = d/2$ (taux de remplissage égal à 0.5) et les paramètres suivants : $d = \lambda$, $\theta = 0^\circ$, $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_t = 2.25$ (réseau diélectrique) ou $\epsilon_t = (0.22 + 6.71j)^2$ (réseau métallique).

Afin d'avoir une idée sur le gain de temps obtenu par l'approche actuelle, nous comparons l'évolution du temps de calcul par rapport à l'ordre de troncature M lors de la résolution :

- (i) Du problème aux valeurs propres dans la région d'entrée seulement (ce sera le temps de référence).
- (ii) Des deux problèmes aux valeurs propres correspondant aux régions d'entrée et de sortie.
- (iii) Du problème aux valeurs propres dans la région d'entrée et de déduire les valeurs propres de la région de sortie via l'équation (3.26).

Les courbes correspondantes, étiquetées C_1 , C_2 et C_3 respectivement, sont reportées sur la figure (3.7). Nous avons d'abord comparé les valeurs propres obtenues par l'équation (3.26)

avec celles calculées en résolvant directement le problème aux valeurs propres pour la région de sortie. Nous avons observé une très petite différence qui varie avec l'ordre de troncature et la nature des valeurs propres. Pour illustrer cette constatation, nous commençons par le réseau diélectrique. Dans le tableau (3.1), nous avons rapporté les modules des valeurs propres, notées D_0 et D_1 (Correspondant aux ordre de diffraction zéro et un) et D_2 (correspondant à la première onde évanescence, i.e. celle du module le plus faible), obtenues pour le milieu de sortie pour des valeurs croissantes de M . Le cas (a) correspond aux valeurs propres calculées directement en résolvant le problème aux valeurs propres à travers la diagonalisation de la matrice \mathcal{A}_t , tandis que le cas (b) correspond aux valeurs propres évaluées via l'équation (3.26). Si nous examinons les cinq premières lignes du tableau (3.1), nous constatons que pour D_0 l'accord est toujours excellent, alors que pour D_1 et D_2 la différence porte sur le 11^{ème} digit. Pour la dernière ligne, où nous avons pris $M = 100$, nous constatons que pour D_0 le résultat reste inchangé, tandis que pour D_1 et D_2 la différence porte sur le 8^{ème} digit, montrant ainsi que la précision reste excellente même avec un ordre de troncature assez élevé. En effet, nous avons vérifié que cette conclusion reste la même pour les valeurs propres de modules plus élevés, correspondant aux ondes évanescences d'ordres supérieurs.

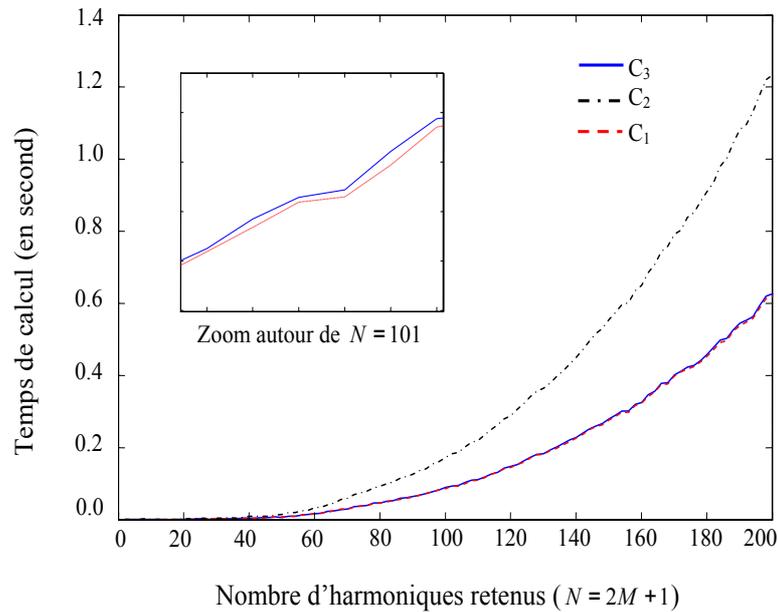


FIG. 3.7 – Temps de calcul des différents problèmes aux valeurs propres en fonction du nombre d'harmoniques de Fourier retenus.

Dans le tableau (3.2), nous avons montré les résultats obtenus dans le cas du réseau métallique. Les valeurs absolues des parties réelle et imaginaire du 3^{ème} ordre évanescence D_3 sont données pour les deux cas de calcul (a) et (b). Là encore, l'accord est excellent. Nous avons également vérifié que la même conclusion vaut pour les autres valeurs propres.

TAB. 3.1 – Comparaison entre les valeurs propres calculées : (a) Directement par le solveur aux valeurs propres et (b) En utilisant l'équation (3.26). $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_t = 2.25$

M	$ D_0 $		$ D_1 $		$ D_2 $	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
10	9.4247779607	9.4247779607	7.02481472742	7.02481472742	8.31187867626	8.31187867626
20	9.4247779607	9.4247779607	7.02481473103	7.02481473103	8.31187288206	8.31187288207
30	9.4247779607	9.4247779607	7.02481473103	7.02481473104	8.31187288206	8.31187288204
40	9.4247779607	9.4247779607	7.02481473103	7.02481473105	8.31187288205	8.31187288206
50	9.4247779607	9.4247779607	7.02481473105	7.02481473103	8.31187288197	8.31187288198
100	9.4247779607	9.4247779607	7.02481473082	7.02481473140	8.31187287858	8.31187288074

TAB. 3.2 – Comparaison entre les valeurs propres calculées : (a) Directement par le solveur aux valeurs propres et (b) En utilisant l'équation (3.26). $\epsilon_i = 1$ et $\epsilon_t = (0.22 + 6.71j)^2$

M	(a)		(b)	
	$ Re(D_3) $	$ Im(D_3) $	$ Re(D_3) $	$ Im(D_3) $
10	46.18126929097	1.26194106316	46.18126929097	1.26194106316
20	46.17865200346	1.26201258675	46.17865200346	1.26201258675
30	46.17865200345	1.26201258675	46.17865200345	1.26201258675
40	46.17865200345	1.26201258674	46.17865200344	1.26201258675
50	46.17865200345	1.26201258675	46.17865200345	1.26201258675
100	46.17865200340	1.26201258675	46.17865200357	1.26201258674

Concentrons-nous maintenant sur le gain du temps de calcul. Comme on peut s'y attendre, voir Figure (3.7), par le biais des graphes C_1 et C_2 , que le temps de calcul consacré à (ii) est le double de celui passé en (i). Cependant, le temps économisé, avec notre approche, est linéairement proportionnel au nombre de couches homogènes dans la structure et cela est loin d'être négligeable pour certaines applications (par exemple, les cristaux photoniques 2D avec une période variant graduellement ou les cristaux photoniques 2D qui sont périodiques suivant une direction et quasi-périodiques suivant l'autre). Plus intéressante est la comparaison entre les graphes C_1 et C_3 . Ils montrent que la différence en temps de calcul entre (i) et (iii) est presque négligeable. À noter que le temps de calcul représenté par C_1 est proportionnel à $(2M + 1)^3$, comme cela peut être prévu pour des problèmes aux valeurs propres. Bien évidemment, tous les résultats ci-dessus sont valides pour les deux polarisations TE et TM, puisque dans un milieu homogène les équations d'onde sont réduites à la même expression. En outre, les calculs approfondis sur les réseaux de différentes configurations publiés dans la littérature comprenant des matériaux avec et sans pertes n'ont montré aucune différence entre les résultats obtenus par les nouvelles et les anciennes méthodes. Finalement, nous voudrions souligner que tous les calculs présentés dans ce travail ont été accomplis sur un PC Intel-Duo-2.1 GHz.

3.5 Conclusion

Ce chapitre est consacré à la FMM paramétrique. Cette technique est apparue après que la FMM originale ne pouvait plus être appliquée aux réseaux très conducteurs dans l'infrarouge ou le micro-onde, à cause du phénomène de Gibbs qui est lié au fort contraste de la permittivité diélectrique du réseau. L'idée fondamentale dans cette méthode est d'augmenter la discrétisation aux voisinages des discontinuités de cette permittivité. La discrétisation est donc loin d'être uniforme comme c'est le cas dans la FMM originale. La FMM paramétrique a été introduite à l'origine par Granet pour un réseau lamellaire, puis modifiée par Vallius pour pouvoir l'appliquer à des structures multi-couches. Ce stratagème mathématique a permis d'accélérer la convergence de la méthode et d'éviter le problème d'instabilité lié au phénomène de Gibbs. En effet, la FMM paramétrique, sous sa formulation initiale, est naturellement moins soumise aux modes parasites que la FMM classique. Cependant, la matrice de projection utilisée pour revenir à l'espace original est sujette aux problèmes d'instabilités, notamment lorsque le nombre de troncature est élevé. Pour éviter définitivement ces modes parasites, nous avons revu cette technique et nous avons introduit une formulation beaucoup plus stable et robuste qui permet d'obtenir des résultats fiables avec un ordre de troncature très raisonnable. Les nombreux exemples numériques traités, qui ne sont pas tous rapportés dans ce manuscrit, ont appuyé ces affirmations.

Un autre résultat inédit est celui de la réduction du temps de calcul pour des réseaux contenant plusieurs couches homogènes. Il est important de souligner que la solution du problème aux valeurs propres est l'étape la plus fastidieuse et la plus coûteuse en temps de calcul dans le processus numérique de la FMM. Il est donc souhaitable, autant que possible, de le réduire en évitant la résolution des problèmes aux valeurs propres dans les couches homogènes. Ainsi, nous avons montré que lorsqu'on travaille dans l'espace transformé (espace- u), il suffit de résoudre le problème aux valeurs propres dans la région d'entrée, puis d'en déduire la solution des problèmes aux valeurs propres dans la région de sortie ou dans toute autre couche homogène présente dans la structure d'une manière très simple. Finalement, au-delà d'éviter des calculs inutiles, cette réduction de calculs peut être particulièrement utile pour les applications d'optimisation utilisant des codes FMM.

Conclusion générale

Dans cette thèse nous avons développé la Méthode Modale de Fourier (FMM) pour l'étude des propriétés optiques (propagation et diffraction) des matériaux structurés à l'échelle de la longueur d'onde. Cette méthode est très populaire dans la communauté des scientifiques de l'optique diffractive pour sa simplicité, son efficacité et le fait qu'elle ne nécessite pas de techniques sophistiquées pour son implémentation. Le but ultime de ce travail de thèse est de construire un modèle numérique puissant, basé sur cette méthode rigoureuse, qui nous permettra d'aborder des applications dans le domaine de la nano-optique, telles que la plasmonique, les métamatériaux, la transmission exaltée, etc.

En premier lieu, nous avons pu nous familiariser avec les bases de la méthode FMM. Cela nous a offert l'opportunité de découvrir et de bien comprendre ses problèmes liés aux instabilités numériques. Dans le cas des diélectriques, la FMM classique (originale) donne des résultats très précis. Elle a été appliquée à plusieurs types de réseaux avec beaucoup de succès, notamment après avoir introduit l'algorithme de la matrice de diffraction et la découverte des bonnes règles de factorisation de Fourier. Elle ne présente aucun problème d'instabilité que ce soit en polarisation TE ou TM. Par contre, dans le cas de structures métalliques, si la méthode donne satisfaction dans le domaine optique du spectre des longueurs d'onde elle échoue complètement dans les domaines infra-rouge et micro-onde, principalement en polarisation TM. Plusieurs raisons ont été avancées. La partie réelle de la permittivité diélectrique des matériaux très conducteurs dans ces spectres de longueurs d'onde est très faible devant sa partie imaginaire. Par conséquent, ce fort contraste de la permittivité diélectrique du réseau, favorisant le phénomène de Gibbs, est la raison essentielle qui rend la convergence de la méthode faible ou très lente. C'est un problème inhérent à la FMM elle-même à cause de son utilisation des séries de Fourier pour la description du champ électromagnétique et de la permittivité diélectrique de la zone modulée. Pour surmonter ce problème, apparition de modes parasites qui sont purement numériques, plusieurs solutions ont été avancées par un certain nombre d'auteurs. Parmi celles-ci, nous citons le filtrage des valeurs propres pour l'identification de ces modes parasites ou l'ajout d'une petite dissipation à la valeur de la permittivité. Cependant, aucune de ces méthodes ne donne pleine satisfaction. La première nécessite un suivi systématique de ces modes et pour la deuxième, il faudrait un ordre de troncature

élevé pour éliminer la quasi-totalité des modes artéfactuels. Finalement, la représentation paramétrique des axes de coordonnées était la technique la plus convenable pour surpasser ce problème d'instabilité. Alors que la FMM sous sa version originale utilise une discrétisation uniforme des axes de coordonnées, cette technique (la représentation paramétrique) est basée sur le concept de résolution spatiale adaptative qui conduit à une discrétisation affinée aux voisinages des points de discontinuités de la permittivité du réseau considéré. Une conséquence remarquable ressort de ce stratagème mathématique, dont les résultats obtenus ont montré son efficacité et son amélioration drastique de la convergence de la FMM. Cependant, la matrice de projection utilisée dans l'étude des réseaux multi-couches pour revenir à l'espace original est de nature mal-conditionnée. L'étude approfondie de ces questions nous a conduit à proposer une nouvelle formulation de la FMM paramétrique. Cette reformulation s'est avérée beaucoup plus stable et beaucoup plus rapide que la formulation initiale. En effet, l'ordre de troncature nécessaire pour atteindre la convergence est presque réduit de moitié par rapport à celui de la formulation initiale. Notre stratégie consiste à utiliser un seul vecteur de coordonnées contenant toutes les singularités des différentes permittivités de toutes les couches du réseau. Cela permet d'utiliser une seule et même fonction de résolution pour toutes les couches de la structure étudiée. C'est un grand avantage du fait qu'il permet d'éviter la matrice de projection au cours de la résolution du problème. La stratégie consiste donc à résoudre les problèmes aux valeurs propres dans toutes les couches, y compris les couches homogènes d'entrée et de sortie, dans le nouvel espace. Ce n'est qu'après l'obtention de toutes les amplitudes du champ électromagnétique qu'on revient dans l'espace original pour calculer les efficacités de diffraction des différents ordres et le tracé des cartes du champ. Les exemples numériques que nous avons traité et que nous n'avons pas tous rapporté dans ce manuscrit ont montré la stabilité remarquable de cette reformulation. Nous l'avons même testé dans le cas des couches métalliques d'épaisseurs très fines, connu pour être difficile. Le résultat obtenu est de loin meilleur que ceux réalisés par la FMM classique et la FMM paramétrique-formulation originale.

Un autre résultat original important est obtenu pour les cas de structures, diélectriques ou métalliques, contenant des couches homogènes. En écrivant les matrices issues des problèmes aux valeurs propres de deux couches homogènes dans l'espace de Fourier, nous avons montré que la dépendance entre leurs valeurs propres respectives s'exprime par une simple équation et que leurs vecteurs propres respectifs sont identiques. Sachant que la résolution du problème aux valeurs propres est l'étape la plus fastidieuse de la méthode FMM, ce résultat permet alors, à partir des résultats de la couche d'entrée, d'en déduire tous ceux des couches homogènes présentes dans la structure étudiée. Par conséquent, le temps de calcul économisé est considérable. Ce résultat, au-delà d'éviter des calculs inutiles, peut être particulièrement utile pour les applications d'optimisation utilisant des codes FMM.

D'autre part, l'introduction des PML (couches parfaitement adaptées) a permis l'extension de la FMM aux cas des structures aperiodiques ou finies dans l'espace. Dans nos codes de calcul, nous avons utilisé le concept des coordonnées complexes étirées qui est essentiellement le prolongement analytique des variables du champ électromagnétique dans l'espace complexe. Dans la FMM, ce type de PML se traduit par un simple changement de variables dans les équations de propagation. L'extension de la FMM aux structures aperiodiques se fait, grâce aux PML, par la périodisation artificielle ou numérique de la structure étudiée. L'examen général des PML et leur influence sur les modes de la structure restent encore préliminaires. Toutefois, les résultats obtenus dans le cas de la FMM classique sont très encourageants, alors que leur introduction dans la FMM paramétrique est encore en voie d'étude.

★ _____ ★

Bibliographie

- [1] B. Guizal and J. Dudley. Ibn sahl, inventeur de la loi de la réfraction. *Pour la Science*, 301 :PP. 24–26, 2002.
- [2] A. M. Smith. What is the history of medieval optics really about? *Proceed. Amer. Phil. Soc.*, 148 :PP. 180–194, 2004.
- [3] E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :PP. 2059–2062, 1987.
- [4] S. John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Physical Review Letters*, 58 :PP. 2486–2489, 1987.
- [5] Lord Rayleigh. On the dynamical theory of gratings. *Proc. Roy. Soc.*, A 79 :399–416, 1907.
- [6] D. Courjon and C. Bainier. *Le champ proche optique*. Springer, 2001.
- [7] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff. Extraordinary optical transmission through sub-wave length hole arrays. *Nature*, 391 :PP. 667–669, 1998.
- [8] R. Petit. *Electromagnetic theory of gratings*. Springer-Verlag, 1980.
- [9] D. J. Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Printice Hall (New Jersey), 1999.
- [10] Stefan A. Maier. *Plasmonics : Fundamentals and Applications*. Springer, 2007.
- [11] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals. *Phys. Rev. B*, 6 :203–205, 1972.
- [12] A. Vial and T. Laroche. Comparison of gold and silver dispersion laws suitable for fdtd simulations. *Appl Phys B*, 93 :139–143, 2008.
- [13] G. Demésy, F. Zolla, A. Nicolet, M. Commandré, and C. Fossati. The finite element method as applied to the diffraction by an anisotropic grating. *Optics Express*, 15 :18089, 2007.
- [14] J. L. Volakis, A. Chatterjee, and L. C. Kempel. *Finite Element Method for Electromagnetics*. IEEE Press, 1998.
- [15] R. Petit and M. Cadilhac. Sur la diffraction d’une onde plane par un réseau infiniment conducteur. *C. R. Acad. Sci.*, 262 :468–471, 1966.

- [16] R. F. Millar. The rayleigh hypothesis and a related least-square solution to scattering problems for periodic surfaces and other scatters. *Radio Sci.*, 8 :785–796, 1973.
- [17] P. M. Van den Berg and J. T. Fokkema. The rayleigh hypothesis in the theory of reflection by a grating. *J. Opt. Soc. Am.*, 69 :27–31, 1979.
- [18] P. M. Van den Berg. Reflection by a grating : Rayleigh method. *J. Opt. Soc. Am.*, 71 :1224–1228, 1981.
- [19] J. P. Hugonin, R. Petit, and M. Cadilhac. Plane-wave expansions used to describe the field diffracted by grating. *J. Opt. Soc. Am.*, 71 :593–598, 1981.
- [20] R. Petit. Plane-wave expansions used to describe the field diffracted by grating : reply to comments by a. wirgin. *J. Opt. Soc. Am.*, 72 :814, 1982.
- [21] A. Wirgin. Plane-wave expansions used to describe the field diffracted by grating : comments. *J. Opt. Soc. Am.*, 72 :812, 1982.
- [22] A. Wirgin. Reflection by a grating : Rayleigh method : comments. *J. Opt. Soc. Am.*, 72 :963–969, 1982.
- [23] Erwin G. Loewen and Evgeny Popov. *Diffraction gratings and applications*. Marcel Dekker, Inc., 1997.
- [24] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE T. Antenn. Propag.*, 14 :302–307, 1966.
- [25] A. Tafiove. *Computational Electrodynamics : The Finite-Differences Time-Domain Method*. Artech House, Boston, 1995.
- [26] G. Bao, Z. Chen, and H. Wu. Adaptive finite-element method for diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 22 :1106–1114, 2005.
- [27] M. Besbes, J. P. Hugonin, P. Lalanne, S. van Haver, O.T.A. Janssen, A. M. Nugrowati, M. Xu, S. F. Pereira, H. P. Urbach, A. S. van de Nes, P. Bienstman, G. Granet, A. Moreau, S. Helfert, M. Sukharev, T. Seideman, F. I. Baida, B. Guizal, and D. Van Labeke. Numerical analysis of a slit-groove diffraction problem. *Journal of the European Optical society*, Rapid Publications 2 :07022 : 1–17, 2007.
- [28] M. Nevière, G. Cerutti-Maori, and M. Cadilhac. Sur une nouvelle méthode de résolution du problème de la diffraction d'une onde plane par un réseau infiniment conducteur. *Opt. Commun.*, 3 :48–52, 1971.
- [29] J. Chandezon, M. T. Dupuis, G. Cornet, and D. Maystre. Multicoated gratings : a differential formalism applicable in the entire optical region. *J. Opt. Soc. Am.*, 72 :839–846, 1982.
- [30] L. Li. Oblique-coordinate-system-based chandezon method for modeling one-dimensionally periodic, multilayer, inhomogeneous, anisotropic gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 16 :2521– 2531, 1999.

- [31] K. Knop. Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves. *J. Opt. Soc. Am.*, 68 :PP. 1206–1210, 1978.
- [32] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 71 :811–818, 1981.
- [33] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 72 :1385–1392, 1982.
- [34] T. Tamir, H. C. Wang, and A. A. Oliver. Wave propagation in sinusoidally stratified dielectric media. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, 2 :PP. 223–335, 1964.
- [35] T. Tamir. Scattering of electromagnetic waves by a sinusoidally stratified half-space, ii. diffraction aspects at the rayleigh and bragg wavelengths. *Canad. J. Phys.*, 44 :PP. 2461–2494, 1966.
- [36] T. Tamir and H. C. Wang. Scattering of electromagnetic waves by a sinusoidally stratified half-space, i. formal solution and analytic approximations. *Canad. J. Phys.*, 44 :PP. 3073–2094, 1966.
- [37] C. Yeh, K. F. Casey, and Z. A. Kaprielian. Transverse magnetic wave propagation in sinusoidally stratified dielectric media. *IEEE Microwave Theory Tech.*, 13 :PP. 297–302, 1965.
- [38] C. B. Burckhardt. Diffraction of a plane wave at a sinusoidally stratified dielectric grating. *J. Opt. Soc. A.*, 56 :PP. 1502–1509, 1966.
- [39] F. G. Kaspar. Diffraction by thick, periodically stratified gratings with complex dielectric constant. *J. Opt. Soc. A.*, 63 :PP. 37–45, 1973.
- [40] S. T. Peng, T. Tamir, and H. L. Bertoni. Theory of periodic dielectric wave-guides. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, 23 :PP. 123–133, 1975.
- [41] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction-e-mode polarization and losses. *J. Opt. Soc. Am.*, 73 :451–455, 1983.
- [42] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Three-dimensional vector coupled-wave analysis of planar grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 73 :PP. 1105–1112, 1983.
- [43] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 3 :1780–1787, 1986.
- [44] K. Rokushima and J. Yamakita. Analysis of anisotropic dielectric gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 73 :PP. 901–908, 1983.
- [45] S. T. Han, Y.-L. Tsao, R. M. Walser, and M. F. Becker. Electromagnetic scattering of two-dimensional surface-relief dielectric gratings. *Appl. Optm.*, 31 :PP. 2343–2502, 1992.
- [46] E. Nojonen and J. Turunen. Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three dimensional profiles. *J. Opt. Soc. Am.*, A 11 :2494–2502, 1994.

- [47] G. Granet and B. Guizal. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in tm polarisation. *J. Opt. Soc. Am.*, A 13 :1019–1023, 1996.
- [48] P. Lalanne and G. M. Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for tm polarisation. *J. Opt. Soc. Am.*, A 13 :779–782, 1996.
- [49] L. Li. Use of fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *J. Opt. Soc. Am.*, A 13 :1870–1876, 1996.
- [50] L. Li. *in Mathematical Modeling Optical Science*. (SIAM, Philadelphia), Eds. G. Bao and L. Cowsar and W. Masters, PP. 111–139, 2001.
- [51] L. Li. Reformulation of the fourier modal method for surface-relief gratings made with anisotropic materials. *J. Mod. Opt.*, 45 :1313–1334, 1998.
- [52] Y. Pagani, B. Guizal, D. Van Labeke, A. Vial, and F. Baida. Diffraction hysteresis loop modeling in magneto-optical gratings. *Opt. Commun.*, 209 :237–244, 2002.
- [53] L. Li. New formulation of the fourier modal method for crossed surface-relief gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11 :2758–2767, 1997.
- [54] J. P. Hugonin and P. Lalanne. Perfectly matched layers as nonlinear coordinate transforms : a generalized formalization. *J. Opt. Soc. Am.*, A 22 :1844–1849, 2005.
- [55] B. Guizal, H. Yala, and D. Felbacq. Reformulation of the eigenvalue problem in the fourier modal method with spatial adaptive resolution. *Optics Letters*, 34 :2790–2792, 2009.
- [56] H. Yala, B. Guizal, and D. Felbacq. Fourier modal method with spatial adaptive resolution for structures comprising homogeneous layers. *J. Opt. Soc. Am.*, 26 :2567–2570, 2009.
- [57] L. Li. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, A 13 :1024–1035, 1996.
- [58] E. Popov and M. Nevière. Grating theory : new equations in fourier space leading to fast converging results for tm polarisation. *J. Opt. Soc. Am.*, 17 :1773–1784, 2000.
- [59] E. Popov and M. Nevière. Maxwell equations in fourier space : fast-converging formulation for diffraction by arbitrary shaped, periodic, anisotropic media. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 18 :2886–2894, 2001.
- [60] P. Lalanne. Effective properties and band structure of lamellar sub-wavelength crystal : plane – wave method revisited. *Phys. Rev. B*, 58(15) :9801 – 9807, 1998.
- [61] P. Lalanne and M. P. Jurek. Computation of the near-field pattern with the coupled-wave method for transverse magnetic polarization. *J. of Modern Opt.*, 45 :1357–1374, 1998.
- [62] N. Chateau and J. P. Hugonin. Algorithm for the rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11 :1321–1331., 1994.

- [63] N. P. K. Cotter, T. W. Preist, and J. R. Sambles. Scattering matrix approach to multilayer diffraction. *J. Opt. Soc. Am. A* 12, 12 :1097–1103., 1995.
- [64] L. Li. Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary profile, depth, and permittivity. *J. Opt. Soc. Am. A*, 10 :2581–2591, 1993.
- [65] L. Li and C. W. Haggans. Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 10 :1184–1189, 1993.
- [66] M. G. Moharam, D. A. Pommet, and B. B. Grann and T. K. Gaylord. Stable implementation of the rigorous coupledwave analysis for surface-relief gratings : enhanced transmission matrix approach,. *J. Opt. Soc. Am. A*, 12 :1077–1086, 1995.
- [67] R. Redheffer. *Difference equations and functional equations in transmission-line theory.* in Modern Mathematics for the Engineer, E. F. Beckenbach, ed. McGraw-Hill, New York, Chap. 12, pp. 282–337, 1961.
- [68] A. Babyliss and B. Turkel. Radiation boundary conditions for wave—like equation. *Comm. Pure Appl. Math.*, 33 :707—725, 1980.
- [69] B. Engquist and A. Majda. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. *Math. Comp.*, 31 :629—651, 1977.
- [70] Z. P. Liao, H. L. Wong, B. P. Yang, and Y. F. Yuan. A transmitting boundary for transient wave analysis. *Scientia Sinica*, (series A) :pp. 1063 – 1076, 1984.
- [71] G. Mur. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations. *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility*, vol. EMC-23, :377–382., 1981.
- [72] J. P. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Physics*, 114 :185–200, 1994.
- [73] D. S. Katz, E. T. Thiele, and A. Taflove. Validation and extension to three dimensions of the berenger pml absorbing boundary condition for fd-td meshes. *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, 4 :268–270, 1994.
- [74] Z. S. Sacks, D.M. Kingsland, R. Lee, and J. F. Lee. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 43 :1460–1463, 1995.
- [75] W. C. Chew, J. M. Jin, and E. Michielssen. Complex coordinate stretching as a generalized absorbing boundary condition. *Microwave Opt. Tech. Lett.*, 15 :363–369, 1997.
- [76] W. C. Chew and W. Weedon. A 3d perfectly matched medium from modified maxwell’s equations with stretched coordinates. *Microwa“e Opt. Technol. Lett.*, 7 :599–604, 1994.
- [77] F. L. Teixeira and W. C. Chew. A general approach to extend berenger’s absorbing boundary condition to anisotropic and dispersive media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 46 :1386–1387, 1998.

-
- [78] B. Popov, B. Chernov, M. Nevère, and N. Bonod. Differential theory : application to highly conducting gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21 :199–206, 2004.
- [79] A. Khavasi, K. Mehrany, and A. H. Jazayeri. Study of the numerical artifacts in differential analysis of highly conducting gratings. *OPTICS LETTERS*, 33 :159–161, 2008.
- [80] A. Khavasi and K. Mehrany. Artifacts-free analysis of highly conducting binary gratings by using the legendre polynomial expansion method. *J. Opt. Soc. Am. A*, 26 :1467–1471, 2009.
- [81] N. M. Lyndin, O. Parriaux, and A. V. Tishchenko. Modal analysis and suppression of the fourier modal method instabilities in highly conductive gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 24 :3781–3788, 2007.
- [82] K. Watanabe. Study of the differential theory of lamellar gratings made of highly conducting materials. *J. Opt. Soc. Am. A*, 23 :69–72, 2006.
- [83] G. Granet. Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolutions. *J. Opt. Soc. Am. A*, 16 :2510–2516, 1999.
- [84] G. Granet, J. Chandezon, J. P. Plumey, and K. Raniriharinosy. Reformulation of the coordinate transformation method through the concept of adaptive spatial resolution. application to trapezoidal gratings. *J. Opt. Soc. Amer. A*, 18 :PP. 2102–2108, 2001.
- [85] T. Vallius and M. Honkanen. Reformulation of the fourier modal method with adaptive spatial resolution : Application to multilevel pro-files. *Opt. Exp.*, 2002 :PP. 24–34, 10.
- [86] A. Khavasi and K. Mehrany. Adaptive spatial resolution in fast, efficient, and stable analysis of metallic lamellar gratings at microwave frequencies. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 57 :PP. 1115–1121, 2009.