



Université de Franche-Comté

École Doctorale SPIM

Thèse de Doctorat

En cotutelle avec
L'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou

Spécialité Sciences pour l'Ingénieur

présentée par

Belkhir Abderrahmane

Extension de la modélisation par FDTD
en nano-optique

Thèse dirigée par Fadi BAIDA et Omar LAMROUS

soutenue le 26 novembre 2008

Jury :

Président : Hervé MAILLOTTE, Directeur de recherches CNRS, UFC, Besançon
Rapporteurs : Taha BENYATTOU, Directeur de recherches CNRS, INSA de Lyon
Hamid KELLOU, Professeur, USTHB, Alger
Examineurs : Mouloud BENAKKI, Professeur, UMMTO, Tizi-Ouzou
Brahim GUIZAL, Professeur, Université de Montpellier 2

Remerciements

Cette thèse est réalisée dans le cadre d'une coopération entre l'Université de Franche-Comté, Besançon (France) et l'Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou (Algérie). Elle a été rendue possible grâce à une collaboration scientifique entre le Département d'Optique P. M. Duffieux (DOPMD) (Professeur Fadi BAIDA), UFC Besançon, et le Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ), UMMTO Tizi-Ouzou (Professeur Omar LAMROUS).

Cette thèse a été partiellement co-financée par l'Etat français et l'Etat algérien (18 mois) dans le cadre du programme Boursier Franco-Algérien. Toute ma reconnaissance aux efforts consentis par les Ministères de la recherche scientifique des deux parties.

Mes remerciements vont à tout le personnel du Département d'Optique P. M. Duffieux pour l'accueil chaleureux que tous les membres m'ont réservé. La souplesse des agents de l'administration ainsi que leur disponibilité permanente m'ont profondément touché.

Je tiens à exprimer ma grande reconnaissance à Monsieur Fadi BAIDA pour la confiance qu'il m'a accordée en m'accueillant dans son équipe de recherche. Sa grande compétence, sa disponibilité et ses conseils précieux m'ont guidé, tout au long de cette thèse, et aidé à m'épanouir dans la sphère de la recherche. Qu'il veuille bien accepter mes très chaleureux remerciements. Mes remerciements vont également à Monsieur Omar Lamrous pour son aide très précieuse; son soutien et l'intérêt qu'il a toujours porté à mon travail m'ont permis de mener à bon escient cette thèse.

Toute ma reconnaissance s'adresse aussi à M. Hervé Maillotte, Directeur de Recherche CNRS et Directeur du Département d'Optique P. M. Duffieux (Besançon) pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de ma thèse.

Je tiens à remercier chaleureusement les rapporteurs Monsieur Taha Benyattou, Directeur de recherches CNRS, INSA de Lyon et Hamid Kellou, Professeur, USTHB Alger de m'avoir fait l'honneur de juger ce travail de thèse. Je remercie également Brahim Guizal, Professeur, Université de Montpellier 2 et Mouloud Benakki, Professeur, Université UMMTO Tizi-Ouzou pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je tiens aussi à remercier Monsieur T. Gharbi pour sa sympathie et son grand soutien pendant mon séjour à Besançon.

Mes hautes considérations également à Messieurs Mhand Amarouche, Directeur du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (UMMTO) et Daniel Van Labeke, ex-Directeur du Département d'Optique P. M. Duffieux (Besançon).

Je ne saurais oublier de remercier tous mes ami(e)s avec qui ces années de thèse ont été rendues très agréables et restées gravées dans le livre des souvenirs.

Enfin, j'ai une pensée toute particulière pour ma famille dont le soutien ne m'a jamais fait défaut durant toutes ces années d'études.

Résumé

Cette thèse constitue un ensemble de travaux et de réflexions sur la question de la modélisation des applications électromagnétiques en nano-optique en utilisant la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD).

Dans un premier temps, des codes FDTD bidimensionnels pour le calcul de bandes interdites photoniques ont été mis en oeuvre. Ces algorithmes tiennent compte de la dispersion des métaux nobles dans la gamme optique décrite par le modèle de Drude ou de Drude-Lorentz. Ces programmes FDTD permettent de tenir compte de la propagation soit dans le plan perpendiculaire au plan d'invariance (appelé "cas dans le plan" ou "in-plane" en anglais) pour les deux polarisations TE et TM ainsi que le cas d'une propagation quelconque hors du plan (ou off-plane). Plusieurs diagrammes de bandes sont calculés et présentés pour les structures carrées et triangulaires dans les cas diélectriques et métalliques.

Ensuite, nous avons implémenté un code BOR-FDTD, basé sur la discrétisation des équations de Maxwell exprimées en coordonnées cylindriques, pour la modélisation des guides d'ondes (ou d'autres objets) à symétrie de révolution. Les conditions absorbantes PML pour décrire l'espace libre sont intégrées à la BOR-FDTD ainsi que les deux modèles de Drude et de Drude-Lorentz. Des simulations ont été effectuées pour le calcul de modes propres de guides d'ondes coaxiaux et cylindriques sub-longueurs d'ondes faits en métal parfait et en métal réel (argent par exemple). Les résultats montrent la possibilité de guider des signaux optiques sans beaucoup de pertes dans un guide coaxial fait en argent de dimensions sublongueur d'onde. Ce dernier résultat est original et constitue une très importante avancée dans le domaine de la "nanoconnectique" en optique, plus particulièrement pour l'optique intégrée.

Puis, un autre code numérique FDTD-3D a été élaboré pour la modélisation des structures périodiques (type cristaux photoniques tridimensionnels) éclairées en incidence oblique. Ce code intègre aussi les couches absorbantes PML ainsi que les modèles de dispersion de Drude et de Drude-Lorentz. Les résultats obtenus sont comparés à ceux issus d'autres modèles théoriques. Les applications de ce code à l'étude de radôme, à l'excitation du mode TEM de la structure métallique à ouvertures annulaires et aux calculs des spectres d'extinction Raman montrent l'efficacité de la FDTD pour la modélisation de telles structures.

Mots clés : BIP, FDTD (Finite Difference Time Domain), équations de Maxwell, cristaux photoniques, dispersion, incidence oblique.

Abstract

This thesis concerns works on electromagnetics modelisations in nano-optics application using finite difference time domain method (FDTD).

Firstly, bidimensional FDTD codes for photonic bande gaps calculation have been implemented. This approach takes into account the optical dispersion of noble metals described in Drude and Drude-Lorentz models. This FDTD programs deal with the off-plane and in-plane for two polarisations TE and TM. Several band structures have been calculated and presented for square and triangular lattices in case of metallic and dielectric materials.

Next, we have implemented a BOR-FDTD code, based on a discretisation of Maxwell equations expressed in cylindrical coordinates, in order to simulate elements with revolution symmetry. In addition to the Drude and Drude-Lorentz models adapted for this code, the perfectly matched layer (PML) are introduced in order to describe the free space. Calculations of eigenmodes in sub-wavelength coaxial and cylindrical waveguides have been made for perfect and real metals (silver for example). It is shown that Silver coaxial waveguide has propagative modes with weak losses. This interesting property is wellcomed in optical nano-connectics and particularly in integrated optics applications.

Finally, another FDTD-3D numerical code has been performed for simulating periodic lattice structures in oblique incidence. This code includes the PML absorption conditions and also takes into account metal dispersion. Our results agree very well with other theoretical results published in the literature. This study allows numerous applications for simulating Raman extinction spectra, radar dome and excitation of the TEM mode of the Annular Aperture Array (AAA).

Key Words : BIP, FDTD (Finite Difference Time Domain), Maxwell equations, photonic crystals, dispersion, oblique incidence.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	ii
Abstract	iii
Table des matières	v
Table des figures	ix
Introduction	1
1 Calcul de bandes photoniques par la méthode FDTD	7
1.1 Introduction	7
1.2 Généralités sur les cristaux photoniques	8
1.2.1 Description des matériaux périodiques	8
1.2.2 Exemples de structures	9
1.2.3 Notion du réseau réciproque	11
1.3 Propriétés optiques des métaux	13
1.3.1 Modèle de Drude	14
1.3.2 Modèle de Drude-Lorentz	15
1.4 Méthodes numériques d'analyse des cristaux photoniques	17
1.4.1 Méthode des ondes planes	17
1.5 Méthodes des différences finies dans le domaine temporel	19
1.5.1 Introduction	19
1.5.2 Equations de Maxwell	19
1.5.3 Equations de Maxwell aux différences centrées	24
1.5.4 Schéma de Yee	26
1.5.5 Intégration des modèles de Drude et de Drude-Lorentz en FDTD	28
1.6 Application au calcul de bandes photoniques (2D)	31
1.6.1 Cristaux photoniques diélectriques :	31
1.6.2 Cristaux photoniques métalliques	37
1.7 Conclusion	44

2	Modélisation des guides d'ondes à symétrie de révolution par la BOR-FDTD	49
2.1	Introduction	49
2.2	Equations de Maxwell en coordonnées cylindriques	50
2.2.1	Développement en séries de Fourier des champs	51
2.3	Equations aux différences centrées	54
2.3.1	Equations aux différences centrées sur l'axe de symétrie	55
2.3.2	Séparation des modes : Modes radial et orthoradial	56
2.3.3	Cas hors plan	57
2.4	Conditions d'absorption aux frontières	59
2.5	Couche parfaitement absorbante	59
2.6	Milieux dispersifs	62
2.6.1	Intégration du modèle de Drude	63
2.6.2	Intégration du modèle de Drude-Lorentz	64
2.7	Applications aux guides d'ondes sub-longueurs d'ondes à symétrie de révolution	65
2.7.1	Guides d'ondes en métal parfait : Tests de validation	65
2.7.2	Guides d'ondes sub-longueurs d'ondes en métal réel :	70
2.7.3	Etude d'un guide d'onde coaxial sub-longueurs d'ondes	73
2.8	Conclusion	79
3	Modélisation des structures diélectriques et métalliques 3D bi-périodiques en incidence oblique	83
3.1	Introduction	83
3.2	Formulation de la FDTD en incidence oblique pour les structures périodiques	84
3.2.1	Equations de Maxwell et structures périodiques	85
3.2.2	Equations de Maxwell dans le nouveau domaine (P et Q)	87
3.2.3	Equations de Maxwell discrétisées dans le nouveau domaine (P et Q)	88
3.3	Adaptation des modèles de Drude et de Drude-Lorentz à la FDTD en incidence oblique	90
3.3.1	Modèle de Drude :	91
3.3.2	Modèle de Drude-Lorentz :	94
3.4	Adaptation de la PML en incidence oblique	97
3.5	Tests de validation du code FDTD en incidence oblique	103
3.5.1	Structures non dispersives	103
3.5.2	Structures dispersives : tests de validation	109
3.5.3	Limites du modèle mis en oeuvre	113
3.6	Etude de la structure AAA pour une application radôme	114
3.7	Excitation du mode <i>TEM</i> de la structure AAA en métal réel	116
3.8	Calcul des spectres d'extinctions Raman	121
3.9	Conclusion	126
	Conclusions et perspectives	131

Table des figures

1.1	Structure cristalline formée d'un réseau et d'un motif élémentaire	8
1.2	Qu'est ce qu'un cristal photonique.	9
1.3	Structures 2D : a) Structure carrée, b) triangulaire et c) hexagonale	10
1.4	Exemples de structures 3D publiées dans [9] : structure cubique (1), tas de bois (2), structure multicouches (3), opales ou opales inversées (4), Yablonovite (5).	11
1.5	Réseaux direct (a) et réciproque (b) d'un réseau oblique	12
1.6	Zones de Brillouin	12
1.7	Permittivité de l'or publiée en [15] et calculée par les modèles de Drude et de Drude-Lorentz	16
1.8	Cellule de Yee	26
1.9	Mise à jour de la composante H_y	27
1.10	Structure carrée et fenêtre de calcul FDTD	31
1.11	Intensité normalisée au point X d'une maille carrée de trous d'airs cylindriques dans le niobate.	32
1.12	Structure de bande d'une structure carrée ; trous d'air de rayon $r = 0.2686a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TM.	33
1.13	Structure de bande d'une structure carrée ; trous d'air de rayon $r = 0.2686a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TE.	33
1.14	Structure triangulaire et fenêtre de calcul FDTD	34
1.15	Structure de bande d'une structure triangulaire ; trous d'air de rayon $r=0.25a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TE.	35
1.16	Structure de bande d'une structure triangulaire ; trous d'air de rayon $r = 0.25a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TM.	35
1.17	Structure de bande d'une structure triangulaire ; trous d'air ($n_1 = 1$) de rayon $r = 0.47a$ dans un milieu diélectrique $n_2 = 3.3764$	36
1.18	Structure de bande d'une maille carré dans le cas hors plan ($k_z = 0.4(\pi/a)$). a) calculs PWE (trais pleins) et FDTD (cercles) [28] et b) nos calculs FDTD.	37
1.19	Structure de bande d'une maille carrée de cylindres métalliques dans l'air : Polarisation TM. a) Calculs de Sakoda [29], b) Nos calculs FDTD.	37
1.20	Structure de bande d'une maille carrée de cylindres en argent dans l'air : a) dans le plan : polarisation TE, b) et c) hors plan : k_z non nul.	38
1.21	Courbe de dispersion au point Γ d'une maille carrée de cylindres en argent dans l'air.	39
1.22	Structure à ouverture annulaire (AAA).	39

1.23	Intensité spectrale normalisée au point Γ en fonction de la longueur d'onde ; structure AAA en argent : a) période $a=300$ nm et b)période $a=160$ nm ; dans les deux cas $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$	40
1.24	Structures de bande de la structure AAA en argent, cas dans le plan et polarisation TE : a) période $a=300$ nm ; b)période $a=160$ nm ; dans les deux cas $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$	41
1.25	Intensité spectrale au point Γ en fonction de la longueur d'onde ; structure AAA en or : a) période $a = 300nm$ et b)période $a = 160nm$; dans les deux cas $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$	42
1.26	Structure de bande d'une structure annulaire (AAA) en or : période $a = 160nm$, $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$	42
1.27	Intensité spectrale normalisée en fonction de la longueur d'onde : a) dans le plan ($k_z = 0$) ; b) hors plan ($k_z = \pi/a$)	43
1.28	Structure de bande d'une structure annulaire en argent dans le cas hors plan : a) $k_z = \pi/(3a)$, b) $k_z = \pi/(a)$	43
1.29	Courbes de dispersion au point Γ d'une structure annulaire en argent, période $a = 160nm$, $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$	44
2.1	Cellule de Yee en coordonnées cylindrique	51
2.2	Distribution spatiale des champs dans le domaine de calcul BOR-FDTD	55
2.3	Principe d'adaptation d'impédance	60
2.4	Principe de fonctionnement d'une PML	60
2.5	Domaine de calcul BOR-FDTD entouré de PML	62
2.6	Structures guidantes à symétrie de révolution	65
2.7	Intensités normalisées d'un guide d'onde métallique cylindrique, modes fondamentaux TE_{11} et TM_{01}	67
2.8	Longueurs d'ondes de coupures des premiers modes d'un guide d'onde cylindrique en métal parfait en fonction du rayon R . a) Mode TE_{11} ; b) Mode TM_{01}	67
2.9	Parties réelles des l'indices effectifs des premiers modes d'un guide d'onde cylindrique en métal parfait de rayon $R = 100nm$. a) Mode TE_{11} ; b) Mode TM_{01}	68
2.10	Longueurs d'ondes de coupure du mode TE_{11} d'un guide d'onde coaxial en métal parfait en fonction du rayon extérieur du coax, le rayon intérieur est $R_i = 50nm$	69
2.11	Partie réelle de l'indice effectif du mode TE_{11} d'un guide coaxial en métal parfait de rayons intérieur $R_i = 50nm$ et extérieur $R_e = 100nm$	70
2.12	Parties réelles des indices effectifs des modes fondamentaux des guides d'ondes cylindrique et coaxial en argent et en métal parfait ; rayon du cylindre $R = 100nm$, rayon intérieur du coax $R_i = 50nm$ et rayon extérieur du coax $R_e = 100nm$	71
2.13	Longueurs d'ondes de coupures du mode fondamentale TE_{11} en fonctions des rayons des structures guidantes a) guide cylindrique et b) guide coaxial avec $R_i = 50nm$	72

2.14	Longueurs d'ondes de coupure du premier mode TE'_{11} d'un guide coaxial en fonction de rayon extérieur R_e . Le rayon intérieur $R_i = 75nm$	73
2.15	Courbes de dispersions du guide d'onde coaxial en argent pour quatre valeurs de R_e . Le rayon intérieur $R_i = 75nm$. Les modes présentés sont ceux pour lesquels $m = 1$	74
2.16	Intensités lumineuses (modules aux carrés des champs électriques) aux fréquences de coupures des deux premiers modes pour les valeurs de R_e suivantes : a) et a') $R_e = 250nm$; b) et b') $R_e = 150nm$; c) et c') $R_e = 125nm$; d) et d') $R_e = 80nm$	76
2.17	Vitesse de groupe du premier mode TE'_{11} d'un guide coaxial en argent de rayons $R_e = 125nm$ $R_i = 75nm$	77
2.18	Schéma de la structure étudiée pour la détermination de la partie imaginaire de l'indice effectif.	77
2.19	Partie imaginaire d'indice effectif du premier mode TE'_{11} de la structure AAA en argent, $R_i = 75nm$	78
3.1	Structure bi-périodique éclairée en incidence oblique, le vecteur d'onde incident est repéré par les angles d'Euler (θ et ϕ).	84
3.2	Orientation du vecteur d'onde incident	85
3.3	Structure périodique et maille élémentaire	86
3.4	Structure bi-périodique délimitée par des PML suivant la troisième direction	97
3.5	Interface plane séparant l'air et le verre (test 0D diélectrique)	103
3.6	Coefficients de transmission et de réflexion à l' interface plane air-verre. a) et c) polarisation TE ; b) et d) polarisation TM. Les résultats FDTD sont comparés à ceux théorique en a) et b). Les erreurs relatives sont présentées en c) et d).	104
3.7	Coefficients de réflexion d'ordre zéro d'un réseau lammelaire en métal parfait pour les deux polarisation TE et TM.	105
3.8	Reflectance d'un réseau périodique 1D diélectrique pour les deux polarisations TE et TM obtenue par les méthodes RCWA et FDTD.	105
3.9	Réflexivité spéculaire de la structure bi-périodique diélectrique définie en d) pour les deux polarisation TE et TM et pour différents angles d'incidence θ , l'angle azimutal $\phi = 0^\circ$	107
3.10	Réflexivité spéculaire calculée par FDTD de la structure définie par le schéma de la figure 3.9-d) en fonction de l'angle azimutal ϕ . a) Polarisation TE et b) polarisation TM. L'angle d'incidence $\theta = 30^\circ$	108
3.11	Coupe horizontale à la fréquence $f = 10Ghz$ des deux courbes de la figure 3.10. Nos résultats FDTD sont comparés à ceux publiés par Attiya et Kishk [13].	108
3.12	Tests de convergence dans le cas de la polarisation TM, $\theta = 30^\circ$. a) $\phi = 0^\circ$ et b) $\phi = 30^\circ$	109

3.13	Transmission à travers une couche plane d'argent ; épaisseur=20 nm, $\theta = 60^\circ$ et $\phi = 0^\circ$. b) et c) polarisation TE; d) et e) polarisation TM. Les résultats FDTD sont comparés à ceux théorique en b) et d). Les erreurs relatives sont présentées en c) et e).	110
3.14	Transmission à travers une couche plane d'or; épaisseur=20 nm, $\theta = 45^\circ$ and $\phi = 0^\circ$. b) et c) polarisation TE; d) et e) polarisation TM. Les résultats FDTD sont comparés à ceux théorique en b) et d). Les erreurs relatives sont présentées en c) et e).	111
3.15	Réseau lammellaire en métal réel	112
3.16	Transmission à travers un réseau lammellaire en argent et en or	112
3.17	Transmission à travers la structure AAA faite en métal réel (or et argent) et éclairée en incidence nulle.	113
3.18	Coefficients de transmission d'une interface plane verre-air pour les deux polarisations TE et TM.	114
3.19	Structure AAA , le film métallique est déposé sur un substrat diélectrique (verre) et éclairé dans le vide.	115
3.20	Réponse spectrale en transmission de la structure AAA présentée sur la figure 3.19, avec $R_i = 2.7mm$, $R_e = 3.6mm$, $p = 12.6mm$ et $h = 3.6mm$	116
3.21	Transmission à travers une structure coaxiale en argent montrant l'excitation du mode TEM par une lumière polarisée TM en incidence oblique; $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et $p = 300nm$. L'angle azimutal $\phi = 0^\circ$	118
3.22	Modules des composantes a) radiale, b) azimutale et c) axiale du champ électrique normalisées par rapport à la valeur maximale de la composante radiale. d) Coupe suivant la diagonale des images a),b) et c). Ces images correspondent aux paramètres de la figure 3.21, polarisation TM, $\theta = 45^\circ$ et à $\lambda = 900nm$ correspondant au pic additionnel.	119
3.23	Transmission à travers une structure coaxiale en métal parfait, argent et or, $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et $p = 300nm$. La lumière incidente est polarisée TM, l'angle d'incidence $\theta = 45^\circ$ et l'angle azimutal $\phi = 0^\circ$	120
3.24	Transmission à travers une structure coaxiale en argent pour différentes valeurs de la hauteur h , $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$ et $p = 300nm$. La lumière incidente est polarisée TM, l'angle d'incidence $\theta = 45$ et l'angle azimutal $\phi = 0$	120
3.25	Transmission à travers une structure coaxiale en argent pour différents angles d'incidence θ , $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et $p = 300nm$. La lumière incidente est polarisée TM, l'angle azimutal $\phi = 0$	121
3.26	Réseau de nano-bâtonnets d'or déposés sur une couche d'ITO, l'ensemble de la structure est déposé sur du verre.	122
3.27	Spectres d'extinction Raman des réseaux de nano-bâtonnets d'or définis dans le tableau 3.1, polarisation TE avec un angle azimutal $\phi = 0^\circ$, ce qui correspond à la polarisation suivant la petite période p_l (champ électrique suivant la petite période).	123

3.28 Spectres d'extinction Raman en incidence oblique de l'échantillon 4, en polarisation TE avec un angle azimutal $\phi = 0^0$, ce qui correspond à la polarisation suivant la petite période p_l (champ électrique suivant la petite période).	124
3.29 Spectres d'extinction Raman de l'échantillon 4 pour différentes valeurs de θ , les nano-particules sont définies comme des ellipsoïdes, polarisation TE avec un angle azimutal $\phi = 0^0$, ce qui correspond à la polarisation suivant la petite période p_l	125
3.30 Spectres d'extinction Raman en fonction de θ de l'échantillon 4, polarisation TM avec un angle azimutal $\phi = 90^0$	126

Introduction

La miniaturisation des composants optiques est actuellement un réel défi qui intéresse plusieurs domaines d'application, nous pouvons citer pour exemple, les structures de bandes interdites photoniques [1][2], la transmission exaltée [3] [4][5], les surfaces sélectives en fréquence [6][7] et la plasmonique [8] [9][10].

Les structures périodiques offrent des possibilités pour la maîtrise des champs électromagnétiques particulièrement dans le domaine du spectre visible à des échelles de la longueur d'onde ou même sub-longueur d'onde. Dans le cas où la maille élémentaire de la structure périodique admet une extension spatiale inférieure à la longueur d'onde du rayonnement pour lequel elle est destinée, cette dernière sera appelée cristal photonique. Dans ces conditions, la compréhension de la propagation de l'onde électromagnétique dans ces matériaux est de première importance. Il est souvent indispensable de connaître simultanément les amplitudes et les fréquences des ondes électromagnétiques présentes à un instant donné et le diagramme de bandes du nanomatériau considéré. Ces paramètres peuvent être accessibles théoriquement à partir de la résolution des équations de Maxwell. La maîtrise de la théorie et des techniques de calcul relatives aux cristaux photoniques à une, deux ou trois dimensions, qu'ils soient métalliques ou diélectriques et de diverses configurations est donc un atout pour la modélisation et la simulation des phénomènes physiques dans les composants basés sur ces structures tels que les cristaux photoniques commandables [11], les guides d'ondes [12][13], et les structures métalliques à ouvertures sublongueurs d'ondes [14][15] pour des applications FSS (Frequency Selective Surfaces) et de transmission exaltée. Un autre domaine d'application lié aux structures périodiques est celui de la plasmonique qui utilise les propriétés de confinement des plasmons de surface permettant le contrôle de la lumière (propagation, guidage, modulation, ...) dans un plan au lieu de travailler avec des éléments optiques massifs (3D) telles que les lentilles. Cette nouvelle optique "surfactive" est parfaitement adaptée à l'optique intégrée et occupe une grande place dans le domaine de la nano-optique.

Notre travail se place dans le cadre de ces applications technologiques et a pour objectif, la réalisation de modèles numériques simulant ces systèmes nano-optiques dans un environnement proche de l'expérimentation. Pour ce faire, nous avons choisi la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD)[16] basée sur le schéma de Yee [17], en raison de l'expérience acquise par notre groupe de recherche dans son développement, mais surtout du fait que cette méthode offre une capacité importante à résoudre des

problèmes liés à des configurations plus ou moins complexes. C'est une méthode temporelle et donc offre la possibilité d'études larges bandes avec la prise en compte des sources électromagnétiques, des conditions aux limites de diverses natures telles que les conditions absorbantes pour la simulation de l'espace libre et de périodicité de Floquet-Bloch . Très largement utilisée dans le domaine de la compatibilité électromagnétique, la FDTD gagne de plus en plus d'utilisateurs pour des applications de plus en plus variées et en particulier en optique intégrée [18][19]. Cette approche numérique que nous utiliserons au cours de nos études, permet de modéliser de façon précise les objets métalliques et diélectriques.

Le chapitre 1 est consacré à un rappel des différents types de cristaux photoniques et des éléments théoriques nécessaires à leur modélisation. Nous introduisons les techniques d'implémentation de la méthode FDTD utilisée pour le calcul des diagrammes de bandes tout en séparant les cas métallique et diélectrique. Les métaux réels étudiés sont traités par les modèles analytiques de Drude ou de Drude-Lorentz. Les configurations dites hors plan (off-plane) et dans le plan (in-plane) pour les deux polarisations TE et TM sont considérées.

Le chapitre 2 présente la formulation de la méthode BOR-FDTD appliquée aux guides d'ondes métalliques présentant une symétrie de révolution et à l'étude des sondes optiques utilisées en microscopie champ proche. La discrétisation des équations de Maxwell exprimées en coordonnées cylindriques est donnée. Deux cas sont étudiés : pour les grandes longueurs d'ondes (micro onde et plus), le métal peut être considéré comme parfait, et donc les caractéristiques de ces guides d'ondes sont exprimées analytiquement. Pour le cas des applications en optique, la réaction des électrons aux fréquences optiques (la dispersion) est prise en considération pour la recherche des modes pouvant être guidés. A l'échelle sub-longueurs d'onde, le confinement de la lumière des modes propres, dans les guides, n'est pas évident, ce qui conduit à une très forte atténuation du rayonnement. Le modèle mis en oeuvre, nous a permis de chercher des modes particuliers de ces guides métalliques sub-longueurs d'ondes qui pourraient être excités et présenter des caractéristiques qui les affranchiraient de cette atténuation.

Le chapitre 3 est dédié à l'étude des structures diélectriques et métalliques bi-périodiques et finies suivant la troisième direction et éclairées en incidence oblique. Pour ce faire, un code FDTD 3D en incidence oblique est élaborée. Cet algorithme tient compte de la dispersion des métaux nobles dans la gamme optique décrite par les deux modèles de Drude et de Drude-Lorentz. Les PML de Berenger [20] sont adaptées en incidence obliques pour la simulation de l'espace libre. Ce code FDTD en oblique est l'extension du code FDTD en incidence normale existant au laboratoire d'optique P. M. Duffieux. Les étapes de calculs sont présentées dans les détails et les résultats des simulations confrontés à ceux de la littérature ont permis de valider le code mis en oeuvre. Trois applications sont menées dans des domaines divers. Elles ont porté sur l'étude de la structure métallique à ouvertures annulaires sub-longueurs d'ondes (structure AAA pour Annular Aperture Arrays) pour une application radôme, l'excitation du mode TEM de la structure AAA et aux calculs des spectres d'extinctions Raman.

Nous terminerons ce travail, par une conclusion générale et des perspectives.

Bibliographie

- [1] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2059, 1987.
 - [2] J. Sajeev, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2486, 1987.
 - [3] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff, *Nature (London)* 391, 667, 1998.
 - [4] F. I. Baida and D. Van Labeke, *Opt. Commun.* 209, 17,2002.
 - [5] F. I. Baida and D. Van Labeke, *Phys. Rev. B* 67, 155314, 2003.
 - [6] T. K. Wu, *Frequency Selective Surface and Grid Array* (Wiley, New York, 1995).
 - [7] D. Van Labeke, D. Grard, B. Guizal, F. I. Baida, and L. Li, *Opt. Express* 14, 11945, 2006.
 - [8] B. Lamprecht, J. R. Krenn, G. Schider, H. Ditlbacher, M. Salerno, N. Félidj, A. Leitner, and F. R. Aussenegg, *Appl. Phys. Lett.* 79, 51, 2001.
 - [9] H. Rigneault, J. Capoulade, J. Dinitnger, J. Wenger, N. Bonod, E. Popov, T. W. Ebbesen, and P. F. Lenne, *Phys. Rev. Lett.* 95, 117401, 2005.
 - [10] W. Ding, S. R. Andrews, and S. A. Maier, *Phys. Rev. A*, 75,063822, 2007.
 - [11] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, and F. I. Baida, *Appl. Phys. Lett.* 87, 241101,2005.
 - [12] S.Y. Lin, E. Chow, V.M. Hietala, P.R. Villeneuve, J.D. Joannopoulos, *Science*, 282, 274, 1998.
 - [13] H. Benisty, C. Weisbuch, D. Labilloy, M. Rattier, C.J.M. Smith, T.F. Krauss, R.M. De la Rue, R. Houdre, U. Oesterle, C. Jouanin, and D. Cassagne, *J. Lightwave Technol.* 17, 2063, 1999.
 - [14] F. I. Baida, Y. Poujet, B. Guizal, and D. Van Labeke, *Opt. Commun.* 256, 190,2005.
 - [15] Michael I. Haftel, Carl Schlockermann, and Girsh Blumberg, *Appl. Phys. Lett.* 88, 193104,2006.
 - [16] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics, the Finite-Difference Time-Domain Method*, 2nd ed. (Artech House, Norwood, MA, 2005).
 - [17] K. S. Yee, *IEEE Trans. Antennas Propag.* 14, 302-307, 1966.
 - [18] T. Benyattou, M. Martin, R. Orobtcouk, A. Talneau, A. Berrier, M. Mulot and S. Anand, *J. of the Korean. Phy. Soc.* 47, 72, 2005.
-

- [19] H. T. Hattori, C. Seassal, X. Letartre, P. Rojo-Romeo, J. L. Leclercq, P. Viktorovitch, M. Zussy, L. d. Cioccio, L. El Melhaoui and J-M. Fedeli, *Opt. Exp.* 13, 3311, 2005.
- [20] J. P. Berenger, *J. Comput. Phys.* 114, 185, 1994.
-

Chapitre 1

Calcul de bandes photoniques par la méthode FDTD

1.1 Introduction

Les matériaux à Bandes Interdites Photoniques (BIP) sont composés d'un assemblage périodique de deux ou plusieurs matériaux diélectriques ou métalliques. Ce nouveau type de structures, généralement artificiel a été proposé [1] et réalisé [2][3] pour la première fois par E. Yablonovitch à la fin des années quatre-vingt. En réalité, le tout premier matériau BIP où cristal photonique a été réalisé sans le savoir par le physicien anglais William Laurence Bragg en 1915. Ce dernier a réussi par l'empilement périodique de couches transparentes à indices de réfraction différents à réfléchir 99.5 % de l'énergie incidente, ce qui reste impossible avec un miroir classique. Ce phénomène s'explique par de multiples réflexions à l'intérieur même de chaque interface qui sont constructives pour une épaisseur particulière des différentes couches.

Par analogie avec la bande d'énergie interdite électronique caractérisant les réseaux cristallins atomiques, les structures photoniques possèdent une bande de fréquences interdites dans laquelle aucune onde électromagnétique ne peut se propager. Cette propriété intéressante offre aux cristaux photoniques la possibilité du contrôle de la propagation de la lumière et permet ainsi d'envisager de nombreuses applications dans le domaine des nano-technologies [4] [5] [6].

Dans ce chapitre, nous passerons en revue les différents types de cristaux photoniques et les outils de simulations permettant leur modélisation. Nous rappellerons leurs propriétés générales qu'ils soient diélectriques où métalliques et dans des configurations diverses. Nous présenterons la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) que nous avons implémentée et utilisée pour le calcul des diagrammes de bandes. Les métaux réels étudiés seront traités dans le cadre des modèles de Drude ou de Drude-Lorentz. Des

calculs de structures de bandes des cristaux périodiques bidimensionnels seront présentés. Enfin, nous détaillerons les cas dits hors plan (off-plane) et dans le plan (in-plane).

1.2 Généralités sur les cristaux photoniques

1.2.1 Description des matériaux périodiques

Avant de classer les différents types de cristaux photoniques, nous avons jugé utile de rappeler quelques notions de physique du solide qui seront utilisées dans ce travail. En effet, le cristal photonique est un milieu dont l'indice diélectrique varie périodiquement suivant une, deux ou trois dimensions. Ce milieu est analogue au milieu cristallin dans lequel il y a arrangement régulier et symétrique des atomes. Une organisation cristalline est constituée par un réseau auquel s'associe une base appelée motif.

- Réseau périodique

Un réseau périodique tridimensionnel est représenté par trois vecteurs fondamentaux de translation \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} qui définissent des noeuds. Si \vec{r} est le vecteur position d'un noeud de ce réseau, l'ensemble des autres noeuds est repéré par le vecteur \vec{r}' tel que :

$$\vec{r}' = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

u , v et w étant des entiers. L'ensemble des points \vec{r}' obtenu pour tous les entiers u, v et w définit le réseau direct.

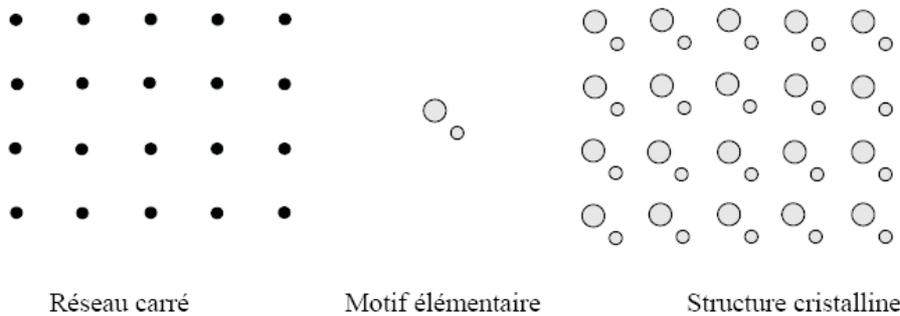


FIG. 1.1 – Structure cristalline formée d'un réseau et d'un motif élémentaire

-Motif

Un motif élémentaire se positionne sur chaque noeud du réseau pour constituer le cristal. Ce motif peut présenter des formes ou des volumes plus ou moins complexes (voir figure 1.1). L'association motif-réseau est caractéristique de l'état cristallin.

1.2.2 Exemples de structures

Les structures BIP sont constituées d'éléments diélectriques ou métalliques disposés périodiquement suivant une, deux ou trois directions (voir figure 1.2).

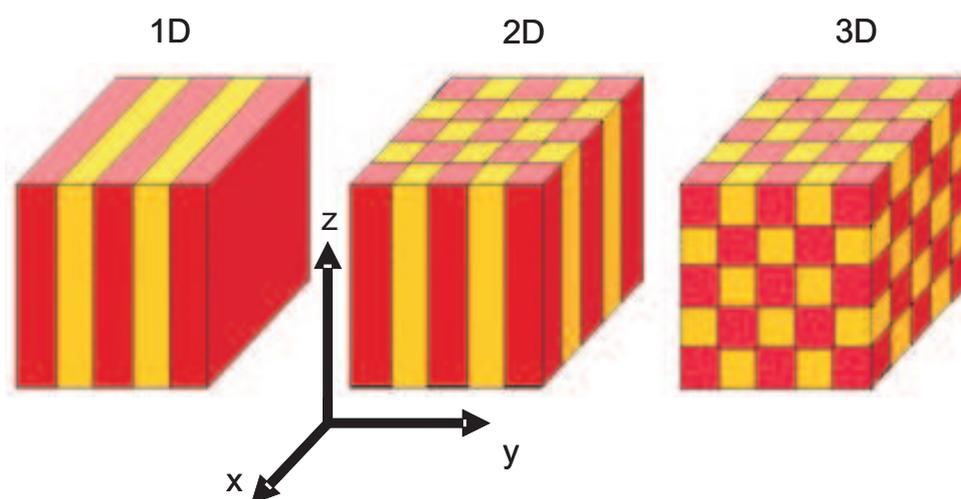


FIG. 1.2 – Qu'est ce qu'un cristal photonique.

-Structures périodiques unidimensionnelles (1D)

Les structures 1D sont les plus anciennes, elles ont été déjà longtemps étudiées et utilisées comme miroirs diélectriques ou filtres optiques. Elles consistent en une alternance de plans diélectriques d'épaisseur $\lambda/4$ où λ représente la longueur d'onde du rayonnement guidé (figure 1.2(1D)). Les bandes interdites de cette structure, appelée également miroir de Bragg, sont sensibles à l'angle d'incidence de l'onde. Ainsi pour obtenir un contrôle des bandes interdites quel que soit l'angle d'incidence, il faut étendre la périodicité de la structure à 2 voir 3 dimensions.

-Structures périodiques bidimensionnelles (2D)

Les structures 2D [7] [8] sont des cristaux dont la permittivité diélectrique est périodique dans les deux dimensions et reste invariante dans la troisième dimension (figure 1.2(2D)). Elles se regroupent principalement suivant trois familles qui sont les réseaux carré, triangulaire et hexagonal (voir figure 1.3).

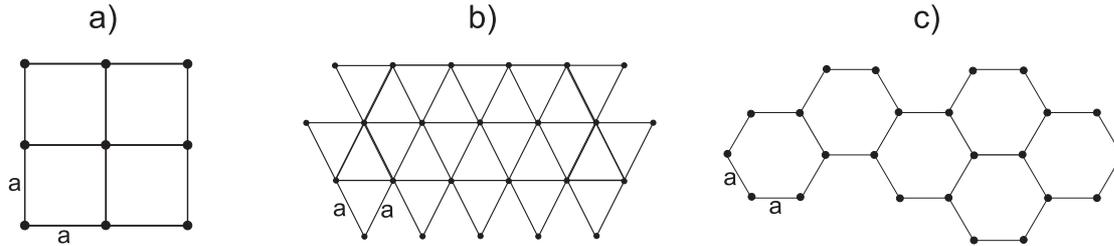


FIG. 1.3 – Structures 2D : a) Structure carrée, b) triangulaire et c) hexagonale

Ces structures bi-périodiques sont généralement composées de cylindres diélectriques. Elles présentent une géométrie simple qui facilite leurs études théoriques et expérimentales.

Dans ces structures 2D, il existe deux types de propagation : dans le plan (in-plane, $k_z = 0$) et hors plan (off-plane k_z non nul), z et k_z sont respectivement l'axe parallèle aux cylindres et la constante de propagation suivant cet axe. En propagation in-plane, on distingue deux modes de polarisations pour les ondes électromagnétiques, la polarisation électrique TE (le champ magnétique \vec{H} est parallèle à l'axe z) et la polarisation magnétique TM (le champ électrique \vec{E} est parallèle à l'axe z). Le comportement fréquentiel n'est pas forcément identique selon la polarisation. En effet, l'apparition de bandes interdites ainsi que leurs largeur et position dépendent du taux de remplissage de la structure, du motif élémentaire et du contraste d'indice.

-Structures périodiques tridimensionnelles (3D)

Les structures périodiques tridimensionnelles sont périodiques suivant les trois directions de l'espace. Il existe un grand nombre de structures possibles. Auguste Bravais a établi un classement de différentes familles de cristaux. Il a montré que les cristaux peuvent se répartir en sept types de mailles (7 systèmes cristallins) et 14 types de réseaux (réseaux de Bravais).

La figure 1.4 montre quelques exemples de cristaux photoniques artificielle 3D.

En réalité, peu de structures 3D possèdent une bande interdite complète [9]. Ho et al.[10] ont été les premiers à montrer théoriquement la présence d'une bande interdite

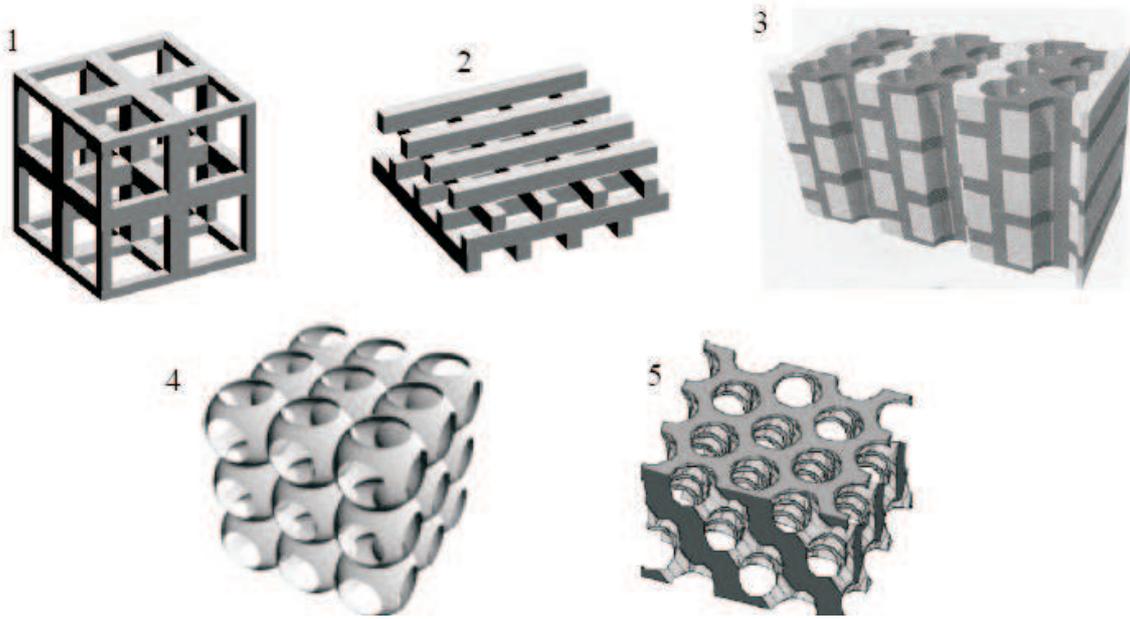


FIG. 1.4 – Exemples de structures 3D publiées dans [9] : structure cubique (1), tas de bois (2), structure multicouches (3), opales ou opales inversées (4), Yablonovite (5).

complète dans une structure à symétrie Cubique à Face Centrée (CFC) ou communément appelée structure diamant. L'inconvénient des structures 3D réside dans le fait qu'elles soient difficiles à réaliser expérimentalement.

1.2.3 Notion du réseau réciproque

Rappelons qu'à toute structure cristalline est associée deux réseaux : le réseau direct et le réseau réciproque. Les axes dans le réseau réciproque sont les normales aux plans principaux du réseau cristallin. Si les vecteurs de base du réseau direct sont \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} , les vecteurs de base du réseau réciproque correspondant \vec{A} , \vec{B} et \vec{C} sont définis tels que [11] :

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{\vec{a}(\vec{b} \wedge \vec{c})}, \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{\vec{a}(\vec{b} \wedge \vec{c})} \quad \text{et} \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{\vec{a}(\vec{b} \wedge \vec{c})}$$

A titre d'exemple, la figure 1.5 illustre les vecteurs de base du réseau réciproque dans le cas d'un réseau de bravais oblique à deux dimensions.

Zone de Brillouin

La notion de la zone de Brillouin est nécessaire pour décrire le comportement optique d'un cristal dans lequel la symétrie de translation joue un rôle essentiel.

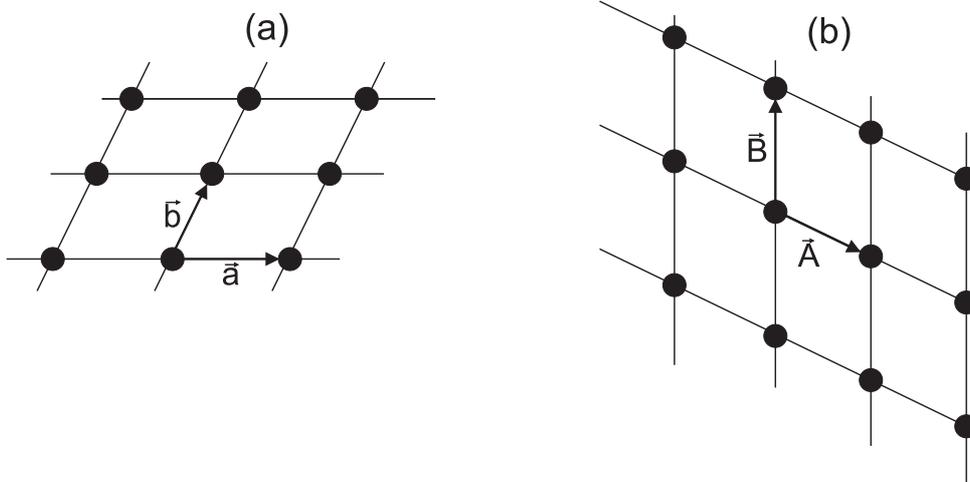


FIG. 1.5 – Réseaux direct (a) et réciproque (b) d'un réseau oblique

Comme nous l'avons vu précédemment, \vec{A} , \vec{B} et \vec{C} définissent une maille élémentaire du réseau réciproque. En physique du solide, il est plus pratique d'utiliser une autre maille élémentaire appelée maille de Wigner-Seitz, celle-ci est définie comme le volume délimité par les plans médiateurs des plus petits vecteurs du réseau. Dans l'espace réciproque, la maille de Weigner-Seitz est appelée première zone de Brillouin, dans laquelle l'état électromagnétique sera défini.

La figure (1.6) montre les premières zones de Brillouin des deux réseaux 2D carré et triangulaire considérés dans ce travail.

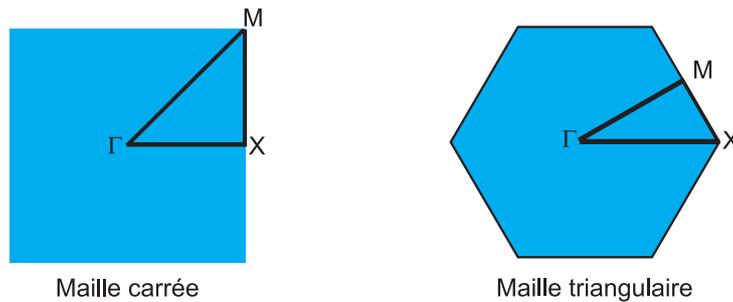


FIG. 1.6 – Zones de Brillouin

Des considérations de symétrie permettent de restreindre le domaine de l'espace réciproque à la zone de Brillouin réduite qui correspond à la région délimitée par les points de haute symétrie Γ , X et M .

Ces points de haute symétrie sont définis comme suit :

- Maille Carrée : $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\frac{\pi}{a}, 0)$ et $M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$.

- Maille triangulaire : $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$ et $M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{\sqrt{3}a})$.

1.3 Propriétés optiques des métaux

Les métaux, du fait qu'ils soient très réfléchissants, occupent une place très importante dans les cristaux périodiques photoniques [12] [13] [14]. En première approximation, un métal peut être considéré comme un milieu isotrope ayant une constante diélectrique ϵ , une perméabilité magnétique μ et une conductivité σ . Les équations de Maxwell s'écrivent :

$$\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = 0 \quad (1.1a)$$

$$-\epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{J} \quad (1.1b)$$

\vec{E} et \vec{H} sont les vecteurs champs électrique et magnétique respectivement et \vec{J} désigne le vecteur densité de courant relié au champ électrique par : $\vec{J} = \sigma \vec{E}$

Pour une onde plane monochromatique de vecteurs champs électromagnétiques $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$, $\vec{H} = \vec{H}_0 \exp(-i\omega t)$, l'équation d'onde pour le métal s'écrit :

$$\Delta^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0 \quad (1.2)$$

avec $k^2 = \omega^2 \mu (\epsilon + i \frac{\sigma}{\omega})$.

La constante diélectrique complexe est définie :

$$\hat{\epsilon} = \epsilon + i \frac{\sigma}{\omega} \quad (1.3)$$

En réalité la constante diélectrique et la conductivité dépendent de la fréquence. La réponse optique d'un métal est directement reliée aux propriétés des électrons et du réseau. Une modification de la distribution électronique se traduit donc par celle des propriétés optiques. Deux mécanismes électroniques interviennent dans les interactions photon/matière et sont à l'origine des propriétés optiques :

- Le premier, intrabande, est dû aux électrons quasi-libres de densité n_e de la bande de conduction et est associé à des transitions optiques sans changement de bande. Sa contribution à la fonction diélectrique est décrite par le modèle de Drude.

- Le second, interbande, est lié aux transitions optiques entre deux bandes électroniques, des bandes pleines vers des états de la bande de conduction ou de cette dernière vers des bandes vides de plus haute énergie. Sa contribution à la constante diélectrique est décrite par le modèle de Lorentz.

1.3.1 Modèle de Drude

Dans ce modèle, le métal est assimilé à un réseau ionique baigné dans un nuage d'électrons libres. Le comportement d'un électron est supposé celui d'une particule de masse m et de charge $-e$. Sous l'effet d'un champ électrique \vec{E} et d'une induction magnétique \vec{B} , l'équation du mouvement de l'électron peut s'écrire sous la forme :

$$m \frac{\partial^2 \vec{x}}{\partial t^2} + m\Gamma \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} + e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) = 0 \quad (1.4)$$

avec \vec{x} et \vec{v} sont respectivement les vecteurs position et vitesse de l'électron. Γ représente un terme d'amortissement, il est inversement proportionnel au temps de relaxation.

En pratique dans la gamme optique, la force de Laplace $-e\vec{v} \wedge \vec{B}$ est négligeable devant la force électrique, le rapport v/c est d'environ $1/300$. De ce fait, une solution harmonique du mouvement de l'électron peut s'écrire sous la forme $\vec{x} = \vec{x}_0 \exp(-i\omega t)$, solution résultant pour un champ électrique $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$.

soit :

$$\vec{x} = \frac{e}{m} \frac{\vec{E}}{(\omega^2 + i\Gamma\omega)} \quad (1.5)$$

Pour une densité électronique n_e , la densité de courant s'écrit :

$$\vec{J} = -n_e e \vec{v} = i n_e e \omega \vec{x} \quad (1.6)$$

En injectant \vec{x} donné par l'équation 1.5 dans l'expression 1.6 on arrive :

$$\vec{J} = \frac{n_e e^2}{m} \frac{1}{(\Gamma - i\omega)} \vec{E} \quad (1.7)$$

La conductivité électronique complexe $\sigma(\omega)$ est déduite de l'équation 1.7 :

$$\sigma(\omega) = \frac{n_e e^2}{m} \frac{1}{(\Gamma - i\omega)} \quad (1.8)$$

En tenant compte de l'équation 1.3, on arrive à la fonction diélectrique relative de Drude :

$$\epsilon_D(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + i\omega\Gamma_D)} \quad (1.9)$$

avec $\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m\epsilon_0}}$ est la fréquence plasma des électrons, ϵ_0 représente la permittivité du vide et ϵ_∞ désigne la permittivité relative du métal à des fréquences infinies. Pour les métaux décrits par le modèle de Drude, ϵ_∞ est généralement approximé à 1.

1.3.2 Modèle de Drude-Lorentz

En plus des électrons de conduction, le modèle de Drude-Lorentz tient compte des électrons de valence. La transition des électrons des bandes pleines vers les états de la bande de conduction peut influencer considérablement la réponse optique. Dans les métaux alcalins, ces transitions apparaissent à des fréquences élevées et n'apportent qu'une faible correction à la fonction diélectrique dans le domaine optique. Ces métaux sont bien décrits par le modèle de Drude. Par contre, dans les métaux nobles une correction doit être apportée à la fonction diélectrique. Elle est due aux transitions entre les bandes d et la bande de conduction $s - p$.

La contribution des électrons de valence à la fonction diélectrique est décrite par le modèle de Lorentz. A la fonction diélectrique Drude est rajouté un terme Lorentzien suivant la relation ci-dessous :

$$\epsilon_{DL}(\omega) = \epsilon_D(\omega) + \epsilon_L(\omega) \quad (1.10)$$

L'estimation de $\epsilon_L(\omega)$, considère que les électrons de valence sont des oscillateurs harmoniques amortis et forcés. Dans le cas d'un seul oscillateur de Lorentz, $\epsilon_L(\omega)$ est donné par l'équation :

$$\epsilon_L(\omega) = \frac{\Delta\epsilon\Omega_L^2}{(\Omega_L^2 - \omega^2 - i\Gamma_L\omega)} \quad (1.11)$$

Γ_L et Ω_L désignent respectivement le coefficient de frottement et la constante de rappel de l'oscillateur et $\Delta\epsilon$ est la force d'oscillateur.

Finalement la fonction diélectrique Drude-Lorentz dans le cas d'un seul oscillateur s'écrit :

$$\epsilon_{DL}(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + i\omega\Gamma_D)} - \frac{\Delta\epsilon\Omega_L^2}{(\omega^2 - \Omega_L^2 + i\Gamma_L\omega)} \quad (1.12)$$

La figure 1.7 illustre la variation de la fonction diélectrique de l'or en fonction de la longueur d'onde obtenue expérimentalement par Johnson et Christy [15] et celles calculées par les deux modèles Drude et Drude-Lorentz. On observe que la correction apportée par le modèle de Lorentz au modèle de Drude est importante aux hautes énergies et donc aux hautes fréquences.

Les paramètres ($\epsilon_{\infty}, \omega_p, \Gamma_D, \Gamma_L, \Omega_L$ et $\Delta\epsilon$) correspondant aux valeurs expérimentales de Johnson et Christy [15] sont :

Pour le modèle de Drude :

$$\epsilon_{\infty} = 9.0685, \omega_p = 1.3544 \times 10^4 \text{ THz} \text{ et } \Gamma_D = 115.3593 \text{ THz}$$

Pour le modèle de Drude Lorentz :

$$\epsilon_{\infty} = 5.9673, \omega_p = 1.3280 \times 10^4 \text{ THz}, \Gamma_D = 100.0283 \text{ THz}, \\ \Omega_L = 4.0845 \times 10^3 \text{ THz}, \Gamma_L = 658.8548 \text{ THz} \text{ et } \Delta\epsilon = 1.09.$$

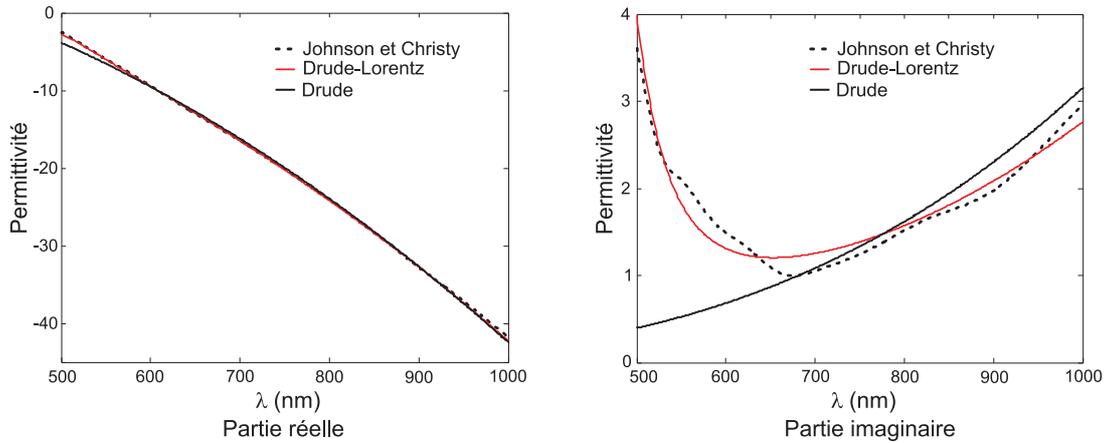


FIG. 1.7 – Permittivité de l'or publiée en [15] et calculée par les modèles de Drude et de Drude-Lorentz

1.4 Méthodes numériques d'analyse des cristaux photoniques

La modélisation d'un problème électromagnétique passe en premier lieu par l'écriture des équations de Maxwell. Leur résolution donne le champ électromagnétique caractérisant le système étudié. Rappelons que ces équations peuvent s'écrire sous forme différentielle ou intégrale dans le domaine temporel ou fréquentiel. La résolution de ces équations est généralement numérique et donc difficile en dehors de certaines considérations physiques. L'absence de conditions aux limites provoque une complication puisque la solution n'est plus unique.

Ainsi, des méthodes analytiques dites approximatives ou asymptotiques ont été en premier lieu utilisées ; elles traduisent les solutions sous forme de séries qui se rapprochent au mieux des résultats expérimentaux [16]. L'efficacité de ces méthodes repose sur la modélisation des interactions ondes-objets telles que : la réflexion, la transmission, la diffraction, et la diffusion. Leur domaine de validité est souvent restreint et n'est pas toujours en accord avec l'expérience. La solution numérique est donc souvent recommandée lorsque ces méthodes asymptotiques échouent.

Vu l'intérêt croissant des structures périodiques, les méthodes numériques pour leur modélisation ne cessent de se développer. Elles sont nombreuses et variées et peuvent être classées suivant le domaine dans lequel elles opèrent, fréquentiel ou temporel. Pour la première catégorie, on peut citer comme exemples la méthode des ondes planes (PWE)[10], la méthode des moments[17] et la méthode des éléments finis[18]. Quant à la deuxième catégorie, la plus générale et la plus répandue est la méthode FDTD (finite difference time domain) développée et utilisée dans ce travail. Dans ce qui suit, nous présenterons de façon succincte la méthode PWE et développerons les grandes lignes de la méthode FDTD. Les codes FDTD élaborés dans ce travail seront validés en se référant aux résultats obtenus par la méthode PWE dans le cas où cette dernière reste valable.

1.4.1 Méthode des ondes planes

Cette méthode, basée sur la résolution des équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel [10] [19], est l'une des méthodes les plus utilisées pour le calcul de structure de bandes photoniques. Pour la décrire, supposons que les composantes électromagnétiques ont une dépendance harmonique en temps de type $\exp(-i\omega t)$. Les équations de Maxwell différentielles s'écrivent :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = i\omega\mu_0\vec{H} \quad (1.13a)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = -i\omega\epsilon_r(\vec{r})\epsilon_0\vec{E} \quad (1.13b)$$

avec μ_0 et ϵ_0 sont respectivement la perméabilité magnétique et la permittivité diélectrique du vide, $\epsilon_r(\vec{r})$ étant la fonction diélectrique du cristal photonique. Des deux équations de Maxwell précédentes découle l'équation d'onde suivante :

$$\vec{\nabla} \wedge \left(\frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} \vec{\nabla} \wedge \vec{H} \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H} \quad (1.14)$$

c est la vitesse de la lumière dans le vide qui est donnée par : $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$

Compte tenu de la périodicité de la permittivité, d'après le théorème de Bloch, le champ électromagnétique peut être développé en ondes planes comme suit :

$$H(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \sum_{\lambda=1,2} h_{G\lambda} \vec{e}_\lambda \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \vec{r}) \quad (1.15)$$

De même pour la fonction diélectrique $\epsilon_r(\vec{r})$:

$$\frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} \epsilon_r^{-1}(\vec{G}) \exp(i\vec{G} \vec{r}) \quad (1.16)$$

où \vec{k} est le vecteur d'onde appartenant à la première zone de Brillouin et \vec{G} le vecteur du réseau réciproque, \vec{e}_1 et \vec{e}_2 étant les vecteurs unitaires perpendiculaires aux vecteurs $(\vec{k} + \vec{G})$.

En injectant 1.15 et 1.16 dans 1.14, on arrive à l'équation matricielle suivante :

$$\sum_{\vec{G}} |\vec{k} + \vec{G}\rangle \langle \vec{k} + \vec{G}'| \epsilon_r^{-1}(\vec{G} - \vec{G}') \begin{pmatrix} \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_2' & -\vec{e}_2 \cdot \vec{e}_1' \\ -\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2' & \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1' \end{pmatrix} h_{G'\lambda'} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_{G\lambda} \quad (1.17)$$

La résolution de 1.17 peut se faire en utilisant la méthode de diagonalisation. Pour différentes valeur du vecteur d'onde \vec{k} , on peut obtenir une série de fréquences propres ω (valeurs propres de la matrice) qui va constituer la structure de bande photonique. Cette méthode est bien adaptée à l'étude de cristaux photoniques infiniment périodiques, elle a été utilisée par plusieurs auteurs pour la détermination de la bande interdite photonique des structures triangulaires bidimensionnelles ainsi que la structure du graphite. Cependant, elle reste inadaptée pour le calcul de la transmission à travers un cristal fini et à l'étude des défauts de périodicité.

1.5 Méthodes des différences finies dans le domaine temporel

1.5.1 Introduction

La méthode numérique des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) a été développée par Yee[20] en 1966 et ce n'est qu'en 1975 qu'une série d'articles préconisant ses futures applications sont apparus [21] [22][23]. Grâce à ses avantages et à l'outil informatique devenant de plus en plus performant, la FDTD n'a cessé de gagner d'utilisateurs pour des applications de plus en plus variées.

La méthode FDTD peut simuler le comportement d'une onde électromagnétique dans tout type de milieu (diélectrique, métal, plasma....), tout en tenant compte des formes géométriques les plus complexes des objets pouvant constituer le système. Elle ne fait intervenir aucune inversion de matrice. Sa formulation théorique[24] extrêmement simple fournit des prédictions d'une grande précision pour un large éventail de problèmes dans le domaine électromagnétique. Elle est large bande, une excitation impulsionnelle dans le domaine temporel suffit à donner la réponse d'un système sur une large bande de fréquences via une transformation de Fourier.

Dans cette partie, nous exposerons les principes de la méthode FDTD et nous expliciterons les points nécessaires à la modélisation des cristaux photoniques.

1.5.2 Equations de Maxwell

La méthode FDTD est basée sur la résolution numérique des équations de Maxwell. Ces dernières s'écrivent de la manière suivante :

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \wedge \vec{E} \quad (1.18a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \vec{B} \cdot \vec{ds} = - \oint \vec{E} \cdot \vec{dl} \quad (1.18b)$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \wedge \vec{H} \quad (1.18c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \vec{D} \cdot \vec{ds} = \oint \vec{H} \cdot \vec{dl} \quad (1.18d)$$

Ces équations sont complétées par les deux relations caractérisant les milieux diélectriques et magnétiques : $\vec{B} = \mu \vec{H}$ et $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ où ϵ et μ désignent respectivement la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique du milieu.

La méthode FDTD est basée essentiellement sur la discrétisation aux différences centrées des équations différentielles de Maxwell 1.18a et 1.18c. Notons que les lois de Gauss pour les inductions électrique et magnétique sont implicites dans l'algorithme de la FDTD.

Rappelons que dans un espace cartésien de repère (O, x, y, z) , les équations différentielles de Maxwell s'écrivent :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad (1.19a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \quad (1.19b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (1.19c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \quad (1.19d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (1.19e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (1.19f)$$

Cristaux photonique bi-périodiques

Dans le cas où les cristaux photoniques sont périodiques suivant deux directions (x et y par exemple) et infini suivant la troisième direction (z), on peut distinguer deux types de propagation, propagation dans le plan (in-plane, k_z nul) et hors plan (off-plane, k_z non nul). Le système d'équations précédent se simplifie selon le type de propagation.

Propagation in-plane : Polarisation TE et TM

Dans ce cas, la propagation se fait dans le plan et la variation des champs s'annule suivant la troisième direction. Le système d'équations 1.19 se simplifie et se subdivise en deux sous-systèmes donnant naissance aux deux polarisations transverse électrique TE et transverse magnétique TM. Pour illustrer ce cas, supposons que le cristal est périodique suivant les directions x et y et est infini suivant z. Les dérivées par rapport à z s'annulent. Les équations 1.19 impliquent :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (1.20a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (1.20b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (1.20c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (1.20d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (1.20e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (1.20f)$$

Remarquons que l'évolution de E_z , H_x et H_y est indépendante de celle de E_x , E_y et H_z . De ce fait résulte deux systèmes d'équations indépendants, l'un décrivant la polarisation TE et l'autre la polarisation TM.

Polarisation TE

Les composantes électriques sont transverses, elles sont dans le plan de périodicité du cristal photonique. La polarisation TE est défini par le système suivant :

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (1.21a)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (1.21b)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (1.21c)$$

Polarisation TM

Dans ce cas ce sont les composantes magnétiques qui sont transverses. Cette polarisation est régie par le système suivant :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (1.22a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (1.22b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (1.22c)$$

Propagation off-plane

La propagation off-plane est caractérisée par une constante de propagation k_z non nulle suivant z . Dans ce cas les vecteurs champs électriques et magnétiques peuvent s'écrire comme suit :

$$\vec{E}(x, y, z, t) = \vec{E}(x, y, t) \exp(ik_z z) \quad (1.23a)$$

$$\vec{H}(x, y, z, t) = \vec{H}(x, y, t) \exp(ik_z z) \quad (1.23b)$$

Dans ce cas, les dérivées par rapport à z dans le système d'équations de Maxwell 1.19 sont calculées de manière analytique. Ce système devient :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} (ik_z E_y - \frac{\partial E_z}{\partial y}) \quad (1.24a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} (\frac{\partial E_z}{\partial x} - ik_z E_x) \quad (1.24b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} (\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}) \quad (1.24c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} (\frac{\partial H_z}{\partial y} - ik_z H_y) \quad (1.24d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} (ik_z H_x - \frac{\partial H_z}{\partial x}) \quad (1.24e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} (\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}) \quad (1.24f)$$

Dans ce cas il n'est plus possible de séparer le système en deux sous-systèmes comme auparavant ; les cas TE et TM se trouvent donc mélangés et ne peuvent pas être traités séparément.

1.5.3 Equations de Maxwell aux différences centrées

Le traitement numérique des systèmes d'équations aux dérivées partielles précédents nécessite un découpage de l'espace et du temps. Une fonction $f(x, y, z, t)$, qui peut représenter l'une des composantes électromagnétiques sera notée $f(i, j, k, n)$ et calculée en des points discrets de l'espace-temps. i, j et k définissent un point spatial de calcul et n représente le nombre d'échantillonnage temporel. Les dérivées partielles figurant dans les équations de Maxwell sont approchées aux différences finies centrées comme suit :

$$\frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x/2, y, z, t) - f(x - \Delta x/2, y, z, t)}{\Delta x} + 0(\Delta x^2) \quad (1.25)$$

Δx représente le pas de discrétisation suivant la direction x . Notons que l'approximation aux différences centrées offre une meilleure précision que l'approximation à droite ou à gauche.

Pour les milieux non magnétiques ($\mu = \mu_0$) et les milieux non dispersifs (permittivité réelle indépendante de la fréquence), l'application de l'approximation précédente sur les

dérivées partielles constituant les équations de Maxwell 1.19 nous amène au système d'équations aux différences centrées suivant :

$$H_x^{n+1/2}(i, j, k) = H_x^{n-1/2}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{E_y^n(i, j, k+1) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j+1, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta y} \right] \quad (1.26a)$$

$$H_y^{n+1/2}(i, j, k) = H_y^{n-1/2}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{E_z^n(i+1, j, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i, j, k+1) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta z} \right] \quad (1.26b)$$

$$H_z^{n+1/2}(i, j, k) = H_z^{n-1/2}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{E_x^n(i, j+1, k) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i+1, j, k) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (1.26c)$$

$$E_x^{n+1}(i, j, k) = E_x^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j, k)} \left[\frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n+1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} \right] \quad (1.26d)$$

$$E_y^{n+1}(i, j, k) = E_y^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j, k)} \left[\frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n+1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (1.26e)$$

$$E_z^{n+1}(i, j, k) = E_z^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j, k)} \left[\frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n+1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n+1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} \right] \quad (1.26f)$$

Notons que pour les cristaux bi-périodiques et infinis suivant z , le système précédent discrétisé se simplifie considérablement. Dans le cas d'une propagation in-plane, il n'y a aucune discrétisation suivant z et le système se subdivise en deux sous-systèmes de sorte que les calculs deviennent très souples en terme d'espace mémoire et de temps de calcul. De même pour le cas off-plane, les dérivées par rapport à z sont déterminées analytiquement ce qui réduit également l'espace mémoire requis et le temps de calcul.

1.5.4 Schéma de Yee

Le calcul des composantes électriques et magnétiques se fait en des points particuliers suivant le schéma de Yee (figure 1.8).

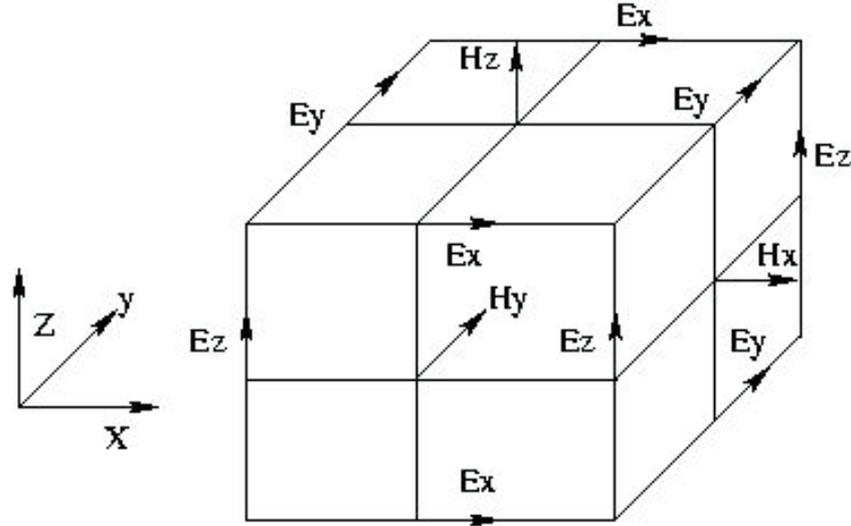


FIG. 1.8 – Cellule de Yee

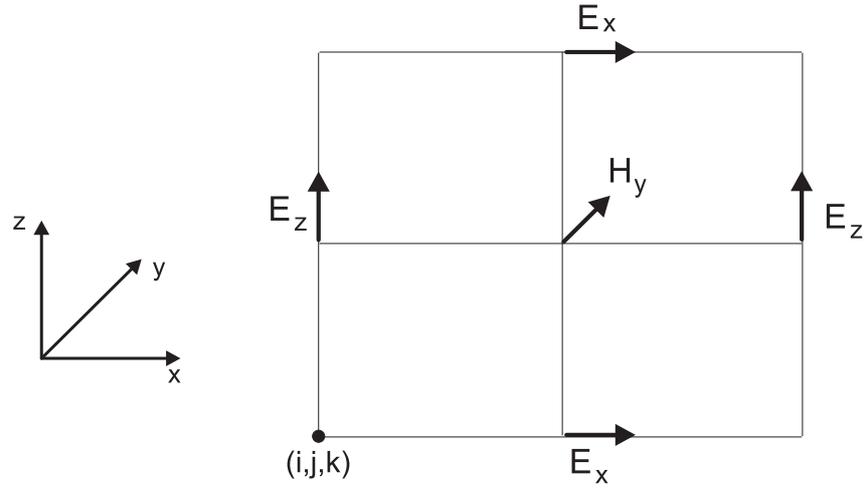
Les composantes électriques sont calculées en des points de la cellule de Yee appelés noeuds électriques qui sont toujours situés au milieu d'une arête. Les composantes magnétiques sont toujours calculées aux centres des faces de la cellule (noeuds magnétiques). Cette répartition des composantes permet au schéma de Yee de respecter la continuité des composantes tangentielle électrique et normale magnétique à l'interface de deux milieux différents.

Le calcul temporel des composantes magnétiques est décalé d'un demi pas de temps sur celui des composantes électriques qui sont calculées tous les $n\Delta t$. Quant aux composantes magnétiques, elles sont calculées aux instants $(n + 1/2)\Delta t$. Cette disposition assure un processus itératif entièrement explicite (pas d'inversion de matrice).

Pour bien comprendre le processus itératif de calcul du champ par la FDTD, reprenons l'équation 1.27 aux différences centrées :

$$H_y^{n+1/2}(i, j, k) = H_y^{n-1/2}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{E_z^n(i+1, j, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i, j, k+1) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta z} \right] \quad (1.27)$$

A l'instant $((n + 1/2)\Delta t)$, la composante H_y du champ magnétique est mise à jour à partir de la valeur de la même composante H_y à l'instant $((n - 1/2)\Delta t)$, et à partir

FIG. 1.9 – Mise à jour de la composante H_y

des quatre plus proches composantes du champ électrique qui l'entourent (voir figure 1.9). Cette opération, effectuée en chaque noeud de la grille FDTD, est répétée à chaque instant d'échantillonnage temporel pour chacune des six composantes du champ électromagnétique. Ce calcul itératif est connu sous le nom de schéma saute-mouton.

Stabilité et dispersion numériques

Le schéma de Yee est explicite et conditionnellement stable. Des valeurs arbitraires des pas de discrétisation spatiotemporels peuvent mener vers des solutions sans fin du champ électromagnétique. Afin d'éviter une telle situation, les pas Δx , Δy , Δz et Δt doivent être choisis de manière à respecter les critères de stabilité suivants :

- Cas 3D [24] :

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{max} \cdot \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}$$

- Cas off-plane [25] :

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{max} \cdot \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{k_z^2}{2}}}$$

v_{max} est la vitesse maximale de propagation dans le milieu du système étudié, en général la vitesse de la lumière dans le vide.

En plus du problème d'instabilité numérique, le passage des formes continues et analogiques des équations de Maxwell aux approximations numériques et discrètes, peut engendrer un effet parasite appelé dispersion numérique. Dans la grille FDTD, la vitesse de phase numérique n'est pas égale à celle de la lumière dans le vide. Elle dépend de plusieurs paramètres, comme le pas de discrétisation et l'angle d'incidence. Les principales conséquences de la dispersion numérique sont les erreurs de phase, les anisotropies numériques et la déformation des signaux. Plusieurs études ont fait l'objet de la dispersion numérique. Le remède à ce problème est de mailler très fin dans la grille FDTD, de l'ordre de $\lambda/18$, avec λ est la longueur d'onde minimale des ondes se propageant dans la grille FDTD.

1.5.5 Intégration des modèles de Drude et de Drude-Lorentz en FDTD

Comme nous l'avons vu précédemment, la permittivité des métaux dans la gamme optique dépend de la fréquence. Comme la méthode FDTD est temporelle, le calcul direct des composantes électriques et magnétiques par le système d'équations 1.26 est impossible. Dans le métal, des techniques sont développées pour adapter le modèle de Drude et le modèle de Drude-Lorentz à la méthode FDTD.

Modèle de Drude

Les équations (1.26d, 1.26e et 1.26f) de mise à jour des composantes électriques font apparaître la permittivité qui dépend explicitement de la fréquence. Pour s'affranchir de la permittivité, nous avons fait intervenir l'équation caractérisant le milieu diélectrique donnée par : $\vec{D} = \epsilon_D(\omega)\vec{E}$. Le principe consiste à remplacer le vecteur champ électrique \vec{E} par $\vec{D}/\epsilon_D(\omega)$ dans les équations de Maxwell afin de faire disparaître $\epsilon_D(\omega)$. Dans les milieux dispersifs, les équations (1.26d, 1.26e et 1.26f) sont remplacées par :

$$D_x^{n+1}(i, j, k) = D_x^n(i, j, k) + \Delta t \left[\frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n+1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} \right] \quad (1.28)$$

$$D_y^{n+1}(i, j, k) = D_y^n(i, j, k) + \Delta t \left[\frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n+1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (1.29)$$

$$D_z^{n+1}(i, j, k) = D_z^n(i, j, k) + \Delta t \left[\frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n+1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n+1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} \right] \quad (1.30)$$

Une fois que les composantes du vecteur déplacement \vec{D} sont mises à jours par les équations précédentes, on passera à la détermination des composantes \vec{E} à partir de la relation $\vec{D} = \epsilon_D(\omega) \vec{E}$. En remplaçant $\epsilon(\omega)$ par son expression donnée par le modèle de Drude, on arrive :

$$\vec{D} = \epsilon_0(1 - \omega_p^2/(\omega^2 + i\omega\Gamma_D)) \vec{E} \quad (1.31)$$

En effectuant une transformée de Fourier inverse (passage au domaine temporel), on obtient :

$$\frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \epsilon_0 \left(\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \omega_p^2 \vec{E} \right) \quad (1.32)$$

La discrétisation aux différences centrées de cette équation aux dérivées partielles temporelles nous donne :

$$\xi \vec{E}^{n+1} = -\chi \vec{E}^{n-1} + 4\epsilon_0 \vec{E}^n + \vec{D}^{n+1}[\Gamma_D \Delta t + 2] - 4\vec{D}^n + [-\Gamma_D \Delta t + 2] \vec{D}^{n-1} \quad (1.33)$$

avec $\xi = \epsilon_0[\omega_p^2 \Delta t^2 + \Gamma_D \Delta t + 2]$ et $\chi = \epsilon_0[\omega_p^2 \Delta t^2 - \Gamma_D \Delta t + 2]$

Du fait de la dispersion, une étape supplémentaire de calcul apparaît et consiste à déterminer les composantes du champ déplacement électrique pour tous les noeuds représentant un objet dispersif. De plus et comme il est visible sur l'équation 1.33, on a besoin de stocker les champs E et D sur deux pas temporels, ce qui a pour effet d'augmenter la place mémoire à allouer ainsi que le temps de calcul.

Modèle de Drude-Lorentz

Comme dans le cas du modèle de Drude, les composantes concernées qui nécessitent un traitement particulier sont E_x , E_y et E_z . Récemment, une technique pour adapter le modèle de Drude-Lorentz à la méthode FDTD à été publiée [26]. Elle consiste à introduire deux nouveaux vecteurs champs $\vec{\psi}_D$ et $\vec{\psi}_L$ et remplacer l'équation 1.18c par le système d'équations suivant [26] :

$$\vec{\psi}_D^n = C_D^\rho \vec{\psi}_D^{n-1} + C_D^\delta \vec{E}^n \quad (1.34a)$$

$$\vec{\psi}_L^n = C_L^\rho \vec{\psi}_L^{n-1} + C_L^\delta \vec{E}^n \quad (1.34b)$$

$$\vec{E}^{n+1} = C^\alpha \vec{E}^n + C^\beta (\vec{\nabla} \wedge \vec{H}^{n+1/2}) + C^\gamma Re(\vec{\psi}_D^n + \vec{\psi}_L^n) \quad (1.34c)$$

avec C^α , C^β , C^γ , C^ρ et C^δ sont des constantes qui dépendent des paramètres figurant dans la fonction diélectrique Drude-Lorentz.

Pour les constantes Drude : $C_D^\rho = \exp(-\gamma_D \Delta t)$ et $C_D^\delta = \Delta \chi_D^0$, avec :

$$\delta_\epsilon = -(\omega_D/\gamma_D)^2, \chi_D^0 = \delta_\epsilon(1 - \exp(-\gamma_D \Delta t)), \Delta \chi_D^0 = \delta_\epsilon(1 - \exp(-\gamma_D \Delta t))^2 \text{ et } \sigma_D = \omega_D^2/\gamma_D$$

Les constantes Lorentziennes sont :

$$C_L^\rho = \exp((- \alpha + i\beta)/\Delta t) \text{ et } C_L^\delta = -i \frac{\gamma}{\alpha - i\beta} (1 - \exp(-(\alpha + i\beta)\Delta t))^2$$

Et les trois autres constantes sont données comme suit :

$$C^\alpha = \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_\infty + \chi^0 + \sigma_D \Delta t}, C^\beta = \frac{\Delta t}{\Delta \chi^0 \epsilon_0 (\epsilon_\infty + \chi^0 + \sigma_D \Delta t)}, \text{ et } C^\gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty + \chi^0 + \sigma_D \Delta t}$$

avec $\chi^0 = \chi_D^0 + Re(\chi_L^0)$ et $\Delta \chi^0 = \Delta \chi_D^0 + Re(\Delta \chi_L^0)$

$$\text{et } \chi_L^0 = -i \frac{\gamma}{\alpha - i\beta} (1 - \exp(-(\alpha + i\beta)\Delta t)),$$

$$\Delta \chi_L^0 = -i \frac{\gamma}{\alpha - i\beta} (1 - \exp(-(\alpha + i\beta)\Delta t))^2$$

Comme dans le cas des milieux dispersifs décrits par modèle de Drude, des étapes supplémentaires de calcul sont nécessaires, elles consistent à déterminer dans le temps les composantes des vecteurs $\vec{\psi}_D$ et $\vec{\psi}_L$ pour tous les noeuds représentant un objet dispersif décrit par le modèle de Drude-Lorentz. Notons que les parties réelles et imaginaires de ces composantes sont calculées séparément, ce qui implique 6 équations de calcul pour la détermination d'une seule composante électrique.

1.6 Application au calcul de bandes photoniques (2D)

1.6.1 Cristaux photoniques diélectriques :

- Maille carrée

Rappelons qu'un CP 2D est un cristal photonique dont la permittivité diélectrique est infiniment périodique suivant deux directions (figure 1.10-a). Ce cristal photonique (figure 1.10), contenant des objets diélectriques à symétrie cylindrique, est réalisé à l'aide d'un programme matlab qui effectue une moyenne sur plusieurs cellules permettant de décrire et de construire le motif élémentaire.

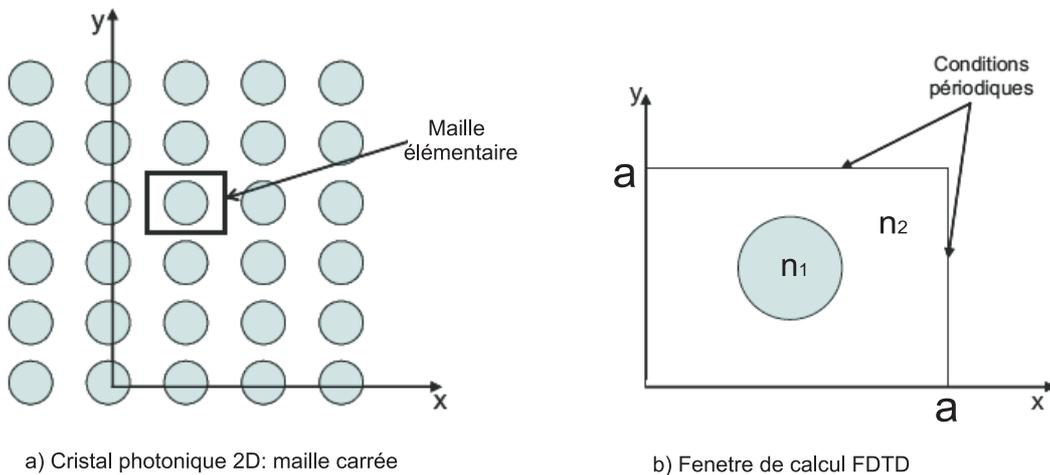


FIG. 1.10 – Structure carrée et fenêtre de calcul FDTD

Par raison de symétrie, on ne prend en considération qu'une seule maille élémentaire (figure 1.10-b). Pour reproduire tout le cristal, aux limites du domaine tronqué (figure 1.10-b), les conditions de périodicité reflétant le théorème du Floquet Bloch sont appliquées sur les composantes électriques et magnétiques.

$$\vec{E}(x = a, y, t) = \vec{E}(x = 0, y, t) \exp(ik_x \cdot a) \quad (1.35a)$$

$$\vec{E}(x, y = a, t) = \vec{E}(x, y = 0, t) \exp(ik_y \cdot a) \quad (1.35b)$$

$$\vec{H}(x = a, y, t) = \vec{H}(x = 0, y, t) \exp(ik_x \cdot a) \quad (1.35c)$$

$$\vec{H}(x, y = a, t) = \vec{H}(x, y = 0, t) \exp(ik_y \cdot a) \quad (1.35d)$$

Pour le calcul de structure Bandes, on injecte un signal de manière à exciter toutes les fréquences possibles de la structure. Ce signal est introduit de manière à respecter la loi de Gauss ($\text{div}(\vec{E}) = 0$), il est donné comme suit :

$$\vec{E} = \sum_G (\vec{v} \wedge (\vec{k} + \vec{G})) \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r})$$

\vec{v} est un vecteur aléatoire, \vec{k} et \vec{G} désignent respectivement le vecteur d'onde et les vecteurs du réseau réciproque.

Après avoir injecté le signal, on calcule l'évolution de la densité volumique d'énergie en fonction de la fréquence jusqu'à ce que le spectre obtenu soit quasi stable. Des pics apparaissent alors dans ce spectre et correspondent aux fréquences propres de la structure étudiée. Un exemple de calcul des fréquences propres d'une structure carrée au point X de la zone de Brillouin est montré sur la figure 1.11.

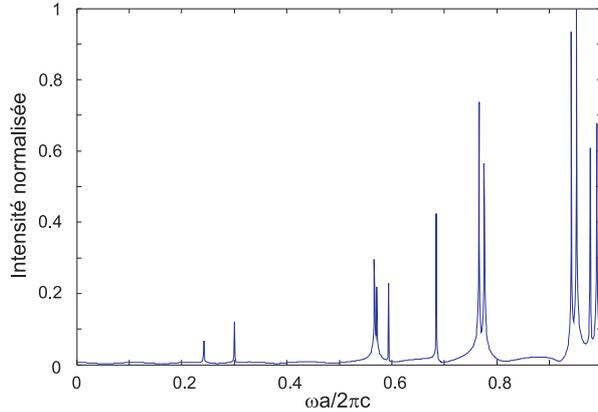


FIG. 1.11 – Intensité normalisée au point X d'une maille carrée de trous d'airs cylindriques dans le niobate.

La structure est composée de trous d'air $n_1 = 1$ dans un milieu diélectrique, niobate de lithium d'indice $n_2 = 2.1421$. Le rayon des trous est $r = 0.2686a$ ce qui correspond à un taux de remplissage de 0.2267%. La grille FDTD contient (60×60) points spatiaux. Pour respecter le critère de stabilité de Yee et éviter la dispersion numérique, le pas temporel est pris égal $\Delta t = a/(120c)$. Le calcul est laissé évoluer pendant 50000 itérations temporelles.

Pour avoir la structure de bande photonique complète, il faut balayer la zone de Brillouin irréductible (Γ XM). La figure 1.12 montre le diagramme de bandes photoniques calculé par la méthode PWE et celui obtenu par la méthode FDTD dans le cas d'une polarisation TM et pour des paramètres de structure identiques à ceux utilisés dans le cas de la figure 1.11.

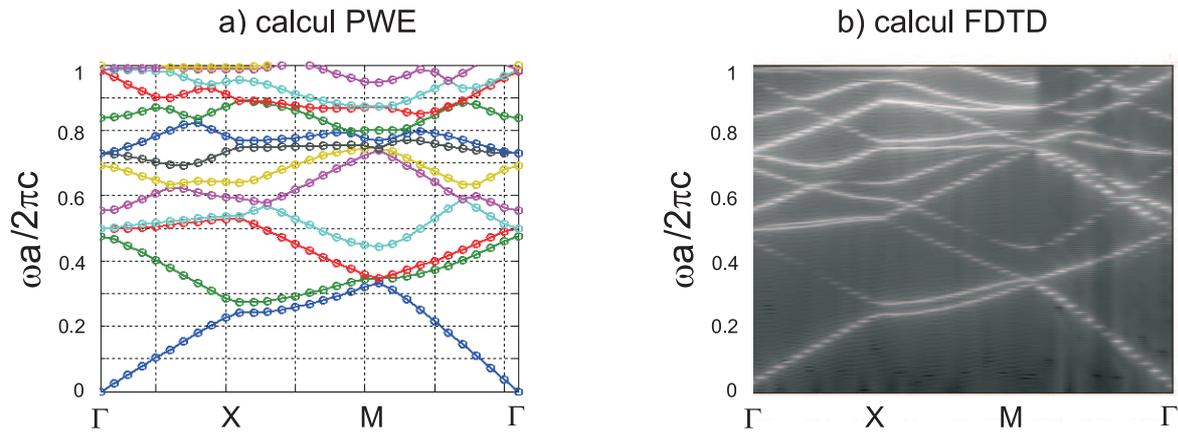


FIG. 1.12 – Structure de bande d'une structure carrée; trous d'air de rayon $r = 0.2686a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TM.

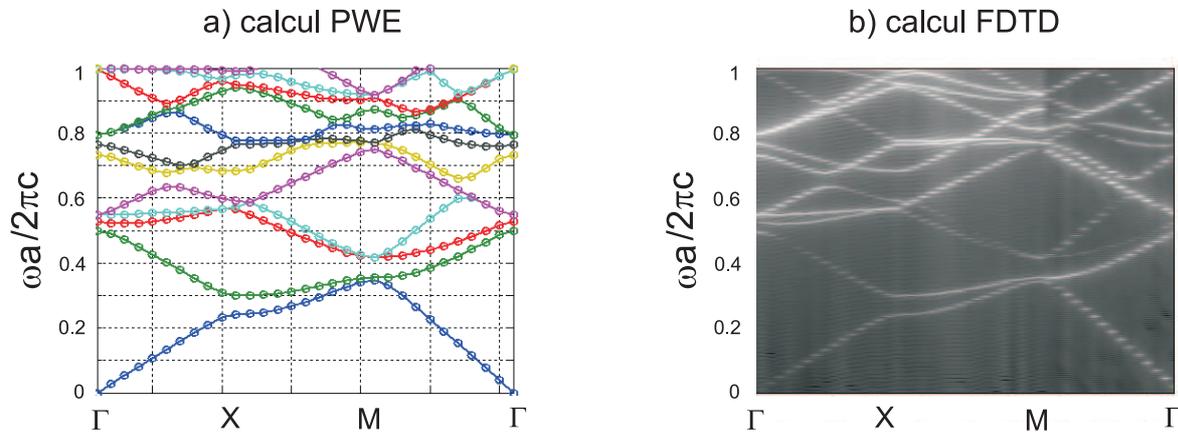


FIG. 1.13 – Structure de bande d'une structure carrée; trous d'air de rayon $r = 0.2686a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TE.

Le diagramme de bande calculé par les méthodes FDTD et PWE, correspondant à la polarisation TE est illustré sur la figure 1.13. Dans les deux cas de polarisation, que se soit TE ou TM, nos calculs FDTD présentent un très bon accord avec ceux obtenus par la PWE. Ces résultats comparatifs valident ainsi nos codes FDTD dans le cas in-plane pour les structures carrées diélectriques.

- Maille Triangulaire :

Comme dans le cas d'une maille carrée, la fenêtre de calcul FDTD est limitée à une seule maille élémentaire (figure 1.14). Pour reproduire tout le cristal, les conditions de périodicité de Floquet Bloch sont appliquées aux limites du domaine tronqué. Pour modéliser la structure photonique triangulaire par FDTD, Min Qiu [27] a choisi comme fenêtre de calcul FDTD la maille 1 montrée sur la figure 1.14-a. Pour cette maille, la FDTD classique élaborée dans un repère orthogonal est non adaptée. Dans [27] la méthode Nonorthogonal-FDTD (FDTD travaillant dans un repère non orthogonal) est développée et utilisée pour la modélisation d'une structure triangulaire. Dans ce cas les conditions de Floquet Bloch s'appliquent comme dans le cas d'une structure carrée.

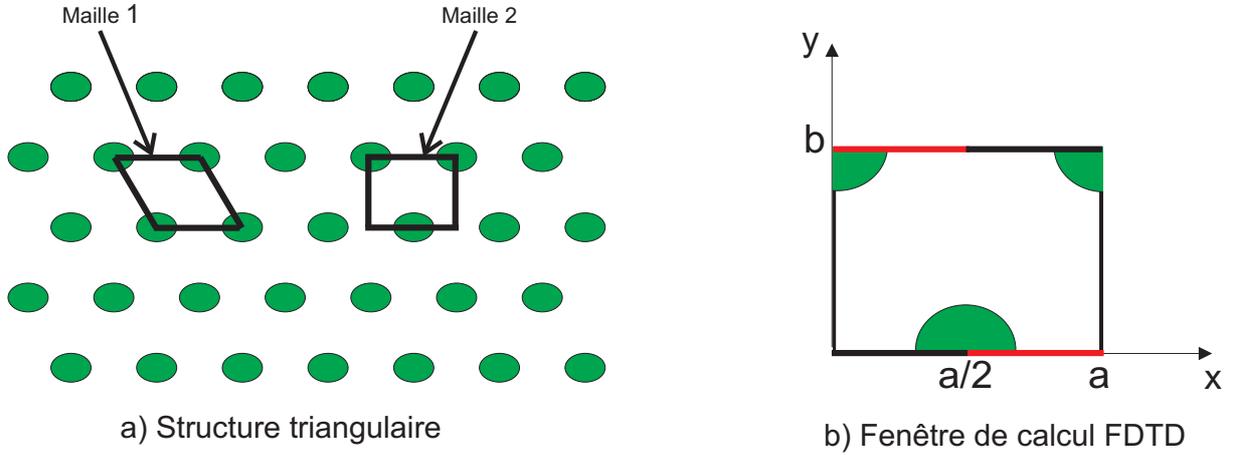


FIG. 1.14 – Structure triangulaire et fenêtre de calcul FDTD

Dans ce travail, pour rester en FDTD classique, en coordonnées orthogonales, nous avons choisi comme fenêtre de calcul FDTD la maille 2 décrite par la figure 1.14-b. Dans ce cas, les conditions de périodicité sont remplacées par :

- A la limite $x = a$:

$$\vec{E}(x = a, y, z, t) = \vec{E}(x = 0, y, z, t) \exp(ik_x \cdot a) \quad (1.36a)$$

$$\vec{H}(x = a, y, z, t) = \vec{H}(x = 0, y, z, t) \exp(ik_x \cdot a) \quad (1.36b)$$

-A la limite $y = b$ avec $x \geq 0$ et $x \leq a/2$

$$\vec{E}(x, y = b, z, t) = \vec{E}(x + \frac{a}{2}, y = 0, z, t) \exp(i(k_y \cdot b - k_x \cdot a/2)) \quad (1.37a)$$

$$\vec{H}(x, y = b, z, t) = \vec{H}(x + \frac{a}{2}, y = 0, z, t) \exp(i(k_y \cdot b - k_x \cdot a/2)) \quad (1.37b)$$

-A la limite $y = b$ avec $x > a/2$ et $x \leq a$

$$\vec{E}(x, y = b, z, t) = \vec{E}(x - \frac{a}{2}, y = 0, z, t) \exp(i(k_y \cdot b + k_x \cdot a/2)) \quad (1.38a)$$

$$\vec{H}(x, y = b, z, t) = \vec{H}(x - \frac{a}{2}, y = 0, z, t) \exp(i(k_y \cdot b + k_x \cdot a/2)) \quad (1.38b)$$

Pour voir l'effet du type de réseau sur la structure de bande, nous avons refait les calculs précédents en remplaçant la maille carrée par une maille triangulaire. Le taux de remplissage est maintenu égal à 0.2267 correspondant au rayon des trous $r = 0.25a$. Les indices de réfraction sont également considérés identiques à ceux du cas précédent ; $n_1 = 1$ et $n_2 = 2.1421$.

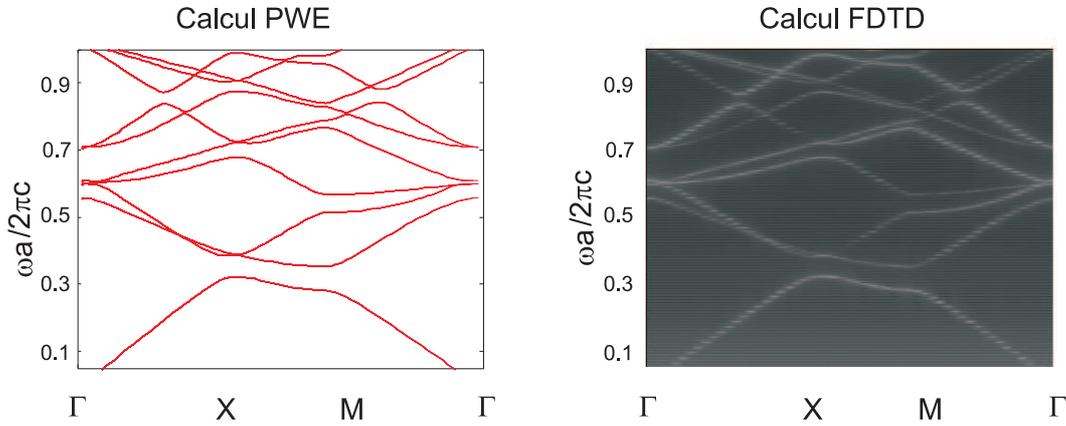


FIG. 1.15 – Structure de bande d'une structure triangulaire ; trous d'air de rayon $r=0.25a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TE.

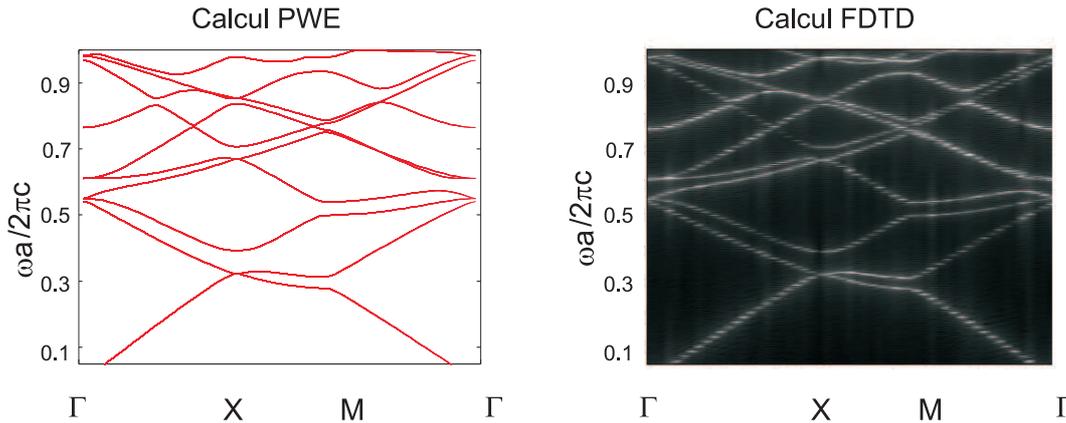


FIG. 1.16 – Structure de bande d'une structure triangulaire ; trous d'air de rayon $r = 0.25a$ dans un milieu diélectrique niobate. Polarisation TM.

Les figures 1.15 et 1.16 illustrent les diagrammes de bandes correspondant aux polarisations TE et TM respectivement, obtenues par la PWE et la FDTD. Dans les deux cas de figures, on constate que les calculs FDTD corroborent ceux de la PWE. Contrairement

au cas de la maille carrée ou aucune bande interdite photonique (BIP) n'est observée, dans le cas d'une structure triangulaire en polarisation TE on note l'apparition d'une bande interdite photonique pour $\omega a/2\pi c$ compris entre 0.32 et 0.35. Cette bande est dite partielle car elle n'existe pas dans le cas de la polarisation TM.

Un exemple de bande interdite complète commune aux deux polarisations TE et TM est montré sur la figure 1.17. La maille est triangulaire, composée de trous d'air ($n_1 = 1$) de formes cylindriques plongés dans un milieu diélectrique d'indice de réfraction ($n_2 = 3.3764$). Le rayon des cylindres est $r = 0.47a$. Cet exemple a fait également l'objet d'une simulation nonorthogonal-FDTD par Min-Qiu [27] (figure 4 en [27]). Nos résultats FDTD présentés sur la figure 1.17 sont concordants avec ceux de Min-Qiu.

On constate sur la figure 1.17-a correspondant à la polarisation TE, l'existence d'une bande interdite pour $\omega a/2\pi c$ compris entre 0.35 et 0.52. De même pour la polarisation TM, une BIP est trouvée pour $\omega a/2\pi c$ compris entre 0.44 et 0.51. Cette dernière bande étant incluse dans celle de la polarisation TE, elle est donc une bande interdite totale.

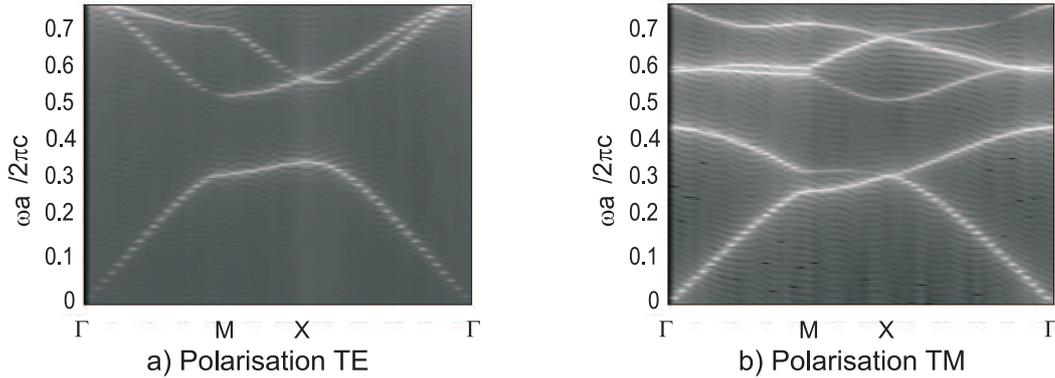


FIG. 1.17 – Structure de bande d'une structure triangulaire ; trous d'air ($n_1 = 1$) de rayon $r = 0.47a$ dans un milieu diélectrique $n_2 = 3.3764$

Cas hors plan : test de validation

Avant d'aborder les cristaux photoniques métalliques, nous avons jugé utile de valider notre code FDTD dans le cas d'une propagation hors plan (off-plane, k_z non nul).

Pour ce faire, nous avons repris l'exemple traité par la FDTD et la PWE dans [28]. La structure est une maille carrée composée de cylindres diélectriques ($\epsilon_r = 8.9$) plongés dans l'air ($\epsilon_r = 1$). Les rayons des cylindres est $r = 0.2a$. La taille de la fenêtre de calcul FDTD est de (60×60) points spatiaux. La constante de propagation k_z est prise égale à $0.4(\pi/a)$. Le pas d'échantillonnage temporel, respectant le critère de stabilité est $\Delta t = 3.73 \times 10^{-11} s$. Le temps de calcul est laissé évoluer jusqu'à 100000 itérations temporelles. Dans les figures 1.18-a et 1.18-b, nous présentons respectivement la structure de bande calculée par FDTD

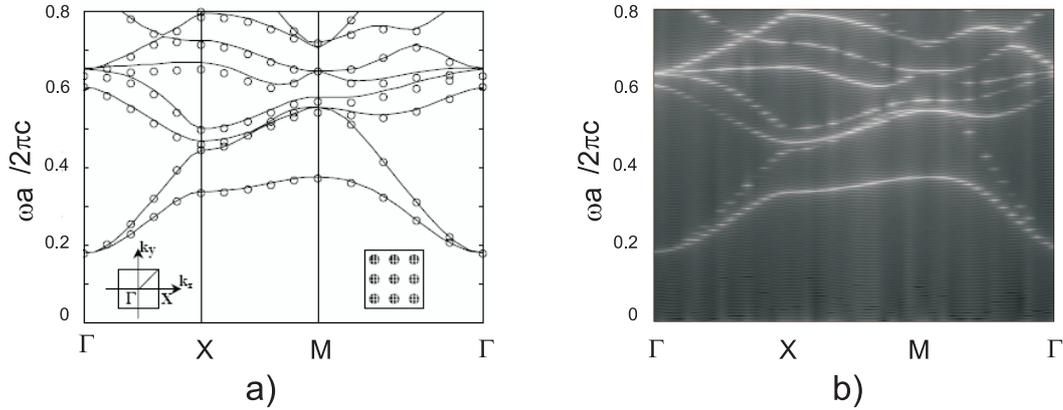


FIG. 1.18 – Structure de bande d’une maille carré dans le cas hors plan ($k_z = 0.4(\pi/a)$). a) calculs PWE (traits pleins) et FDTD (cercles) [28] et b) nos calculs FDTD.

et PWE dans [28] et celle que nous avons calculée par FDTD. Là encore, on constate la similitude de nos résultats FDTD avec ceux présentés dans [28].

1.6.2 Cristaux photoniques métalliques

Les métaux réels dans la gamme optique sont traités soit par le modèle de Drude soit par celui de Drude-Lorentz. Le premier calcul effectué consiste à valider notre code FDTD dans le cas des milieux dispersifs. Le cristal photonique pris comme test de validation est celui étudié par Sakoda et al.[29] par la méthode FDTD basée sur un calcul moyen des simulations d’un dipôle radiatif.

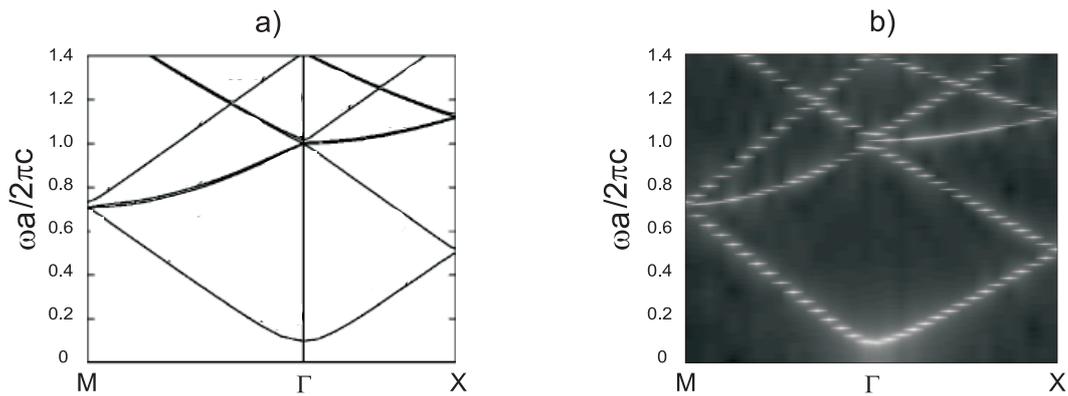


FIG. 1.19 – Structure de bande d’une maille carrée de cylindres métalliques dans l’air : Polarisation TM. a) Calculs de Sakoda [29], b) Nos calculs FDTD.

La structure consiste en un ensemble de cylindres métalliques arrangés en réseau carré dans l’air $n_2 = 1$. Le rayon des cylindres est $r = 0.0564a$ (taux de remplissage de 0.01). Les paramètres figurant dans l’expression de la fonction diélectrique de Drude sont donnés tel

que $\omega_p a / (2\pi c) = 1$ et $\Gamma_D = 0.01\omega_p$. La structure de bande correspondante est présentée sur la figure 1.19. Les paramètres de calcul FDTD sont : la taille de la grille FDTD est (120×120) , le pas d'échantillonnage temporel est $\Delta t = a / (240c)$. Le nombre d'itérations temporelles est $N_t = 100000$. On remarque que nos calculs FDTD (voir figure 1.19-b) sont conformes à ceux de Sakoda [29](figure 1.19-a). Ce test valide notre code FDTD dans le cas des milieux dispersifs décrits par le modèle de Drude. L'intégration du modèle de Drude-Lorentz en FDTD est aussi validé (voir chapitre 3).

La deuxième structure métallique étudiée consiste en une maille carrée de cylindres en argent dans l'air. La dispersion de l'argent est décrite par un modèle de Drude où les constantes figurant dans l'expression de la fonction diélectrique sont celles correspondant aux valeurs expérimentales publiées par Johnson et Christy : $\omega_p = 1.374 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ et $\Gamma_D = 3.21 \times 10^{13} \text{ rad/s}$. La période de la maille élémentaire est $a = 160 \text{ nm}$ et le rayon des cylindres est $r = 50 \text{ nm}$. La figure 1.20 montre les structures de bandes photoniques dans le plan (figure 1.20-a) et hors plan (figures 1.20-b et 1.20-c)).

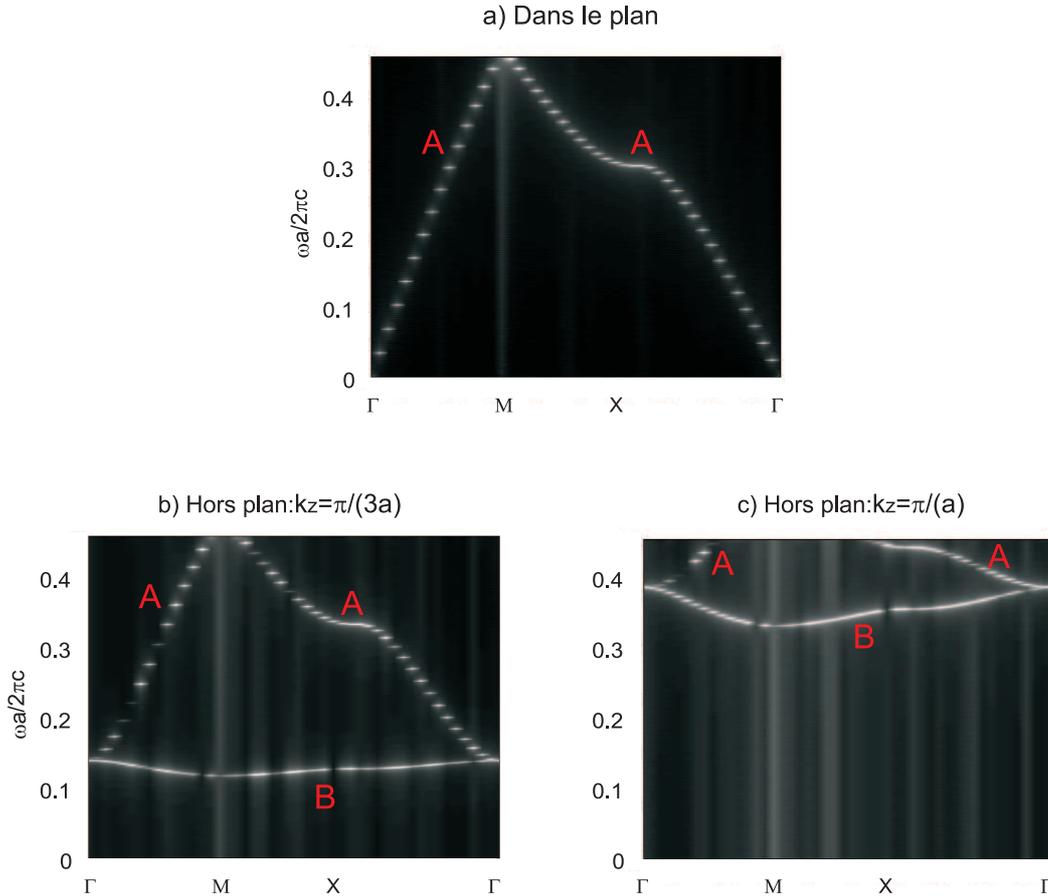


FIG. 1.20 – Structure de bande d'une maille carrée de cylindres en argent dans l'air : a) dans le plan : polarisation TE, b) et c) hors plan : k_z non nul.

Dans le cas in-plane, correspondant à la polarisation TE, on ne voit qu'un seul mode, mode A dans l'intervalle $[0; 0.5]$ de la fréquence normalisée ($a\omega / (2\pi c)$) (figure 1.20-a).

Notons que les bandes TM se situent au-dessus de la fréquence $0.45 \times c/a$ correspondant aux longueurs d'ondes inférieures à $\lambda = 355nm$. Dans le cas off-plane, on voit apparaître un mode supplémentaire B . Il correspond probablement au mode TEM excité dans le cas où k_z est non nul. On remarque que les deux modes se déplacent vers les hautes fréquences (basses longueurs d'ondes) lorsque k_z augmente, ce qui est conforme à la relation de dispersion donnée par $k_z = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} - \frac{4\pi^2}{\lambda_c^2}$. λ_c est la longueur d'onde de coupure.

Sur la figure 1.21, on représente la courbe de dispersion au point Γ obtenue par un calcul FDTD hors plan. Au point Γ de la zone de Brillouin, les deux modes A et B se situent au même endroit pour toutes les valeurs de la constante de propagation k_z .

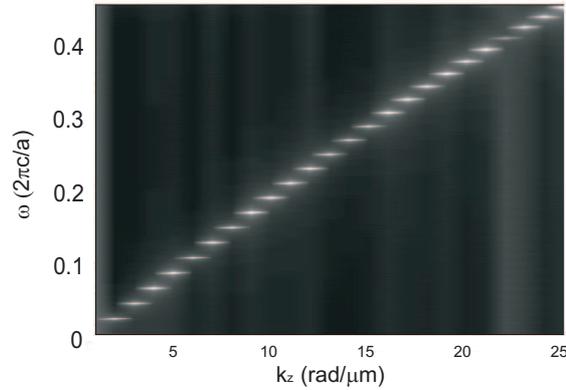


FIG. 1.21 – Courbe de dispersion au point Γ d'une maille carrée de cylindres en argent dans l'air.

Le cristal photonique précédent est remplacé par une structure à ouverture annulaire en argent (en anglais Annular Aperture Array, AAA) (voir figure 1.22).

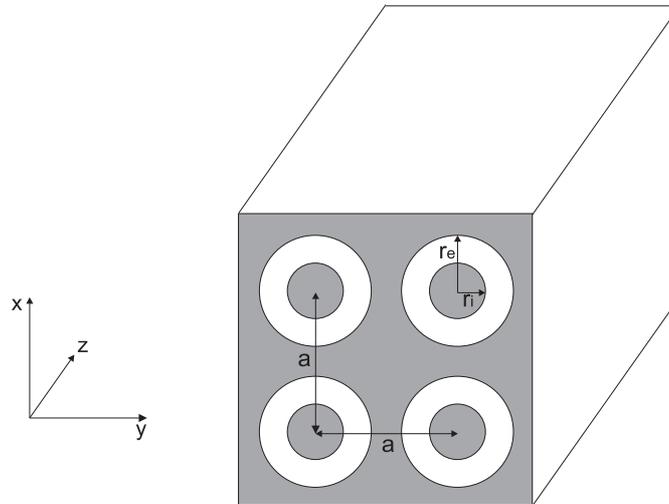


FIG. 1.22 – Structure à ouverture annulaire (AAA).

La structure AAA a été proposée par F.Baida et D. Van Labeke [5] pour des applications de transmission exaltée. Baida et al. ont montré que la transmission à travers une structure AAA sub-longueur d'onde peut atteindre les 90% dans la gamme du visible.

Les rayons intérieur et extérieur de la cavité coaxiale considérée sont $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$. La figure 1.23 montre l'intensité spectrale normalisée de la structure AAA au point Γ pour deux périodes différentes $a=300$ nm (figure 1.23-a) et $a=160$ nm (figure 1.23-b).

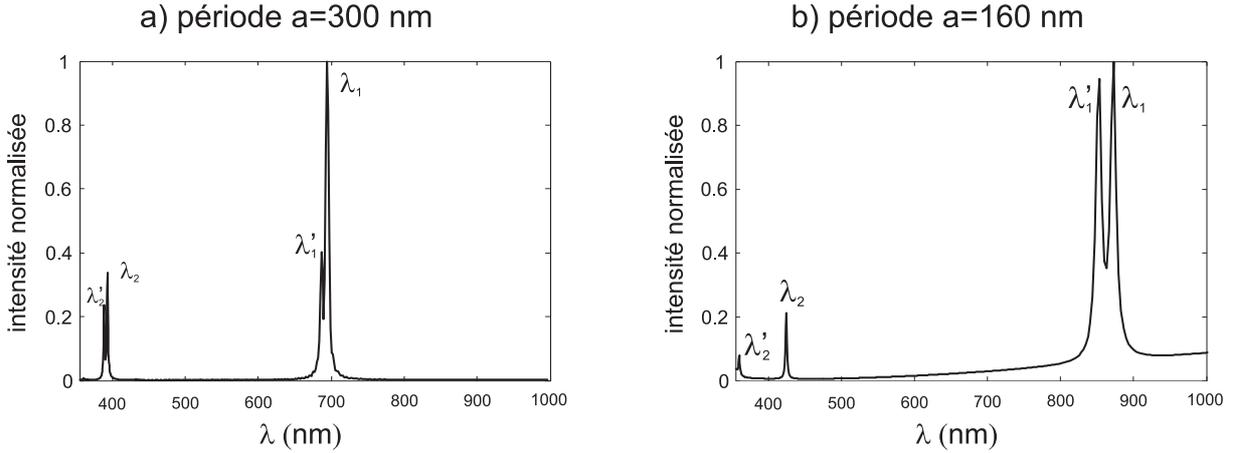


FIG. 1.23 – Intensité spectrale normalisée au point Γ en fonction de la longueur d'onde ; structure AAA en argent : a) période $a=300$ nm et b) période $a=160$ nm ; dans les deux cas $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$

Pour $a = 300nm$, on observe deux modes dégénérés. Les deux pics du mode fondamental se situent respectivement à la longueur d'onde $\lambda'_1 = 686nm$ et $\lambda_1 = 694nm$. Pour le mode secondaire, les pics sont localisés à $\lambda'_2 = 388nm$ et $\lambda_2 = 393nm$. En passant de la période $a = 300nm$ à la période $a = 160nm$, les deux pics du premier mode se sont nettement séparés, l'un est observé à $\lambda'_1 = 853nm$ et l'autre à $\lambda_1 = 872nm$. De même pour le deuxième mode, les deux pics sont décalés vers $\lambda_2 = 424nm$ et $\lambda'_2 = 360nm$.

Ces effets sur les positions des pics, en passant d'une période $a=300$ nm à $a=160$ nm, sont dus au fait que l'influence mutuelle des coax adjacents est plus forte dans le second cas. Pour $a = 160nm$, la distance séparant les coax les uns des autres est suffisamment petite, relativement à la longueur de pénétration de l'argent dans la gamme optique.

La figure 1.24, présentant les diagrammes de bandes de la structure AAA en argent pour ces deux périodes, met clairement en évidence l'effet du couplage des coax. Sur la figure 1.24-a ($a = 300nm$), les bandes sont horizontales. Le réseau a peu d'effet sur les fréquences propres de la cavité (les coax sont découplés les uns des autres). Au contraire, dans le cas de la figure 1.24-b ($a=160$ nm), les bandes sont courbées et les fréquences propres des modes varient fortement en fonction de \vec{k} .

Dans [30], les distributions de $|h_z|^2$ aux longueurs d'ondes λ'_1 et λ_2 de la figure 1.23-

a ($a = 300nm$) ont été calculées et présentées. Les résultats ont montré que ces pics correspondent respectivement aux mode TE_{11} et TE_{21} . La dégénérescence des modes TE est due au fait que la symétrie cylindrique des cavités coaxiales est brisée quand les coax sont arrangés en un réseau carré. Pour une cavité coaxiale isolée correspondant à une période infinie, les modes TE ne présentent qu'un seul pic chacun [30].

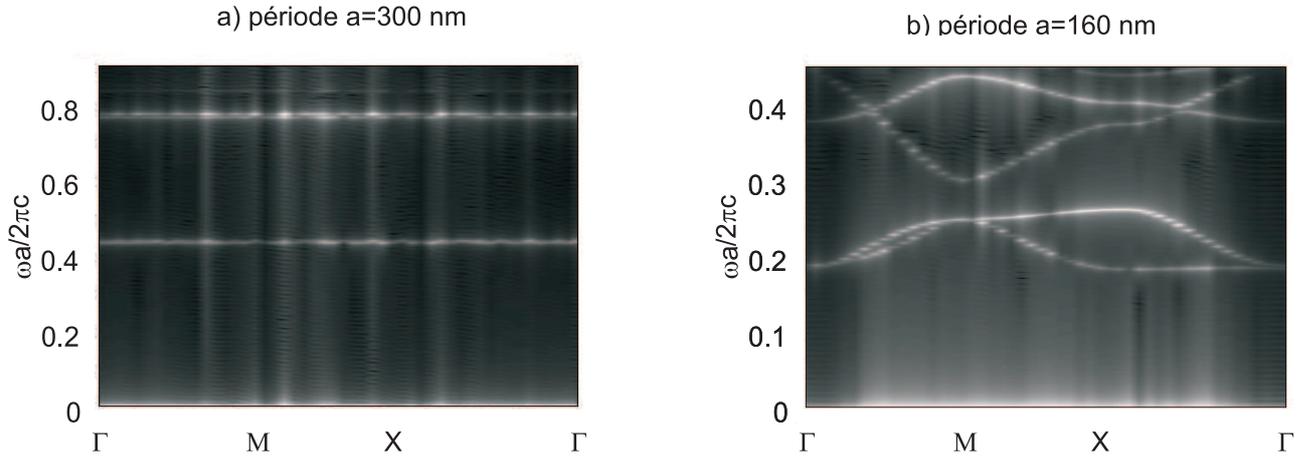


FIG. 1.24 – Structures de bande de la structure AAA en argent, cas dans le plan et polarisation TE : a) période $a=300$ nm ; b) période $a=160$ nm ; dans les deux cas $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$

Dans le cas de la figure 1.24-b, correspondant à la polarisation TE, on note la présence de deux bandes interdites. L'une s'étalant de la fréquence zéro (longueur d'onde infinie) à la fréquence $0.1835(c/a)$ ($\lambda = 872nm$). La deuxième bande interdite se situe dans la gamme optique entre 492 nm et 630 nm. Notons que ces bandes interdites sont totales, les fréquences propres correspondant à la polarisation TM se trouvent au-dessus de la fréquence $0.45 \times c/a$.

Nous avons reconsidéré l'application précédente en remplaçant l'argent par l'or. La dispersion de l'or est décrite par le modèle de Drude-Lorentz et les paramètres figurant dans la fonction diélectrique sont ceux correspondant aux valeurs expérimentales publiées par Johnson et Christy [15]. Sur la figure 1.25, nous avons présenté l'intensité spectrale au point Γ en fonction de la longueur d'onde d'une structure AAA en or. Pour une période $a=300$ nm, on observe trois modes propres ayant des pics aux alentours des longueurs d'ondes $\lambda_1 = 757nm$, $\lambda_2 = 560nm$ et $\lambda_3 = 420nm$. Ces pics sont décalés vers les grandes longueurs d'ondes et beaucoup plus larges par rapport à ceux obtenus dans le cas de l'argent (figure 1.23-a). Cela est dû probablement à la forte absorption de l'or par rapport à celle de l'argent dans la gamme du visible et probablement à l'effet sur la réponse optique des transitions électroniques de la bande d vers les bandes de conduction dans le cas de l'or.

En passant à la période $a = 160nm$, comme dans le cas de l'argent, le mode fondamental est décalé vers le haut en longueur d'onde $\lambda_1 = 903nm$. Au contraire, les deux autres pics sont peu affectés par le réseau. Leurs longueurs d'ondes $\lambda_2 = 568nm$ et $\lambda_3 = 422nm$

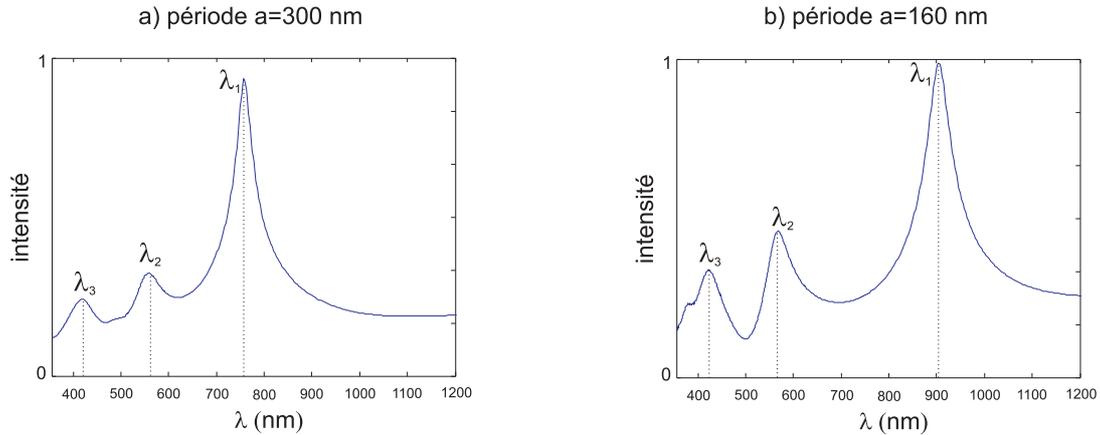


FIG. 1.25 – Intensité spectrale au point Γ en fonction de la longueur d’onde ; structure AAA en or : a) période $a = 300nm$ et b) période $a = 160nm$; dans les deux cas $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$

demeurent très proches de celles obtenues pour la période $a = 300nm$. Ces modes sont très confinés à l’intérieur des coax et sont peu affectés par le réseau. Cela est bien visible sur la structure de bande présentée sur la figure 1.26.

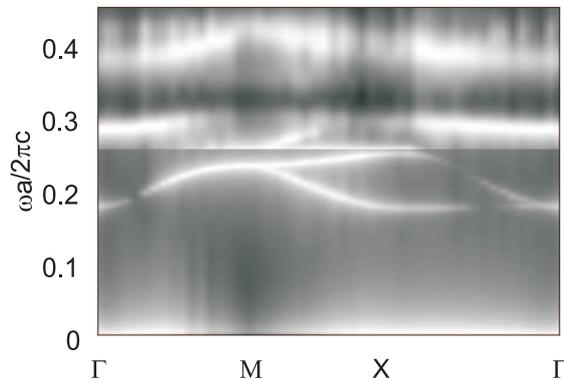


FIG. 1.26 – Structure de bande d’une structure annulaire (AAA) en or : période $a = 160nm$, $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$

Sur cette dernière figure, on remarque que la branche correspondant au premier mode présente bien une dispersion en \vec{k} . Ce mode fondamental est dégénéré suivant les direction MX et $X\Gamma$ de la zone de Brillouin. Pour les deux autres modes, du fait qu’ils soient peu affectés par le réseau et présentent des pics larges, leurs bandes paraissent horizontales.

Cas hors plan : structure AAA en argent

Pour étudier l’effet de la propagation (kz non nulle) sur les bandes photoniques de la structure AAA, nous avons repris la structure d’argent : période $a = 160nm$, $r_i = 50nm$

et $r_e = 75nm$. La figure 1.27 montre l'intensité normalisée dans le cas in-plane et off-plane ($k_z = \pi/a$). On constate que dans le cas off-plane les modes sont décalés vers les petites longueurs d'ondes conformément à la théorie.

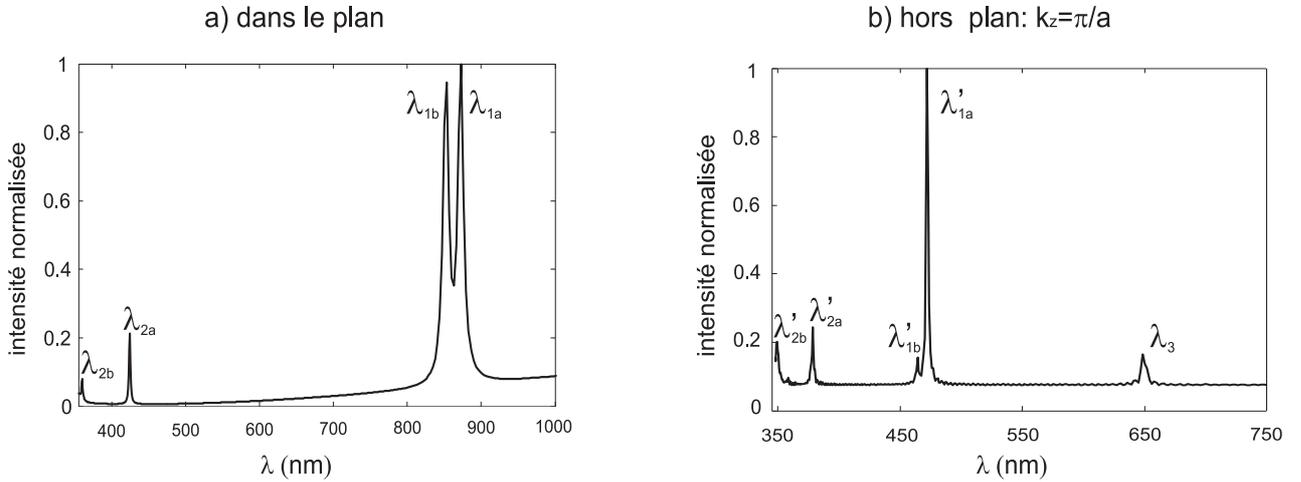


FIG. 1.27 – Intensité spectrale normalisée en fonction de la longueur d'onde : a) dans le plan ($k_z = 0$) ; b) hors plan ($k_z = \pi/a$)

Les longueurs d'ondes $\lambda_{1a} = 872nm$ et $\lambda_{1b} = 853nm$ des deux pics du mode fondamental TE dégénéré dans le cas in-plane sont décalées respectivement vers $\lambda'_{1a} = 472nm$ et $\lambda'_{1b} = 464nm$ dans le cas off-plane ($k_z = \pi/a$). Les deux pics secondaires $\lambda_{2a} = 424nm$ et $\lambda_{2b} = 349nm$ passent respectivement à $\lambda'_{2a} = 378nm$ et $\lambda'_{2b} = 349nm$. Sur la figure 1.27-b on observe l'apparition d'un mode supplémentaire situé à $\lambda_3 = 649nm$. Ce mode est le mode TEM excité dans le cas off-plane et qui se trouve à $\lambda = \infty$ dans le cas in-plane.

Ces résultats sont similaires à ceux publiés [30] et qui confirment la nature de ces modes. Le mode localisé en λ_3 est le mode TEM . Les deux autres situés en λ'_{1b} et λ'_{2a} correspondent respectivement aux mode TE_{11} et TE_{21} .

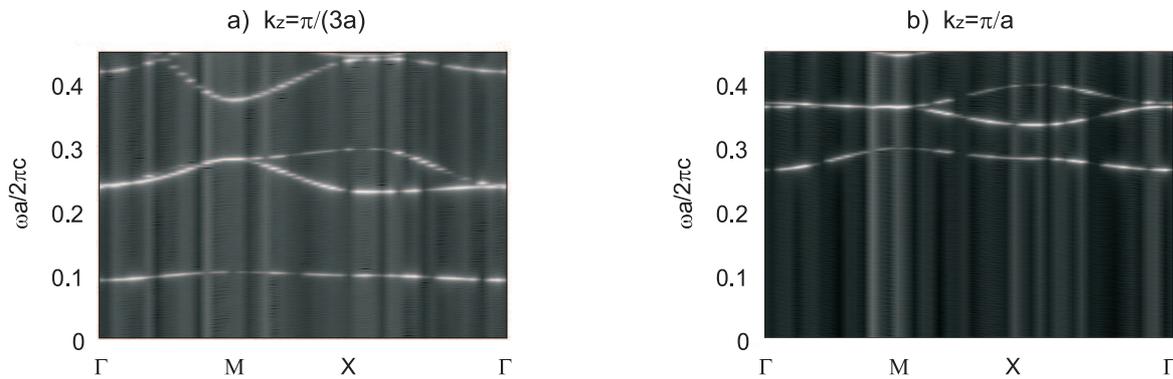


FIG. 1.28 – Structure de bande d'une structure annulaire en argent dans le cas hors plan : a) $k_z = \pi/(3a)$, b) $k_z = \pi/a$

Sur la figure 1.28 sont présentées les structures de bandes photoniques dans le cas hors

plan pour deux valeurs différentes de k_z . On constate l'apparition d'une bande interdite photonique supplémentaire par rapport au cas in-plane. Elle est due au mode TEM excité dans le cas off-plane pour une fréquence différente de zéro. Pour $k_z = \pi/(3a)$, les trois bandes interdites se situent entre $]1873nm \infty[$, $]723nm \ 1668nm[$ et $]458nm \ 575nm[$. Ces bandes interdites deviennent $]653nm \infty[$, $]512nm \ 574nm[$ et $]378nm \ 431nm[$ dans le cas ou $k_z = \pi/(a)$. Ces bandes se sont décalées vers les petites longueurs d'ondes en passant de $k_z = \pi/(3a)$ à $k_z = \pi/(a)$. Conformément à la théorie, ce déplacement des bandes est dû au fait que les fréquences propres des modes augmentent lorsque k_z augmente.

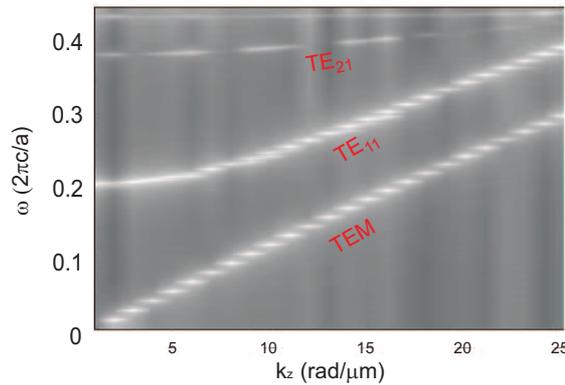


FIG. 1.29 – Courbes de dispersion au point Γ d'une structure annulaire en argent, période $a = 160nm$, $r_i = 50nm$ et $r_e = 75nm$

La figure 1.29 montre les courbes de dispersion de ces modes en fonction de k_z qui confirment bien la nature TEM du mode supplémentaire excité dans le cas hors plan. Ce mode démarre à partir de la fréquence zéro, et ne présente donc pas de coupure.

1.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons, dans un premier temps, décrit les cristaux photoniques diélectriques et métalliques ainsi que leurs propriétés physiques permettant leur modélisation.

Ensuite, nous avons présenté la méthode FDTD adaptée aux calculs de structures de bandes photoniques bi-périodiques. Nous avons considéré les cas dans le plan et hors plan et avons pris en compte dans notre code de calcul FDTD les caractéristiques des métaux décrites par les modèles de Drude et de Drude -Lorentz.

Plusieurs diagrammes de bandes dans les cas in-plane et off-plane et pour des structures diélectriques et métalliques sont présentés.

Les codes FDTD élaborés sont actuellement opérationnels et ouvrent des perspectives

pour l'étude des configurations inédites exhibant des propriétés exotiques (modes gelés, dispersion négative, réfraction négative, ...) dans le cas de structures métalldiélectriques.

Au vu des résultats, la méthode FDTD s'avère très efficace pour la modélisation des cristaux photoniques diélectriques et métalliques. C'est pourquoi cette méthode sera grandement étendue dans la suite de ce travail, notamment à l'étude des structures à symétrie de révolution (BOR-FDTD) et des cristaux bi-périodiques finis suivant la troisième direction (FDTD en incidence oblique).

Bibliographie

- [1] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett., 58, 2059, 1987.
 - [2] E. Yablonovitch, J. Opt. Society, 10, 283-293, 1993.
 - [3] E. Yablonovitch and T.J. Gmitter, J. Opt. Society, 9, 1792-1800, 1990.
 - [4] T.W. Ebbesen, H.J. Lezec, H.F. Ghaemi, T. Thio, and P.A. Wolff, Nature, 391, 667-669, 1998.
 - [5] F. I. Baida and D. Van Labeke, Optics Commun., 209, 17-22, 2002.
 - [6] Daniel Van Labeke, Davy Grard, Brahim Guizal, Fadi I. Baida, and Lifeng Li, Opt. Express, 14(25), 11945-11951, 2006.
 - [7] M. Plihal and A.A Maradudin, Phys .Rev B 44, 8565, 1991.
 - [8] G. Tayeb, D. Maystre, J. Opt. Soc. Am. A 14 , 3323-3332, 1997.
 - [9] T. Jaffre– *Caractérisation des matériaux à bande interdite électromagnétique multi-périodiques et leurs applications aux antennes*, Thèse de doctorat-Université de Limoges, 2005.
 - [10] K.M. Ho, C.T. Chan, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. 65, 3152, 1990.
 - [11] C. Kittel– *Solid State Physics*, (John Wiley and Sons, New York, 1986).
 - [12] M. M. Sigalas, C.T. Chan, K.M. Ho and C.M. Soukoulis, Phys. Rev. B 52, 11744, 1995.
 - [13] S. Fan, P.R. Villeneuve and J.D. Joannopoulos, Phys. Rev. B 54, 11245, 1994.
 - [14] M.A. Ustyantsev– *Analysis and design of metallo-dielectric photonic crystals*, Thesis- Universitat Rovira i Virgili, 2007.
 - [15] P. Johnson and R. Christy, Phys. Rev. B 6, 4370-4379, 1972.
 - [16] J. Vanblabel, IEEE-MTL, 23, N° 2, 1975.
 - [17] J. C. Vardaxoglou, Frequency Selective Surfaces, Research Studies Press Ltd., 1997.
 - [18] F. Brechet, J. Marcou, D. Pagnoux, and P. Roy, Roy, Opt. Fiber Technol., 5, 181, 1999.
 - [19] K.M. Leung and Y.F. Liu, Phys. Rev. Lett. 65, 2646, 1990.
 - [20] K. S. Yee, IEEE Trans. Antennas Propag. 14, 302-307, 1966.
 - [21] A. Taflove and M. E. Brodwin, IEEE Transactions on Microwave theory and Technique, MTT-23, N° 8, August 1975.
-

- [22] A. Taflove and M. E. Brodwin, IEEE Transactions on Microwave theory and Technique, MTT-23, N° 11, November 1975.
 - [23] K. S. Kunz and K. M. Lee, IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, EMC-20, N° 2, May 1978.
 - [24] A. Taflove and S. C. Hagness– *Computational Electrodynamics, the Finite-Difference Time-Domain Method*, Artech House, Norwood, MA, second edition, 2005.
 - [25] A.C. Cangellaris, IEEE Microwave Guided Wave Lett. 3, 3, 1993.
 - [26] A. Vial, A-S. Grimault, D. Macias, D. Barchiesi and M. L. Chapelle, Phys. Rev. B 71, 085416, 2005.
 - [27] M. Qiu – *Computational methods for the analysis and design of photonic bandgap structures*, Thesis Royal Institute of Technology Stockholm,2000.
 - [28] Min Qiu and S. He, Physics Letter A, 2000
 - [29] K. Sakoda, N. Kawai, and T Ito, Phy. Rev. B 64, 045116, 2001.
 - [30] F. I. Baida, D. Van Labeke, G. Granet, A. Moreau, and A. Belkir, Appl. Phys. B : Lasers Opt. 79, 1-8, 2004.
-

Chapitre 2

Modélisation des guides d'ondes à symétrie de révolution par la BOR-FDTD

2.1 Introduction

Les guides d'ondes métalliques à symétrie de révolution sont très utilisés pour des applications en optique. Pour les grandes longueurs d'ondes (micro ondes et plus) le métal est généralement considéré comme un métal parfait, et de ce fait, les caractéristiques électromagnétiques de ces guides peuvent être décrites par des expressions analytiques connues[1]. Pour des applications en optique, les métaux ne peuvent plus être considérés comme parfaits, la réaction des électrons aux fréquences optiques doit être prise en considération. La recherche des modes pouvant être guidés est subordonnée à l'étude des pertes dans le métal rendant nécessaire le recours aux modèles numériques. Pour des guides ayant des ouvertures de dimensions supérieures aux longueurs d'ondes optiques (de l'ordre de quelques micromètres), le confinement de la lumière de certains modes guidés peut être obtenu dans la partie diélectrique ce qui permet une propagation du signal sur des distances assez importantes sans beaucoup d'atténuation. Dans le cas de l'optique guidée, les guides doivent avoir des dimensions très petites inférieures à la longueur d'onde. Dans ce cas, le confinement n'est pas évident ce qui conduit à une très forte atténuation de l'information transmise.

Actuellement, la nano-optique est en plein essor [2] [3] [4] [5] . La conception des guides d'ondes optiques de dimensions nano-métriques (sub-longueurs d'ondes) est devenue indispensable pour la nano-connectique [6] [7] [8]. Citons par exemple, les techniques de microscopie en champ proche qui consistent à utiliser des guides d'onde ou micropipettes comme sondes pour la détection du champ proche optique[9]. Ces dernières sont supposées permettre le guidage du champ électromagnétique jusqu'à l'extrémité de la pointe ainsi

que son émission à travers l'ouverture sub-longueur d'onde.

L'objectif de ce chapitre est de chercher des modes particuliers de ces guides sub-longueurs d'ondes qui pourraient être excités et de présenter des caractéristiques qui les affranchiraient de l'atténuation due à la dissipation du métal. Pour ce faire, nous avons développé et adapté un algorithme FDTD où la symétrie de révolution de la structure à étudier est exploitée afin de réduire et de simplifier considérablement les codes de calcul FDTD. Le code ainsi réalisé porte le nom de BOR-FDTD (Body Of Revolution FDTD), il consiste à discrétiser dans l'espace et dans le temps les équations de Maxwell exprimées en coordonnées cylindriques [10], [11] [12] . La dépendance azimuthale (en ϕ) des composantes électromagnétiques est développée en séries de Fourier. L'algorithme peut calculer des solutions pour tous les modes de Fourier en l'exécutant pour chaque mode. Ce code est dit 2.5 D. La dépendance en ϕ est calculée de manière analytique, ceci signifie que l'algorithme BOR-FDTD est bidimensionnel en terme d'utilisation de ressource informatique. En plus, pour les cas travaillant hors plan (off-plane), la dépendance en z est aussi calculée analytiquement, le calcul BOR-FDTD se ramène donc dans ce cas à une dimension.

La première partie de ce chapitre est consacrée à la présentation de la technique BOR-FDTD. Les passages du code de calcul 3D à 2D puis à un 1D pour les cas off-plane seront présentés. Les couches absorbantes de type PML pour la modélisation des milieux ouverts seront adaptées à la BOR-FDTD ainsi que les traitements nécessaires pour les différents types d'applications. Plusieurs tests de validation seront effectués. Des simulations pour l'étude des guides d'ondes métalliques cylindriques et coaxiaux de dimensions sub-longueurs d'ondes ont été réalisées. Les résultats obtenus seront analysés et commentés.

2.2 Equations de Maxwell en coordonnées cylindriques

La méthode BOR-FDTD est également basée sur la discrétisation suivant le schéma de Yee [13] des équations de Maxwell exprimées en coordonnées cylindriques (voir figure 2.1). Dans ce système de coordonnées, ces équations s'écrivent de la manière suivante :

$$\epsilon \frac{\partial E_r}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial H_z}{\partial \phi} - \frac{\partial H_\phi}{\partial z} \quad (2.1a)$$

$$\epsilon \frac{\partial E_\phi}{\partial t} = \frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial r} \quad (2.1b)$$

$$\epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rH_\phi)}{\partial r} - \frac{\partial H_r}{\partial \phi} \right) \quad (2.1c)$$

$$-\mu \frac{\partial H_r}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial E_z}{\partial \phi} - \frac{\partial E_\phi}{\partial z} \quad (2.1d)$$

$$-\mu \frac{\partial H_\phi}{\partial t} = \frac{\partial E_r}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial r} \quad (2.1e)$$

$$-\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rE_\phi)}{\partial r} - \frac{\partial E_r}{\partial \phi} \right) \quad (2.1f)$$

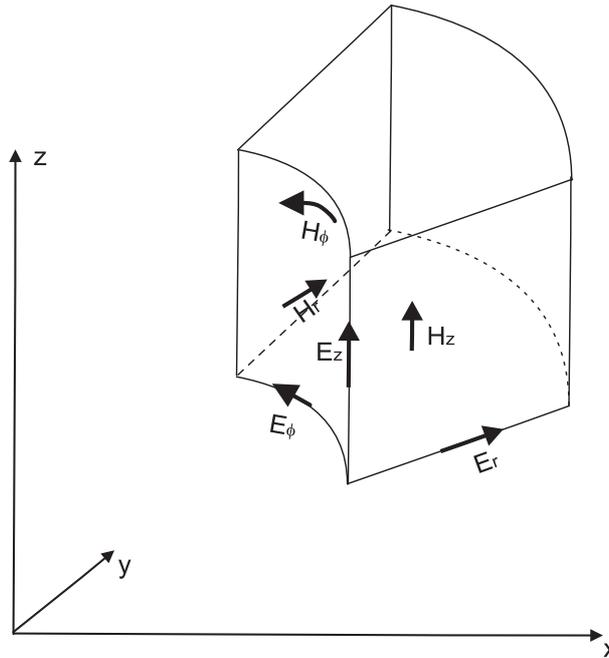


FIG. 2.1 – Cellule de Yee en coordonnées cylindrique

La figure 2.1 montre la répartition en coordonnées cylindriques des composantes des champs électrique et magnétique dans la cellule de Yee. Il est à remarquer qu'après exploitation de la symétrie cylindrique, la cellule de Yee 3D devient 2D voir 1D.

2.2.1 Développement en séries de Fourier des champs

Pour les systèmes optiques à symétrie de révolution, la dépendance azimutale en (ϕ) des champs \vec{E} et \vec{H} peut être développée en séries de Fourier comme suit :

$$\vec{E}(r, \phi, z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} (\vec{e}_{\mu}(r, z, t)\cos(m\phi) + \vec{e}_{\nu}(r, z, t)\sin(m\phi)) \quad (2.2a)$$

$$\vec{H}(r, \phi, z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} (\vec{h}_{\mu}(r, z, t)\cos(m\phi) + \vec{h}_{\nu}(r, z, t)\sin(m\phi)) \quad (2.2b)$$

m est le nombre de mode, μ et ν dénotent respectivement les dépendances en cosinus et en sinus des coefficients de Fourier. En injectant les équations 2.2a et 2.2b dans le système d'équations 2.1, on obtient pour m donné :

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial e_{r\mu}}{\partial t} \cos(m\phi) + \epsilon \frac{\partial e_{r\nu}}{\partial t} \sin(m\phi) = & -\frac{m}{r} h_{z\mu} \sin(m\phi) + \frac{m}{r} h_{z\nu} \cos(m\phi) - \frac{\partial h_{\phi\mu}}{\partial z} \cos(m\phi) \\ & - \frac{\partial h_{\phi\nu}}{\partial z} \sin(m\phi) \end{aligned} \quad (2.3a)$$

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial e_{\phi\mu}}{\partial t} \cos(m\phi) + \epsilon \frac{\partial e_{\phi\nu}}{\partial t} \sin(m\phi) = & \frac{\partial h_{r\mu}}{\partial z} \cos(m\phi) + \frac{\partial h_{r\nu}}{\partial z} \sin(m\phi) - \frac{\partial h_{z\mu}}{\partial r} \cos(m\phi) - \\ & \frac{\partial h_{z\nu}}{\partial r} \sin(m\phi) \end{aligned} \quad (2.3b)$$

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial e_{z\mu}}{\partial t} \cos(m\phi) + \epsilon \frac{\partial e_{z\nu}}{\partial t} \sin(m\phi) = & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rh_{\phi\mu})}{\partial r} \cos(m\phi) + \frac{\partial(rh_{\phi\nu})}{\partial r} \sin(m\phi) \right) + \frac{m}{r} h_{r\mu} \sin(m\phi) \\ & - \frac{m}{r} h_{r\nu} \cos(m\phi) \end{aligned} \quad (2.3c)$$

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial h_{r\mu}}{\partial t} \cos(m\phi) - \mu \frac{\partial h_{r\nu}}{\partial t} \sin(m\phi) = & -\frac{m}{r} e_{z\mu} \sin(m\phi) + \frac{m}{r} e_{z\nu} \cos(m\phi) - \frac{\partial e_{\phi\mu}}{\partial z} \cos(m\phi) \\ & - \frac{\partial e_{\phi\nu}}{\partial z} \sin(m\phi) \end{aligned} \quad (2.3d)$$

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial h_{\phi\mu}}{\partial t} \cos(m\phi) - \mu \frac{\partial h_{\phi\nu}}{\partial t} \sin(m\phi) = & \frac{\partial e_{r\mu}}{\partial z} \cos(m\phi) + \frac{\partial e_{r\nu}}{\partial z} \sin(m\phi) - \frac{\partial e_{z\mu}}{\partial r} \cos(m\phi) \\ & - \frac{\partial e_{z\nu}}{\partial r} \sin(m\phi) \end{aligned} \quad (2.3e)$$

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial h_{z\mu}}{\partial t} \cos(m\phi) - \mu \frac{\partial h_{z\nu}}{\partial t} \sin(m\phi) = & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(re_{\phi\mu})}{\partial r} \cos(m\phi) + \frac{\partial(re_{\phi\nu})}{\partial r} \sin(m\phi) \right) + \frac{m}{r} e_{r\mu} \sin(m\phi) \\ & - \frac{m}{r} e_{r\nu} \cos(m\phi) \end{aligned} \quad (2.3f)$$

De ce système, on en déduit :

$$\epsilon \frac{\partial e_{r\nu}}{\partial t} = -\frac{m}{r} h_{z\mu} - \frac{\partial h_{\phi\nu}}{\partial z} \quad (2.4a)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{\phi\mu}}{\partial t} = \frac{\partial h_{r\mu}}{\partial z} - \frac{\partial h_{z\mu}}{\partial r} \quad (2.4b)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{z\nu}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial (r h_{\phi\nu})}{\partial r} + \frac{m}{r} h_{r\mu} \quad (2.4c)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{r\mu}}{\partial t} = \frac{m}{r} e_{z\nu} - \frac{\partial e_{\phi\mu}}{\partial z} \quad (2.4d)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{\phi\nu}}{\partial t} = \frac{\partial e_{r\nu}}{\partial z} - \frac{\partial e_{z\nu}}{\partial r} \quad (2.4e)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{z\mu}}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial (r e_{\phi\mu})}{\partial r} \right) - \frac{m}{r} e_{r\nu} \quad (2.4f)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{r\mu}}{\partial t} = \frac{m}{r} h_{z\nu} - \frac{\partial h_{\phi\mu}}{\partial z} \quad (2.5a)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{\phi\nu}}{\partial t} = \frac{\partial h_{r\nu}}{\partial z} - \frac{\partial h_{z\nu}}{\partial r} \quad (2.5b)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{z\mu}}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial (r h_{\phi\mu})}{\partial r} \right) - \frac{m}{r} h_{r\nu} \quad (2.5c)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{r\nu}}{\partial t} = -\frac{m}{r} e_{z\mu} - \frac{\partial e_{\phi\nu}}{\partial z} \quad (2.5d)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{\phi\mu}}{\partial t} = \frac{\partial e_{r\mu}}{\partial z} - \frac{\partial e_{z\mu}}{\partial r} \quad (2.5e)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{z\nu}}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial (r e_{\phi\nu})}{\partial r} \right) + \frac{m}{r} e_{r\mu} \quad (2.5f)$$

Il est à remarquer que les composantes des champs décrites dans le système (2.5) correspondent à celles décrites dans le système (2.4) pour un angle $\phi = 90^\circ$, et que ces deux systèmes d'équations restent indépendants dans le cas d'un milieu isotrope étudié. Par conséquent, nous avons choisi de traiter seulement le deuxième système d'équations, tout en omettant les indices μ et ν .

$$\epsilon \frac{\partial e_r}{\partial t} = \frac{m}{r} h_z - \frac{\partial h_\phi}{\partial z} \quad (2.6a)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_\phi}{\partial t} = \frac{\partial h_r}{\partial z} - \frac{\partial h_z}{\partial r} \quad (2.6b)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rh_\phi)}{\partial r} \right) - \frac{m}{r} h_r \quad (2.6c)$$

$$-\mu \frac{\partial h_r}{\partial t} = -\frac{m}{r} e_z - \frac{\partial e_\phi}{\partial z} \quad (2.6d)$$

$$-\mu \frac{\partial h_\phi}{\partial t} = \frac{\partial e_r}{\partial z} - \frac{\partial e_z}{\partial r} \quad (2.6e)$$

$$-\mu \frac{\partial h_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial(re_\phi)}{\partial r} + \frac{m}{r} e_r \quad (2.6f)$$

2.3 Equations aux différences centrées

L'approximation aux différences centrées des dérivées partielles spatiales temporelles, figurant dans les équations précédentes, nous conduit :

$$e_r^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2) = e_r^{n-1/2}(i+1/2, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{m}{(i+1/2)\Delta r} h_z^n(i+1/2) + \frac{1}{\Delta z} (h_\phi^n(i+1/2, k) - h_\phi^n(i+1/2, k+1)) \right] \quad (2.7a)$$

$$e_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) = e_\phi^{n-1/2}(i, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{h_z^n(i-1/2, k+1/2) - h_z^n(i+1/2, k+1/2)}{\Delta r} + \frac{1}{\Delta z} (h_r^n(i, k+1) - h_r^n(i, k)) \right] \quad (2.7b)$$

$$e_z^{n+1/2}(i, k) = e_z^{n-1/2}(i, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon i \Delta r} \left[(i+1/2)\Delta r h_\phi^n(i+1/2, k) - (i-1/2)\Delta r h_\phi^n(i-1/2, k) - m h_r^n(i, k) \right] \quad (2.7c)$$

$$h_r^{n+1}(i, k) = h_r^n(i, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{m}{i\Delta r} e_z^{n+1/2}(i, k) + \frac{1}{\Delta z} (e_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) - e_\phi^{n+1/2}(i, k-1/2)) \right] \quad (2.7d)$$

$$h_\phi^{n+1}(i+1/2, k) = h_\phi^n(i+1/2, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{e_z^{n+1/2}(i+1, k) - e_z^{n+1/2}(i, k)}{\Delta r} + \frac{1}{\Delta z} (e_r^{n+1/2}(i+1/2, k-1/2) - e_r^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2)) \right] \quad (2.7e)$$

$$h_z^{n+1}(i+1/2, k+1/2) = h_z^n(i+1/2, k+1/2) \frac{\Delta t}{(i+1/2)\Delta r \mu} \left[(i+1)\Delta r e_\phi^{n+1/2}(i+1, k+1/2) - i\Delta r e_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) + m e_r^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2) \right] \quad (2.7f)$$

Sur la figure 2.2, sont indiquées les positions spatiales de calcul des champs. Sur l'axe de symétrie z , on remarque que les composantes e_ϕ , e_z et h_r ne peuvent pas être calculées par les équations discrétisées précédemment. Leurs mises à jour sur l'axe z nécessitent un traitement particulier.

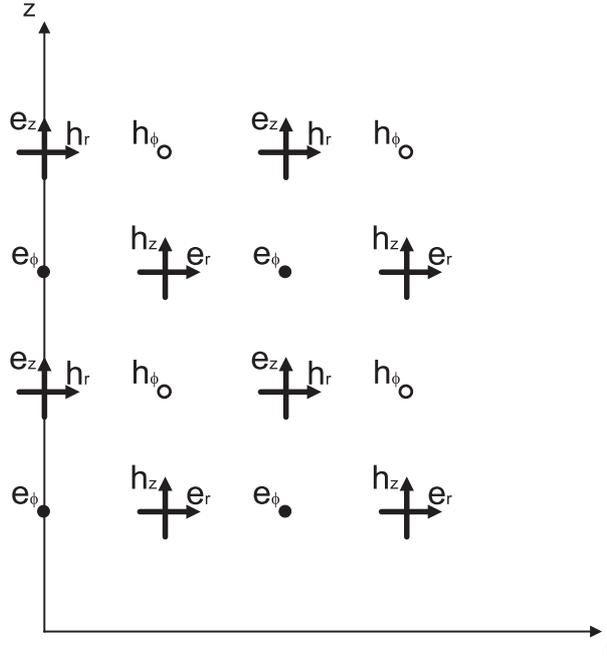


FIG. 2.2 – Distribution spatiale des champs dans le domaine de calcul BOR-FDTD

2.3.1 Equations aux différences centrées sur l'axe de symétrie

Sur l'axe z ($r = 0$), les composantes e_z , e_ϕ et h_r sont données comme suit :

Calcul de e_ϕ :

$$m = 1;$$

$$e_\phi^{n+1/2}(0, k + 1/2) = e_\phi^{n-1/2}(0, k + 1/2) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[-\frac{2}{\Delta r} h_z^n(1/2, k + 1/2) + \frac{1}{\Delta z} (h_r^n(0, k + 1) - h_r^n(0, k)) \right]$$

$$m \neq 1;$$

$$e_\phi^{n+1/2}(0, k + 1/2) = 0$$

Calcul de e_z :

$$m = 0;$$

$$e_z^{n+1/2}(0, k) = e_z^{n-1/2}(0, k) + \frac{4\Delta t}{\epsilon\Delta r} h_\phi^n(1/2, k)$$

$$m > 0;$$

$$e_z^{n+1/2}(0, k) = 0$$

Calcul de h_r :

$$\begin{aligned}
 m &= 1; \\
 h_r^{n+1}(0, k) &= h_r^n(0, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{1}{\Delta r} e_z^{n+1/2}(1, k) + \frac{1}{\Delta z} (e_\phi^{n+1/2}(0, k + 1/2) - e_\phi^{n+1/2}(0, k - 1/2)) \right] \\
 m &\neq 1; \\
 h_r^{n+1}(0, k) &= 0
 \end{aligned}$$

Il est à rappeler que le schéma de Yee est explicite et que pour assurer sa stabilité, il faut que le critère suivant soit satisfait [11] :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta r}{sc}$$

avec $s = m + 1$ pour $m > 0$ et $s = \sqrt{2}$ pour $m = 0$. c est la vitesse de la lumière dans le vide.

2.3.2 Séparation des modes : Modes radial et orthoradial

Pour $m=0$, le système 2.6 peut se séparer en deux systèmes indépendants, l'un décrivant le mode radial et l'autre le mode orthoradial. Notons qu'on peut laisser et coder directement le système précédent sans le séparer à condition de bien exciter initialement le mode que l'on veut étudier (radial ou orthoradial). De plus, l'espace mémoire requis dans ce cas est plus grand. Pour ces raisons, les deux modes radial et orthoradial sont étudiés séparément.

Mode radial

Ce mode est régi par les trois équations de mise à jour des champs e_r, e_z et h_ϕ . Ces dernières discrétisées aux différences centrées s'écrivent :

$$e_r^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2) = e_r^{n-1/2}(i+1/2, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{1}{\Delta z} (h_\phi^n(i+1/2, k) - h_\phi^n(i+1/2, k+1)) \right] \quad (2.8a)$$

$$e_z^{n+1/2}(i, k) = e_z^{n-1/2}(i, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon i \Delta r} \left[(i+1/2) \Delta r h_\phi^n(i+1/2, k) - (i-1/2) \Delta r h_\phi^n(i-1/2, k) \right] \quad (2.8b)$$

$$h_\phi^{n+1}(i+1/2, k) = h_\phi^n(i+1/2, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{e_z^{n+1/2}(i+1, k) - e_z^{n+1/2}(i, k)}{\Delta r} + \frac{1}{\Delta z} (e_r^{n+1/2}(i+1/2, k-1/2) - e_r^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2)) \right] \quad (2.8c)$$

Mode orthoradial :

Ce mode est décrit par les trois autres équations de calcul des champs e_ϕ, h_r et h_z . Elles sont données comme suit :

$$e_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) = e_\phi^{n-1/2}(i, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{h_z^n(i-1/2, k+1/2) - h_z^n(i+1/2, k+1/2)}{\Delta r} + \frac{1}{\Delta z} (h_r^n(i, k+1) - h_r^n(i, k)) \right] \quad (2.9a)$$

$$h_r^{n+1}(i, k) = h_r^n(i, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{1}{\Delta z} (e_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) - e_\phi^{n+1/2}(i, k-1/2)) \right] \quad (2.9b)$$

$$h_z^{n+1}(i+1/2, k+1/2) = h_z^n(i+1/2, k+1/2) \frac{\Delta t}{\mu(i+1/2)\Delta r} \left[(i+1) \Delta r e_\phi^{n+1/2}(i+1, k+1/2) - i \Delta r e_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) \right] \quad (2.9c)$$

2.3.3 Cas hors plan

Pour les structures guidées suivant la direction z , les champs électrique et magnétique peuvent être écrits comme suit :

$$\vec{e}(r, \phi, z, t) = \vec{e}_0(r, \phi, t) \exp(ik_z z) \quad (2.10a)$$

$$\vec{h}(r, \phi, z, t) = \vec{h}_0(r, \phi, t) \exp(ik_z z) \quad (2.10b)$$

En remplaçant ces deux dernières équations dans le système à discrétiser 2.6, on arrive :

$$\epsilon \frac{\partial e_r}{\partial t} = \frac{m}{r} h_z - ik_z h_\phi \quad (2.11a)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_\phi}{\partial t} = ik_z h_r - \frac{\partial h_z}{\partial r} \quad (2.11b)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial (r h_\phi)}{\partial r} \right) - \frac{m}{r} h_r \quad (2.11c)$$

$$-\mu \frac{\partial h_r}{\partial t} = -\frac{m}{r} e_z - ik_z e_\phi \quad (2.11d)$$

$$-\mu \frac{\partial h_\phi}{\partial t} = ik_z e_r - \frac{\partial e_z}{\partial r} \quad (2.11e)$$

$$-\mu \frac{\partial h_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial (r e_\phi)}{\partial r} \right) + \frac{m}{r} e_r \quad (2.11f)$$

Les dérivées par rapport à z sont déterminées de manière analytique. Il ne reste alors à discrétiser parmi les variables spatiales que la variable r . Le calcul BOR-FDTD dans ce cas est 1D. Conformément au schéma de Yee, les composantes e_r , h_ϕ et h_z sont calculées en des points $(i + \frac{1}{2})\Delta r$. Par contre les composantes e_ϕ , e_z et h_r sont quant à elles calculées aux points $i\Delta r$. Dans le domaine temporel, les composantes électriques sont déterminées en des instants $(n + 1/2)\Delta t$ et celles magnétiques en $n\Delta t$. Δr et Δt sont respectivement le pas de discrétisation suivant r et le pas d'échantillonnage temporel, n et i étant des entiers quelconques. La discrétisation aux différences centrées des équations précédentes suivant le schéma de Yee nous amène au système suivant :

$$e_r^{n+1/2}(i + 1/2) = e_r^{n-1/2}(i + 1/2) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{m}{(i + 1/2)\Delta r} h_z^n(i + 1/2) - jk_z h_\phi^n(i + 1/2) \right] \quad (2.12a)$$

$$e_\phi^{n+1/2}(i) = e_\phi^{n-1/2}(i) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{h_z^n(i - 1/2) - h_z^n(i + 1/2)}{\Delta r} + jk_z h_r^n(i) \right] \quad (2.12b)$$

$$e_z^{n+1/2}(i) = e_z^{n-1/2}(i) + \frac{\Delta t}{\epsilon i \Delta r} \left[(i + 1/2)\Delta r h_\phi^n(i + 1/2) - (i - 1/2)\Delta r h_\phi^n(i - 1/2) - m h_r^n(i) \right] \quad (2.12c)$$

$$h_r^{n+1}(i) = h_r^n(i) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{m}{i \Delta r} e_z^{n+1/2}(i) + jk_z e_\phi^{n+1/2}(i) \right] \quad (2.12d)$$

$$h_\phi^{n+1}(i + 1/2) = h_\phi^n(i + 1/2) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{e_z^{n+1/2}(i + 1) - e_z^{n+1/2}(i)}{\Delta r} - jk_z e_r^{n+1/2}(i + 1/2) \right] \quad (2.12e)$$

$$h_z^{n+1}(i + 1/2) = h_z^n(i + 1/2) - \frac{\Delta t}{\mu(i + 1/2)\Delta r} \left[(i + 1)\Delta r e_\phi^{n+1/2}(i + 1) - i\Delta r e_\phi^{n+1/2}(i) + m e_r^{n+1/2}(i + 1/2) \right] \quad (2.12f)$$

Pour ces cas particuliers décrits précédemment, les équations de calcul des champs sur

l'axe de symétrie z se déduisent facilement de celles décrites dans le cas général.

2.4 Conditions d'absorption aux frontières

Ce type de conditions aux limites permet de décrire des systèmes ouverts, c'est à dire des systèmes dans lesquels les ondes qu'ils émettent ou réfléchissent se propagent à l'infini. En effet, l'espace mémoire limité des calculateurs impose aux utilisateurs de la FDTD de tronquer leur domaine de calcul. Aux limites du domaine tronqué, les champs électromagnétiques ne peuvent pas être calculées par les équations discrétisées précédemment. L'existence de frontières nécessite un traitement particulier pour empêcher que l'onde électromagnétique incidente sur ces "bords" ne se réfléchisse et revienne polluer le signal physique réel.

On distingue deux classes de méthodes pour résoudre les problèmes aux frontières :

- Les méthodes qui expriment le champ sur la frontière uniquement en fonction du champ déjà calculé à l'intérieur du domaine étudié. C'est le cas des conditions de Mur. Ces conditions sont très faciles à mettre en oeuvre. Par contre elles ne sont rigoureusement valables que pour les ondes arrivant à incidence normale à la limite du domaine, car des réflexions parasites apparaissent en incidence oblique.

- Les méthodes qui ajoutent autour du domaine d'étude une couche non forcément physique ne provoquant aucune réflexion et absorbant quasi totalement tout champ électromagnétique s'y propageant. C'est le cas des couches parfaitement adaptées de Berenger [14]. Dans ce travail, malgré la complexité de leur codage notre algorithme utilise ces conditions aux limites PML qui sont souvent présentées comme étant les plus performantes.

2.5 Couche parfaitement absorbante

La technique PML repose sur le principe d'adaptation d'impédance à l'interface entre deux milieux de même indice mais dont l'un est absorbant avec des conductivités électrique σ^e et magnétiques σ^m non nulles (voir figure 2.3). Cette condition d'adaptation s'écrit :

$$\frac{\sigma^e}{\epsilon} = \frac{\sigma^m}{\mu_0} \quad (2.13)$$

L'onde arrivant du milieu incident n'est pas réfléchi vers celui-ci et se trouve atténuée dans le milieu absorbant. Mais dans ce cas, l'adaptation d'impédance n'est possible qu'à

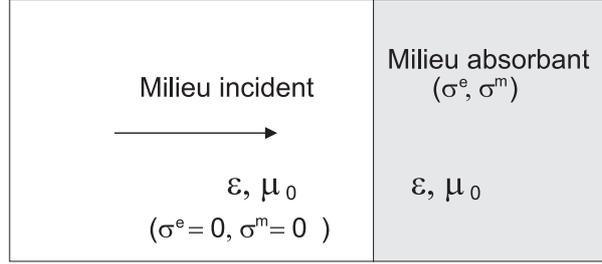


FIG. 2.3 – Principe d'adaptation d'impédance

incidence normale, des réflexions parasites à l'interface apparaissent dans le cas où l'onde arrive à incidence oblique. Pour y remédier, Berenger [14] a proposé un milieu absorbant artificiellement biaxe. L'absorption est non nulle suivant la normale à l'interface entre les deux milieux et elle est nulle suivant l'axe parallèle à l'interface (voir figure 2.4). Dans le milieu PML, l'onde plane incidente est décomposée fictivement en deux ondes :

1) Une onde se propageant sous incidence normale et vérifie l'équation 2.13. Cette onde est atténuée et absorbée par le milieu PML et ne subit qu'une très faible réflexion vers le milieu incident.

2) Une deuxième onde à incidence rasante qui ne subit aucune absorption dans le milieu PML. Cette onde, se propageant parallèlement à l'interface entre les deux milieux ne subit aucune réflexion et voit un milieu identique à celui de la fenêtre principale.

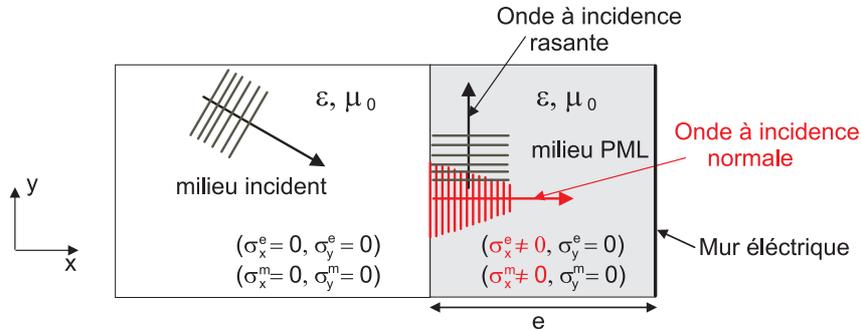


FIG. 2.4 – Principe de fonctionnement d'une PML

La forte absorption de l'onde dans le milieu PML, peut engendrer des réflexions parasites vers la structure étudiée. Ces réflexions, qui sont d'origine purement numérique, proviennent de la discontinuité induite par la discrétisation spatiale. En effet, la technique de discrétisation aux différences centrées est inadaptée dans le cas où les champs subissent de fortes variations. Une solution à ce problème est d'imposer une augmentation progressive de façon polynomiale de l'absorption σ dans la couche PML. Elle est donnée comme suit :

$$\sigma = \left(\frac{x_{pml}}{e}\right)^m \sigma_{max} \quad (2.14)$$

avec σ_{max} est la conductivité maximale, x_{pml} représente la profondeur dans la région PML mesurée à partir de l'interface, e désigne l'épaisseur de la couche PML et m dénote le degré de la loi polynpmiale qui est généralement égal 2.

L'absorption part de zéro à l'interface PML-domain de calcul et augmente pour atteindre sa valeur maximale au bord extérieur de la PML. La condition de mur électrique qui consiste à forcer à zéro les composantes tangentielles du champ électrique est appliquée sur le bord extérieur de la couche PML (voir figure 2.4).

Dans le milieu PML, les composantes électriques et magnétiques sont dédoublées, au total on obtient 12 composantes électromagnétiques qui sont décrites par :

$$\epsilon \frac{\partial e_{rz}}{\partial t} + \sigma_z^e e_{rz} = -\frac{\partial(h_{\phi r} + h_{\phi z})}{\partial z} \quad (2.15a)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{r\phi}}{\partial t} + \sigma_\phi^e e_{r\phi} = \frac{m}{r}(h_{zr} + h_{z\phi}) \quad (2.15b)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{\phi r}}{\partial t} + \sigma_r^e e_{\phi r} = -\frac{\partial(h_{zr} + h_{z\phi})}{\partial r} \quad (2.15c)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{\phi z}}{\partial t} + \sigma_z^e e_{\phi z} = \frac{\partial(h_{rz} + h_{r\phi})}{\partial z} \quad (2.15d)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{zr}}{\partial t} + \sigma_r^e e_{zr} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(r(h_{\phi z} + h_{\phi r}))}{\partial r} \right) \quad (2.15e)$$

$$\epsilon \frac{\partial e_{z\phi}}{\partial t} + \sigma_\phi^e e_{z\phi} = -\frac{m}{r}(h_{rz} + h_{r\phi}) \quad (2.15f)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{rz}}{\partial t} + \sigma_z^m h_{rz} = -\frac{\partial(e_{\phi z} + e_{\phi r})}{\partial z} \quad (2.15g)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{r\phi}}{\partial t} + \sigma_\phi^m h_{r\phi} = -\frac{m}{r}(e_{zr} + e_{z\phi}) \quad (2.15h)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{\phi r}}{\partial t} + \sigma_r^m h_{\phi r} = -\frac{\partial(e_{zr} + e_{z\phi})}{\partial r} \quad (2.15i)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{\phi z}}{\partial t} + \sigma_z^m h_{\phi z} = \frac{\partial(e_{rz} + e_{r\phi})}{\partial z} \quad (2.15j)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{zr}}{\partial t} + \sigma_r^m h_{zr} = \frac{1}{r} \frac{\partial(r(e_{\phi z} + e_{\phi r}))}{\partial r} \quad (2.15k)$$

$$-\mu \frac{\partial h_{z\phi}}{\partial t} + \sigma_\phi^m h_{z\phi} = \frac{m}{r}(e_{rz} + e_{r\phi}) \quad (2.15l)$$

Dans ce travail, la PML est implémentée en r et z comme le montre la figure 2.5.

Pour résoudre les équations précédentes dans le milieu PML, on les discrétise aux différences centrées dans l'espace et dans le temps. Prenons comme exemple l'équation 2.15a pour le calcul de e_{rz} :

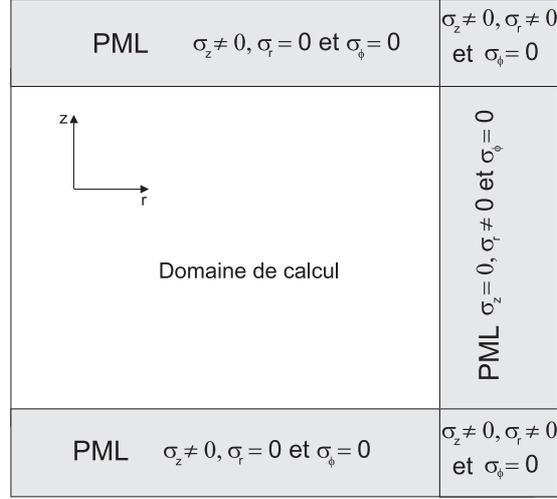


FIG. 2.5 – Domaine de calcul BOR-FDTD entouré de PML

$$\epsilon \frac{\partial e_{rz}}{\partial t} + \sigma_z^e e_{rz} = - \frac{\partial (h_{\phi r} + h_{\phi z})}{\partial z} \quad (2.16)$$

La discrétisation de cette équation nous amène :

$$\frac{\epsilon(e_{rz}^{n+1}(i, j) - e_{rz}^n(i, j))}{\Delta t} + \sigma_z^e \frac{(e_{rz}^{n+1}(i, j) + e_{rz}^n(i, j))}{2} = \quad (2.17)$$

$$- \frac{(h_{\phi r}^n(i, j) - h_{\phi r}^n(i, j - 1))}{\Delta z} - \frac{(h_{\phi z}^n(i, j) - h_{\phi z}^n(i, j - 1))}{\Delta z}$$

A l'instant $(n+1)$, la mise à jour de la composante e_{rz} est faite par l'équation suivante :

$$e_{rz}^{n+1}(i, j) = \frac{2\epsilon - \sigma_z^e \Delta t}{2\epsilon + \sigma_z^e \Delta t} e_{rz}^n(i, j) + \frac{2\Delta t}{\Delta z (2\epsilon + \sigma_z^e \Delta t)} (h_{\phi r}^n(i, j) - h_{\phi r}^n(i, j - 1) + \quad (2.18)$$

$$h_{\phi z}^n(i, j) - h_{\phi z}^n(i, j - 1))$$

Les autres équations sont discrétisées de la même manière.

2.6 Milieux dispersifs

Rappelons que la constante diélectrique des milieux dispersifs (plus particulièrement les métaux) peut être décrite soit par le modèle de Drude soit par le modèle de Drude-

Lorentz. Ces deux modèles, décrits dans le premier chapitre, sont adaptés dans le programme BOR-FDTD.

2.6.1 Intégration du modèle de Drude

Dans le milieu dispersif, les équations de calcul des composantes électriques font intervenir explicitement la fréquence. Le calcul direct de ces composantes par la BOR-FDTD à caractère temporel n'est pas envisageable. Comme dans le cas de la FDTD classique (voir chapitre 1), pour calculer les composantes électriques, on fait intervenir l'équation du milieu $\vec{d} = \epsilon(\omega)\vec{e}$. \vec{d} est le vecteur déplacement électrique. En remplaçant dans les équations 2.7a, 2.7b et 2.7c les composantes $\epsilon(\omega)\vec{e}$ par celles de \vec{d} , on arrive :

$$d_r^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2) = d_r^{n-1/2}(i+1/2, k+1/2) + \frac{m\Delta t}{(i+1/2)\Delta r} h_z^n(i+1/2) + \frac{\Delta t}{\Delta z} (h_\phi^n(i+1/2, k) - h_\phi^n(i+1/2, k+1)) \quad (2.19a)$$

$$d_\phi^{n+1/2}(i, k+1/2) = d_\phi^{n-1/2}(i, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\Delta r} (h_z^n(i-1/2, k+1/2) - h_z^n(i+1/2, k+1/2)) + \frac{\Delta t}{\Delta z} (h_r^n(i, k+1) - h_r^n(i, k)) \quad (2.19b)$$

$$d_z^{n+1/2}(i, k) = d_z^{n-1/2}(i, k) + \frac{\Delta t}{i\Delta r} [(i+1/2)\Delta r h_\phi^n(i+1/2, k) - (i-1/2)\Delta r h_\phi^n(i-1/2, k) - m h_r^n(i, k)] \quad (2.19c)$$

La correction des composantes \vec{d} sur l'axe z se fait de manière analogue à celle des composantes \vec{e} effectuées précédemment.

Les composantes du champ électrique sont déterminées en utilisant la relation :

$$\vec{d} = \epsilon(\omega)\vec{e} = \epsilon_0[1 - \omega_p^2/(\omega^2 + j\omega\Gamma_D)]\vec{e} \quad (2.20)$$

Pour passer au domaine temporel, on effectue une transformation de Fourier inverse sur la relation précédente comme suivant :

$$\frac{\partial^2 \vec{d}(t)}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial \vec{d}(t)}{\partial t} = \epsilon_0 \left[\frac{\partial^2 \vec{e}(t)}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial \vec{e}(t)}{\partial t} + \omega^2 \vec{e}(t) \right] \quad (2.21)$$

Les dérivées temporelles sont remplacées par des différences centrées. Un exemple de calcul de la composante e_r est donnée par l'équation discrétisée suivante :

$$\begin{aligned} \epsilon_0 e_r(t + \Delta t)[\omega_p^2 \Delta t^2 + \Gamma_D \Delta t + 2] = & -\epsilon_0 e_r(t - \Delta t)[\omega_p^2 \Delta t^2 - \Gamma_D \Delta t + 2] + 4\epsilon_0 e_r(t) \\ & + d_r(t + \Delta t)[\Gamma_D \Delta t + 2] - 4d_r(t) + d_r(t - \Delta t)[- \Gamma_D \Delta t + 2] \end{aligned} \quad (2.22)$$

Il est à noter que les équations pour le calcul de e_ϕ et e_z s'obtiennent de la même manière.

2.6.2 Intégration du modèle de Drude-Lorentz

Dans le cas du modèle de Drude-Lorentz (voir chapitre 1), les 3 équations de mise à jour des composantes électriques sont remplacées respectivement par les 3 systèmes d'équation suivant [15] :

$$\psi_{Dr}^n = C_D^\rho \psi_{Dr}^{n-1} + C_D^\delta E_r^{n-1/2} \quad (2.23a)$$

$$\psi_{Lr}^n = C_L^\rho \psi_{Lr}^{n-1} + C_L^\delta E_r^{n-1/2} \quad (2.23b)$$

$$\begin{aligned} E_r^{n+1/2} = & C^\alpha E_r^{n-1/2} + C^\beta \left[\frac{m}{(i+1/2)\Delta r} h_z^n(i+1/2) + \right. \\ & \left. \frac{1}{\Delta z} (h_\phi^n(i+1/2, k) - h_\phi^n(i+1/2, k+1)) \right] + C^\gamma Re(\psi_{Dr}^n + \psi_{Lr}^n) \end{aligned} \quad (2.23c)$$

$$\psi_{D\phi}^n = C_D^\rho \psi_{D\phi}^{n-1} + C_D^\delta E_\phi^{n-1/2} \quad (2.24a)$$

$$\psi_{L\phi}^n = C_L^\rho \psi_{L\phi}^{n-1} + C_L^\delta E_\phi^{n-1/2} \quad (2.24b)$$

$$\begin{aligned} E_\phi^{n+1/2} = & C^\alpha E_\phi^{n-1/2} + C^\beta \left[\frac{1}{\Delta r} (h_z^n(i-1/2, k+1/2) - h_z^n(i+1/2, k+1/2)) + \right. \\ & \left. \frac{1}{\Delta z} (h_r^n(i, k+1) - h_r^n(i, k)) \right] + C^\gamma Re(\psi_{D\phi}^n + \psi_{L\phi}^n) \end{aligned} \quad (2.24c)$$

$$\psi_{Dz}^n = C_D^\rho \psi_{Dz}^{n-1} + C_D^\delta E_z^{n-1/2} \quad (2.25a)$$

$$\psi_{Lz}^n = C_L^\rho \psi_{Lz}^{n-1} + C_L^\delta E_z^{n-1/2} \quad (2.25b)$$

$$\begin{aligned} E_z^{n+1/2} = & C^\alpha E_z^{n-1/2} + C^\beta \left[\frac{1}{i\Delta r} ((i+1/2)\Delta r h_\phi^n(i+1/2, k) - \right. \\ & \left. (i-1/2)\Delta r h_\phi^n(i-1/2, k) - m h_r^n(i, k)) \right] + C^\gamma Re(\psi_{Dz}^n + \psi_{Lz}^n) \end{aligned} \quad (2.25c)$$

Les constantes $C^\alpha, C^\beta, C^\gamma, C_D^\rho, C_D^\delta, C_L^\rho$, et C_L^δ , qui dépendent des paramètres figurant dans la fonction diélectrique Drude-Lorentz, sont les mêmes que celles définies dans le chapitre 1 (paragraphe 1.5.5)

Pour les cas particuliers, (cas off-plane, modes radiale et orthoradial), l'intégration des modèles de Drude et de Drude-Lorentz à la BOR-FDTD se fait de la même manière. De même, la correction sur l'axe de symétrie dans le métal peut être facilement déduite de celle effectuée dans le cas diélectrique.

2.7 Applications aux guides d'ondes sub-longueurs d'ondes à symétrie de révolution

Le premier test consiste à retrouver les fréquences propres (modes guidés) de guides cylindriques et coaxiaux en métal parfait. Les structures à symétrie de révolution considérées sont présentées sur la figure 2.6. Un guide d'onde métallique cylindrique de rayon R et un guide métallique coaxial de rayon intérieur R_i et de rayon extérieur R_e .

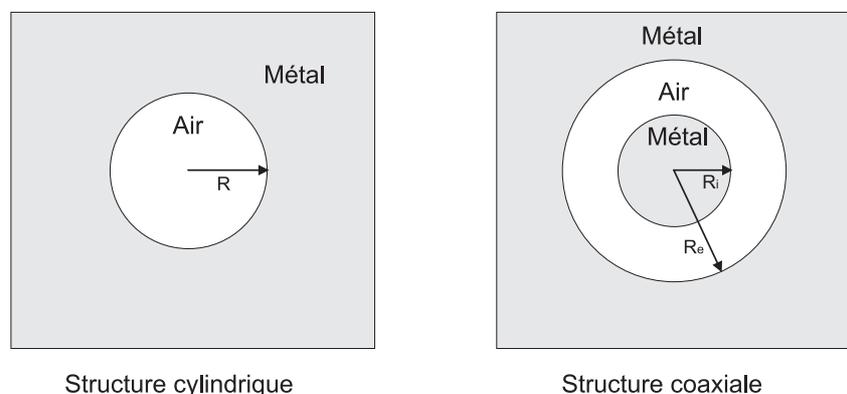


FIG. 2.6 – Structures guidantes à symétrie de révolution

2.7.1 Guides d'ondes en métal parfait : Tests de validation

Pour valider notre code BOR-FDTD, nous avons commencé par étudier les structures faites en métal parfait dont les propriétés de guidage sont connues analytiquement. Les longueurs d'ondes de coupure et les indices effectifs des premiers modes de ces guides sont calculés par la BOR-FDTD et les résultats sont confrontés à la théorie.

Guide d'onde cylindrique en métal parfait :

Les modes du guide d'onde cylindrique considérés sont les deux premiers modes ayant les plus grandes longueurs d'ondes de coupure. Rappelons que le mode fondamental de ce guide est transverse électrique TE_{11} , le deuxième est transverse magnétique TM_{01} .

- Calcul des longueurs d'ondes de coupure :

En théorie, les longueurs d'ondes de coupures des modes TE_{11} et TM_{01} d'un guide d'onde cylindrique en métal parfait (MP) sont donnés respectivement par [16] :

$$\lambda_{TE_{11}}^c = \frac{2\pi R}{1.841} \quad (2.26)$$

$$\lambda_{TM_{01}}^c = \frac{2\pi R}{2.405} \quad (2.27)$$

Pour la détermination de ces longueurs d'ondes de coupure, les guides d'ondes sont considérés infinis suivant la direction z . Le code BOR-FDTD travaillant hors plan (off-plane) est utilisé. Dans ce cas, seule la variable r est discrétisée, ce qui implique un calcul 1D permettant un maillage très fin.

Les étapes de calcul des λ_c sont comme suit :

- Fixer k_z à zéro (la longueur d'onde de coupure correspond à $k_z = 0$).
- Injecter un signal dans la structure.
- Calcul des composantes électriques et magnétiques dans le temps et dans tout l'espace.
- Passage au domaine fréquentiel par une transformation de Fourier intégrée dans le programme BOR-FDTD. La transformée de Fourier est effectuée sur les composantes électromagnétiques en un nombre limité de points spatiaux pris aléatoirement.

Le calcul BOR-FDTD est laissé évoluer dans le temps jusqu'à ce qu'il se stabilise. Les fréquences non propres à la structure disparaissent dans le temps.

Après stabilisation du calcul BOR-FDTD, les pics de l'intensité spectrales obtenus correspondent aux fréquences propres de la structure, donc aux fréquences de coupures à $k_z = 0$. Un exemple de calcul de longueurs d'ondes de coupure des deux premiers modes TE_{11} et TM_{01} d'un guide cylindrique en MP de rayon $R = 120nm$ est montré sur la figure

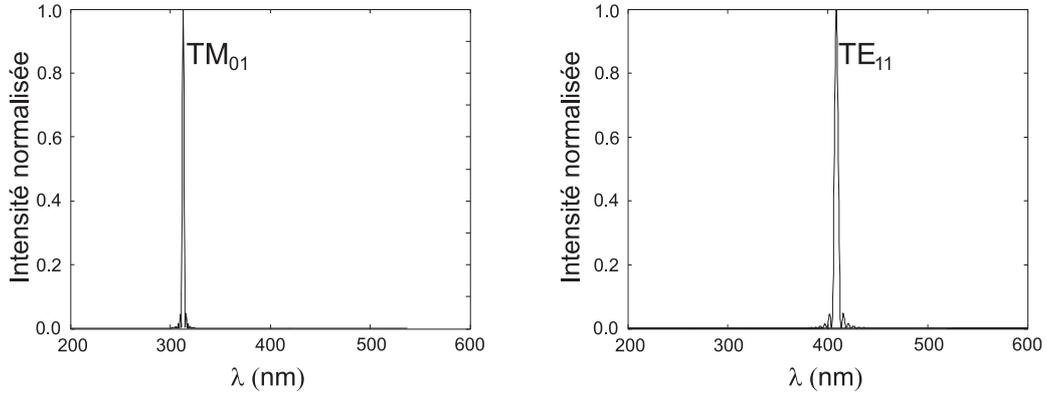


FIG. 2.7 – Intensités normalisées d'un guide d'onde métallique cylindrique, modes fondamentaux TE_{11} et TM_{01}

2.7. Pour un rayon $R = 120nm$, les calculs analytiques nous donnent $\lambda_c^{TE_{11}} = 409.5nm$ et $\lambda_c^{TM_{01}} = 313.5nm$. Sur la figure 2.7 obtenue par des calculs BOR-FDTD, $\lambda_c^{TE_{11}} = 408.8nm$ et $\lambda_c^{TM_{01}} = 313.1nm$. Dans les deux cas, les erreurs relatives commises sont de 0.17 % pour le calcul de $\lambda_c^{TE_{11}}$ et de 0.13 % pour le calcul de $\lambda_c^{TM_{01}}$. Le pas de discrétisation spatial utilisé est $\Delta r = 0.15nm$.

Les variations des longueurs d'ondes de coupure des deux modes TE_{11} et TM_{01} en fonction du rayon du cylindre en MP sont présentées sur la figure 2.8. Conformément à la théorie, les longueurs d'onde de coupure augmentent lorsque le rayon R augmente. Notons que nos résultats sont conformes avec ceux prédits par la théorie (équations 2.26 et 2.27).

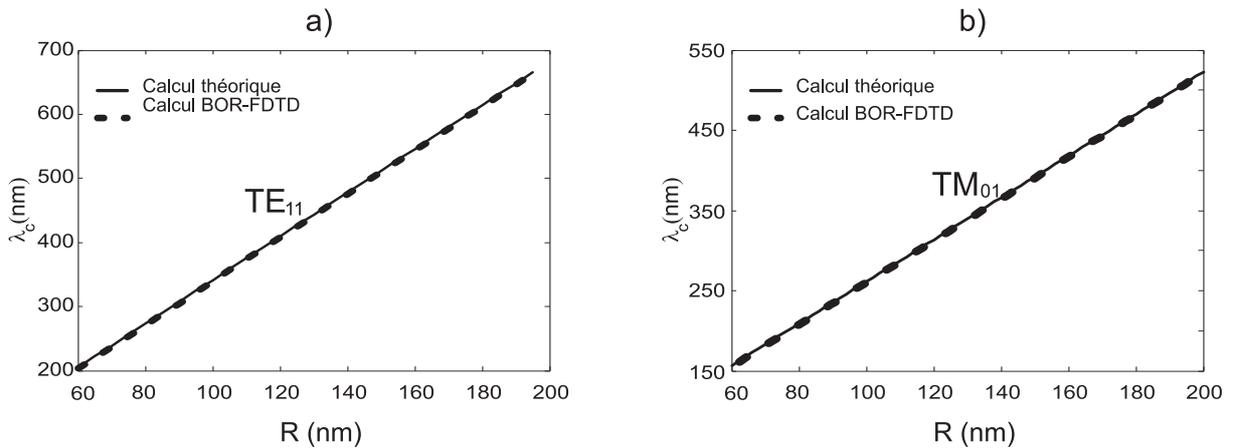


FIG. 2.8 – Longueurs d'ondes de coupures des premiers modes d'un guide d'onde cylindrique en métal parfait en fonction du rayon R . a) Mode TE_{11} ; b) Mode TM_{01}

- Calcul des indices effectifs :

Les indices effectifs des modes propres d'un guide d'onde en métal parfait sont donnés théoriquement comme suit :

$$n_{eff}^{MP} = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{\lambda_c^2}} \quad (2.28)$$

Les étapes à suivre pour le calcul FDTD de l'indice effectif sont semblables aux précédentes. La seule différence est que dans ce cas la constante de propagation k_z est non nulle. On donne une valeur à k_z , puis on refait exactement les mêmes étapes que précédemment. L'indice effectif est donné par la relation $k_z = n_{eff} \frac{2\pi}{\lambda}$, avec λ est la longueur d'onde propre de la structure obtenue par le calcul BOR-FDTD. Sur la figure 2.9, sont présentées les parties réelles des indices effectifs des deux modes TE_{11} et TM_{01} d'un guide cylindrique en métal parfait de rayon $R = 100nm$. Nos calculs numériques sont en accord avec ceux de la théorie.

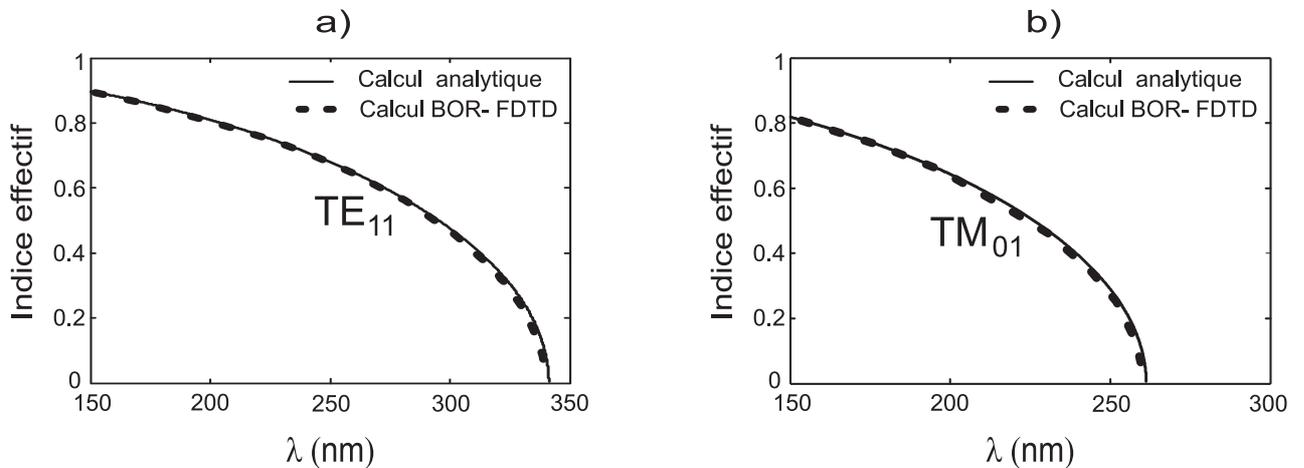


FIG. 2.9 – Parties réelles des l'indices effectifs des premiers modes d'un guide d'onde cylindrique en métal parfait de rayon $R = 100nm$. a) Mode TE_{11} ; b) Mode TM_{01} .

Guide d'onde coaxial en métal parfait

Le mode fondamental d'un guide d'onde coaxial est transverse électromagnétique TEM_0 qui est sans fréquence de coupure, le deuxième est transverse électrique TE_{11} . Les autres modes secondaires possèdent des longueurs d'onde de coupure très inférieures à celle du mode TE_{11} . Théoriquement, les longueurs d'ondes de coupure des modes TE_{mn} d'un guide coaxial en métal parfait sont obtenues en résolvant l'équation suivante :

$$J_m(\alpha_{mn})Y_m\left(\frac{R_i\alpha_{mn}}{R_e}\right) - Y_m(\alpha_{mn})J_m\left(\frac{R_i\alpha_{mn}}{R_e}\right) = 0 \quad (2.29)$$

avec J_m et Y_m sont respectivement les fonctions de Bessel et de Neumann et $\alpha_{mn} = \frac{2\pi R_e}{\lambda_c^{TE_{mn}}}$.

Pour le premier mode TE_{11} , la longueur d'onde de coupure est généralement approximée par :

$$\lambda_{TE_{11}}^c \simeq \pi(R_i + R_e) \quad (2.30)$$

Sur la figure 2.10, on montre la variation de la longueur d'onde de coupure du mode TE_{11} en fonction du rayon extérieur du coax. Le rayon intérieur est fixé à $R_i = 50nm$.

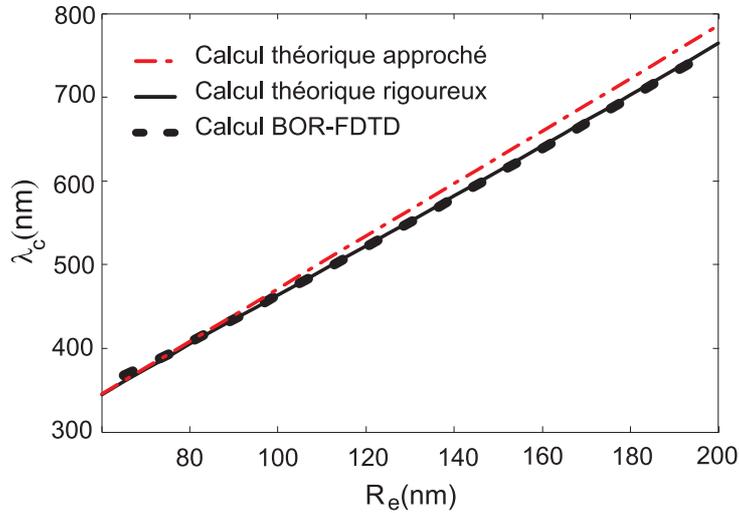


FIG. 2.10 – Longueurs d'ondes de coupure du mode TE_{11} d'un guide d'onde coaxial en métal parfait en fonction du rayon extérieur du coax, le rayon intérieur est $R_i = 50nm$.

On remarque sur la figure 2.10 que nos calculs présentent un léger décalage par rapport aux calculs approchés par l'équation 2.30, par contre ils se superposent avec les calculs analytiques rigoureux obtenus par l'équation 2.29, ce qui valide notre méthode.

La figure 2.11 présente la partie réelle de l'indice effectif du mode TE_{11} d'un guide coaxial à métal parfait. Là encore nos résultats restent en très bon accord avec la théorie (équation 2.28).

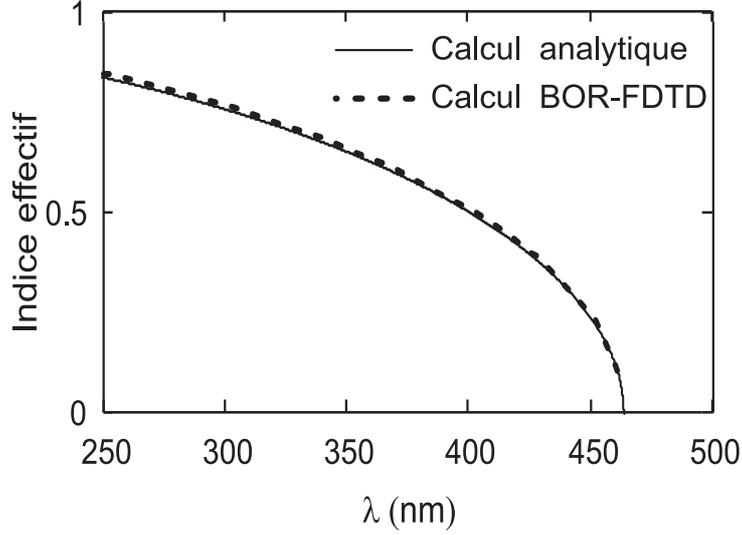


FIG. 2.11 – Partie réelle de l'indice effectif du mode TE_{11} d'un guide coaxial en métal parfait de rayons intérieur $R_i = 50nm$ et extérieur $R_e = 100nm$.

2.7.2 Guides d'ondes sub-longueurs d'ondes en métal réel :

Dans la gamme optique, la dispersion des métaux ne peut plus être négligée. Les guides d'ondes en métal parfait, étudiés précédemment, sont remplacés par des guides d'ondes en métal réel tels que l'argent et l'or. Les paramètres figurant dans l'expression de Drude et Drude-Lorentz de la fonction diélectrique, utilisés, correspondent aux valeurs expérimentales de Johnson et Chrysty [17]

Rappelons que dans le cas général (métal avec perte) l'indice effectif est complexe $n_{eff} = n'_{eff} + jn''_{eff}$. Dans le cas où le métal est considéré comme parfaitement conducteur, l'indice effectif des modes propagatifs est purement réel et celui des modes non propagatifs (modes évanescents) est purement imaginaire. Dans le cas du métal réel avec faible perte, la partie imaginaire reste très inférieure devant la partie réelle, et cette dernière s'annule à la longueur d'onde de coupure. La détermination BOR-FDTD des parties réelles des indices effectifs et des longueurs d'ondes de coupure des modes propres des guides faits en métal réel s'effectue de la même façon que précédemment (métal parfait). Le calcul des parties imaginaires des indices effectifs sera détaillé en étudiant les pertes dans le métal.

Les premiers calculs consistent à déterminer les indices effectifs des premiers modes des deux guides d'ondes cylindrique et coaxial faits en argent. Sur la figure 2.12, les résultats de ces calculs sont présentés et comparés aux indices effectifs dans le cas où les deux guides sont en métal parfait.

On constate que les indices effectifs des premiers modes des structures en argent sont toujours supérieurs à ceux des mêmes structures mais en métal parfait. En remplaçant le métal parfait par l'argent, la distribution des champs du mode fondamental et du deuxième

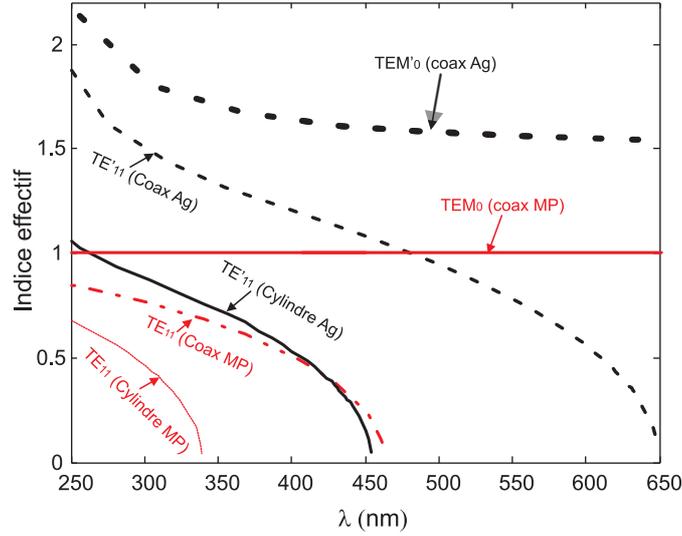


FIG. 2.12 – Parties réelles des indices effectifs des modes fondamentaux des guides d'ondes cylindrique et coaxial en argent et en métal parfait ; rayon du cylindre $R = 100nm$, rayon intérieur du coax $R_i = 50nm$ et rayon extérieur du coax $R_e = 100nm$.

mode de la structure coaxiale correspondent respectivement aux modes $m = 0$ et $m = 1$ [16]. Ces deux premiers modes ne sont pas purement transverse électromagnétique TEM et transverse électrique TE_{11} , leurs composantes E_z ne sont pas nulles, mais elles ont des valeurs qui restent très faibles comparées aux deux autres composantes, ces deux modes sont notés TEM'_0 et TE'_{11} . De même, pour le guide d'onde cylindrique en argent, le mode fondamental est noté TE'_{11} .

On remarque que l'indice effectif du mode TEM'_0 , qui est sans fréquence de coupure, du guide coaxial en argent est toujours supérieur à 1 et il présente une faible dispersion pour des longueurs d'ondes supérieures à $400nm$. Le mode TEM'_0 ayant une symétrie de révolution ne peut pas être excité à l'aide d'une onde plane polarisée linéairement. L'intégrale de recouvrement entre cette dernière et le mode TEM'_0 est nulle tandis qu'il est maximal pour le mode TE'_{11} . Pour cette raison, dans la suite de ce travail, le mode TE'_{11} du guide coaxial sera considéré comme étant le mode fondamental.

Sur la figure 2.12, on constate que les longueurs d'ondes de coupure correspondant à $n_{eff} = 0$ des modes TE'_{11} des guides d'ondes en argent sont toujours supérieures à celles des modes TE_{11} des mêmes guides faits en métal parfait. Ces résultats sont similaires à ceux publiés récemment pour les cas des structures rectangulaires [18] et cylindriques [19]. On peut dire de manière générale que pour les structures guidantes en métal réel, les modes propagatifs possèdent des longueurs d'ondes de coupure supérieures à celles des mêmes modes des structures en métal parfait. Ce résultat explique la transmission exaltée obtenue à travers des films d'argent opaques percés par des ouvertures annulaires sublongueur d'onde [20]. Le shift des longueurs d'ondes de coupure vers le rouge dépend de la fréquence plasma du métal (w_p) et des paramètres géométriques du guide d'onde (les rayons). L'effet des paramètres liés aux pertes dans le métal tel que le paramètre Γ_D

figurant dans le modèle de Drude, est négligeable sur le shift des longueurs d'ondes de coupure des différents modes guidés ($k_z = 0$). L'effet des pertes se manifeste pendant la propagation, à k_z non nul.

Sur la figure 2.13 on présente les variations des longueurs d'ondes de coupures du mode fondamental des guides coaxial et cylindrique en argent et en métal parfait en fonction des rayons des deux structures. Nous constatons un phénomène nouveau qui est illustré sur la figure 2.13-b :

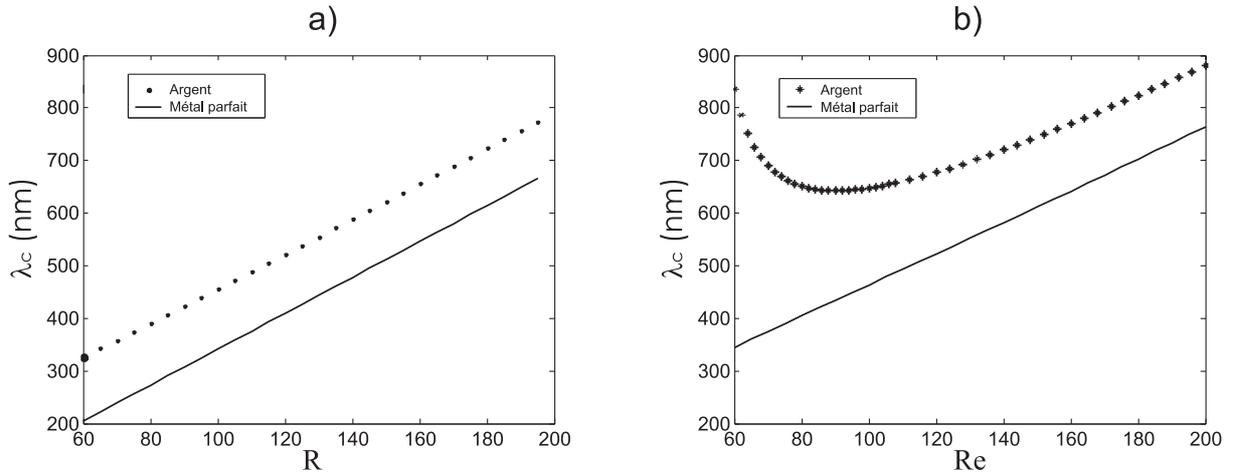


FIG. 2.13 – Longueurs d'ondes de coupures du mode fondamentale TE_{11} en fonctions des rayons des structures guidantes a) guide cylindrique et b) guide coaxial avec $R_i = 50nm$

1) Pour les guides d'ondes cylindriques en métal parfait et en argent (figure 2.13-a), les longueurs d'ondes de coupures augmentent linéairement avec le rayon. Les longueurs d'ondes de coupures du mode TE'_{11} de guide cylindrique en argent sont toujours supérieures à celles du mode TE_{11} de même guide mais en métal parfait. Nous avons ainsi reproduit les résultats publiés par Shin et al [19].

2) La variation de la longueur d'onde de coupure du mode TE_{11} de guide coaxial en métal parfait est aussi linéaire conformément à la relation théorique (2.30). Par contre pour le guide coaxial en argent, la variation de la longueur d'onde de coupure du mode TE'_{11} ne l'est pas et présente un comportement non usuel lorsque le rayon extérieur se rapproche du rayon intérieur. Lorsque le rayon extérieur diminue à partir de 200 nm, la longueur d'onde de coupure diminue pour atteindre une valeur minimale de (642nm) pour $R_e = 90nm$. Puis elle augmente lorsque R_e diminue et se rapproche du rayon intérieur R_i . Ce phénomène est à l'origine de la grande transmission obtenue à travers les structures à petites ouvertures annulaires (R_i proche de R_e), excitée par une lumière s'étalant sur une large gamme de fréquences [21].

En somme, il est important de noter que dans les deux cas étudiés, pour un même rayon extérieur, la longueur d'onde de coupure du mode TE'_{11} du guide d'ondes coaxial

est toujours supérieure à celle du mode fondamental de guide cylindrique. Cette longueur d'onde de coupure du mode TE'_{11} de guide d'ondes coaxial est aussi supérieur à celle du mode fondamental d'un guide rectangulaire ayant une ouverture de dimensions comparables au rayon extérieur du coax [16]. Notons aussi, que pour un rayon extérieur fixe du coax, on peut déplacer la longueur d'onde de coupure du mode TE'_{11} vers les grandes longueurs d'ondes en augmentant simplement le rayon intérieur de guide d'ondes coaxial.

2.7.3 Etude d'un guide d'onde coaxial sub-longueurs d'ondes

Comme mentionné précédemment, pour couvrir toute la gamme du visible, on peut faire déplacer les λ_c du mode TE'_{11} vers l'infrarouge en considérant un guide coaxial avec un espace inter-conducteur ($R_e - R_i$) très faibles (de l'ordre de $\lambda/150$). L'application associée à la figure 2.13-b est faite pour un guide d'ondes coaxial de rayon intérieur $R_i = 75nm$. Les cas du métal parfait, de l'argent et de l'or sont étudiés.

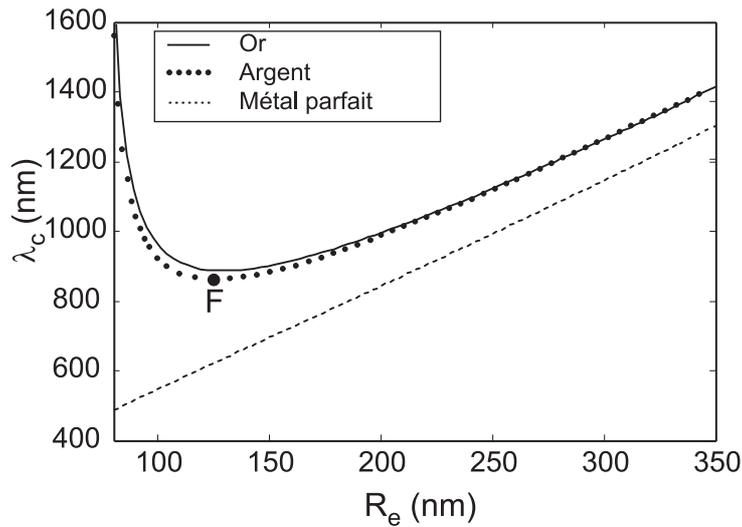


FIG. 2.14 – Longueurs d'ondes de coupure du premier mode TE'_{11} d'un guide coaxial en fonction de rayon extérieur R_e . Le rayon intérieur $R_i = 75nm$

On constate dans la figure 2.14, que dans les cas du métal réel (argent et or), le phénomène décrit précédemment (redshift) se reproduit. Le déplacement latéral vers les hautes longueurs d'onde de la longueur d'onde de coupure du mode guidé TE'_{11} est sensiblement plus importante dans le cas de l'or comparé à l'argent. Dans le cas de l'argent, la longueur d'onde de coupure minimale se situe au point F à $R_e = 125nm$ correspondant donc à une distance interconducteur de $R_e - R_i = 50 nm$. Dans le cas précédent (figure 2.13-b) où $R_i = 50nm$, la distance séparant les deux coax pour laquelle la longueur d'onde est minimale est $R_e - R_i = 40nm$. La position de ce minimum dépend probablement aussi de la valeur de la longueur d'onde de coupure en ce point.

Pour expliquer ce comportement des λ_c dans les métaux réels, nous avons étudié l'évolution des courbes de dispersion en fonction du rayon extérieur R_e , des modes ayant le nombre azimuthal $m = 1$. Sur la figure 2.15, nous présentons les courbes de dispersions du guide d'ondes en argent relatives aux quatre valeurs de R_e . On constate sur la figure 2.15-a que les modes d'ordre supérieur sont propagatifs et tendent asymptotiquement vers la ligne de lumière. Quant aux deux premiers modes TE'_{11} et TE'_{12} , ils coupent la ligne de lumière et tendent asymptotiquement vers $\omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$ qui est la fréquence des plasmons de surface à l'interface argent-air.

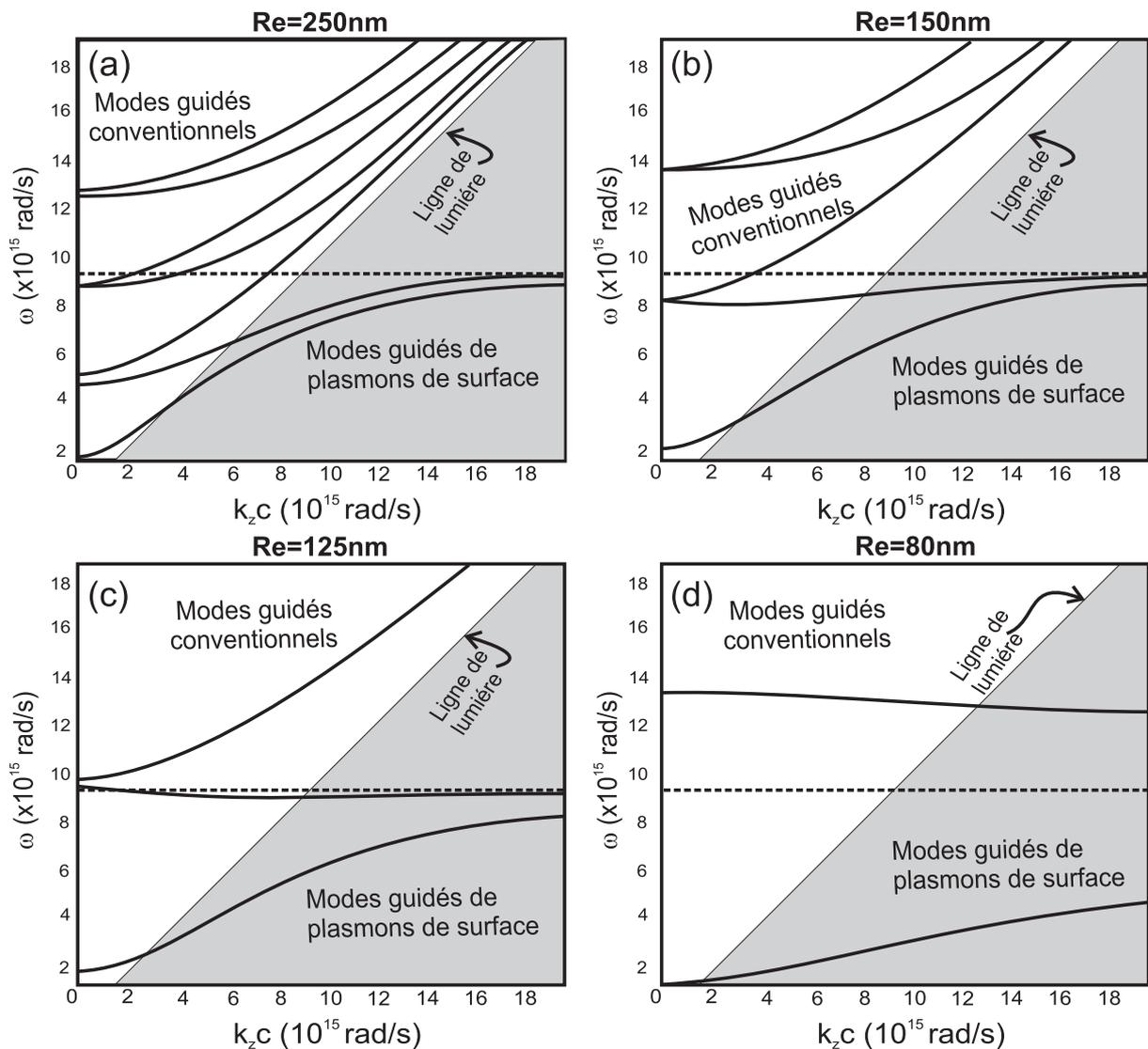


FIG. 2.15 – Courbes de dispersions du guide d'onde coaxial en argent pour quatre valeurs de R_e . Le rayon intérieur $R_i = 75nm$. Les modes présentés sont ceux pour lesquels $m = 1$.

En diminuant le rayon extérieur, on constate que les fréquences des modes propagatifs sont shiftées vers les hautes fréquences (voir figures 2.15-a, b et c). Ces modes n'apparaissent

plus sur la figure 2.15-d correspondant à $R_e = 80nm$. Quant au deuxième mode TE'_{12} , sa courbe de dispersion est aussi déplacée vers les hautes fréquences quand le rayon extérieur diminue. A $R_e = 80nm$ (figure 2.15-d), elle devient presque horizontal à $\omega = \omega_p$. Pour le premier mode TE'_{11} , sa courbe de dispersion est shiftée vers les hautes fréquences en passant de $R_e = 250nm$ à $R_e = 125nm$, par contre de $R_e = 125nm$ à $R_e = 80nm$ le déplacement s'est effectué vers les basses fréquences. Cela est conforme aux résultats de la figure 2.14 à $k_z = 0$. A $R_e = 80nm$ un large gap est obtenu entre les deux premiers modes.

Sur la figure 2.16, on présente l'intensité lumineuse (modules aux carrés des champs électriques) aux fréquences de coupures des deux premiers modes pour les quatres valeurs de R_e considérés dans le cas de la figure 2.15. Les figures 2.16-a), b), c) et d) correspondent au premier mode pour les rayons $R_e = 250nm$, $R_e = 150nm$, $R_e = 125nm$ et $R_e = 80nm$ respectivement. Les figures 2.16-a'), b'), c') et d') correspondent au deuxième mode pour les mêmes valeurs du rayon extérieur.

On constate que pour le premier mode TE'_{11} , l'intensité lumineuse correspond toujours, quelque que soit la valeur de R_e , à l'excitation des plasmons de surface à l'interface interne du coax. Quant au deuxième mode TE'_{12} , le maximum de la lumière est localisé entre les deux interfaces du coax. Nous avons bien vérifié que ces deux modes ressemblent aux modes TE_{1n} , aux fréquences de coupures, les composantes e_r , e_ϕ et h_z sont non nulles et les trois autres e_z , h_r et h_ϕ sont très faibles.

Notons sur la figure 2.15-d que pour $R_e = 80nm$, la longueur d'onde de coupure du second mode est presque égale 140 nm ce qui correspond à $\omega = \omega_p$. Dans ce cas, la constante diélectrique de l'argent devient nulle et la resonance plasmon (plasmon de volume) est obtenue comme le montre la figure 2.16-d'. Il semble que pour $R_e \rightarrow R_i$, la fréquence de coupure du premier mode tend vers zéro et celle du deuxième mode vers ω_p .

Pour les valeurs de R_e très proches de R_i (figure 2.15-d, $R_e = 80nm$), les courbes de dispersion sont presque horizontales. Ceci correspond à des vitesses de groupe petites relativement à la vitesse de la lumière c dans le vide. Sur la figure 2.17 on présente la vitesse du groupe v_g dans la gamme optique du premier mode TE'_{11} d'un guide coaxial de rayon extérieur $R_e = 125nm$ et de rayon intérieur $R_i = 75nm$. Cette courbe est obtenue numériquement de la courbe 2.15-c en utilisant la formule $v_g = \frac{d\omega}{dk}$.

Plusieurs autres calculs ont été effectués et ont montré que les courbes de dispersion deviennent de plus en plus horizontal lorsque le rayon extérieur se rapproche du rayon intérieur et par conséquent la vitesse de groupe diminue (par exemple pour $R_i = 50nm$ et $R_e = 55nm$, la vitesse de groupe est inférieure à $c/4$ dans le domaine du visible). Dans tous les cas, la vitesse de groupe à la fréquence du coupure tend vers zéro, il n'y a pas de propagation suivant l'axe z ($k_z = 0$).

Le premier mode plasmonique TE'_{11} de guide coaxial est très intéressant du fait qu'il ait des grandes longueurs d'ondes de coupure pour des dimensions sublongueurs d'ondes

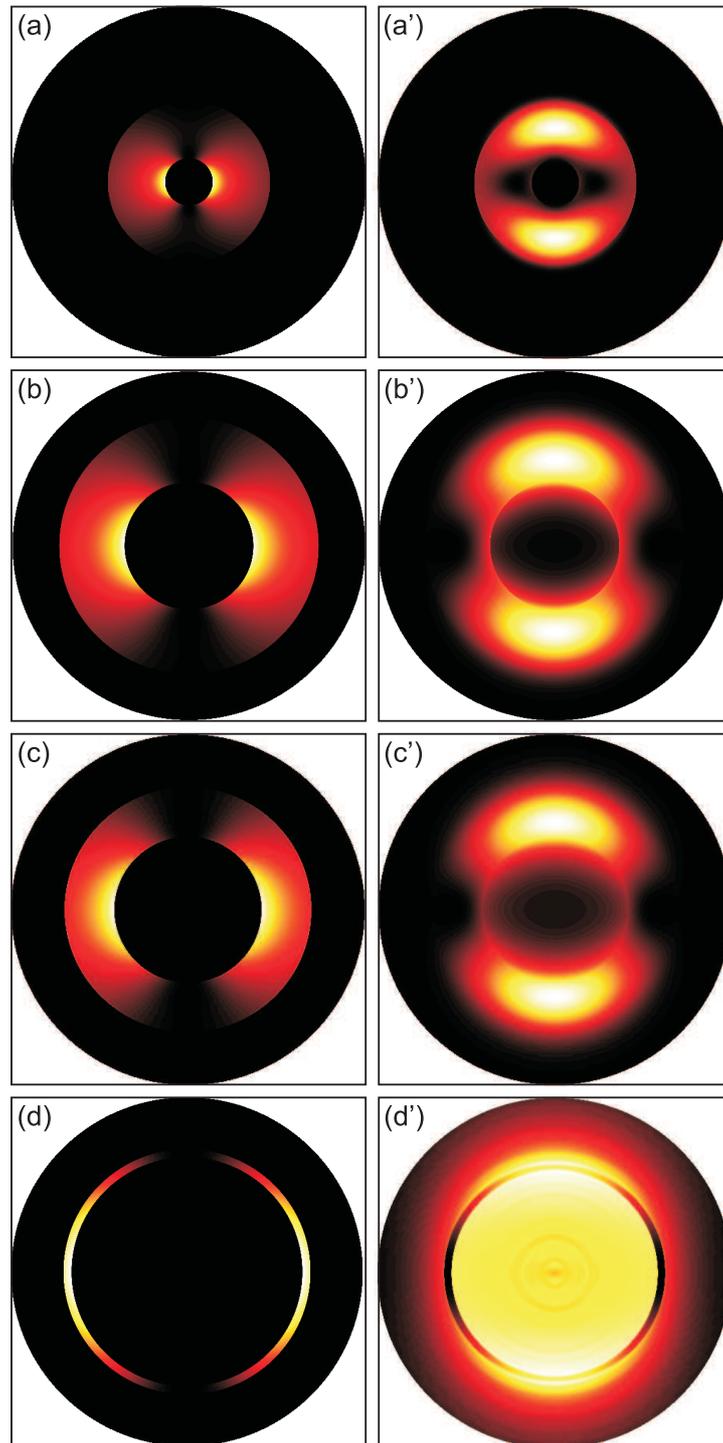


FIG. 2.16 – Intensités lumineuses (modules aux carrés des champs électriques) aux fréquences de coupures des deux premiers modes pour les valeurs de R_e suivantes : a) et a') $R_e = 250nm$; b) et b') $R_e = 150nm$; c) et c') $R_e = 125nm$; d) et d') $R_e = 80nm$.

des rayons. Pour des applications en nano-optique, il est nécessaire de déterminer les pertes dues à la propagation dans le métal. Pour ce mode TE'_{11} , d'après la figure 2.16 la

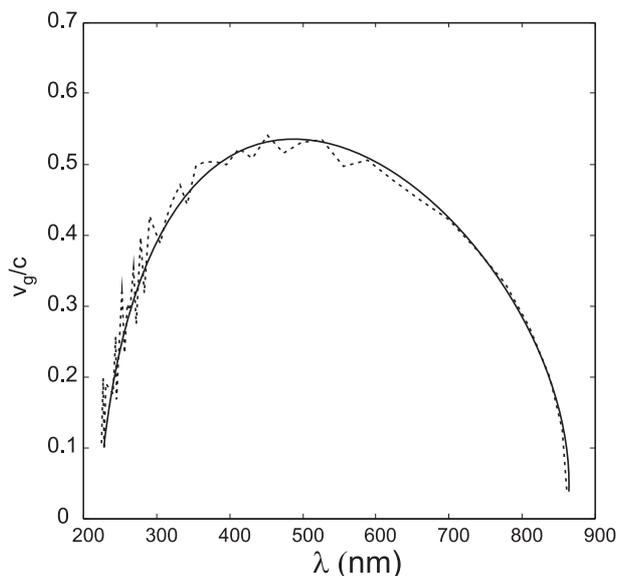


FIG. 2.17 – Vitesse de groupe du premier mode TE'_{11} d'un guide coaxial en argent de rayons $R_e = 125nm$ $R_i = 75nm$.

lumière est essentiellement confinée entre les deux interfaces métalliques du coax. Cela peut déjà nous rassurer des faibles pertes pendant la propagation.

Pour confirmer cela, nous avons déterminé la partie imaginaire n''_{eff} de l'indice effectif n_{eff} qui est directement liée aux pertes.

La partie imaginaire de n_{eff} est calculée par le code BOR-FDTD pour une structure finie suivant la direction z . Le principe est de calculer l'atténuation de la lumière suivant la direction de propagation z . Le schéma de la structure étudiée est présentée sur la figure 2.18.

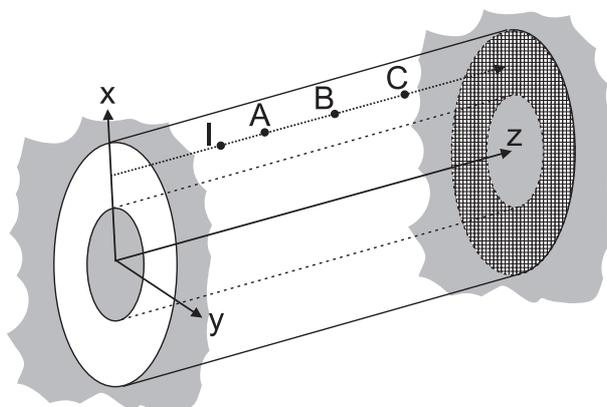


FIG. 2.18 – Schéma de la structure étudiée pour la détermination de la partie imaginaire de l'indice effectif.

Un signal temporel de forme gaussienne est injecté au point I de manière à exciter le

mode propre étudié (ici le TE_{11}). Cette impulsion est centrée sur $\lambda = 500nm$ et admet une petite largeur temporelle pour couvrir toute la gamme optique. Trois points détecteurs sont placés en A , B et C comme le montre la figure 2.18. En ces points, les composantes électriques $E_r(t)$, $E_\phi(t)$ et $E_z(t)$ sont enregistrées en fonction du temps. Une transformée de Fourier est effectuée sur chacune de ces composantes afin de déterminer les intensités spectrales I_A , I_B et I_C .

Les intensités aux points A , B et C se trouvent atténuées par rapport à l'intensité I_I injectée au point I , elles sont données par :

$$I_A = I_I \exp\left(-n''_{eff} \frac{4\pi z_A}{\lambda}\right) \quad (2.31)$$

$$I_B = I_I \exp\left(-n''_{eff} \frac{4\pi z_B}{\lambda}\right) \quad (2.32)$$

$$I_C = I_I \exp\left(-n''_{eff} \frac{4\pi z_C}{\lambda}\right) \quad (2.33)$$

A partir de ces équations, la partie imaginaire de l'indice effectif n''_{eff} est calculée comme suit :

$$n''_{eff} = \frac{\lambda \ln(I_{A,B \text{ ou } C} / I_{B,C \text{ ou } A})}{4\pi(z_{B,C \text{ ou } A} - z_{A,B \text{ ou } C})} \quad (2.34)$$

Notons que ce calcul n'est envisageable que pour des longueurs d'ondes inférieures à la longueur d'onde de coupure. Pour des λ tendant vers λ_c , la vitesse de groupe tend vers zéro, et le temps nécessaire pour que l'onde arrive aux points détecteurs tend vers l'infini.

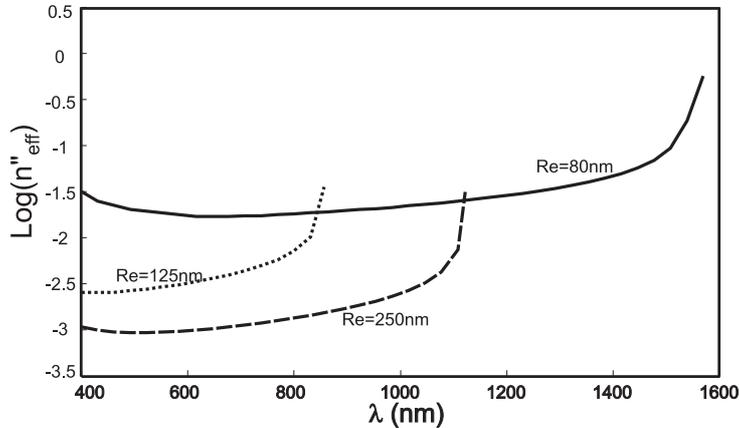


FIG. 2.19 – Partie imaginaire d'indice effectif du premier mode TE'_{11} de la structure AAA en argent, $R_i = 75nm$.

La figure 2.19 illustre le logarithme de la partie imaginaire de l'indice effectif du premier mode TE'_{11} pour trois rayons extérieurs différents $R_e = 250nm$, $R_e = 125nm$ et $R_e = 80nm$. Dans tous les cas, le rayon intérieur $R_i = 75nm$. On constate que lorsque le rayon extérieur augmente la partie imaginaire de l'indice effectif du premier mode TE'_{11} diminue et donc la distance de propagation augmente.

Pour le cas où $R_e = 125nm$, la partie imaginaire de l'indice effectif est au voisinage de 2×10^{-3} dans la gamme du visible ce qui correspond à une longueur d'atténuation de $50\mu m$. Cela implique que ce mode a de faibles pertes pendant sa propagation. Ainsi, des nano-guides, pouvant transmettre un signal optique à des distances de plusieurs dizaines de micromètres, peuvent être conçus pour la nano-connectique.

Ce résultat intéressant peut trouver aussi des applications dans le domaine de la transmission exaltée à travers des ouvertures annulaires sublongueurs d'ondes [21]. Dans [21], les auteurs ont démontré que les pics de transmission sont shiftés vers les grandes longueurs ondes quand le rayon extérieur de l'ouverture tend vers celui intérieur. En [16], nous avons montré que le pic de transmission à travers une couche métallique de $100nm$ d'épaisseur percée d'une seule ouverture coaxiale sublongueur d'onde est shifté vers les grandes longueurs d'ondes en remplaçant le métal parfait par l'argent. Ce shift peut encore être amplifié en diminuant le rayon extérieur du guide.

2.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis au point un code BOR-FDTD permettant une modélisation rigoureuse des structures à symétrie de révolution. Les modèles de Drude et de Drude-Lorentz sont adaptés au code BOR-FDTD pour la prise en compte de la dispersion des métaux dans la gamme optique. Plusieurs tests de validation ont été effectués en modélisant des guides d'ondes cylindrique et coaxial en métal parfait.

La prise en compte de la dispersion du métal a permis de mettre en exergue un comportement inhabituel de la longueur d'onde de coupure du mode TE'_{11} . En effet, et contrairement au cas du métal parfait, quand les deux rayons intérieur et extérieur sont suffisamment rapprochés, la longueur d'onde de coupure du premier mode TE'_{11} augmente au lieu de continuer à diminuer. Les courbes de dispersion et de l'intensité lumineuse à la fréquence de coupure ont montré que ce mode est un mode plasmonique. L'étude des pertes dans le métal, via le calcul de la partie imaginaire de l'indice effectif, a montré que ce mode plasmonique se propage avec faibles pertes et les distances utiles de propagation peuvent aller jusqu'à plusieurs dizaines de micromètres.

La vitesse de groupe de ce mode plasmonique est assez faible devant la vitesse de la lumière dans le vide, ce qui implique que la lumière se propage lentement à l'intérieur de guide coaxial. Cette propriété devient très importante en substituant l'air remplissant le

volume entre les deux interfaces du coax par un milieu optique non linéaire ou électro-optique. Une exaltation des effets non-linéaires peut alors être obtenue grâce à cette lumière lente [22].

Les structures coaxiales, du fait qu'elles aient des propriétés optiques très intéressantes, seront largement étudiées dans le troisième chapitre lorsqu'elles sont arrangées de manière périodique pour former un cristal photonique (structures AAA). Le dernier chapitre sera consacré à l'étude des structures bipériodiques et finies suivant la troisième direction par la FDTD en incidence oblique.

Bibliographie

- [1] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed. (John Wiley, New York, 1975).
 - [2] M. Roussey, M.-P. Bernal, N. Courjal, and F. I. Baida, *Appl. Phys. Lett.* 87, 241101, 2005.
 - [3] H. Rigneault, J. Capoulade, J. Dintinger, J. Wenger, N. Bonod, E. Popov, T. W. Ebbesen, and P. F. Lenne, *Phys. Rev. Lett.* 95, 117401, 2005.
 - [4] J. Wenger, H. Rigneault, J. Dintinger, D. Marguet, and P.-F. Lenne, *J. Biol. Phys.* 32, SN1, 2006.
 - [5] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff, *Nature (London)* 391, 667, 1998.
 - [6] Sergey I. Bozhevolnyi, Valentyn S. Volkov, Eloïse Devaux, and Thomas W. Ebbesen, *Phys. Rev. Lett.* 95, 046802, 2005.
 - [7] L. Novotny and C. Hafner, *Phys. Rev. E* 50, 4094, 1994.
 - [8] Ursula Schröter and Alain Dereux, *Phys. Rev. B* 64, 125420, 2001.
 - [9] F. I. Baida, D. Van Labek et Y. Pagani, *Optics Communications* 225, 241, 2003.
 - [10] D. B. Davidson and R. W. Ziolkowski, *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(4) :1471, 1994.
 - [11] A. Taflove and S. C. Hagness. *Computational Electrodynamics : The Finite-Difference Time-Domain Method*, , 2nd ed. (Artech House, Norwood, MA, 2000).
 - [12] V. Rodriguez-Pereyra, A. Z. Elsherbeni, and C. E. Smith, *Progress In Electromagnetics Research, PIER* 24, 257, 1999
 - [13] K. S. Yee, *IEEE Trans. Antennas Propag.* 14, 302-307, 1966.
 - [14] J. P. Berenger, *J. Comput. Phys.* 114, 185, 1994.
 - [15] A. Vial, A-S. Grimault, D. Macias, D. Barchiesi and M. L. Chapelle, *Phys. Rev. B* 71, 085416, 2005.
 - [16] F. I. Baida, A. Belkhir, D. Van Labeke and O. Lamrous, *Phys. Rev. B* 74, 205419, 2006.
 - [17] P. Johnson and R. Christy, *Phys. Rev. B* 6, 4370-4379, 1972.
 - [18] Reuven Gordon and Alexandre G. Brolo, *Opt. Express* 13, 1933, 2005.
 - [19] Hocheol Shin, Peter B. Catrysse, and Shanhui Fan, *Phys. Rev. B* 72, 085436, 2005.
-

- [20] F. I. Baida, D. Van Labeke, G. Granet, A. Moreau, and A. Belkir, *Appl. Phys. B : Lasers Opt.* 79, 1, 2004.
 - [21] Michael I. Haftel, Carl Schlockermann, and Girsh Blumberg, *Appl. Phys. Lett.* 88, 193104, 2006.
 - [22] M. Roussey, F. Baida, M.-P. Bernal, *J. of the Opt. Soc. of America. B* 24, 1416, 2007.
-

Chapitre 3

Modélisation des structures diélectriques et métalliques 3D bi-périodiques en incidence oblique

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, on s'intéressera à la modélisation des structures diélectriques et métalliques bi-périodiques lamellaires par la méthode FDTD en incidence oblique. Notons au passage que le code FDTD en incidence oblique, élaboré dans ce travail, est une extension de celui fonctionnant en incidence normale développé par F. I. Baida.

Pour les ondes en incidence normale, la méthode FDTD basée sur le schéma de Yee, a beaucoup fait ses preuves dans l'analyse des structures périodiques [1][2][3]. Dans ce cas simple, les conditions aux limites périodiques (CLP) de Floquet-Block s'appliquent facilement sans aucune modification du schéma de Yee. Dans le cas de l'incidence oblique, l'application des CLP fait intervenir de manière explicite la fréquence dans l'algorithme FDTD temporel. Pour adapter la FDTD à l'étude en incidence oblique, Veysoglu [4] a introduit la méthode de transformation des champs du domaine (E et H) vers le domaine (P et Q). Une conséquence immédiate à cette transformation apparaît : elle réside dans la nécessité de modifier le schéma de Yee. Plusieurs techniques d'implémentation sont proposées [5], entre autres, celle de la décomposition des champs (Split-Field Method SFM) [6] utilisée dans ce travail, et la méthode différentielle temporelle en exponentielle (Exponential Time Differencing) proposée récemment dans la référence [7]. Depuis Veysoglu, nombre de chercheurs ont réalisé des codes FDTD en incidence oblique par la technique SFM. Wu et al. [8] ont étudié les filtres à cristaux photoniques par la FDTD en incidence oblique. Oh and Escuti [9] ont implémenté la méthode FDTD 2D pour l'analyse des structures anisotropes éclairées en oblique.

Dans ce travail, un code FDTD 3D complet fonctionnant en incidence oblique est mis en oeuvre. Les équations de Maxwell sont modifiées et exprimées dans le domaine (P et Q). Elles sont ensuite discrétisées par la méthode SFM. Pour éviter les réflexions aux bords du domaine de calcul, le milieu, ouvert suivant la troisième direction, est délimité par les PML de Berenger [10]. Les équations dans le milieu PML sont aussi transformées et exprimées dans le nouveau domaine et implémentées par la méthode SFM. De plus, les modèles de Drude et de Drude-Lorentz sont intégrés et adaptés au schéma numérique afin de tenir compte de la dispersion et de pouvoir modéliser ainsi des objets métalliques.

En premier lieu, plusieurs tests ont été conduits aussi bien pour des objets diélectriques que métalliques. Ils seront réalisés sur des structures non diffractantes (0D), et ensuite sur des réseaux périodiques 1D et 2D finis suivant la troisième direction. Les résultats obtenus seront confrontés à la théorie, à l'expérience et à d'autres modèles numériques.

On terminera ce chapitre par des applications de ce code à l'étude de la structure AAA pour une application radome, à l'excitation du mode *TEM* de la structure AAA faite en métal réel et aux calculs des spectres d'extinction Raman.

3.2 Formulation de la FDTD en incidence oblique pour les structures périodiques

Le code FDTD élaboré permet la modélisation d'une structure bi-périodique et finie suivant la troisième direction comme le montre la figure 3.1. L'espace ouvert suivant la troisième direction (z) est délimité par des PML.

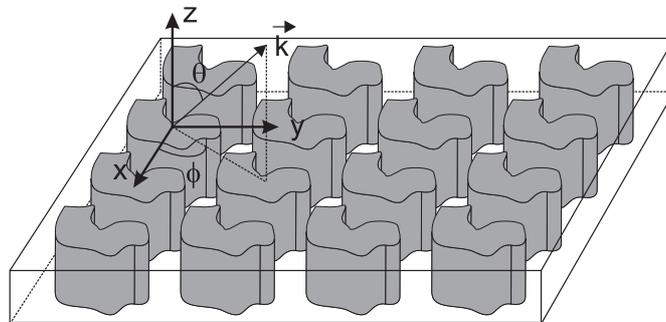


FIG. 3.1 – Structure bi-périodique éclairée en incidence oblique, le vecteur d'onde incident est repéré par les angles d'Euler (θ et ϕ).

3.2.1 Equations de Maxwell et structures périodiques

Rappelons que la méthode FDTD est basée essentiellement sur la discrétisation aux différences centrées des équations différentielles de Maxwell. Ces dernières sont projetées sur les axes d'un repère cartésien (O,x,y,z) comme suit :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \quad (3.1b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (3.1c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \quad (3.1d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (3.1e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (3.1f)$$

Soit une onde électromagnétique se propageant obliquement au plan (O,x,y) comme le montre le vecteur d'onde \vec{k} décrit par le schéma de la figure 3.2.

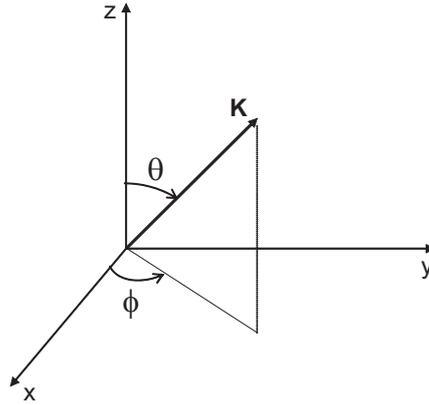


FIG. 3.2 – Orientation du vecteur d'onde incident

Les champs électrique et magnétique de l'onde plane incidente s'écrivent :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(j(\omega t + k_x x + k_y y + k_z z)) \quad (3.2a)$$

$$\vec{H} = \vec{H}_0 \exp(j(\omega t + k_x x + k_y y + k_z z)) \quad (3.2b)$$

avec : $k_x = \omega \sin\theta \cos\phi / v_i$, $k_y = \omega \sin\theta \sin\phi / v_i$ et $k_z = \omega \cos\theta / v_i$

Dans le cas d'un objet périodique, un seul motif (une période) de l'objet est considéré pour le calcul FDTD (voir figure 3.3). Les conditions de périodicité sont alors écrites et les champs sur l'un des côtés de la fenêtre de calcul seront déterminées en fonction des champs calculés sur le côté opposé.

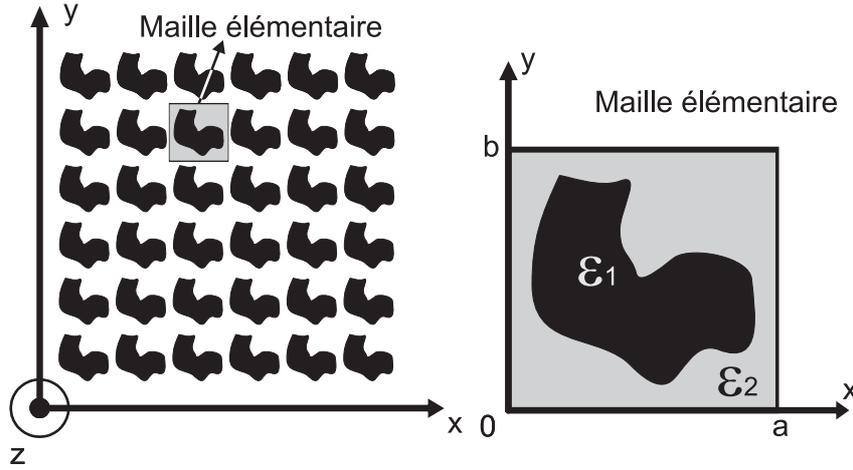


FIG. 3.3 – Structure périodique et maille élémentaire

Pour les structures périodiques en x et y (identiques à celle présentée sur la figure 3.3), ces conditions s'appliquent comme suit :

$$\vec{E}(x + a, y, z, t) = \vec{E}(x, y, z, t) \exp(jk_x a) \quad (3.3a)$$

$$\vec{E}(x, y + b, z, t) = \vec{E}(x, y, z, t) \exp(jk_y b) \quad (3.3b)$$

$$\vec{H}(x, y, z, t) = \vec{H}(x + a, y, z, t) \exp(-jk_x a) \quad (3.3c)$$

$$\vec{H}(x, y, z, t) = \vec{H}(x, y + b, z, t) \exp(-jk_y b) \quad (3.3d)$$

Comme la méthode FDTD est temporelle et les composantes k_x et k_y dépendent de ω , l'application de ces conditions périodiques ne peut se faire directement. Pour contourner ce problème, on effectue un changement de variables. Les composantes E et H sont remplacées par les nouvelles composantes électriques P et magnétiques Q afin d'éliminer la dépendance en k_x et k_y . Ces nouvelles composantes sont définies comme suit :

$$\vec{P} = \vec{E} \exp(-j(k_x x + k_y y)) \quad (3.4a)$$

$$\vec{Q} = \vec{H} \exp(-j(k_x x + k_y y)) \quad (3.4b)$$

En considérant ces nouvelles composantes P et Q , les conditions de périodicité s'appliquent simplement comme dans le cas d'une incidence normale :

$$\vec{P}(x + a, y, z, t) = \vec{P}(x, y, z, t) \quad (3.5a)$$

$$\vec{P}(x, y + b, z, t) = \vec{P}(x, y, z, t) \quad (3.5b)$$

$$\vec{Q}(x, y, z, t) = \vec{Q}(x + a, y, z, t) \quad (3.5c)$$

$$\vec{Q}(x, y, z, t) = \vec{Q}(x, y + b, z, t) \quad (3.5d)$$

3.2.2 Equations de Maxwell dans le nouveau domaine (P et Q)

En remplaçant les composantes des vecteurs \vec{E} et \vec{H} données par les expressions 3.4 dans le système d'équations de Maxwell, on obtient :

$$j\epsilon\omega P_x = \frac{\partial Q_z}{\partial y} - \frac{\partial Q_y}{\partial z} + jk_y Q_z \quad (3.6a)$$

$$j\epsilon\omega P_y = \frac{\partial Q_x}{\partial z} - \frac{\partial Q_z}{\partial x} - jk_x Q_z \quad (3.6b)$$

$$j\epsilon\omega P_z = \frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y} + jk_x Q_y - jk_y Q_x \quad (3.6c)$$

$$j\mu\omega Q_x = \frac{\partial P_y}{\partial z} - \frac{\partial P_z}{\partial y} - jk_y P_z \quad (3.6d)$$

$$j\mu\omega Q_y = \frac{\partial P_z}{\partial x} - \frac{\partial P_x}{\partial z} + jk_x P_z \quad (3.6e)$$

$$j\mu\omega Q_z = \frac{\partial P_x}{\partial y} - \frac{\partial P_y}{\partial x} + jk_y P_x - jk_x P_y \quad (3.6f)$$

Notons que pour une onde se propageant en incidence normale, le système précédent est équivalent au système d'équations de Maxwell exprimées dans le domaine $(E - H)$. Dans le cas oblique, les termes additionnels qui apparaissent aux deuxièmes membres à droite des équations (3.6) et qui dépendent explicitement des composantes de \vec{k} , donc de la fréquence ω , sont équivalents à des dérivées temporelles. L'implémentation directe de la FDTD dans ce cas reste impossible. La technique est de décomposer les composantes électromagnétiques (SFM) comme suivant :

$$P_x = P_{xa} + \frac{k_y}{\epsilon\omega} Q_z \quad (3.7a)$$

$$P_y = P_{ya} - \frac{k_x}{\epsilon\omega} Q_z \quad (3.7b)$$

$$P_z = P_{za} + \frac{k_x}{\epsilon\omega} Q_y - \frac{k_y}{\epsilon\omega} Q_x \quad (3.7c)$$

$$Q_x = Q_{xa} - \frac{k_y}{\mu\omega} P_z \quad (3.7d)$$

$$Q_y = Q_{ya} + \frac{k_x}{\mu\omega} P_z \quad (3.7e)$$

$$Q_z = Q_{za} + \frac{k_y}{\mu\omega} P_x - \frac{k_x}{\mu\omega} P_y \quad (3.7f)$$

En remplaçant les composantes des vecteurs \vec{P} et \vec{Q} données par le système (3.7) dans les premiers membres des équations du système (3.6), on arrive aux équations permettant le calcul des composantes-a (\vec{P}_a et \vec{Q}_a) à partir de celles des champs totaux \vec{P} et \vec{Q} :

$$\frac{\partial P_{xa}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial Q_z}{\partial y} - \frac{\partial Q_y}{\partial z} \right) \quad (3.8a)$$

$$\frac{\partial P_{ya}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial Q_x}{\partial z} - \frac{\partial Q_z}{\partial x} \right) \quad (3.8b)$$

$$\frac{\partial P_{za}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y} \right) \quad (3.8c)$$

$$\frac{\partial Q_{xa}}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial P_y}{\partial z} - \frac{\partial P_z}{\partial y} \right) \quad (3.8d)$$

$$\frac{\partial Q_{ya}}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial P_z}{\partial x} - \frac{\partial P_x}{\partial z} \right) \quad (3.8e)$$

$$\frac{\partial Q_{za}}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial P_x}{\partial y} - \frac{\partial P_y}{\partial x} \right) \quad (3.8f)$$

3.2.3 Equations de Maxwell discrétisées dans le nouveau domaine (P et Q)

Le calcul numérique des composantes des vecteurs \vec{P} et \vec{Q} passe d'abord par celui des composantes-a des vecteurs \vec{P}_a et \vec{Q}_a . La détermination de ces dernières se fait en discrétisant ce dernier ensemble d'équations aux différences centrées comme suit :

$$P_{xa}^n(i, j, k) = P_{xa}^{n-1}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{Q_z^{n-1/2}(i, j, k) - Q_z^{n-1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} - \frac{Q_y^{n-1/2}(i, j, k) - Q_y^{n-1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} \right] \quad (3.9a)$$

$$P_{ya}^n(i, j, k) = P_{ya}^{n-1}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{Q_x^{n-1/2}(i, j, k) - Q_x^{n-1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} - \frac{Q_z^{n-1/2}(i, j, k) - Q_z^{n-1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (3.9b)$$

$$P_{za}^n(i, j, k) = P_{za}^{n-1}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[\frac{Q_y^{n-1/2}(i, j, k) - Q_y^{n-1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} - \frac{Q_x^{n-1/2}(i, j, k) - Q_x^{n-1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} \right] \quad (3.9c)$$

$$Q_{xa}^n(i, j, k) = Q_{xa}^{n-1}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{P_y^{n-1/2}(i, j, k+1) - P_y^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta z} - \frac{P_z^{n-1/2}(i, j+1, k) - P_z^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta y} \right] \quad (3.9d)$$

$$Q_{ya}^n(i, j, k) = Q_{ya}^{n-1}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{P_z^{n-1/2}(i+1, j, k) - P_z^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta x} - \frac{P_x^{n-1/2}(i, j, k+1) - P_x^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta z} \right] \quad (3.9e)$$

$$Q_{za}^n(i, j, k) = Q_{za}^{n-1}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{P_x^{n-1/2}(i, j+1, k) - P_x^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta y} - \frac{P_y^{n-1/2}(i+1, j, k) - P_y^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (3.9f)$$

Pour remonter aux composantes des vecteurs \vec{P} et \vec{Q} , un remaniement algébrique du système d'équations 3.7 doit être effectué. Q_x et Q_y , donnés respectivement par les deux équations (3.7d) et (3.7e), sont remplacés dans l'équation (3.7c) pour obtenir :

$$\left(1 - \frac{k_x^2}{\epsilon\mu\omega^2} - \frac{k_y^2}{\epsilon\mu\omega^2}\right)P_z = P_{za} + \frac{k_x}{\epsilon\omega}Q_{ya} - \frac{k_y}{\epsilon\omega}Q_{xa} \quad (3.10)$$

Et en remplaçant P_x donné par (3.7a) et P_y par (3.7b) dans l'équation (3.7f), on trouve :

$$\left(1 - \frac{k_x^2}{\epsilon\mu\omega^2} - \frac{k_y^2}{\epsilon\mu\omega^2}\right)Q_z = Q_{za} + \frac{k_y}{\mu\omega}P_{xa} - \frac{k_x}{\mu\omega}P_{ya} \quad (3.11)$$

Dans l'algorithme FDTD, le calcul de ces composantes totales se fait dans l'ordre suivant :

$$P_z^n(i, j, k) = \frac{1}{\left(1 - \frac{k_x^2}{\epsilon\mu\omega^2} - \frac{k_y^2}{\epsilon\mu\omega^2}\right)} \left[P_{za}^n(i, j, k) + \frac{k_x}{\epsilon\omega} Q_{ya}^n(i, j, k) - \frac{k_y}{\epsilon\omega} Q_{xa}^n(i, j, k) \right] \quad (3.12a)$$

$$Q_z^n(i, j, k) = \frac{1}{\left(1 - \frac{k_x^2}{\epsilon\mu\omega^2} - \frac{k_y^2}{\epsilon\mu\omega^2}\right)} \left[Q_{za}^n(i, j, k) + \frac{k_y}{\mu\omega} P_{xa}^n(i, j, k) - \frac{k_x}{\mu\omega} P_{ya}^n(i, j, k) \right] \quad (3.12b)$$

$$P_x^n(i, j, k) = P_{xa}^n(i, j, k) + \frac{k_y}{\epsilon\omega} Q_z^n(i, j, k) \quad (3.12c)$$

$$P_y^n(i, j, k) = P_{ya}^n(i, j, k) - \frac{k_x}{\epsilon\omega} Q_z^n(i, j, k) \quad (3.12d)$$

$$Q_x^n(i, j, k) = Q_{xa}^n(i, j, k) - \frac{k_y}{\mu\omega} P_z^n(i, j, k) \quad (3.12e)$$

$$Q_y^n(i, j, k) = Q_{ya}^n(i, j, k) + \frac{k_x}{\mu\omega} P_z^n(i, j, k) \quad (3.12f)$$

Notons que, contrairement au schéma de Yee traditionnel, les nouveaux champs \vec{P} et \vec{Q} et les champs-a \vec{P}_a et \vec{Q}_a doivent être calculés aux instants $n\Delta t$ et $(n+1/2)\Delta t$. Chaque composante est calculée deux fois en une itération temporelle. Cela est fait en introduisant d'autres composantes intermédiaires de calcul dans le programme, ce qui constitue la difficulté majeure de ce code. Au total, il y a 24 composantes électromagnétiques à manipuler dans la grille principale. Ce problème se complique davantage dans les milieux PML et dispersif. On se retrouvera avec 40 composantes pour le milieu PML, auxquelles s'ajoutent 38 composantes électromagnétiques dans le milieu dispersif décrit par le modèle de Drude et 112 autres dans celui décrit par le modèle de Drude-Lorentz.

3.3 Adaptation des modèles de Drude et de Drude-Lorentz à la FDTD en incidence oblique

Dans le cas de l'incidence oblique, d'après les deux systèmes d'équations (3.9) et (3.12), les composantes qui nécessitent un traitement particulier dans le milieu dispersif sont : P_{xa} , P_{ya} , P_{za} , P_x , P_y , P_z et Q_z . Le calcul direct de ces composantes par les équations (3.9) et (3.12) fait intervenir explicitement la permittivité et donc la fréquence dans l'algorithme FDTD temporel. Dans cette partie, nous montrerons la manière dont est prise en compte la dispersion des métaux dans la FDTD en incidence oblique et donc comment sont calculées ces composantes dans le cas des modèles de Drude et Drude-Lorentz.

Remarquons que les équations 3.9 pour le calcul de P_{xa} , P_{ya} , P_{za} sont similaires à celles traditionnelles de Maxwell. Le calcul de ces composantes dans le milieu dispersif ne

nécessitera aucun traitement supplémentaire par rapport au cas de l'incidence normale. Par contre, les équations 3.12 permettant le calcul des composantes P_x , P_y , P_z et Q_z seront traitées d'une manière différente.

3.3.1 Modèle de Drude :

Rappelons que la permittivité diélectrique des métaux est approximée par le modèle de Drude comme suit :

$$\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega\Gamma_D) \quad (3.13)$$

avec ω_p représente la fréquence plasma et Γ_D un coefficient directement lié aux pertes.

- Calcul des composantes intermédiaires P_{xa} , P_{ya} et P_{za} :

Le calcul de ces composantes dans le cas dispersif se fait de manière analogue au cas de l'incidence normale. Prenons comme exemple le calcul de P_{xa} . En introduisant la composante $L_{xa} = \epsilon(\omega)P_{xa}$ dans l'équation 3.8a, on aura :

$$\frac{\partial L_{xa}}{\partial t} = \frac{\partial Q_z}{\partial y} - \frac{\partial Q_y}{\partial z} \quad (3.14)$$

Le calcul de L_{xa} se fait en discrétisant aux différences centrées cette dernière équation aux dérivées partielles, soit :

$$L_{xa}^{n+1}(i, j, k) = L_{xa}^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (Q_z^n(i, j, k) - Q_z^n(i, j - 1, k)) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (Q_y^n(i, j, k) - Q_y^n(i, j, k - 1)) \quad (3.15)$$

Une fois que L_{xa} est calculée, on passera à la détermination de P_{xa} à partir de la relation $L_{xa} = \epsilon(\omega)P_{xa}$. En remplaçant $\epsilon(\omega)$ par son expression donnée par le modèle de Drude, on arrive à :

$$L_{xa} = \epsilon_0(1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega\Gamma_D))P_{xa} \quad (3.16)$$

En effectuant une transformée de Fourier inverse (passage au domaine temporel), on obtient :

$$\frac{\partial^2 L_{xa}}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial L_{xa}}{\partial t} = \epsilon_0 \left(\frac{\partial^2 P_{xa}}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial P_{xa}}{\partial t} + \omega_p^2 L_{xa} \right) \quad (3.17)$$

La discrétisation aux différences centrées de cette équation aux dérivées partielles temporelles nous donne en un point (i,j,k) de la grille FDTD :

$$\xi P_{xa}^{n+1} = -\chi P_{xa}^{n-1} + 4\epsilon_0 P_{xa}^n + L_{xa}^{n+1} [\Gamma_D \Delta t + 2] - 4L_{xa}^n + [-\Gamma_D \Delta t + 2] L_{xa}^{n-1} \quad (3.18)$$

avec

$$\xi = \epsilon_0 [\omega_p^2 \Delta t^2 + \Gamma_D \Delta t + 2] \text{ et } \chi = \epsilon_0 [\omega_p^2 \Delta t^2 - \Gamma_D \Delta t + 2]$$

Les composantes P_{xa} et P_{ya} se calculent de façon similaire.

- Calcul des composantes P_z, Q_z, P_x et P_y :

En remplaçant la permittivité par son expression de Drude dans les équations de calcul des composantes P_z, Q_z, P_x et P_y du système 3.12 et après quelques remaniements algébriques, on arrive à :

$$\beta P_z + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} Q_{ya} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} Q_{xa} = \epsilon_0 (1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega \Gamma_D)) (P_z - P_{za}) \quad (3.19a)$$

$$\beta Q_z = \epsilon_0 (1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega \Gamma_D)) (Q_z - Q_{za} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{\mu v_i} P_{xa} + \frac{\sin \theta \cos \phi}{\mu v_i} P_{ya}) \quad (3.19b)$$

$$\epsilon_0 (P_x - P_{xa}) [1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega \Gamma_D)] = \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} Q_z \quad (3.19c)$$

$$\epsilon_0 (P_y - P_{ya}) [1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega \Gamma_D)] = -\frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} Q_z \quad (3.19d)$$

avec $\beta = \frac{\sin(\theta)^2 \cos(\phi)^2}{\mu v_i^2} + \frac{\sin(\theta)^2 \sin(\phi)^2}{\mu v_i^2}$

Pour bien illustrer les démarches à suivre pour le calcul de P_z, Q_z, P_x et P_y , prenons l'exemple de l'équation 3.19a pour la détermination de P_z en un point quelconque (i,j,k) de la grille FDTD.

Posons :

$$L_z = \epsilon(\omega)P_z = \epsilon_0(1 - \omega_p^2/(\omega^2 + i\omega\Gamma_D))P_z \quad (3.20)$$

D'après l'équation 3.19a, on a :

$$L_z = L_{za} + \beta P_z + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} Q_{ya} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} Q_{xa} \quad (3.21)$$

avec $L_{za} = \epsilon(\omega)P_{za}$, une composante calculée et utilisée pour la détermination de P_{za} .

Une fois que L_z est calculée, on passe au calcul de P_z en utilisant l'équation 3.20. Après passage au domaine temporel via une transformée de Fourier inverse et une discrétisation aux différences centrées des dérivées partielles temporelles, on obtient :

$$\xi P_z^{n+1} = -\chi P_z^{n-1} + 4\epsilon_0 P_z^n + L_z^{n+1}[\Gamma_D \Delta t + 2] - 4L_z^n + [-\Gamma_D \Delta t + 2]L_z^{n-1} \quad (3.22)$$

En remplaçant L_z^{n+1} donné par l'expression 3.21 dans l'équation 3.22, on arrive à l'équation de mise à jour de P_z à l'instant $(n + 1)$:

$$\begin{aligned} \eta P_z^{n+1} = & -\chi P_z^{n-1} + 4\epsilon_0 P_z^n + (\Gamma_D \Delta t + 2)[L_{za}^{n+1} + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} Q_{ya}^{n+1} - \\ & \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} Q_{xa}^{n+1}] - 4L_z^n + (-\Gamma_D \Delta t + 2)L_z^{n-1} \end{aligned} \quad (3.23)$$

avec $\eta = [\xi - (\Gamma_D \Delta t + 2)\beta]$

Les équations de mise à jour des composantes Q_z , P_x et P_y s'obtiennent en suivant la même procédure.

De même que les composantes électriques et magnétiques des vecteurs \vec{P} , \vec{P}_a , \vec{Q} et \vec{Q}_a , les composantes des vecteurs \vec{L} et \vec{L}_a sont aussi calculées aux instants $n\Delta t$ et $(n + 1/2)\Delta t$. Au total 38 composantes électriques et magnétiques sont nécessaires pour le milieu dispersif décrit par le modèle de Drude. De plus, comme on peut le remarquer dans les équations 3.18 et 3.23, la mise à jour de ces composantes à l'instant $n + 1$ nécessite leurs stockages aux instants (n) et $(n - 1)$, ce qui complique et rend plus lourd l'exécution de l'algorithme FDTD.

3.3.2 Modèle de Drude-Lorentz :

La fonction diélectrique donnée par le modèle de Drude-Lorentz s'écrit :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \omega_p^2/(\omega^2 + i\omega\Gamma_D) - \Delta\epsilon\Omega_l^2/((\omega^2 - \Omega_l^2) + i\Gamma_l\omega) \quad (3.24)$$

Les composantes concernées et qui nécessitent un traitement particulier sont toujours les mêmes à savoir : P_{xa} , P_{ya} , P_{za} , P_x , P_y , P_z et Q_z .

- Calcul de P_{xa} , P_{ya} et P_{za}

Le calcul des composantes P_{xa} , P_{ya} et P_{za} est analogue au cas de l'incidence normale. En effet, les équations 3.8 sont similaires aux équations 3.1 utilisées dans le cas de l'incidence normale. Prenons l'exemple de calcul de P_{xa} et reprenons l'équation 3.8a :

$$\epsilon \frac{\partial P_{xa}}{\partial t} = \left(\frac{\partial Q_z}{\partial y} - \frac{\partial Q_y}{\partial z} \right) \quad (3.25)$$

Par analogie aux équations 1.34 (chapitre 1) pour le calcul des composantes du vecteur \vec{E} dans le milieu dispersif décrit par le modèle de Drude-Lorentz, le calcul de P_{xa} se fait par l'ensemble des trois équations suivantes :

$$\psi_{Dxa}^n = C_D^\rho \psi_{Dxa}^{n-1} + C_D^\delta P_{xa}^n \quad (3.26a)$$

$$\psi_{Lxa}^n = C_L^\rho \psi_{Lxa}^{n-1} + C_L^\delta P_{xa}^n \quad (3.26b)$$

$$P_{xa}^{n+1} = C^\alpha P_{xa}^n + C^\beta \left(\frac{\partial Q_z^{n+1/2}}{\partial y} - \frac{\partial Q_y^{n+1/2}}{\partial z} \right) + C^\gamma Re(\psi_{Dxa}^n + \psi_{Lxa}^n) \quad (3.26c)$$

Les constantes $C^\alpha, C^\beta, C^\gamma, C_D^\rho, C_D^\delta, C_L^\rho$, et C_L^δ , qui dépendent des paramètres figurant dans la fonction diélectrique Drude-Lorentz, sont définies dans le chapitre 1 (paragraphe 1.5.5).

Le calcul des deux autres composantes P_{ya} et P_{za} se fait exactement de la même manière.

- Calcul de P_x , P_y , P_z et Q_z :

Le calcul des composantes P_x , P_y , P_z et Q_z nécessite l'introduction d'autres variables impliquant d'autres équations. Pour voir la manière dont sont calculées ces composantes, prenons l'exemple de calcul de P_z à partir de l'équation 3.12a. Cette dernière implique l'équation suivante :

$$\epsilon M_z = \beta P_z + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} Q_{ya} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} Q_{xa} \quad (3.27)$$

avec $M_z = P_z - P_{za}$ et $\beta = \frac{\sin(\theta)^2 \cos(\phi)^2}{\mu v_i^2} + \frac{\sin(\theta)^2 \sin(\phi)^2}{\mu v_i^2}$

Pour pouvoir utiliser la technique d'adaptation du modèle de Drude-Lorentz à la FDTD [21], comme pour le calcul des composantes du vecteur \vec{P}_a , essayons de donner une forme à l'équation 3.27 qui ressemble à celle de l'équation 3.25 et qui va nous permettre d'user de cette technique. Pour cela, dérivons par rapport au temps les deux membres de l'équation 3.27 pour obtenir :

$$\epsilon \frac{\partial M_z}{\partial t} = \beta \frac{\partial P_z}{\partial t} + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} \frac{\partial Q_{ya}}{\partial t} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} \frac{\partial Q_{xa}}{\partial t} \quad (3.28)$$

Dans le milieu dispersif décrit par le modèle de Drude-Lorentz, on passe de l'équation 3.25 au système d'équations 3.26 pour la détermination de P_{xa} . Pour le calcul de M_z , par analogie à ce passage, l'équation 3.28 sera remplacée par le système d'équations suivant :

$$\psi_{Dz}^n = C_D^\rho \psi_{Dz}^{n-1} + C_D^\delta M_z^n \quad (3.29a)$$

$$\psi_{Lz}^n = C_L^\rho \psi_{Lz}^{n-1} + C_L^\delta M_z^n \quad (3.29b)$$

$$M_z^{n+1} = C^\alpha M_z^n + C^\beta \left(\beta \frac{\partial P_z}{\partial t} + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} \frac{\partial Q_{ya}}{\partial t} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} \frac{\partial Q_{xa}}{\partial t} \right) + C^\gamma \text{Re}(\psi_{Dz}^n + \psi_{Lz}^n) \quad (3.29c)$$

Après discrétisation aux différences centrées, des dérivées temporelles apparaissant dans l'équation 3.29c, on obtient le système d'équation pour le calcul de M_z :

$$\psi_{Dz}^n = C_D^\rho \psi_{Dz}^{n-1} + C_D^\delta M_z^n \quad (3.30a)$$

$$\psi_{Lz}^n = C_L^\rho \psi_{Lz}^{n-1} + C_L^\delta M_z^n \quad (3.30b)$$

$$M_z^{n+1} = C^\alpha M_z^n + C^\beta / \Delta t (\beta (P_z^{n+1} - P_z^n) + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} (Q_{ya}^{n+1} - Q_{ya}^n) - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} (Q_{xa}^{n+1} - Q_{xa}^n)) + C^\gamma Re(\psi_{Dz}^n + \psi_{Lz}^n) \quad (3.30c)$$

En remplaçant M_z par $P_z - P_{za}$ dans l'équation 3.30c, on obtient :

$$(1 - C^\beta / \Delta t \beta) P_z^{n+1} = P_{za}^{n+1} + C^\alpha M_z^n + C^\beta / \Delta t (-\beta P_z^n + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} (Q_{ya}^{n+1} - Q_{ya}^n) - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} (Q_{xa}^{n+1} - Q_{xa}^n)) + C^\gamma Re(\psi_{Dz}^n + \psi_{Lz}^n) \quad (3.31)$$

Finalement, le système d'équations nécessaire pour la mise à jour de P_z s'exécute dans l'algorithme FDTD dans l'ordre suivant :

$$\psi_{Dz}^n = C_D^\rho \psi_{Dz}^{n-1} + C_D^\delta M_z^n \quad (3.32a)$$

$$\psi_{Lz}^n = C_L^\rho \psi_{Lz}^{n-1} + C_L^\delta M_z^n \quad (3.32b)$$

$$(1 - C^\beta / \Delta t \beta) P_z^{n+1} = P_{za}^{n+1} + C^\alpha M_z^n + C^\beta / \Delta t (-\beta P_z^n + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} (Q_{ya}^{n+1} - Q_{ya}^n) - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} (Q_{xa}^{n+1} - Q_{xa}^n)) + C^\gamma Re(\psi_{Dz}^n + \psi_{Lz}^n) \quad (3.32c)$$

$$M_z^{n+1} = C^\alpha M_z^n + C^\beta / \Delta t (\beta (P_z^{n+1} - P_z^n) + \frac{\sin \theta \cos \phi}{v_i} (Q_{ya}^{n+1} - Q_{ya}^n) - \frac{\sin \theta \sin \phi}{v_i} (Q_{xa}^{n+1} - Q_{xa}^n)) + C^\gamma Re(\psi_{Dz}^n + \psi_{Lz}^n) \quad (3.32d)$$

Les équations de calcul des composantes P_x , P_y et Q_z , dans le milieu dispersif décrit par le modèle de Drude-Lorentz, s'obtiennent en suivant un raisonnement quasi-similaire à celui utilisé pour le calcul de P_z .

Notons que quatre équations sont nécessaires pour le calcul de P_z dans le milieu décrit par le modèle de Drude-Lorentz. De même pour la composante Q_z , elle est calculée à l'aide d'un système de quatre équations. Les autres composantes P_{xa} , P_{ya} , P_{za} , P_x et P_y sont mises à jour en exécutant des systèmes de 3 équations chacun. L'ensemble de ces composantes est calculé aux instants $n\Delta t$ et $(n + 1/2)\Delta t$. Au total, 56 composantes sont nécessaires pour adapter le modèle de Drude-Lorentz à la FDTD en incidence oblique. Comme cette technique d'adaptation du modèle de Drude-Lorentz à la FDTD ne marche que si les champs sont réels, les parties réelles et imaginaires des composantes des champs sont traitées séparément, ce qui accentue la difficulté de son implémentation.

3.4 Adaptation de la PML en incidence oblique

Le milieu ouvert suivant la direction z est délimité par les conditions absorbantes PML de Berenger (voir figure 3.4).

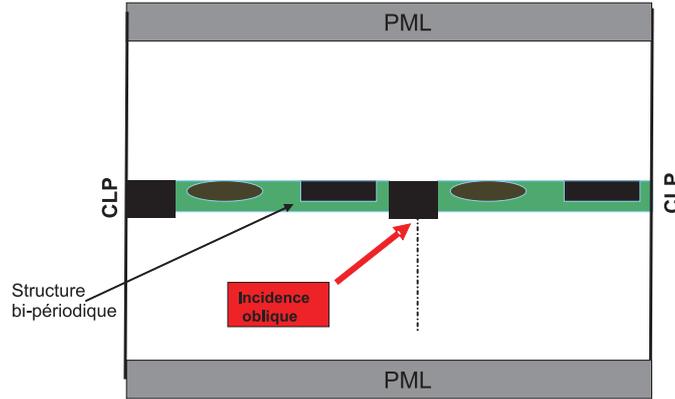


FIG. 3.4 – Structure bi-périodique délimitée par des PML suivant la troisième direction

Ce milieu PML est modélisé par les équation de Maxwell modifiées par Berenger [10] qui s'écrivent (voir chapitre 2, paragraphe 2.5) :

$$\epsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (3.33a)$$

$$\left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z\right) E_{xz} = -\frac{\partial}{\partial z} (H_{yx} + H_{yz}) \quad (3.33b)$$

$$\left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z\right) E_{yz} = \frac{\partial}{\partial z} (H_{xy} + H_{xz}) \quad (3.33c)$$

$$\epsilon \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} = -\frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (3.33d)$$

$$\epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (H_{yx} + H_{yz}) - \frac{\partial}{\partial y} (H_{xy} + H_{xz}) \quad (3.33e)$$

$$\mu \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} = -\frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (3.33f)$$

$$\left(\mu \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z^*\right) H_{xz} = \frac{\partial}{\partial z} (E_{yx} + E_{yz}) \quad (3.33g)$$

$$\left(\mu \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z^*\right) H_{yz} = -\frac{\partial}{\partial z} (E_{xy} + E_{xz}) \quad (3.33h)$$

$$\mu \frac{\partial H_{yx}}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (3.33i)$$

$$\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} (E_{xy} + E_{xz}) - \frac{\partial}{\partial x} (E_{yx} + E_{yz}) \quad (3.33j)$$

avec σ_z est la conductivité électrique et σ_z^* la résistivité magnétique introduites pour le

milieu PML.

Pour adapter ce milieu PML au main grid dans le cas oblique, un changement de variables est effectué sur les composantes PML de manière analogue à celui fait sur les composantes électromagnétiques dans le domaine principal de calcul FDTD. Les nouvelles composantes PML sont :

$$P_{\nu\mu} = E_{\nu\mu} \exp(-j(K_x x + K_y y)) \quad (3.34a)$$

$$Q_{\nu\mu} = H_{\nu\mu} \exp(-j(K_x x + K_y y)) \quad (3.34b)$$

$$P_z = E_z \exp(-j(K_x x + K_y y)) \quad (3.34c)$$

$$Q_z = H_z \exp(-j(K_x x + K_y y)) \quad (3.34d)$$

avec ν représente x ou y et μ dénote x, y ou z .

En remplaçant les composantes $E_{\nu\mu}, H_{\nu\mu}, E_z$ et H_z données par les expressions 3.34 dans le système d'équations 3.33, on obtient les équations PML modifiées et exprimées dans le nouveau domaine (P-Q) :

$$\epsilon \frac{\partial P_{xy}}{\partial t} = \frac{\partial Q_z}{\partial y} + j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \sin(\phi) Q_z \quad (3.35a)$$

$$\left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z\right) P_{xz} = -\frac{\partial}{\partial z} (Q_{yx} + Q_{yz}) \quad (3.35b)$$

$$\left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z\right) P_{yz} = \frac{\partial}{\partial z} (Q_{xy} + Q_{xz}) \quad (3.35c)$$

$$\epsilon \frac{\partial P_{yx}}{\partial t} = -\frac{\partial Q_z}{\partial x} - j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \cos(\phi) Q_z \quad (3.35d)$$

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial P_z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (Q_{yx} + Q_{yz}) - \frac{\partial}{\partial y} (Q_{xy} + Q_{xz}) + j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \sin(\phi) (Q_{yx} + Q_{yz}) - \\ j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \cos(\phi) (Q_{xy} + Q_{xz}) \end{aligned} \quad (3.35e)$$

$$\mu \frac{\partial Q_{xy}}{\partial t} = -\frac{\partial P_z}{\partial y} - j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \sin(\phi) P_z \quad (3.35f)$$

$$\left(\mu \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z^*\right) Q_{xz} = \frac{\partial}{\partial z} (P_{yx} + P_{yz}) \quad (3.35g)$$

$$\left(\mu \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z^*\right) Q_{yz} = -\frac{\partial}{\partial z} (P_{xy} + P_{xz}) \quad (3.35h)$$

$$\mu \frac{\partial Q_{yx}}{\partial t} = \frac{\partial P_z}{\partial x} + j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \cos(\phi) P_z \quad (3.35i)$$

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial Q_z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} (P_{xy} + P_{xz}) - \frac{\partial}{\partial x} (P_{yx} + P_{yz}) + j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \sin(\phi) (P_{xy} + P_{xz}) - \\ j \frac{\omega}{v_i} \sin(\theta) \cos(\phi) (P_{yx} + P_{yz}) \end{aligned} \quad (3.35j)$$

Notons que dans le cas de l'incidence normale ($\theta = 0$), le système précédent est équivalent au système d'équations de Berenger exprimées dans le domaine ($E - H$). Comme dans le cas de la grille principale FDTD, pour implémenter ces équations PML modifiées, les composantes des champs sont décomposées comme suivant :

$$P_{xy} = P_{xya} + \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{v_i \epsilon} Q_z \quad (3.36a)$$

$$P_{xz} = P_{xza} \quad (3.36b)$$

$$P_{yz} = P_{yza} \quad (3.36c)$$

$$P_{yx} = P_{yxa} - \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{v_i \epsilon} Q_z \quad (3.36d)$$

$$P_z = P_{za} + \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{v_i \epsilon} (Q_{yx} + Q_{yz}) - \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{v_i \epsilon} (Q_{xy} + Q_{xz}) \quad (3.36e)$$

$$Q_{xy} = Q_{xya} - \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{v_i \mu} P_z \quad (3.36f)$$

$$Q_{xz} = Q_{xza} \quad (3.36g)$$

$$Q_{yz} = Q_{yza} \quad (3.36h)$$

$$Q_{yx} = Q_{yxa} + \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{v_i \mu} P_z \quad (3.36i)$$

$$Q_z = Q_{za} + \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{v_i \mu} (P_{xy} + P_{xz}) - \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{v_i \mu} (P_{yx} + P_{yz}) \quad (3.36j)$$

En injectant les équations 3.36 dans les premiers membres des équations 3.35, on arrive aux équations permettant le calcul des composantes des vecteurs \vec{P}_a et \vec{Q}_a dans le milieu PML :

$$\epsilon \frac{\partial P_{xya}}{\partial t} = \frac{\partial Q_z}{\partial y} \quad (3.37a)$$

$$(\epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z) P_{xza} = -\frac{\partial}{\partial z} (Q_{yx} + Q_{yz}) \quad (3.37b)$$

$$(\epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z) P_{yza} = \frac{\partial}{\partial z} (Q_{xy} + Q_{xz}) \quad (3.37c)$$

$$\epsilon \frac{\partial P_{yxa}}{\partial t} = -\frac{\partial Q_z}{\partial x} \quad (3.37d)$$

$$\epsilon \frac{\partial P_{za}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (Q_{yx} + Q_{yz}) - \frac{\partial}{\partial y} (Q_{xy} + Q_{xz}) \quad (3.37e)$$

$$\mu \frac{\partial Q_{xya}}{\partial t} = -\frac{\partial P_z}{\partial y} \quad (3.37f)$$

$$(\mu \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z^*) Q_{xza} = \frac{\partial}{\partial z} (Q_{yx} + Q_{yz}) \quad (3.37g)$$

$$(\mu \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z^*) Q_{yza} = -\frac{\partial}{\partial z} (P_{xy} + P_{xz}) \quad (3.37h)$$

$$\mu \frac{\partial Q_{yxa}}{\partial t} = \frac{\partial P_z}{\partial x} \quad (3.37i)$$

$$\mu \frac{\partial Q_{za}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} (P_{xy} + P_{xz}) - \frac{\partial}{\partial x} (P_{yx} + P_{yz}) \quad (3.37j)$$

Le calcul des composantes des vecteurs \vec{P}_a et \vec{Q}_a dans le milieu PML se fait en résolvant le système d'équations 3.37. Pour voir la manière dont sont calculées ces composantes, prenons l'exemple de calcul de la composante P_{xza} à partir de l'équation 3.37b.

$$\epsilon \frac{\partial P_{xza}}{\partial t} + \sigma_z P_{xza} = -\frac{\partial}{\partial z} (Q_{yx} + Q_{yz}) \quad (3.38)$$

Les solutions de l'équation 3.38 sans second membre sont de type :

$$P_{xza}(t) = C \exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon} t\right) \quad (3.39)$$

Une solution particulière de l'équation 3.38 avec second membre est :

$$P_{xza}(t) = -\frac{1}{\sigma_z} \frac{\partial (Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z} \quad (3.40)$$

La solution générale est la somme de celle de l'équation sans second membre et de la solution particulière :

$$P_{xza}(t) = C \exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}t\right) - \frac{1}{\sigma_z} \frac{\partial(Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z} \quad (3.41)$$

En considérant à l'instant $t = 0$, $P_{xza}(t = 0) = 0$ on détermine la constante C par :

$$C = \frac{1}{\sigma_z} \frac{\partial(Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z} \quad (3.42)$$

En remplaçant la constante C donnée par l'expression 3.42 dans l'équation 3.41, on obtient :

$$P_{xza}(t) = \frac{1}{\sigma_z} \frac{\partial(Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z} [\exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}t\right) - 1] \quad (3.43)$$

Cette solution est valable quelque soit le temps t , à l'instant $t + \Delta t$, on a :

$$P_{xza}(t)(t + \Delta t) = \frac{1}{\sigma_z} \frac{\partial(Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z} [\exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}t\right) \exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}\Delta t\right) - 1] \quad (3.44)$$

De l'équation 3.43, on a :

$$\exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}t\right) = \frac{\sigma_z}{\frac{\partial(Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z}} P_{xza}(t) + 1 \quad (3.45)$$

En injectant dans l'équation 3.44 l'expression de $\exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}t\right)$ donnée par 3.45, on arrive à l'équation à discrétiser dans l'espace :

$$P_{xza}(t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}\Delta t\right) P_{xza}(t) + \frac{1}{\sigma_z} \frac{\partial(Q_{yx} + Q_{yz})}{\partial z} [\exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}\Delta t\right) - 1] \quad (3.46)$$

La discrétisation de cette dernière équation aux différences centrées dans l'espace donne l'équation de mise à jour de P_{xza} :

$$P_{xza}^{n+1}(i, j, k) = \exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}\Delta t\right)P_{xza}^n(i, j, k) + \frac{1}{\sigma_z\Delta z}[\exp\left(-\frac{\sigma_z}{\epsilon}\Delta t\right) - 1](Q_{yx}^{n+1/2}(i, j, k) - (3.47)$$

$$Q_{yx}^{n+1/2}(i, j, k - 1) + Q_{yz}^{n+1/2}(i, j, k) - Q_{yz}^{n+1/2}(i, j, k - 1))$$

Le calcul des composantes P_{yza} , Q_{xza} et Q_{yza} respectivement à partir des équations 3.37c, 3.37g et 3.37h se fait de manière similaire que précédemment. Les autres composantes sont obtenues en discrétisant le reste d'équations 3.37 aux différences centrées dans l'espace et dans le temps.

Une fois que les composantes des vecteurs \vec{P}_a et \vec{Q}_a dans le milieu PML sont calculées, on passe au calcul des composantes des vecteurs \vec{P} et \vec{Q} . Après un remaniement algébrique du système d'équations 3.36, la mise à jour des composantes des vecteur \vec{P} et \vec{Q} dans le milieu PML se fait de manière suivante :

$$P_z^n = \frac{1}{\left(1 - \frac{\sin(\theta)^2 \cos(\phi)^2}{\epsilon\mu v_i^2} - \frac{\sin(\theta)^2 \sin(\phi)^2}{\epsilon\mu v_i^2}\right)} [P_{za}^n + \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{\epsilon v_i} (Q_{yxa}^n + Q_{yza}^n) - \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{\epsilon v_i} (Q_{xya}^n + Q_{xza}^n)] \quad (3.48)$$

$$Q_z^n = \frac{1}{\left(1 - \frac{\sin(\theta)^2 \cos(\phi)^2}{\epsilon\mu v_i^2} - \frac{\sin(\theta)^2 \sin(\phi)^2}{\epsilon\mu v_i^2}\right)} [Q_{za}^n + \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{\mu v_i} (P_{xya}^n + P_{xza}^n) - \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{\mu v_i} (P_{yxa}^n + P_{yza}^n)] \quad (3.49)$$

$$P_{xy}^n = P_{xya}^n + \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{\epsilon v_i} Q_z^n \quad (3.50)$$

$$P_{xz}^n = P_{xza}^n \quad (3.51)$$

$$P_{yz}^n = P_{yza}^n \quad (3.52)$$

$$P_{yx}^n = P_{yxa}^n - \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{\epsilon v_i} Q_z^n \quad (3.53)$$

$$Q_{xy}^n = Q_{xya}^n - \frac{\sin(\theta) \sin(\phi)}{\mu v_i} P_z^n \quad (3.54)$$

$$Q_{xz}^n = Q_{xza}^n \quad (3.55)$$

$$Q_{yz}^n = Q_{yza}^n \quad (3.56)$$

$$Q_{yx}^n = Q_{yxa}^n + \frac{\sin(\theta) \cos(\phi)}{\mu v_i} P_z^n \quad (3.57)$$

De même que dans le cas de grille FDTD principale, toutes les composantes électriques

et magnétiques dans le milieu PML sont calculées aux instants $(n\Delta t)$ et $((n+1)\Delta t)$. En somme, 40 composantes dans le milieu PML sont nécessaires en incidence oblique.

3.5 Tests de validation du code FDTD en incidence oblique

Pour valider ce code FDTD en oblique, plusieurs tests seront effectués dans les cas des milieux non dispersifs (diélectrique, métal parfait) et dispersif (métal réel). Ces tests seront portés sur :

- cas 0D : Calcul des coefficients de transmission et de réflexion en polarisations TE et TM et comparaison avec les formules de Fresnel,
- cas 1D : Calcul de la transmission et de la réflexion en polarisations TE et TM et comparaison avec l'expérience et d'autres méthodes numériques,
- cas 2D : Calcul de la transmission et de la réflexion en polarisations TE et TM et comparaison avec d'autres méthodes numériques.

3.5.1 Structures non dispersives

- Test 0D

Le premier test effectué dans le cas diélectrique consiste à calculer les coefficients de transmission et de réflexion d'une onde plane polarisée linéairement et éclairant un dioptre plan séparant deux milieux d'indices différents (voir figure 3.5).

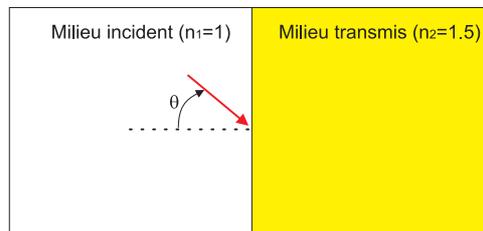


FIG. 3.5 – Interface plane séparant l'air et le verre (test 0D diélectrique)

Sur la figure 3.6, on compare nos résultats FDTD à ceux théoriques. On constate que nos calculs FDTD sont en très bon accord avec la théorie. Les erreurs relatives aux calculs de la transmission T et de la réflexion R en fonction de l'angle d'incidence θ sont représentées sur les figures 3.6-c et 3.6-d pour les polarisation TE et TM respectives. Ces erreurs sont calculées selon l'expression $|T_{FDTD} - T|/T$, où T_{FDTD} est la transmission calculée par la FDTD et T est celle obtenue théoriquement. On constate que le maximum de l'erreur relative pour le calcul de la transmission est autour de 10^{-3} pour les angles

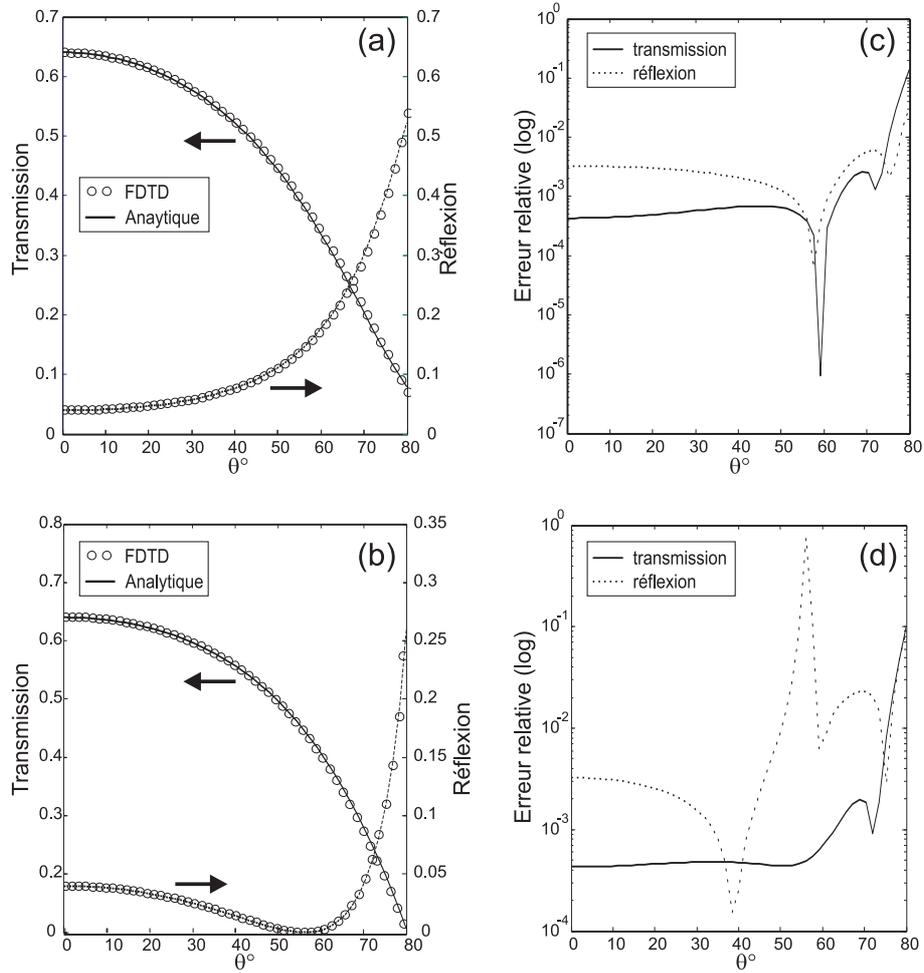


FIG. 3.6 – Coefficients de transmission et de réflexion à l'interface plane air-verre. a) et c) polarisation TE; b) et d) polarisation TM. Les résultats FDTD sont comparés à ceux théorique en a) et b). Les erreurs relatives sont présentées en c) et d).

d'incidence $\theta < 60$. Sur la figure 3.6-d, on note une erreur d'environ 100 % pour une valeur particulière de l'angle d'incidence (56.3°) : angle de Brewster pour lequel rien n'est réfléchi en polarisation TM. A cet angle, le coefficient de réflexion R s'annule et la valeur de $|R_{FDTD} - R|/R$ devient insignificative.

Ces erreurs sont assez faibles ce qui dénote la précision de notre code. Ces erreurs peuvent être minimisées en augmentant l'épaisseur de la PML et en minimisant les pas de discrétisation spatiale.

- Test 1D

Pour tester les objets diffractants, nous avons commencé par calculer la réflexion d'une onde plane par un réseau lammelaire en métal parfait. Cette application a fait l'objet d'une

étude expérimentale et théorique par la méthode différentielle [11]. Sur la figure 3.7, on présente les coefficients de réflexion de l'ordre zéro diffracté, obtenus par la méthode FDTD, pour les deux polarisations TE et TM . Les paramètres du réseau lamellaire sont donnés sur la figure 3.7 avec $h = d/4$ et $c = d/2$. Ces résultats sont en très bon accord avec ceux publiés dans la référence [11] (figure 6.2.a et figure 6.2.b de la page 162).

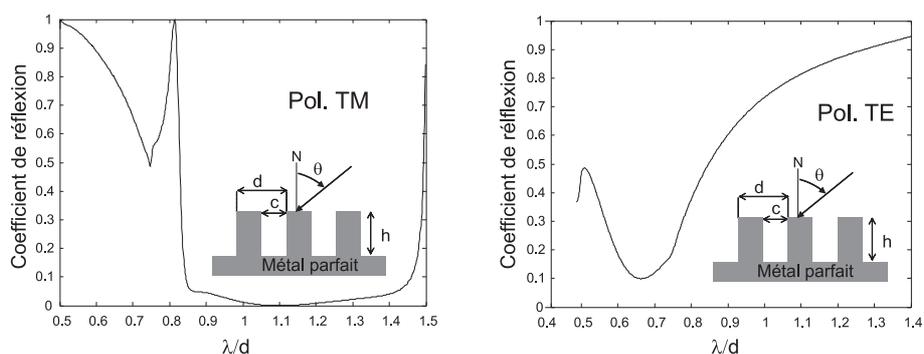


FIG. 3.7 – Coefficients de réflexion d'ordre zéro d'un réseau lamellaire en métal parfait pour les deux polarisation TE et TM.

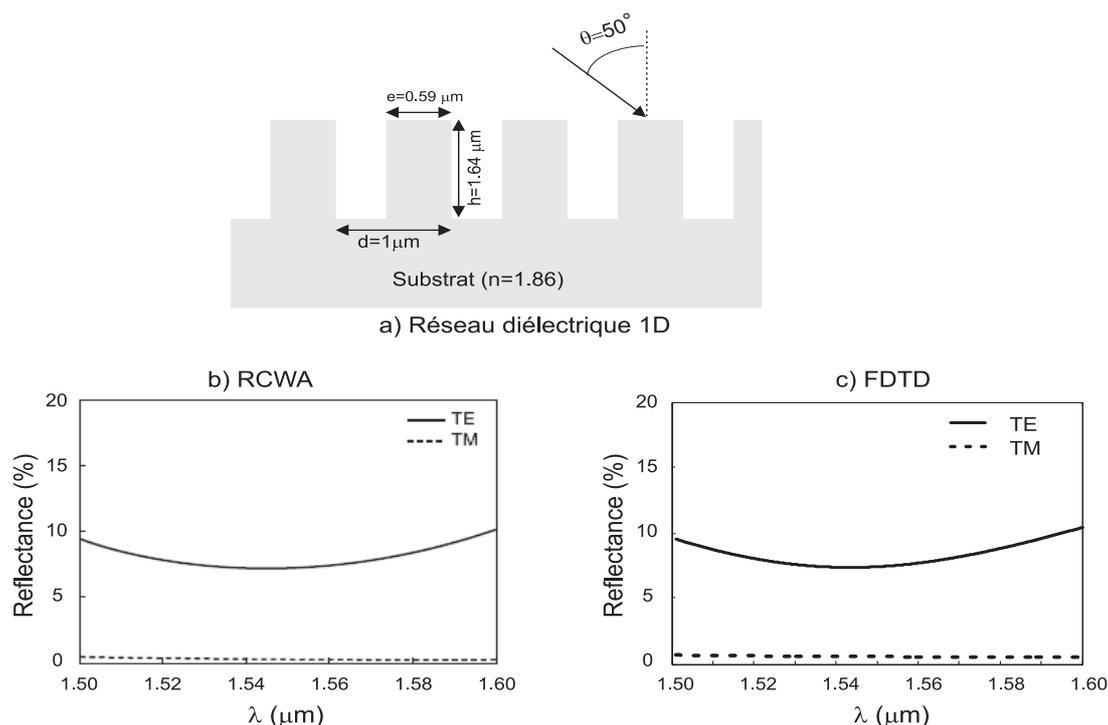


FIG. 3.8 – Reflectance d'un réseau périodique 1D diélectrique pour les deux polarisations TE et TM obtenue par les méthodes RCWA et FDTD.

Un autre test 1D est effectué en calculant la réflexion d'un réseau diélectrique périodique suivant une direction. Cette application a fait l'objet d'une étude théorique par la méthode RCWA [12]. Les paramètres de ce réseau sont portés sur la figure 3.8-a. Notons, là encore, la concordance de nos résultats FDTD avec ceux obtenus par la méthode RCWA (figure 4-b de la référence [12])

- Test 2D

Dans cette partie, nous allons tester notre code FDTD en oblique dans le cas général : structures périodiques selon deux directions et finies suivant la troisième. Ce test est général, car tous les paramètres seront considérés. En plus de la polarisation et de l'angle d'incidence, l'angle azimutal sera aussi pris en considération .

Pour cela, nous nous sommes intéressés à la structure étudiée par la méthode modale vectorielle (VMM) dans les références [13] [14]. La structure consiste en un réseau bi-périodique de parallélépipèdes de permittivité $\epsilon_a = 10$ plongés dans un milieu diélectrique de permittivité $\epsilon_b = 4$ (voir figure 3.9-d). L'ensemble de la structure est supposé être entouré d'air. Les périodes suivant x et y sont $a = b = 20mm$. La hauteur des parallélépipèdes suivant l'axe z est $h = 2mm$ et les deux cotés de la base, parallèles aux directions de périodicité x et y , sont égaux et valent $10mm$.

Les premières simulations effectuées consistent à calculer la réflexion de l'ordre zéro diffracté pour les deux polarisations TE et TM et pour différents angles d'incidence θ . L'angle azimutal est fixé à $\phi = 0^\circ$. Sur la figure 3.9, on compare nos résultats FDTD avec ceux des autres méthodes. On constate une légère différence entre nos résultats et ceux publiés dans [13], notamment au niveau des pics de resonance. Pour $\theta = 0^\circ$, par raison de symétrie, les deux polarisations TE et TM sont équivalentes. Pour cette raison, les résultats correspondants à la polarisation TM ne sont pas portés sur la figure 3.9.

Ce type de structures est très difficile à modéliser par les méthodes numériques fréquentielles à cause des singularités que présentent leurs réponses spectrales. Le calcul large bande par ces méthodes nécessite un calcul fréquence par fréquence, et de ce fait on risque de louper des points se situant dans les zones singulières. Comme on peut le noter sur la figure 3.9-a, les résultats de la méthode FDTD sont consistants et présentent toujours des réponses spectrales intermédiaires comparés à ceux obtenus par d'autres méthodes.

Pour tester notre code FDTD en oblique quand l'angle azimutal change, nous avons fait d'autres calculs de réflexion de la structure présentée sur la figure 3.9-d en fonction de l'angle ϕ pour les deux polarisations TE et TM , l'angle d'incidence étant fixé $\theta = 30^\circ$. Les résultats sur une large gamme de fréquences sont illustrés sur la figure 3.10.

Attiya and Kishk [13] ont calculé les coefficients de réflexion en fonction de ϕ à une valeur fixe de la fréquence $f = 10GHz$. Pour comparer nos résultats à ceux publiés dans [13], nous avons fait une coupe sur la figure 3.10 à $f = 10GHz$.

Sur la figure 3.11, on note un décalage entre nos résultats FDTD et ceux de la méthode VMM [13]. Cela est attribué à la discrétisation spatiale : les pas de discrétisation utilisés sont $dx = dy = 0.666mm$, et le pas dz varie de $0.133mm$ au niveau de la structure jusqu'à $1mm$. Pour tester la convergence des résultats FDTD en fonction des valeurs des pas de discrétisation, nous avons refait l'application de la figure 3.9-f avec les pas

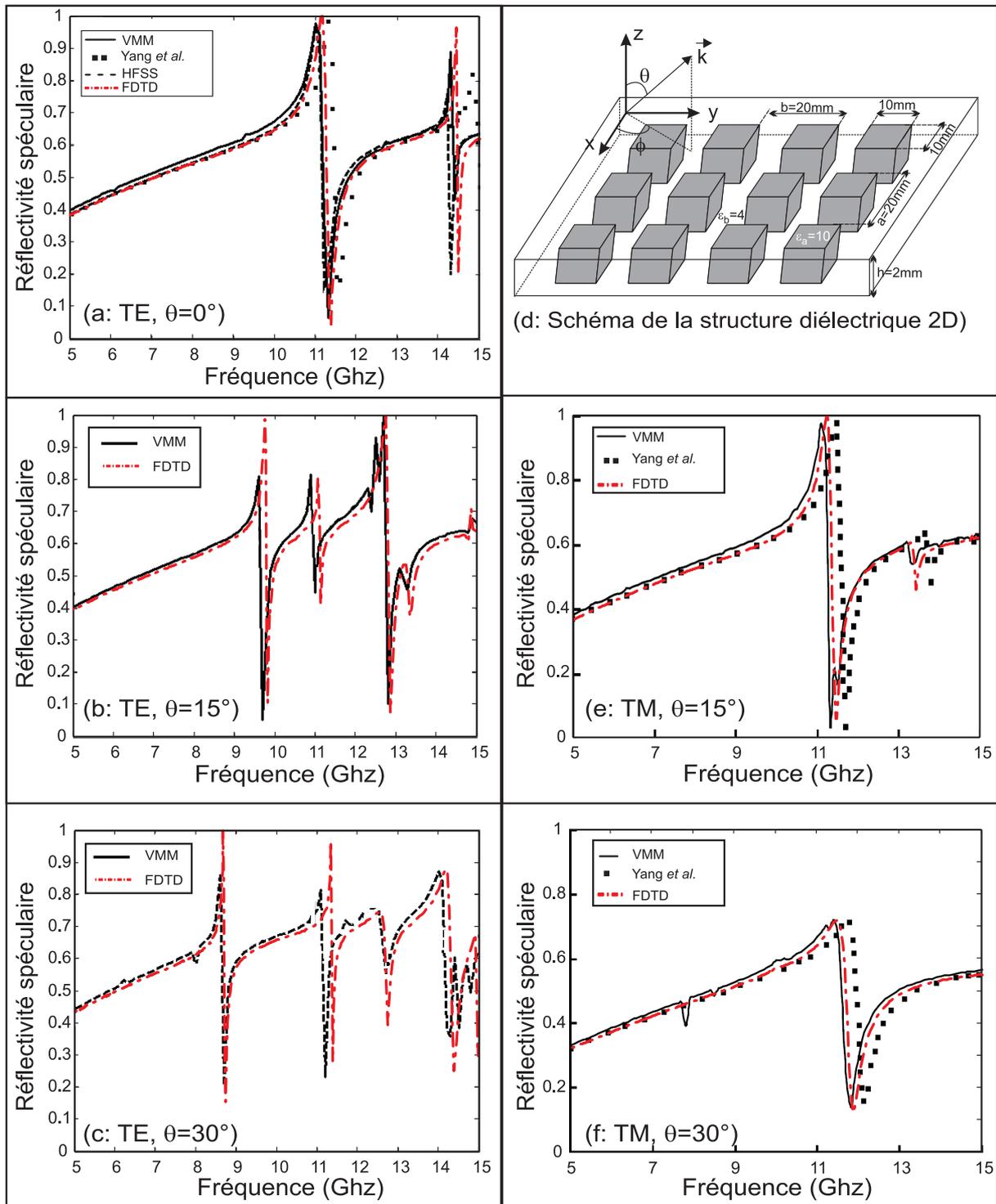


FIG. 3.9 – Réflectivité spéculaire de la structure bi-périodique diélectrique définie en d) pour les deux polarisation TE et TM et pour différents angles d'incidence θ , l'angle azimutal $\phi = 0^\circ$.

suivants $dx = dy = 0.333\text{mm}$, et dz allant de 0.133mm à 1mm . Les résultats obtenus

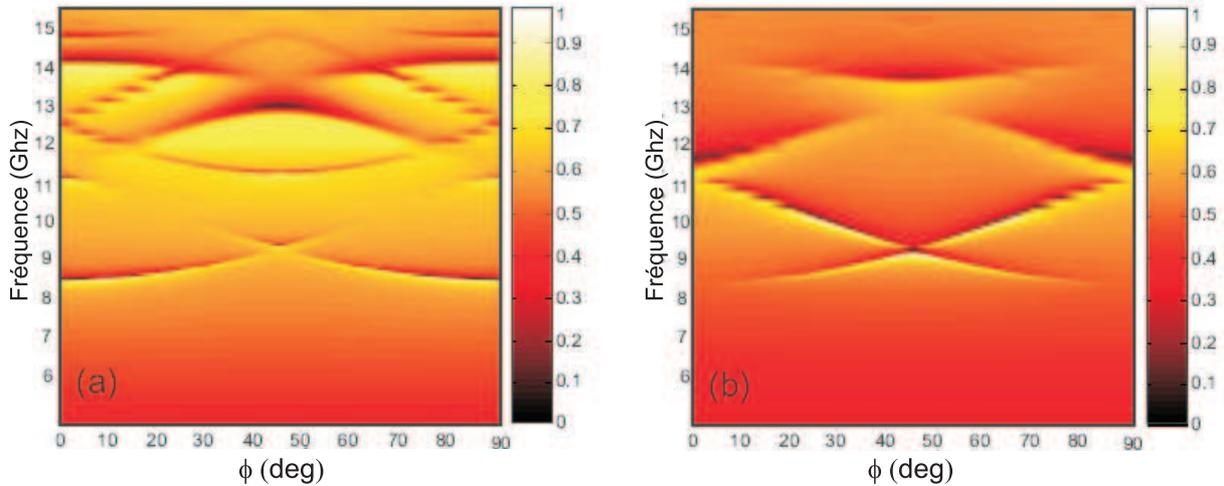


FIG. 3.10 – Réflectivité spéculaire calculée par FDTD de la structure définie par le schéma de la figure 3.9-d) en fonction de l'angle azimutal ϕ . a) Polarisation TE et b) polarisation TM. L'angle d'incidence $\theta = 30^\circ$

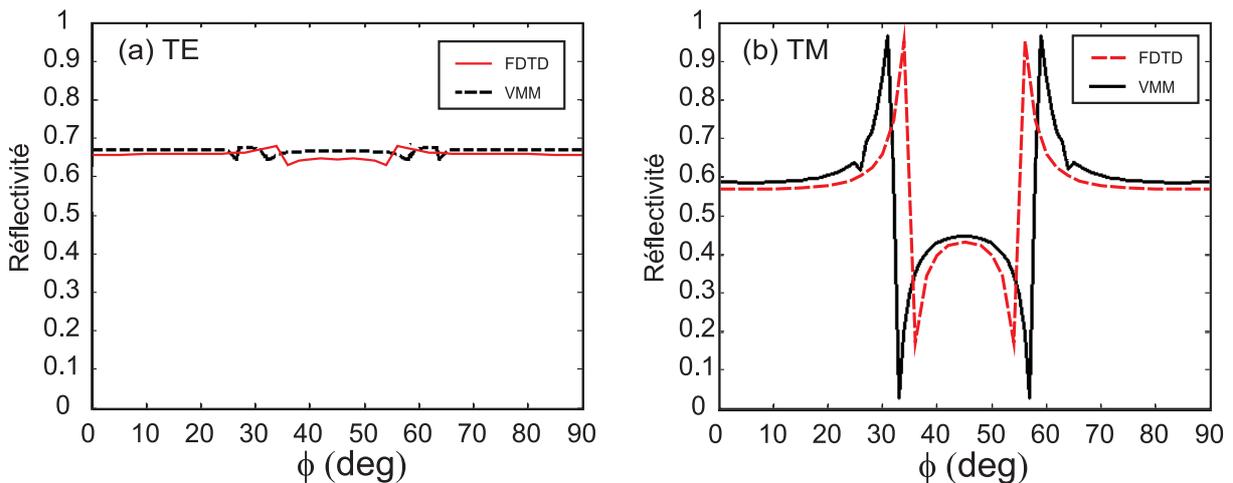


FIG. 3.11 – Coupe horizontale à la fréquence $f = 10\text{ GHz}$ des deux courbes de la figure 3.10. Nos résultats FDTD sont comparés à ceux publiés par Attiya et Kishk [13].

sont comparés à ceux de la figure 3.9-f sur la figure 3.12. On constate que les deux courbes se superposent (figure 3.12-a)), ce qui implique que le maillage utilisé précédemment est suffisamment fin pour assurer la convergence de nos résultats FDTD.

Ce test est refait à $\phi = 30^\circ$. Contrairement au cas où $\phi = 0^\circ$, on note un léger décalage entre les deux courbes obtenues avec des paramètres de discrétisation différents. Cette petite différence est visible au niveau des pics de résonances.

La confrontation de nos résultats FDTD en oblique à ceux de la littérature valide notre code dans le cas des structures bi-périodiques diélectriques. Cependant, nous avons jugé utile de comparer ces résultats FDTD en oblique quand l'angle azimutal change par

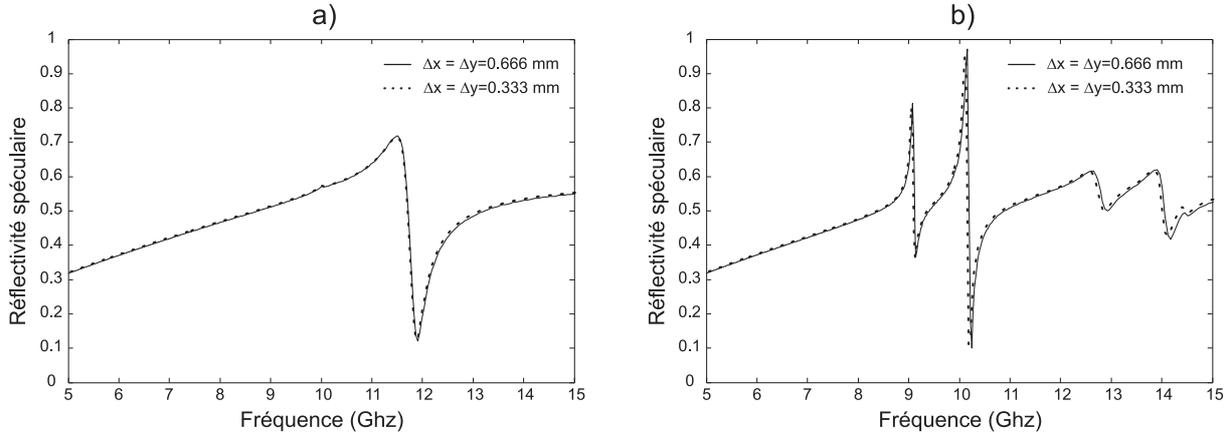


FIG. 3.12 – Tests de convergence dans le cas de la polarisation TM, $\theta = 30^\circ$. a) $\phi = 0^\circ$ et b) $\phi = 30^\circ$

rapport à ceux des autres méthodes rigoureuses telles que la méthode FMM.

3.5.2 Structures dispersives : tests de validation

Dans cette partie, nous ferons des tests de validation de ce code FDTD en oblique dans le cas des métaux réels décrits soit par le modèle de Drude ou par le modèle de Drude-Lorentz. Comme dans le cas diélectrique, nous allons distinguer les cas $0D$, $1D$ et $2D$. Dans tous les cas, les métaux retenus sont l'argent et l'or pour valider, respectivement, les modèles de Drude et de Drude-Lorentz. Ce choix est justifié par les données relatives à ces matériaux dans la littérature. Dans tout le reste de ce travail, les paramètres utilisés dans les deux modèles de dispersion sont ceux correspondants aux valeurs expérimentales de Johnson et Cristy [15].

Tests $0D$: Couches minces

Dans ce cas, nous allons nous intéresser à la propagation d'une onde à travers une couche mince d'argent d'épaisseur 20 nm, pour un angle d'incidence $\theta = 60^\circ$ et un angle azimutal $\phi = 0^\circ$. Nous avons calculé les transmissions à travers cette couche pour les deux polarisations TE et TM , et nous les avons comparées aux résultats analytiques sur les figures 3.13-b et 3.13-d respectivement. Ces dernières, montrent que nos résultats obtenus par la méthode FDTD sont en très bon accord avec ceux obtenus analytiquement. Le maximum des erreurs relatives, présentées sur les figures 3.13-c et 3.13-e pour les polarisations TE et TM , est autour de 3×10^{-3} .

Pour tester le modèle de Drude-Lorentz adapté à la FDTD en oblique, nous avons refait l'application précédente en remplaçant l'argent par l'or. L'angle d'incidence dans

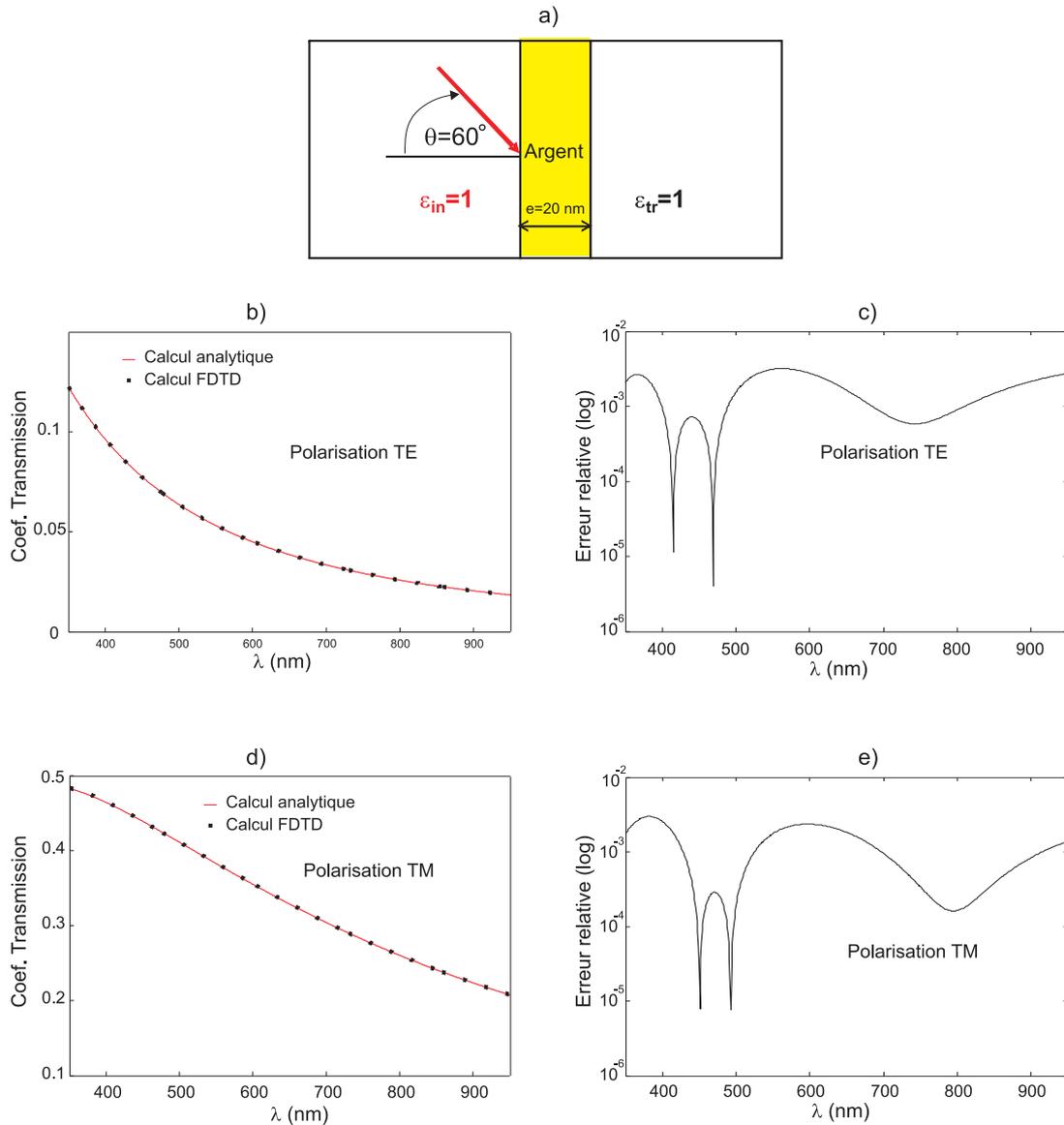


FIG. 3.13 – Transmission à travers une couche plane d'argent ; épaisseur=20 nm, $\theta = 60^\circ$ et $\phi = 0^\circ$. b) et c) polarisation TE ; d) et e) polarisation TM. Les résultats FDTD sont comparés à ceux théorique en b) et d). Les erreurs relatives sont présentées en c) et e).

ce cas est pris $\theta = 45^\circ$. Les résultats de la figure 3.14 montrent la concordance de nos résultats avec la théorie. Les erreurs relatives sont présentées sur les figures 3.14-c et 3.14-e pour les polarisations TE et TM respectivement. Dans les deux cas de polarisation, le maximum de l'erreur relative est inférieur à 10^{-2} . Ces erreurs peuvent être minimisées en diminuant les pas de discrétisation spatiaux et en augmentant l'épaisseur de la couche PML.

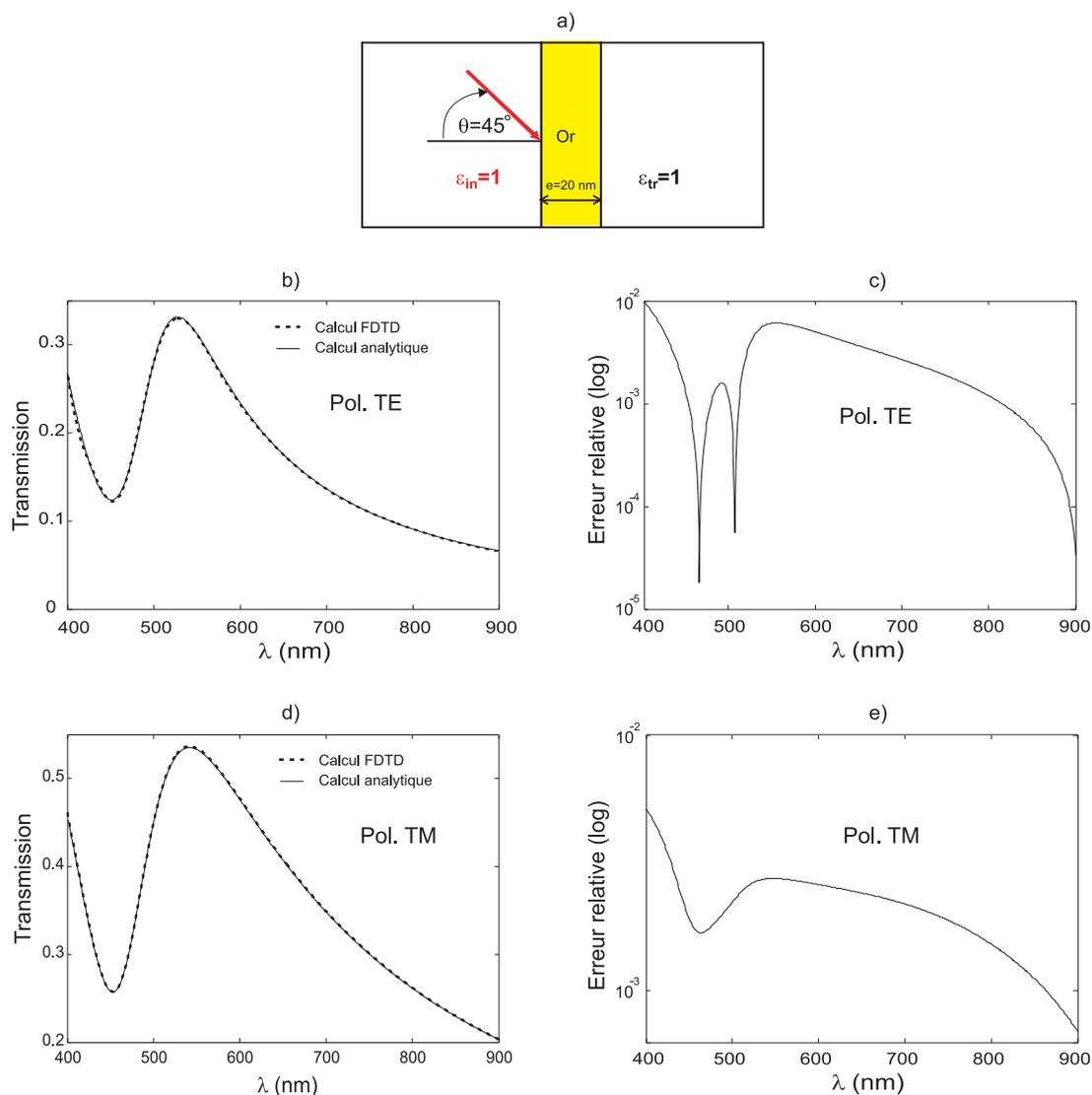


FIG. 3.14 – Transmission à travers une couche plane d'or ; épaisseur=20 nm, $\theta = 45^\circ$ and $\phi = 0^\circ$. b) et c) polarisation TE ; d) et e) polarisation TM. Les résultats FDTD sont comparés à ceux théorique en b) et d). Les erreurs relatives sont présentées en c) et e).

Réseau 1D

Nous allons nous intéresser maintenant au cas de la transmission à travers un réseau lamellaire 1D en argent et en or (voir figure 3.15). Sur la figure 3.16, nous comparons les résultats obtenus par FDTD à ceux donnés par la méthode modale de Fourier (FMM). Ce calcul a été effectué pour la polarisation *TM* à un angle d'incidence $\theta = 45^\circ$ et à l'angle azimutal $\phi = 0^\circ$.

Les paramètres de ce réseau sont : période $p = 900 \text{ nm}$, largeur de la fente $f = 90 \text{ nm}$ et hauteur $h = 400 \text{ nm}$. Pour l'optimisation du calcul FDTD, nous avons effectué un maillage

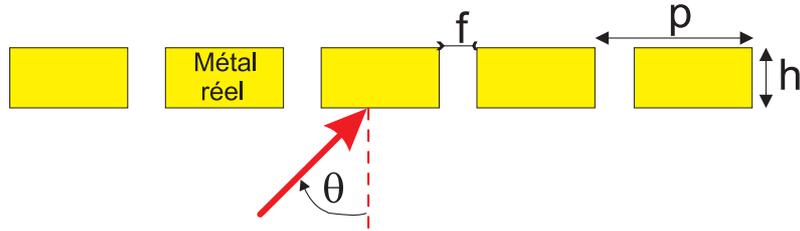


FIG. 3.15 – Réseau lammellaire en métal réel

non uniforme. Les pas de discrétisation spatiaux varient de 2.5 nm à 20 nm .

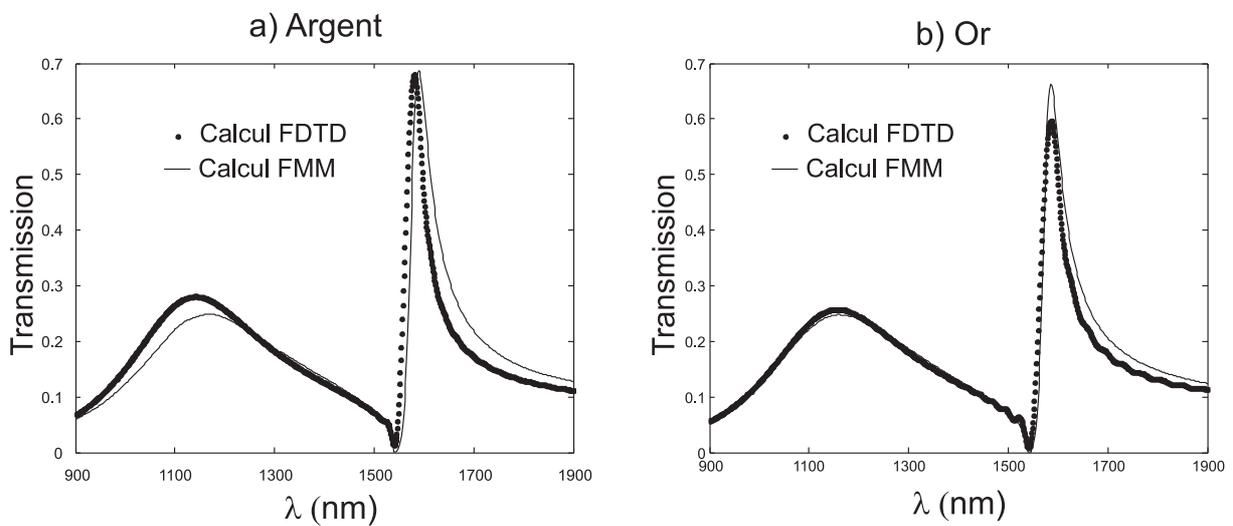


FIG. 3.16 – Transmission à travers un réseau lammellaire en argent et en or

Dans ce cas, nous constatons l'efficacité de notre code pour ce type de structure. Comme le montre la figure 3.16, il y a à nouveau une assez bonne correspondance entre nos résultats FDTD et ceux obtenus par FMM.

Réseau métallique 2D :

Dans ce cas, on fait le calcul de la transmission à travers la structure AAA à l'aide de deux codes FDTD différents : l'un fonctionnant en incidence normale et l'autre en incidence oblique à $\theta = 0^\circ$. Les paramètres de la structures AAA sont $R_i = 50\text{nm}$, $R_e = 100\text{nm}$ et la hauteur $h = 240\text{nm}$. La cavité coaxiale est éclairée en incidence normale dans le vide.

On constate sur la figure 3.17 que les courbes de transmission, à travers la cavité coaxiale faite en or et et en argent, obtenues par les deux différents codes FDTD se superposent. Comme ce code est validé dans les cas des structures diélectriques 2D et métallique 1D, nous jugeons que ce dernier test, effectué en incidence nulle, suffit pour valider le code FDTD en oblique dans le cas des structures bi-périodiques dispersives.

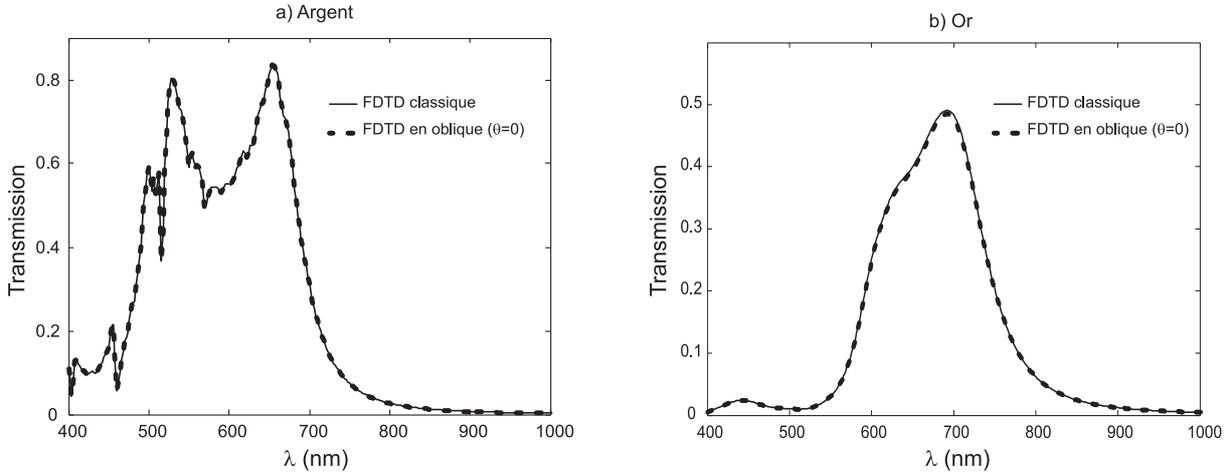


FIG. 3.17 – Transmission à travers la structure AAA faite en métal réel (or et argent) et éclairée en incidence nulle.

3.5.3 Limites du modèle mis en oeuvre

Les tests précédents sont effectués dans les cas où l'indice de réfraction du milieu incident est toujours inférieur à l'indice du milieu transmis. Dans ce cas précis, nous avons vu que le code oblique élaboré est validé pour tous les angles d'incidence.

Cependant, ce code est limité à des angles d'incidence inférieurs à l'angle critique quand l'indice du milieu incident est supérieur à celui du milieu transmis. L'angle critique θ_c est donné par $\theta_c = \sin^{-1}(n_{tr}/n_{in})$, avec n_{in} et n_{tr} sont respectivement les indices des milieux incident et transmis. Dans le cas où le milieu incident est le verre, d'indice $n_{in} = 1.5$, et le milieu transmis est le vide $n_{in} = 1$, $\theta_c = 41.83^\circ$. Comme le montre la figure 3.18, le code en oblique donne de bons résultats pour les deux polarisations TE et TM si l'angle d'incidence est inférieur à θ_c . Pour des angles $\theta \geq \theta_c$, le code FDTD en oblique mis en oeuvre diverge. Ce problème survient dès que le terme $(1 - \frac{\sin(\theta)^2 \cos(\phi)^2}{\epsilon\mu v_i^2} - \frac{\sin(\theta)^2 \sin(\phi)^2}{\epsilon\mu v_i^2})$ (voir équations 3.12) devient négatif dans le milieu diélectrique d'indice de réfraction n inférieur à celui du milieu incident n_{in} . Ce problème, que nous jugeons d'origine purement numérique, pourrait être résolu en proposant un autre schéma numérique de manière à faire disparaître ce terme dans les équations 3.12. L'analyse de ce problème, qui est en cours, nécessitera beaucoup de temps, car un nouveau algorithme implique de nouvelles équations dans les différents types de milieu (diélectrique, dispersif et PML).

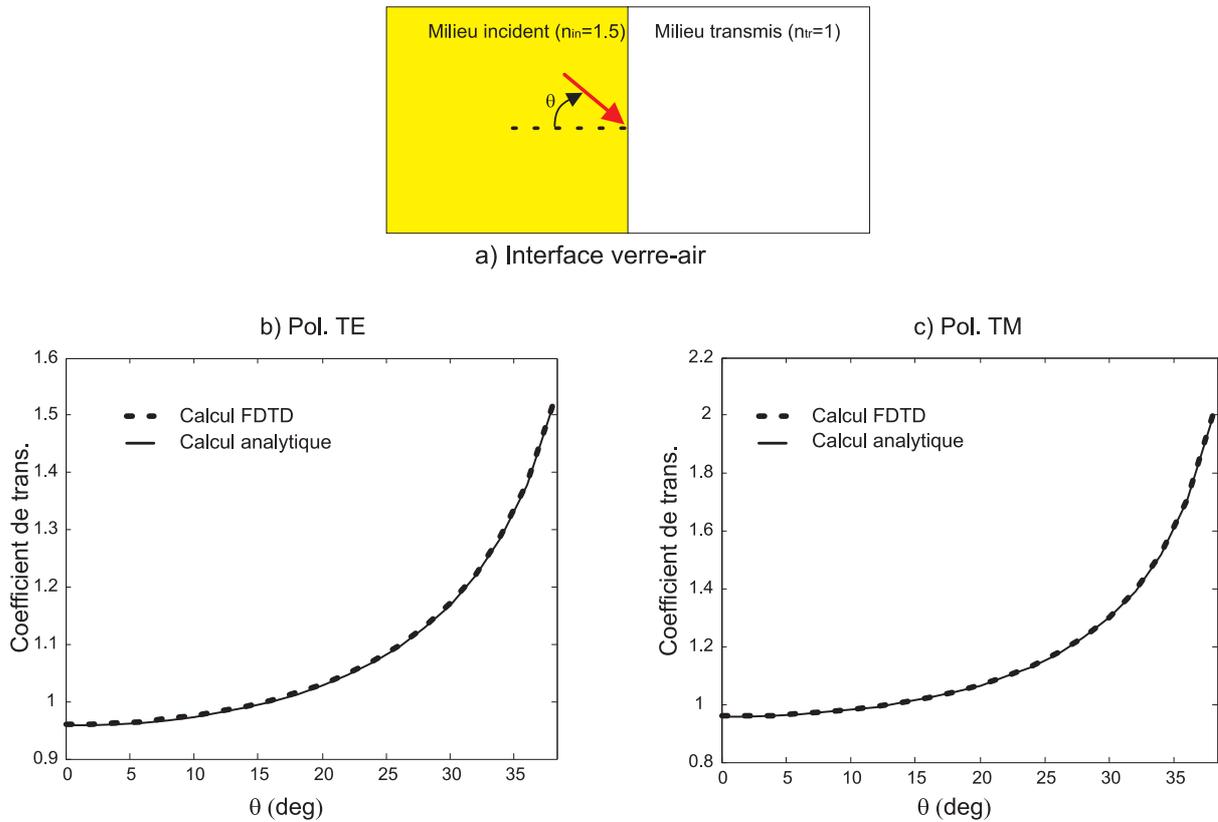


FIG. 3.18 – Coefficients de transmission d’une interface plane verre-air pour les deux polarisations TE et TM.

3.6 Etude de la structure AAA pour une application radôme

Dans cette partie, nous étudierons la transmission à travers une structure périodique à ouverture annulaire (structure AAA), en métal parfait, en fonction des angles d’incidence, azimutal et de la polarisation. Cette étude a été récemment réalisée par Van Labeke et al. [16] dans le cas d’une structure AAA à section carrée en argent pour une application radôme. Dans le but de montrer les potentialités de la structure AAA dans le domaine des grandes longueurs d’ondes (térahertz ou ondes millimétriques), nous avons repris cette étude dans le cas du métal parfait. Pour cette application (radôme), cette structure doit avoir la même réponse spectrale quelques soient la polarisation, l’angle d’incidence et l’angle azimutal.

Considérons une couche plane en métal parfait de hauteur $h = 3.6\text{mm}$ percée par des ouvertures annulaires, et déposée sur du verre comme le montre la figure 3.19.

Les valeurs des rayons intérieur et extérieur sont choisies de manière à avoir le pic de

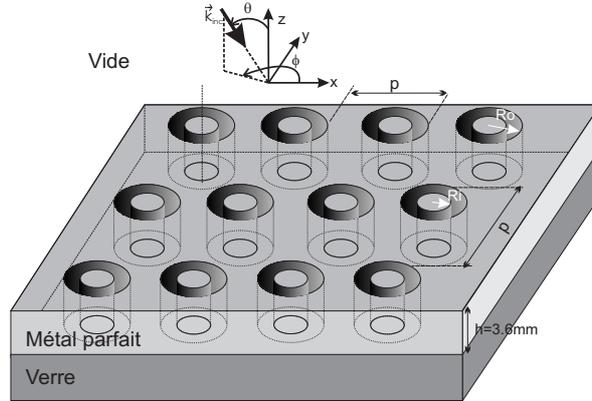


FIG. 3.19 – Structure AAA , le film métallique est déposé sur un substrat diélectrique (verre) et éclairé dans le vide.

transmission à la longueur d'onde recherchée, $R_i = 2.7\text{mm}$ et $R_e = 3.6\text{mm}$, et pour éviter l'anomalie de Rayleigh en incidence normale, la période est fixée à $p = 12.6\text{mm}$. Dans le but de bien décrire la structure (les ouvertures et l'épaisseur du métal), un maillage non uniforme est incorporé dans l'algorithme FDTD.

Les figures 3.20-a) et 3.20-b) montrent la réponse spectrale en transmission pour différentes valeurs de l'angle azimutal dans les cas des polarisations TE et TM respectivement. Pour les deux cas, l'angle d'incidence est fixé à $\theta = 20^\circ$. On constate que, hormis l'apparition de l'anomalie de Rayleigh (se manifestant par des pics de transmission très fins), la réponse spectrale demeure la même indépendamment de la polarisation et de l'angle azimutal. Notons que la discrétisation par des parallélépipèdes de la structure coaxiale qui donne une forme en escalier des contours circulaires, peut légèrement affecter la réponse spectrale quand les paramètres de l'onde incidente changent. C'est en effet ce que l'on peut remarquer sur les figures 3.20-a) et 3.20-b) où la position du pic se trouve très légèrement modifiée.

Pour voir l'effet de l'angle d'incidence θ , nous avons refait cette application en fixant l'angle azimutal $\phi = 0^\circ$ et en faisant varier l'angle θ de 0° à 40° . Les résultats sont portés sur les figures 3.20-c) et 3.20-d) pour les deux polarisations TE et TM respectivement. Ces résultats montrent la robustesse de la structure AAA vis-à-vis de l'angle d'incidence. Pour la polarisation TE , la réponse spectrale est inchangée quand l'angle d'incidence varie. La légère différence des spectres quand θ varie est due à la discrétisation spatiale comme il a été mentionné plus haut. Cependant, en passant en polarisation TM , l'anomalie de Rayleigh apparaît sous forme de discontinuités et perturbe le spectre de transmission. Pour y remédier, les paramètres géométriques de la structure coaxiale doivent être définis de manière à éloigner les anomalies de Rayleigh des pics de transmission [16].

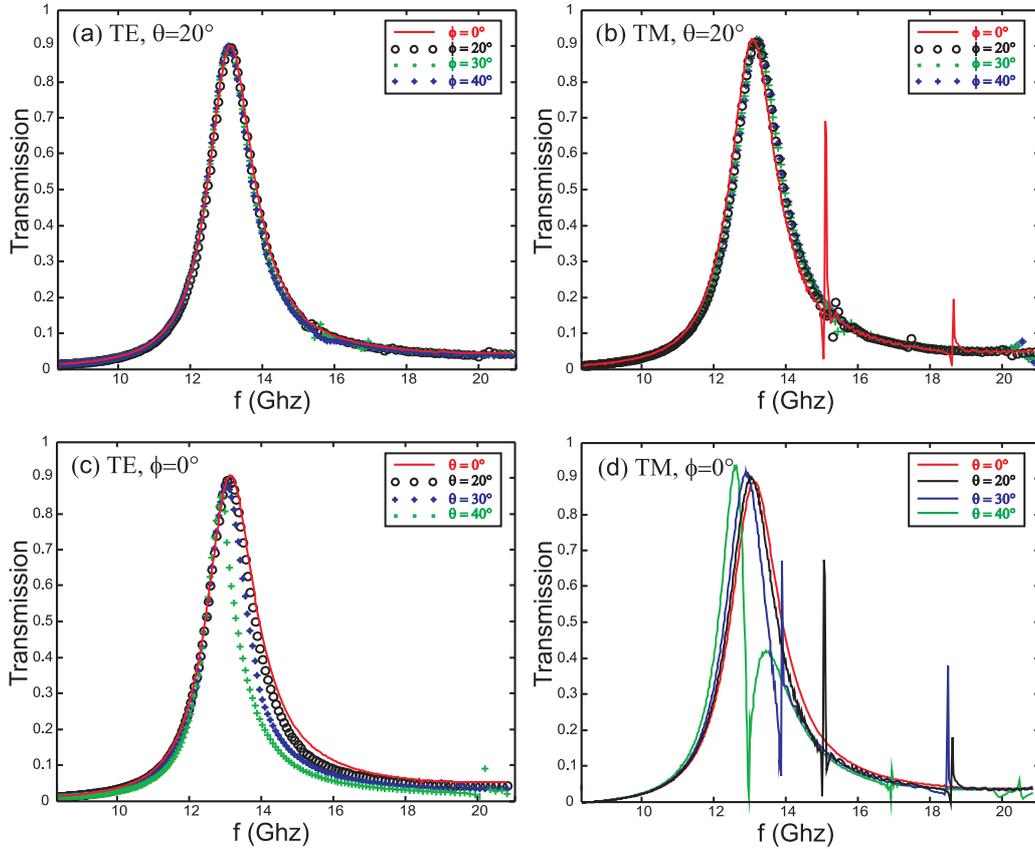


FIG. 3.20 – Réponse spectrale en transmission de la structure AAA présentée sur la figure 3.19, avec $R_i = 2.7mm$, $R_e = 3.6mm$, $p = 12.6mm$ et $h = 3.6mm$.

3.7 Excitation du mode TEM de la structure AAA en métal réel

Les applications de la structure AAA sont d'une grande importance en électromagnétisme (transmission exaltée, surfaces sélectives en fréquence FSS...). Les recherches visant à bien exploiter ses propriétés optiques très intéressantes ne cessent de se développer. Historiquement, cette structure a été proposée [17] car une telle cavité coaxiale admet un mode guidé sans fréquence de coupure i.e. le mode TEM. Cependant, l'excitation de ce mode, pour lequel le champ électromagnétique admet une symétrie de révolution parfaite, est impossible à l'aide d'une onde plane polarisée linéairement en incidence normale ; il ne peut être généré que par une onde polarisée radialement. En incidence normale, le mode excité, et qui est à l'origine de la transmission extraordinaire, est le mode TE_{11} [19]. Ce dernier, admet une fréquence de coupure mais il présente un bon recouvrement avec une onde plane polarisée rectilignement éclairant la structure sous incidence normale.

L'excitation du mode TEM présente plusieurs avantages par rapport au mode TE_{11} . Le mode TEM n'admet pas de fréquence de coupure. Ainsi, et en première approximation,

la position du pic de transmission correspondant à l'excitation de ce mode ne dépendra que de l'épaisseur de la couche métallique et de la nature du métal. Il peut donc correspondre à une longueur d'onde supérieure à celle imposée par le mode TE_{11} lorsque l'on éclaire la structure par une onde polarisée linéairement.

Récemment, Baida [18] a démontré théoriquement la possibilité d'exciter le mode TEM de la structure AAA faite en métal parfait via une lumière polarisée linéairement sous deux conditions sur l'onde incidente : la première est qu'elle doit se propager en incidence oblique et la deuxième, qu'elle soit polarisée TM. Dans ce paragraphe, nous étendrons les résultats obtenus dans la référence [18] au domaine du visible, région de spectre électromagnétique où les pertes dans les métaux nobles sont non négligeables.

La position spectrale de ce pic TEM, qui est sans fréquence de coupure, est directement liée à la condition de résonance de la cavité (similaire à celle d'un Fabry-Pérot) ouverte formée par chaque trou annulaire [18] :

$$\lambda_{TEM} = \frac{2\pi h}{l\pi - \psi_r} \quad (3.58)$$

avec λ_{TEM} est la longueur d'onde associée au pic TEM, h dénote l'épaisseur de la couche métallique, ψ_r représente la variation de phase due aux réflexions du mode guidé par les deux extrémités ouvertes des cavités annulaires, et l un entier positif non nul.

Dans le cas général, la condition de résonance ne peut-être obtenue que pour une épaisseur du film métallique supérieure à une épaisseur minimale. Dans le domaine des micro-ondes et térahertz, cette condition peut être remplie sans que la valeur de la transmission soit affectée, il est toujours possible de construire des structures très épaisses car le métal se comporte comme conducteur parfait et le champ EM n'y pénètre pas. Cette solution n'est pas possible dans la gamme optique à cause de la dissipation énergétique dans le métal. On montrera que la nature elle-même de ces métaux jouera un rôle positif pour remédier à ce problème.

La structure étudiée est celle présentée sur la figure 3.19 sans le substrat, le vide constitue les deux milieux transmis et incident. Les paramètres géométriques de la structure sont $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et période $p = 300nm$. Le premier calcul effectué consiste à montrer la possibilité d'exciter le mode TEM de la structure AAA faite en argent par une lumière polarisée linéairement. Dans le but de valider, encore une fois, les deux conditions nécessaires à l'excitation du mode TEM [18], nous avons effectué un calcul en incidence nul et un autre calcul en incidence oblique pour les deux polarisations TE et TM . Les résultats sont portés sur la figure 3.21. Notons que les deux polarisations TE et TM sont équivalentes en incidence normale.

On voit bien, sur la figure 3.21, l'apparition d'un pic supplémentaire dans le cas de la polarisation TM en oblique par rapport à l'incidence normale et à la polarisation TE.

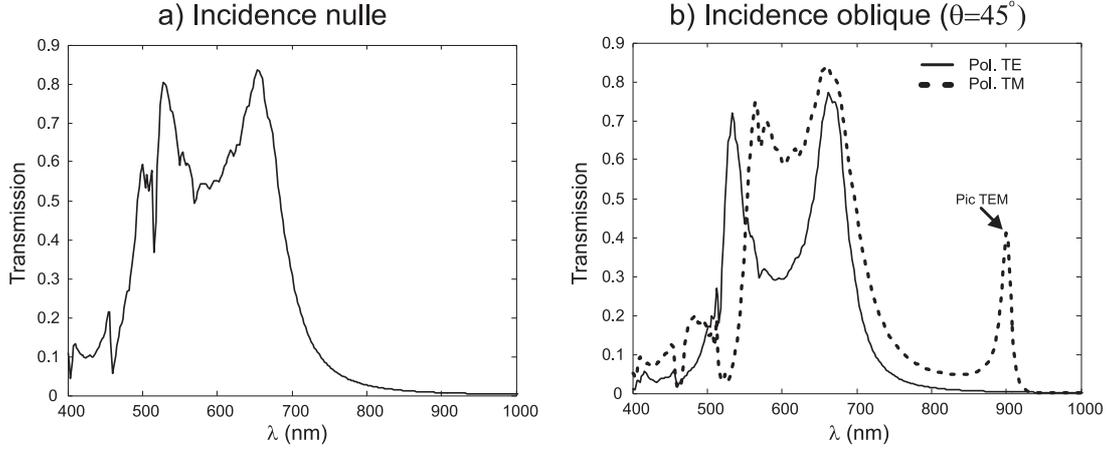


FIG. 3.21 – Transmission à travers une structure coaxiale en argent montrant l’excitation du mode TEM par une lumière polarisée TM en incidence oblique; $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et $p = 300nm$. L’angle azimutal $\phi = 0^\circ$.

Pour confirmer la nature de ce mode généré par une onde polarisée TM à $\theta = 45^\circ$, nous avons représenté la distribution spatiale des modules des composantes radiale, azimutal et axial du champ électrique à la longueur d’onde correspondant au pic supplémentaire de transmission situé à $\lambda_{TEM} = 900 nm$. Cette distribution est calculée dans le plan polaire (r, ϕ) à l’intérieur de la cavité à une distance $z = 200nm$ mesurée du côté de l’onde incidente.

On constate sur la figure 3.22 que la la composante radiale ne dépend pas de l’angle azimutal ϕ , les composantes azimutal et axial sont presque nulles. La valeur de E_z n’est pas complètement nulle comme dans le cas du métal parfait mais possède une valeur qui reste très faible devant la composante radiale. Ce mode ressemble au mode TEM , il sera noté TEM' .

Ces résultats confirment encore et valident le résultat du calcul analytique de Baida [18] dans le cas où la structure AAA est faite en métal réel.

Pour voir l’effet de la dispersion sur la position de ce pic, nous avons refait le calcul en incidence oblique et polarisation TM dans le cas du métal parfait et de l’or. La dispersion de l’or est décrite par le modèle de Drude-Lorentz. Les résultats sont comparés sur la figure 3.23 à ceux obtenus dans le cas de l’argent.

La longueur d’onde correspondant au pic TEM dans le cas du métal parfait est $\lambda_{TEM}^{mp} = 636nm$. En remplaçant le métal parfait par l’argent la longueur du pic TEM' est shiftée vers $\lambda_{TEM'}^{Ag} = 900nm$. Dans le cas de l’or cette longueur d’onde est déplacée d’avantage vers les grandes longueurs d’ondes $\lambda_{TEM'}^{Au} = 935nm$. Comme les fréquences plasma des deux métaux sont presque identiques, les paramètres liés aux pertes ont un effet non négligeable sur le shift des longueur d’onde TEM' .

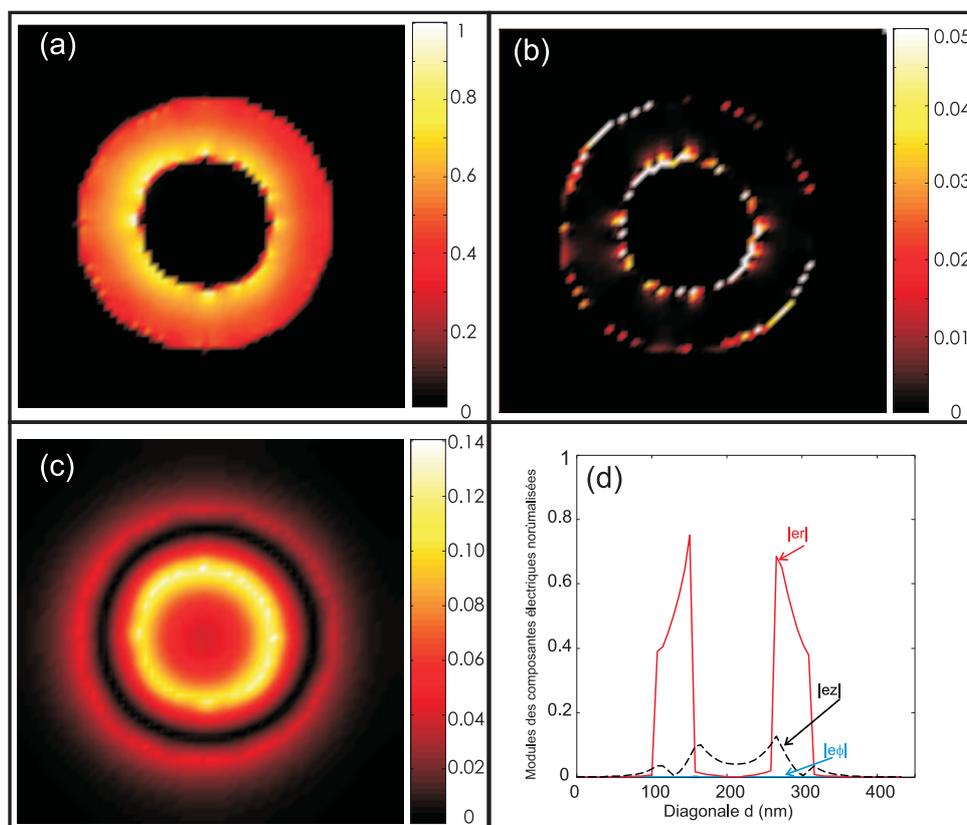


FIG. 3.22 – Modules des composantes a) radiale, b) azimutale et c) axiale du champ électrique normalisées par rapport à la valeur maximale de la composante radiale. d) Coupe suivant la diagonale des images a), b) et c). Ces images correspondent aux paramètres de la figure 3.21, polarisation TM, $\theta = 45^\circ$ et à $\lambda = 900\text{nm}$ correspondant au pic additionnel.

Notons que les pic TEM sont plus étroits que ceux des mode TE_{11} , cette propriété est d'une grande importance pour d'éventuelles applications dans le domaine du filtrage spectral.

L'intensité du pic TEM' dans les cas de l'argent et de l'or est beaucoup plus petite que dans le cas du métal parfait. Ceci est dû aux pertes induites par la nature réelle des deux métaux. Ces pertes peuvent être minimisées en diminuant la hauteur h de la couche métallique. Pour voir l'effet de la hauteur h , plusieurs calculs ont été effectués pour différents valeurs de h (voir figure 3.24). On constate que lorsque h diminue, l'intensité du pic TEM' augmente. Par contre, la position du pic TEM' est shiftée vers les petites longueurs d'ondes quand h diminue, ce qui est conforme à la relation théorique 3.58 établie dans le cas du métal parfait.

L'effet de l'angle d'incidence θ est aussi étudié. Sur la figure 3.25, on constate que l'intensité des pics TEM' augmente lorsque θ augmente, l'effet des pertes peut être ainsi minimisé en augmentant l'angle d'incidence. Notons aussi que la position des longueurs d'onde TEM' ne change pas en fonction de l'angle d'incidence.

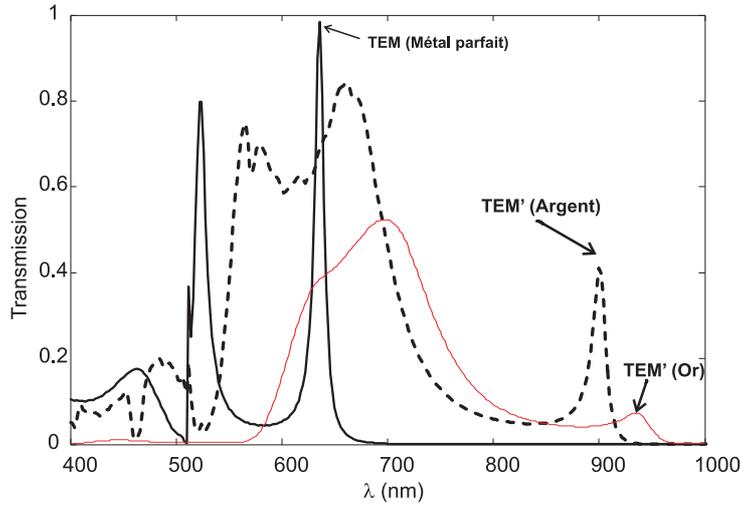


FIG. 3.23 – Transmission à travers une structure coaxiale en métal parfait, argent et or, $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et $p = 300nm$. La lumière incidente est polarisée TM, l'angle d'incidence $\theta = 45^\circ$ et l'angle azimutal $\phi = 0^\circ$.

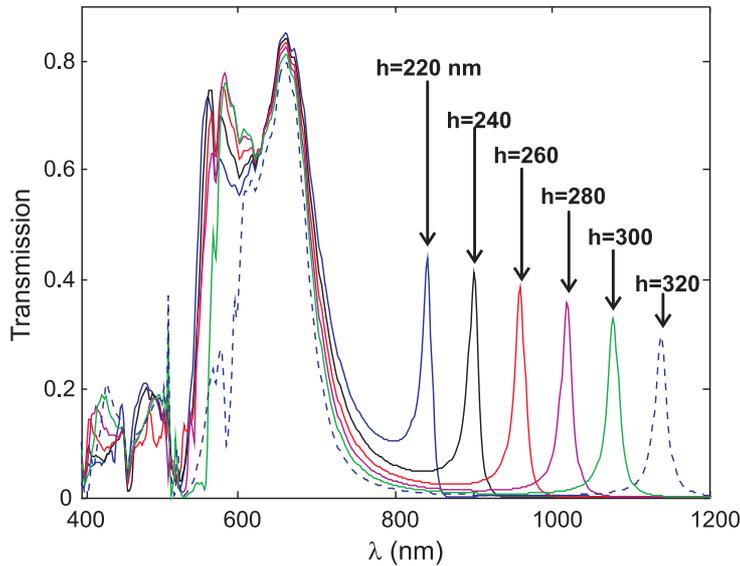


FIG. 3.24 – Transmission à travers une structure coaxiale en argent pour différentes valeurs de la hauteur h , $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$ et $p = 300nm$. La lumière incidente est polarisée TM, l'angle d'incidence $\theta = 45$ et l'angle azimutal $\phi = 0$.

Finalement, la position du pic *TEM* de la structure AAA dépend, en plus des rayons (via la valeur de l'indice effectif du mode) et de l'épaisseur de la couche métallique (via la relation de phase-matching), de la nature du métal. Les pertes peuvent être minimisées en diminuant la hauteur de la couche métallique et en augmentant l'angle d'incidence.

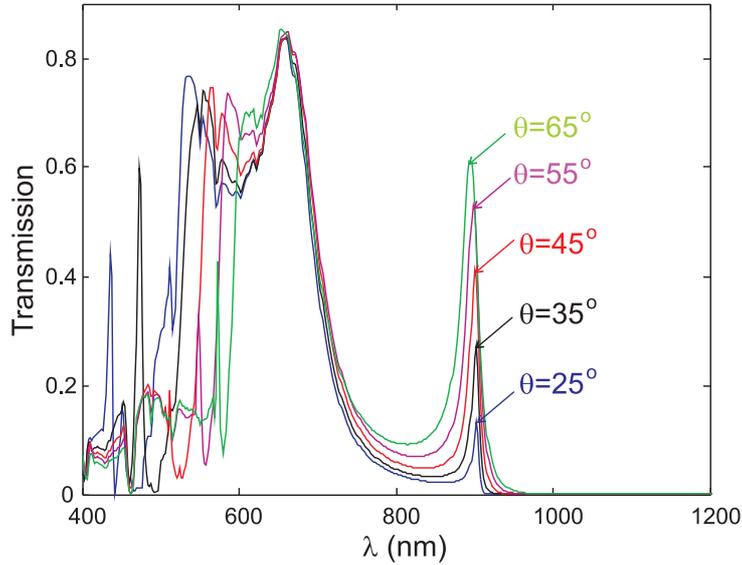


FIG. 3.25 – Transmission à travers une structure coaxiale en argent pour différents angles d'incidence θ , $R_i = 50nm$, $R_e = 100nm$, $h = 240nm$ et $p = 300nm$. La lumière incidente est polarisée TM, l'angle azimutal $\phi = 0$.

3.8 Calcul des spectres d'extinctions Raman

Dans cette dernière partie du présent chapitre, on s'intéressera au calcul des spectres d'extinction Raman (spectres d'absorption) d'un réseau de nano-particules d'or déposées sur un substrat diélectrique. La résonance des plasmons de surface localisés (en anglais LSP pour localized surface plasmon) est à l'origine des pics d'absorption. Ces dernières années, ces LSP sont sujets à plusieurs études théoriques [20] [21] et expérimentales [22] [23] [24] pour des applications en diffusion Raman exaltée de surface (Surface-Enhanced Raman Spectroscopy, SERS). La technique spectroscopique SERS est très puissante, elle permet d'avoir des informations sur des molécules en très faibles concentrations. Le mécanisme du phénomène SERS, conduisant à l'intensification de l'onde diffusée par les molécules adsorbées sur les nano-particules d'or, repose sur la forte augmentation du champ local à la surface de ces particules.

Pour une particule isolée, la résonance plasmon dépend de la nature de la particule (fonction diélectrique), de sa forme, de ses dimensions et du milieu l'entourant. Quand les particules sont déposées sur un substrat et structurées de manière périodique, d'autres paramètres tels que l'indice de réfraction du substrat et les pas du réseau influencent considérablement la position de la résonance plasmon. De plus, pour des condition particulières sur les paramètres du réseau et de l'onde incidente, un pic secondaire s'ajoute à celui de résonance et affecte la longueur d'onde du plasmon de surface localisé.

L'objectif assigné à cette dernière partie du travail, est de montrer que le code FDTD en oblique que nous avons élaboré peut être utilisé pour assister et expliquer les résultats

de certaines expériences dans le domaine du SERS.

La structure considérée consiste en un réseau bi-périodique de nano-bâtonnets d'or déposés sur une couche d'ITO (indium-tane-oxide) de $30nm$ d'épaisseur et d'indice $n=2$ (voir figure 3.26). L'ensemble (particules d'or et la couche d'ITO) est déposé sur un substrat en verre d'indice $n = 1.45$. Les premiers calculs sont effectués en incidence normale pour différents paramètres du réseau. Ces différents réseaux sont définis dans le tableau 3.1. Les distances P_L et P_l représentent respectivement les pas du réseau suivant le grand et le petit axe des nano-bâtonnets. d_l dénote la longueur du petit axe de la particule et d_L celle du grand axe. Dans tous les cas, la hauteur des particules est $h = 45 nm$.

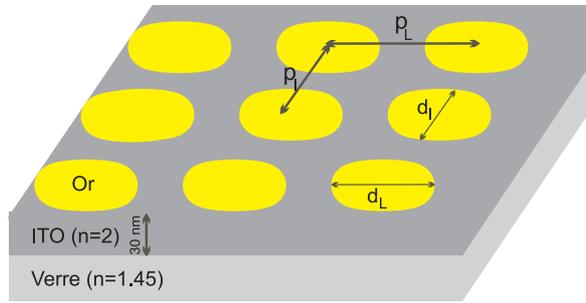


FIG. 3.26 – Réseau de nano-bâtonnets d'or déposés sur une couche d'ITO, l'ensemble de la structure est déposé sur du verre.

Numéro d'échantillon	$p_l(nm)$	$p_L(nm)$	$d_L(nm)$	$d_l(nm)$
1	310	310	210	105
2	310	330	255	130
3	310	400	270	130
4	300	380	280	140

TAB. 3.1 – Différents types de réseaux de nano-bâtonnets d'or

La figure 3.27 présente les spectres d'extinction Raman pour ces quatre réseaux calculés par FDTD et ceux obtenus expérimentalement. Ces résultats expérimentaux nous ont été communiqués par N. Félidj (Laboratoire ITODYS, Université Paris 7). Les nano-bâtonnets sont définis dans le code FDTD comme des cylindres à bases elliptiques : la longueur du cylindre correspond au grand axe de la particule, le grand et le petit axe des bases des cylindres correspondent respectivement au petit axe et à la hauteur des particules.

On constate que nos résultats FDTD sont qualitativement en bon accord avec ceux de l'expérience. Les longueurs d'onde du plasmon de surface localisé et l'intensité du pic correspondant dépendent des paramètres géométriques du réseau. La longueur d'onde plasmon est shifté vers le rouge quand le pas du réseau suivant le grand axe des particules d'or augmente. L'explication donnée par Felidj et al. [24] repose sur la condition donnant la constante critique p_C de diffraction du réseau :

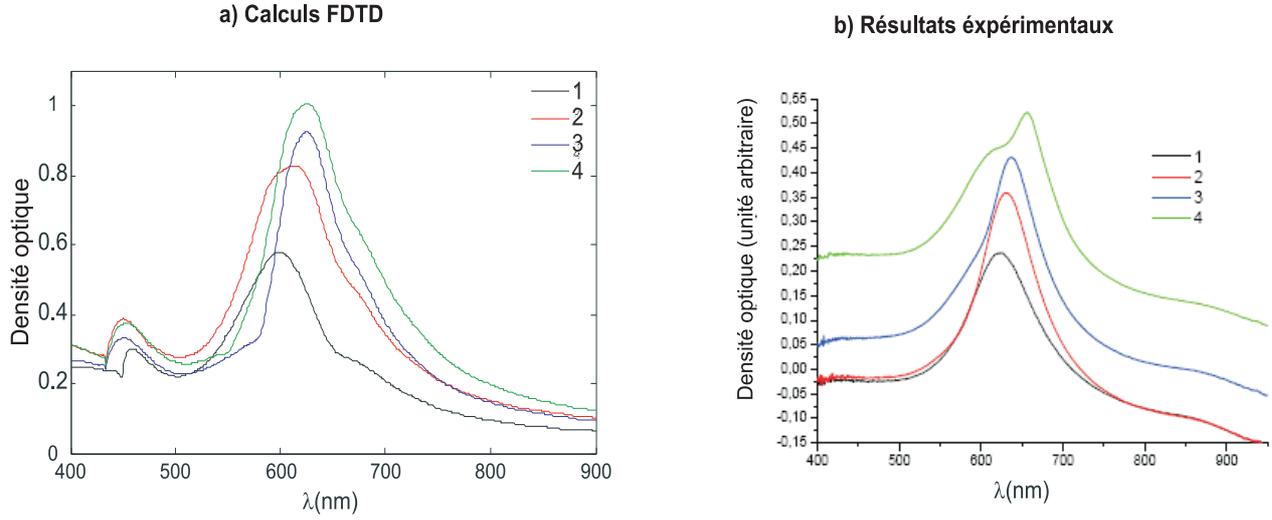


FIG. 3.27 – Spectres d’extinction Raman des réseaux de nano-bâtonnets d’or définis dans le tableau 3.1, polarisation TE avec un angle azimutal $\phi = 0^0$, ce qui correspond à la polarisation suivant la petite période p_l (champ électrique suivant la petite période).

$$p_C = \frac{m\lambda_0}{n_1 \sin \theta + n_2} \quad (3.59)$$

m représente l’ordre de diffraction, λ_0 est la longueur d’onde de la lumière incidente dans le vide. n_1 est l’indice du milieu incident et n_2 celui du superstrat ou du substrat.

Quand $p_L < p_C$, pour $m = 1$, le premier ordre diffracté est complètement évanescent et la réponse optique du réseau, hormis la réduction de l’atténuation de la lumière, correspond à la résonance plasmon d’une seule particule individuelle. Lorsque p_L se rapproche de la constante critique p_C , le premier ordre diffracté commence à devenir radiatif dans le plan de la structure à des longueur d’ondes inférieur à $p_L/(n_1 \sin \theta + n_2)$ ce qui conduit à un couplage entre l’ensemble des nano-particules. Ce couplage qui s’amplifie avec p_L est à l’origine du déplacement vers le rouge de la longueur d’onde LSP .

Dans [24], trois phases de déplacement de λ_{LSP} en fonction de la période p_L sont observées :

- 1) $p_L < p_C$, le déplacement se fait vers le rouge en fonction de p_L .
- 2) $p_L > p_C$ et p_L proche de p_C , le déplacement de la longueur d’onde LSP se fait vers le bleu quand p_L augmente. Ce shift vers le petites longueurs d’ondes est dû à l’apparition au voisinage de la résonance du pic secondaire qui correspond au premier ordre diffracté.
- 3) $p_L > p_C$ et p_L loin de p_C , le déplacement de la longueur d’onde LSP se fait à nouveau vers le rouge quand p_L augmente. Dans ce cas, le pic additionnel qui se déplace vers les grandes longueurs d’ondes en fonction de p_L se trouve loin de la résonance.

Nous montrerons que ce pic additionnel et ces phases de variation de la longueur d'onde LSP peuvent être retrouvés en fonction de l'angle d'incidence et pour une période p_L fixe. Pour cela, nous avons repris l'échantillon 4 et effectué des calculs en incidence oblique.

Sur la figure 3.28 sont illustrés les spectres d'extinction Raman pour quatre différentes valeurs de θ . On constate que les longueurs d'ondes LSP se sont déplacées vers les grandes longueurs d'ondes quand θ augmente.

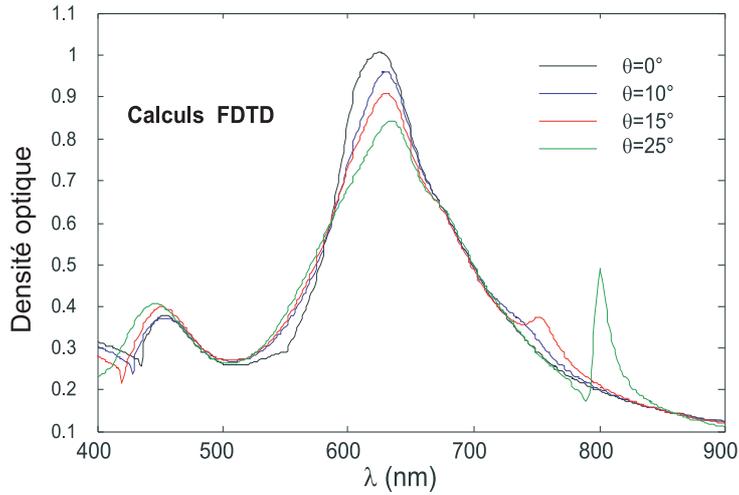


FIG. 3.28 – Spectres d'extinction Raman en incidence oblique de l'échantillon 4, en polarisation TE avec un angle azimutal $\phi = 0^\circ$, ce qui correspond à la polarisation suivant la petite période p_l (champ électrique suivant la petite période).

Dans [24], des spectres d'extinction Raman d'un réseau de nano-particules d'or oblates ont été mesurés pour différents angles d'incidence. Comme dans le cas précédent, pour expliquer le déplacement de la résonance, un angle critique θ_C est défini [24] :

$$\theta_C = \sin^{-1}[(\lambda_{ps}/p_L - n_2)/n_1] \quad (3.60)$$

λ_{ps} est la longueur d'onde correspondant à l'excitation du plasmon de surface.

Dans la référence [24], deux phases d'évolution des pics de résonance en fonction de l'angle d'incidence θ sont observées :

- Le shift de la résonance s'opère vers le rouge quand θ augmente avant d'atteindre l'angle critique,
- Pour θ supérieur à θ_c un pic supplémentaire apparaît et les longueurs d'ondes de résonance sont shiftées vers le bleu.

Dans le cas de la figure 3.28 les pics de résonance plasmon sont shiftés vers les grandes longueurs d'ondes. A $\theta = 15^\circ$ on voit apparaître un pic minuscule qui est shifté vers le rouge en passant à $\theta = 25^\circ$. Après l'apparition de ce pic supplémentaire, le déplacement de la résonance se fait toujours vers le rouge. Une explication peut être donnée en faisant une analogie au cas de l'incidence normale (phase 3), sur la figure 3.28 le petit pic additionnel est loin de la résonance. Ce déplacement vers le rouge et non pas vers le bleu de λ_{LSP} , après l'apparition du pic secondaire, est attribué aussi à la petitesse de l'intensité du pic additionnel devant celle de la résonance LSP .

Les calculs de la figure 3.28 ont été refaits dans le cas où les nano-particules ont une forme elliptique. Les paramètres de ce nouveau réseau sont les mêmes que ceux de l'échantillon 4. En incidence normale, on constate sur la figure 3.29, que le pic de résonance se trouve au même endroit avec une intensité inférieure que dans le cas de la figure 3.28. Par contre, en incidence oblique, l'évolution des spectres en fonction de θ est différente pour les deux géométries (forme cylindrique à bases elliptiques et forme ellipsoïdale).

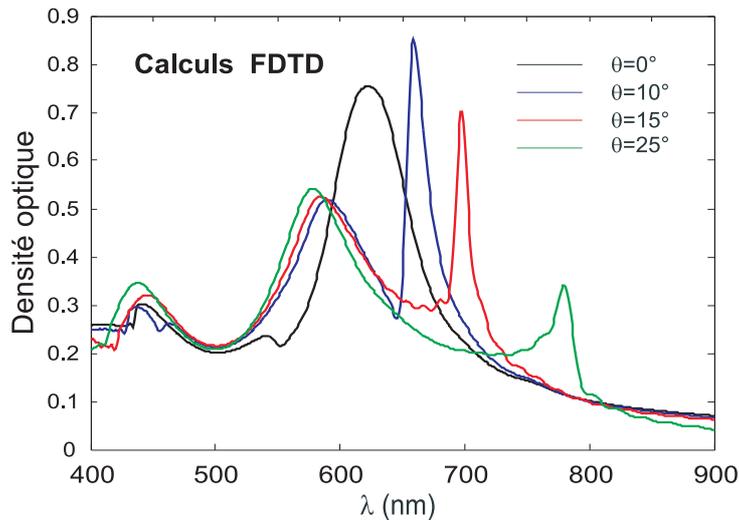


FIG. 3.29 – Spectres d'extinction Raman de l'échantillon 4 pour différentes valeurs de θ , les nano-particules sont définies comme des ellipsoïdes, polarisation TE avec un angle azimutal $\phi = 0^\circ$, ce qui correspond à la polarisation suivant la petite période p_l .

Dans le cas de l'ellipsoïde, sur la figure 3.29, on voit apparaître le pic supplémentaire plus intense dont la longueur d'onde augmente en fonction de θ . Ce pic additionnel apparaît déjà à $\theta = 10^\circ$, ce qui veut dire que l'angle critique $\theta_C < 10^\circ$. Le déplacement vers le bleu de la longueur d'onde plasmon est dû à l'apparition de ce pic au voisinage de la résonance, ces résultats sont conformes à ceux de Félidj [24].

Pour les mêmes périodes et les mêmes dimensions des particules d'or, la variation des spectres d'extinction Raman en fonction de θ diffère d'une forme géométrique à une autre. Cela est dû essentiellement à l'apparition du mode secondaire dont la position et l'intensité diffèrent d'une forme géométrique à une autre. D'après la relation 3.60, la longueur d'onde λ_{ps} , qui diffère d'une forme géométrique à une autre, est la cause principale de cette

différence. Même dans le cas où les longueurs d'onde λ_{ps} sont les mêmes pour les deux géométries, donc pour le même θ_c (mêmes paramètres du réseau), l'intensité des pics additionnels peut jouer un rôle non négligeable sur l'évolution des spectres d'extinction Raman en fonction de θ .

Pour voir l'effet de la polarisation, les calculs précédents ont été refaits dans le cas d'une polarisation TM avec un angle azimutal $\phi = 90^\circ$; polarisation dans le plan perpendiculaire à la grande période (le champ électrique a deux composantes quand on est oblique : une composante suivant la petite période et une autre suivant la direction z qui est perpendiculaire au plan défini par les deux directions de périodicité).

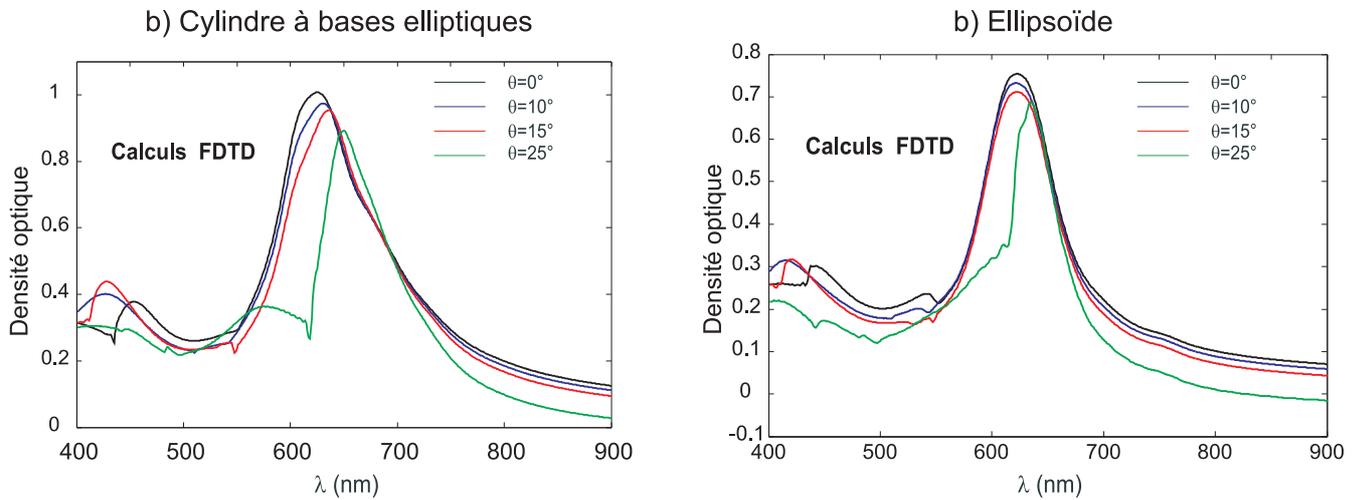


FIG. 3.30 – Spectres d'extinction Raman en fonction de θ de l'échantillon 4, polarisation TM avec un angle azimutal $\phi = 90^\circ$.

On constate que dans les deux cas de la figure 3.30, le pic secondaire de premier ordre diffracté n'apparaît pas et les spectres d'extinction Raman suivent presque la même variation pour les deux différentes géométries. Ce dernier résultat confirme l'explication précédente dans le cas de la polarisation TE : l'apparition du pic additionnel, sa position et son intensité, affectent la longueur d'onde LSP. En conclusion, les calculs FDTD des spectres d'extinction Raman sont conformes à ceux de la littérature. La position des pics d'absorption, est très sensible aux paramètres du réseau, à la forme géométrique des particules et aux paramètres du faisceau incident (polarisation et l'angle d'incidence).

3.9 Conclusion

Dans ce dernier chapitre, un code FDTD fonctionnant en oblique est élaboré. Les modèles de Drude et de Drude-Lorentz décrivant la dispersion des métaux nobles dans la gamme optique sont intégrés et adaptés à la FDTD en oblique. Les couches parfaitement absorbantes (PML) sont également adaptées en oblique pour la description des milieux

ouverts.

Plusieurs tests sont effectués dans les cas diélectrique et métallique. Les tests sont effectués sur des structures non diffractantes ($0D$), réseaux 1D et 2D finis suivant la troisième direction. Les résultats, confrontés à la théorie, aux autres méthodes numériques et à l'expérience, ont permis de valider le modèle mis en oeuvre.

Trois applications sont étudiées dans des domaines divers :

- La première est portée sur l'étude de la structure AAA pour une application radôme. Nous avons montré que la réponse électromagnétique dans la gamme des ondes millimétriques de la structure AAA demeure inchangée en fonction de la polarisation et des angles d'incidence et azimutal.
- La deuxième a consisté sur l'excitation du mode TEM par une lumière se propageant en incidence oblique et polarisée TM, de la structure AAA faite en métal réel (argent et or) dans la gamme du visible. Le pic de ce mode TEM , qui est sans fréquence de coupure, est déplacé vers le rouge en remplaçant le métal parfait par le métal réel. La position de ce pic peut être changée en fonction de l'épaisseur de la couche métallique. Les pertes dans le métal sont minimisées en diminuant l'épaisseur du métal et en augmentant l'angle d'incidence.
- La dernière application est dédiée aux calculs des spectres d'extinction Raman. Les résultats FDTD obtenus ont montré que les longueurs d'onde LSP correspondant aux pics des spectres d'absorption, dépendent des paramètres du réseau, du faisceau incident et de la forme géométrique des nano-particules. Pour des conditions particulières sur le pas du réseau et de l'angle d'incidence, un pic supplémentaire dû au premier ordre diffracté vient s'ajouter au pic d'absorption. Ce dernier est largement affecté par l'apparition en son voisinage de ce pic additionnel. Ces résultats FDTD sont conformes à ceux de l'expérience.

En conclusion, les différents calculs montrés dans ce chapitre montrent que le code FDTD en oblique mis en oeuvre dans ce travail, est efficace et général dans le sens où il est applicable sur un large éventail de problèmes électromagnétiques (formes géométriques diverses, gammes de spectres différentes ...).

Bibliographie

- [1] W.-J. Tsay and D. M. Pozar, *IEEE Microw. Guid. Wave Lett.* 3, 250, 1993.
 - [2] A. Alexanian, N. J. Koliass, R. C. Compton, and R. A. York, *Microwave Opt. Technol. Lett.* 6, 138, 1996.
 - [3] F. I. Baida and D. Van Labeke, *Phys. Rev. B* 67, 155314, 2003.
 - [4] M. E. Veysoglu, R. T. Shin, and J. A. Kong, *J. Electromagn. Waves Appl.* 7, 1595, 1993.
 - [5] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics, the Finite-Difference Time-Domain Method*, 2nd ed. (Artech House, Norwood, MA, 2005).
 - [6] J. A. Roden, S. D. Gedney, M. P. Kesler, J. G. Maloney, and P. H. Harms, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* 46, 420, 1998.
 - [7] G. Zheng, A. A. Kishk, A. W. Glisson, and A. B. Yakovlev, *PIER* 59, 85, 2006.
 - [8] B.-I. Wu, E. Yang, J. A. Kong, J. A. Oswald, K. A. McIntosh, L. Mahoney, and S. Verghese, *Microwave Opt. Technol. Lett.* 27, 81, 2000.
 - [9] C. Oh and M. J. Escuti, *Opt. Express* 14, 11870, 2006.
 - [10] J. P. Berenger, *J. Comput. Phys.* 114, 185, 1994.
 - [11] R. Petit, *Electromagnetic Theory of Gratings, Topics in Current Physics, Vol. 22* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
 - [12] M. Shiozaki HIOZAKI and M. Shigehara, *SEI Technical Rev.* 59, 27, 2005.
 - [13] A. M. Attiya and A. A. Kishk, *PIER* 60, 221, 2006.
 - [14] H.-Y. D. Yang, R. Diaz, and N. G. Alexopoulos, *J. Opt. Soc. Am. B* 14, 2513, 1997.
 - [15] P. Johnson and R. Christy, *Phys. Rev. B* 6, 4370-4379, 1972.
 - [16] D. Van Labeke, D. Grard, B. Guizal, F. I. Baida, and L. Li, *Opt. Express* 14, 11945, 2006.
 - [17] F. I. Baida and D. Van Labeke, *Opt. Commun.* 209, 17, 2002.
 - [18] F. I. Baida, *Applied Physics B* 89, 145, 2007.
 - [19] F. I. Baida, D. Van Labeke, G. Granet, A. Moreau, and A. Belkhir. *Applied Phys. B* 79, 1, 2004.
 - [20] A.S. Grimault, A. vial and M. Lamy de la Chapelle, *Appl. Phys. B* 84, 111, 2006.
-

- [21] A. Vial, A-S. Grimault, D. Macias, D. Barchiesi and M. L. Chapelle, *Phys. Rev. B* 71, 085416, 2005.
 - [22] N. Félidj, J. Aubard, G. Lévi, J. R. Krenn, G. Schider, A. Leitner and F. R. Aussenegg, *Phys. Rev. B* 66, 245407, 2002.
 - [23] N. Félidj, J. Aubard, G. Lévia, J. R. Krenn, A. Hohenau, G. Schider, A. Leitner, and F. R. Aussenegg, *Appl. Phys. Letters*, 82 (18),3095, 2003.
 - [24] N. Félidj, G. Laurent, J. Aubard, G. Lévi, A. Hohenau, J. R. Krenn, and F. R. Aussenegg, *J. Of Chemi. Phys* 123, 221103, 2005.
-

Conclusions et perspectives

Ce travail de thèse est une contribution à la modélisation électromagnétique pour la conception de composants en vue des applications en nano-optique. Dans le travail que nous présentons, nous avons montré les possibilités de la méthode FDTD tout en cherchant les techniques numériques qui permettront d'accroître son nombre d'applications.

Dans un premier temps, un code FDTD bidimensionnel dans le cas in-plane ($k_z=0$) est élaboré et validé pour le calcul de bandes interdites photoniques (BIP) permettant de traiter les deux polarisations TE et TM. Ce code est ensuite étendu au cas off-plane, cas où k_z est non nul. Il peut simuler des structures photoniques ayant différentes géométries et contenant des objets diélectriques ou métalliques. La dispersion des objets métalliques est prise en considération par le modèle analytique de Drude ou de Drude-Lorentz que nous avons adapté à la FDTD. Plusieurs diagrammes de bandes sont présentés pour les structures carrées et triangulaires dans les cas diélectriques et métalliques. L'effet du type de maille, de la nature du matériau et de k_z sur la structure de bande est mis en exergue.

Le deuxième volet de ce travail de thèse est dédié à la modélisation par la méthode BOR-FDTD des structures guidantes à symétrie de révolution pour la nano-connectique. La problématique posée est celle du confinement de la lumière des modes propres qui n'est pas tout à fait assuré à l'intérieur des guides nano-métriques, ainsi les pertes aux fréquences optiques engendrent une forte atténuation de la lumière. Le code FDTD élaboré, basé sur la discrétisation des équations de Maxwell en coordonnées cylindriques, permet une modélisation rigoureuse de ces nano-guides à symétrie de révolution. Les modèles analytiques de Drude et de Drude-Lorentz sont également adaptés à cet algorithme pour la description de la dispersion des métaux nobles dans la gamme optique. Les conditions d'absorption PML pour simuler l'espace libre sont implémentées pour la BOR-FDTD.

Les caractéristiques électromagnétiques connues des guides cylindriques et coaxiaux en métal parfait, vers lequel tendent les métaux réels aux grandes longueurs d'ondes relativement à la gamme optique, nous ont permis de valider notre modèle. En substituant le métal parfait par le métal réel (argent ou or), des résultats intéressants ont été mis en évidence. En plus du shift vers les grandes longueurs d'ondes des λ_c du mode TE_{11} du guide coaxial en métal réel par rapport à celui en métal parfait, il est montré que ces λ_c augmentent pour un espace interconducteur très faible. Les courbes de dispersion et les distributions d'intensité lumineuse à l'intérieur du nano-guide coaxial ont révélé le

caractère plasmonique de ce mode. Les distances de propagation faiblement atténuée sont estimées à plusieurs dizaines de micromètres, via la détermination des parties imaginaires de l'indice effectif de ce mode plasmonique. A ce niveau, il serait très intéressant d'étendre cette étude à des géométries coniques coaxiales pour des applications en microscopie du champ proche dont la sonde doit transporter des signaux optiques sans perte. Ce mode particulier se propage lentement à travers la cavité coaxiale, sa vitesse de groupe est largement inférieure à la célérité de la lumière dans le vide, et des applications pourraient être envisagées en optique non linéaire en raison du fort confinement de la lumière.

Une troisième partie de cette thèse est consacrée à la modélisation par FDTD des structures diélectriques et métalliques bi-périodiques et finies suivant la troisième direction et éclairées en incidence oblique. Les PLM de Berenger sont adaptées à la FDTD en oblique pour décrire l'espace libre suivant la troisième direction. De même, les modèles analytiques de Drude et de Drude-Lorentz sont aussi intégrés à l'algorithme FDTD en oblique pour l'étude des métaux nobles dans la gamme optique.

Plusieurs tests de validation sont effectués tout en séparant les structures diélectriques des structures métalliques. Les résultats des simulations obtenus et confrontés à la littérature, dans les cas des structures non diffractantes $0D$, des réseaux $1D$ et $2D$ finis suivant la troisième direction, ont permis de valider le code mis en oeuvre.

Des applications de ce code en oblique ont été effectuées dans des domaines d'applications différents. La première est consacrée à montrer que la structure à ouvertures annulaires peut être utilisée pour des applications radar (radôme). En effet, aux ondes millimétriques, la réponse spectrale d'une structure AAA donnée demeure inchangée en fonction des angles d'incidence et azimutal ainsi qu'en fonction de la polarisation. Dans la deuxième application, nous nous sommes intéressés à l'excitation du mode TEM de la structure AAA faite en métal réel par une lumière en incidence oblique et polarisée TM. Cette application est l'extension de celle faite par F. I. Baida dans le cas du métal parfait. Les longueurs d'ondes des pics TEM des cavités coaxiales sont shiftées vers les grandes longueurs d'onde en remplaçant le métal parfait par le métal réel. La position des pics TEM, mode sans fréquence de coupure, peut être accordée en fonction de l'épaisseur du métal. Nous avons terminé ce travail par le calcul des spectres d'extinctions Raman d'un réseau de nano-particules d'or déposées sur un substrat diélectrique. Les résultats présentés ont montré que les spectres d'absorption sont très sensibles aux paramètres du réseau, à la géométrie des nano-particules ainsi qu'aux paramètres du faisceau incident.

Les différents tests de validation et applications effectués par le code FDTD en incidence oblique, démontrent la performance de cet algorithme. Toutefois, ce code présente des limites dans le cas d'une réflexion interne au delà de l'angle critique (réflexion totale). Au delà de cet angle, le code diverge. Ce point constituera l'une de nos préoccupations après la soutenance de cette thèse.
