



**HAL**  
open science

# Etude de propriétés optiques liées à la transmission de cristaux photoniques bidimensionnels

Michael Sarrazin

► **To cite this version:**

Michael Sarrazin. Etude de propriétés optiques liées à la transmission de cristaux photoniques bidimensionnels. Physique [physics]. Université de Franche-Comté, 2002. Français. NNT : . tel-00002972v2

**HAL Id: tel-00002972**

**<https://theses.hal.science/tel-00002972v2>**

Submitted on 17 Nov 2003

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

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# THÈSE

Présentée à :

**L'UFR DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
DE L'UNIVERSITÉ DE FRANCHE-COMTÉ**

Pour obtenir le

**GRADE DE DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ  
DE FRANCHE-COMTÉ**

**École Doctorale Louis Pasteur**

Spécialité : **Physique**

**ETUDE DE PROPRIETES OPTIQUES  
LIEES A LA TRANSMISSION DE  
CRISTAUX PHOTONIQUES  
BIDIMENSIONNELS**

Par

**Michaël SARRAZIN**

*Soutenu le 24 avril 2002 devant la commission d'examen :*

Président du jury : **C. Girardet**, Professeur - Université de Franche-Comté.

Rapporteurs : **D. Barchiesi**, Professeur - Université de technologie de Troyes.  
**G. Granet**, Professeur - Université Blaise Pascal de Clermont-Ferrand.

Membres du jury : **D. Van Labeke**, Professeur - Université de Franche-Comté.  
**J.-P. Vigneron**, Professeur - Université Notre-Dame de la Paix, Namur.  
**J.-M. Vigoureux**, Professeur - Université de Franche-Comté.

# Table des matières

<b>I</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>II</b>	<b>Historique et introduction aux problèmes posés</b>	<b>9</b>
1	Les cristaux photoniques	12
2	Diffraction par un réseau	21
3	Les anomalies de Wood	28
4	Plasmons et plasmons de surface	32
<b>III</b>	<b>Les outils théoriques développés, aspects numériques et analytiques</b>	<b>37</b>
5	Présentation de l'algorithme. Méthode des modes couplés et formalisme de la matrice <b>S</b>	39
5.1	Description d'un système matériel dans une représentation de Fourier . . .	39
5.2	Equations de Maxwell dans une représentation de Fourier . . . . .	43
5.3	Choix de la base de polarisation . . . . .	46
5.4	Définition de la matrice de transfert <b>T</b> . . . . .	50
5.5	Définition de la matrice de diffraction <b>S</b> . . . . .	52
5.6	Combinaison des matrices <b>S</b> . . . . .	54

5.7	Flux du vecteur de Poynting . . . . .	55
<b>6</b>	<b>L'algorithme et son application numérique. Discussion des avantages et des inconvénients de la méthode</b>	<b>57</b>
<b>7</b>	<b>Aspects analytiques. Etude des pôles et des zéros de la matrice S</b>	<b>63</b>
7.1	Oscillateur élémentaire linéaire en régime permanent harmonique . . . . .	64
7.2	Les résonances et les pôles de la matrice S . . . . .	67
7.3	Zéros de la matrice S et des ordres de diffraction . . . . .	71
7.4	Remarques sur la détermination des pôles de la matrice S pour une couche plane homogène . . . . .	75
<b>IV</b>	<b>Analyse de cristaux photoniques bidimensionnels</b>	<b>80</b>
<b>8</b>	<b>Introduction</b>	<b>82</b>
<b>9</b>	<b>Analyse théorique et simulations numériques</b>	<b>87</b>
9.1	Analyse de la transmission, de la réflexion et des pertes en énergie du système	90
9.2	Contribution des effets de diffraction multiple . . . . .	100
9.3	Etude des résonances et des modes propres du système . . . . .	115
9.4	Analyse de la nature des modes propres du système . . . . .	126
9.5	Aspects liés au champ proche . . . . .	135
9.6	Analyse d'un film diélectrique . . . . .	148
<b>10</b>	<b>Conclusion</b>	<b>159</b>

<b>V</b>	<b>Conclusion générale et perspectives</b>	<b>162</b>
<b>VI</b>	<b>Annexes</b>	<b>177</b>
<b>VII</b>	<b>Bibliographie</b>	<b>201</b>

# **Première partie**

## **Introduction**

L'optique s'est enrichie cette dernière décennie par le développement de la recherche dans le domaine des cristaux photoniques. Sous ce terme se cache une transposition de l'étude des "band-gap" électroniques propre à la physique du solide à l'étude de "band-gap" photonique en optique. L'idée est alors de considérer des matériaux constituant un réseau caractérisé par une permittivité répartie périodiquement dans l'espace. Cette répartition peut s'effectuer à une, deux ou trois dimensions avec possibilité de travailler, bien entendu, dans un domaine d'espace fini.

Le travail présenté ici repose sur l'étude de cristaux photoniques bidimensionnels et sur la mise en place des outils théoriques correspondants. Le programme général d'étude de multicouches, éventuellement rugueuses ou percées de trous, a été mis au point par J-P. Vigneron, de l'université Notre-Dame de la Paix à Namur (Belgique), lors d'un séjour en 1999 au Laboratoire de Physique Moléculaire. Nous avons ensuite adapté ce programme à notre problématique. De plus, l'étude des cristaux photoniques, par leur caractère périodique, fait souvent usage de la méthode des modes couplés que nous avons utilisée et qui initialement, sous la forme que nous employons, a été introduite par John Pendry. Ainsi, les méthodes qui ont été employées au cours de ce travail, basées essentiellement sur une méthode de modes couplés et l'utilisation du formalisme de la matrice  $S$ , ne sont pas en soi des méthodes nouvelles. La spécificité de notre travail repose sur deux aspects.

Premièrement, nous avons cherché à obtenir un certain nombre de paramètres caractéristiques dans l'étude des systèmes optiques (à partir de cette méthode des modes couplés et l'utilisation de la matrice  $S$ ). Ces paramètres correspondent au calcul des coefficients de transmission et réflexion, dont on peut déduire les pertes en énergie. De plus, nous avons développé le calcul de cartes du champ proche et du champ dans le volume du système étudié, avec la possibilité dans le cadre d'un problème de diffraction de sélectionner certains ordres et certaines polarisations particulières. On peut y ajouter également la détermination, par l'étude directe des propriétés de la matrice  $S$  (entre autre de ses pôles), des modes propres du système étudié. Il est enfin possible d'obtenir des informations sur la dynamique du système en réponse impulsionnelle.

Deuxièmement, le début de cette thèse a coïncidé avec la publication par T.W. Ebbesen *et al* [F2] de résultats concernant l'étude expérimentale de cristaux photoniques bidimensionnels constitués d'une couche métallique percée de trous sublongueurs d'onde répartis selon un réseau à deux dimensions et déposée sur un substrat diélectrique. Aussi, nous avons tourné l'essentiel de notre travail vers l'analyse de ces expériences.

Dans ce travail, nous présentons un historique ainsi qu'un résumé des méthodes et des concepts développés autour des notions de cristal photonique et de théorie de la diffraction.

Dans un second temps nous présentons le formalisme développé au travers de la méthode des modes couplés et du formalisme de la matrice  $S$ . Ensuite, nous appliquerons ces méthodes à l'analyse de cristaux photoniques bidimensionnels en utilisant les résultats expérimentaux obtenus par T.W. Ebbesen *et al* pour comparaison avec nos résultats théoriques.

Enfin, avant de conclure, nous ferons une présentation des questions et problèmes restant posés ainsi que des perspectives de travaux pouvant être envisagées à la suite de notre travail.

N.B. : Concernant la bibliographie; les divers articles et ouvrages ont été classés par thèmes (notés de A à N), puis numérotés dans l'ordre alphabétique selon les auteurs et l'année de parution.

## Deuxième partie

### Historique et introduction aux problèmes posés

Le but de ce chapitre est de présenter l'essentiel des notions et des calculs nécessaires à la compréhension des chapitres suivants. Dans un premier temps, nous présentons un aperçu de la notion de cristal photonique de manière à souligner l'intérêt des divers aspects et méthodes abordés dans ce travail. Ainsi, nous verrons comment l'étude des cristaux photoniques nous amène à rappeler quelques aspects essentiels des problèmes de diffraction par des réseaux. Ceci nous conduira à définir les notions d'anomalies de Wood typiques de l'étude des réseaux, et de plasmons de surfaces. Ces notions s'avéreront nécessaires pour la suite. Pour le détail de certains calculs, nous renverrons le lecteur aux annexes.

# Chapitre 1

## Les cristaux photoniques

L'électron, agent de tout phénomène électronique, a été le principal acteur du développement technologique contemporain. Depuis l'avènement du laser, le photon tend à lui disputer la première place. D'un point de vue théorique, l'électron et le photon présentent des similitudes de comportement du fait que, comme l'ensemble des particules, ils sont soumis à la dualité onde-corpuscule. De plus, on constate une analogie mathématique entre les équations de Maxwell qui décrivent le comportement ondulatoire des photons et l'équation de Schrödinger qui décrit celui des électrons. En effet, on montre, à partir des équations de Maxwell, que l'on peut écrire le "parallèle" suivant [A7] :

	Mécanique quantique	Electromagnétisme
Champ	$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})e^{-i\omega t}$	$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r})e^{-i\omega t}$
Problème aux valeurs propres	$H\Psi = E\Psi$	$\Theta\vec{H} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\vec{H}$
Opérateur hermitique	$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$	$\Theta = \vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}\vec{\nabla} \times\right)$

à condition de faire l'hypothèse que  $\varepsilon(\vec{r})$  ne dépende pas de  $\omega$  et soit réelle,  $\Theta$  est un opérateur hermitique. Au niveau de la physique fondamentale, la compréhension des propriétés des matériaux passe par l'analyse de leurs propriétés électroniques. Ainsi, dans les solides cristallins, les électrons sont soumis à un potentiel périodique qui trouve son origine dans la répartition régulière des atomes ou molécules du milieu. Du point de vue

quantique, si on ajoute à cela le caractère ondulatoire de l'électron, ces deux caractéristiques suffisent pour expliquer comment les corps solides peuvent être des isolants, des conducteurs ou des semi-conducteurs. Ainsi, l'énergie des électrons ne peut pas prendre n'importe quelle valeur ; elle doit appartenir à certaines gammes d'énergie susceptibles d'être séparées par des "bandes interdites". Il est alors naturel de se demander si on saurait tirer profit de l'analogie théorique entre les électrons et les photons. A la fin des années 80, Eli Yablonovitch [A7,10,13,14], s'est demandé s'il était possible de concevoir des matériaux où les bandes interdites concerneraient les photons au lieu des électrons (On notera toutefois que cette idée avait été envisagée plus tôt par Ohtaka [A8]). Par analogie avec les cristaux semi-conducteurs, il imagine des structures périodiques constituées par des empilements de petites billes, de cylindres, de petites poutres ou encore des réseaux de minuscules galeries. Ces nouveaux matériaux prennent alors le nom de "cristaux photoniques" ou encore BIP (pour Bande Interdite Photonique, lorsque c'est le cas).

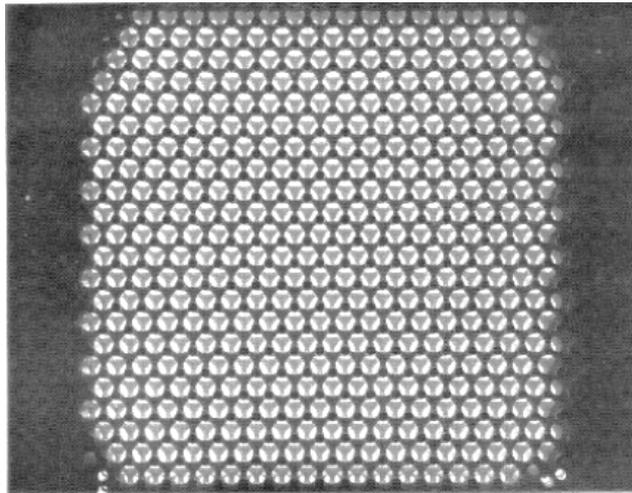


Figure 1.1 : Photographie de la Yablonovite, premier exemple pratique de cristal photonique à "gap" complet réalisé par Yablonovitch (Cliché E. Yablonovitch, AT&T, [A13]).

Pour mieux comprendre la notion de cristal photonique nous allons, dans un premier temps, rappeler la notion de miroir de Bragg. Usuellement les miroirs sont constitués d'une simple couche de métal (argent ou aluminium) déposée sur un substrat (une plaque

de verre). Cependant, les miroirs de très haute qualité utilisés en optique, par exemple dans la réalisation d'une cavité laser, sont d'une autre nature. En effet, ils ne font pas intervenir la réflexion sur une surface métallique. Ces miroirs constituent ce que l'on nomme des miroirs de Bragg. Ils sont constitués d'un ensemble de couches transparentes distinctes et superposées périodiquement (figure 1.2).

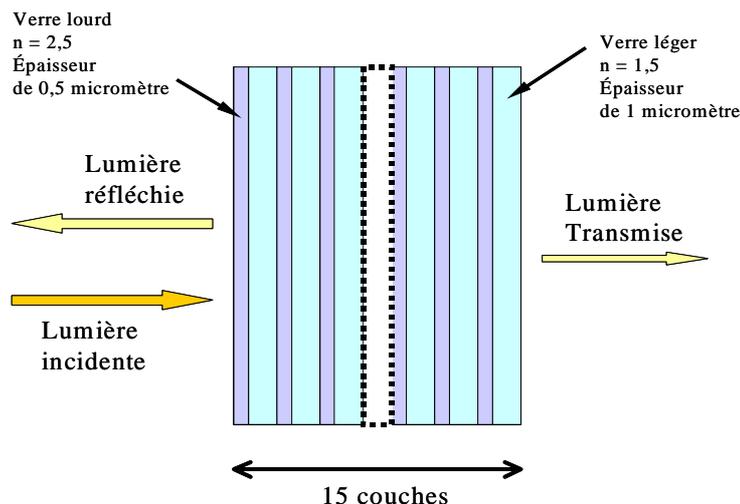


Figure 1.2 : Schéma d'un exemple de miroir de

Bragg constitué d'un empilement de couches de verre "lourd" et "léger"

La lumière est réfléchie sur chacune des interfaces entre les couches et subit un déphasage. De ce fait, les différentes ondes réfléchies sur chacune des interfaces interfèrent constructivement ou destructivement selon le déphasage de chacune d'entre elles ; le déphasage étant dépendant, en dehors de la structure du multicouche, de la longueur d'onde et de l'angle d'incidence de l'onde lumineuse. Ainsi, on pourra aboutir selon les circonstances à des interférences constructives conduisant à des coefficients de réflexion élevés, ou encore à des interférences destructives conduisant à des coefficients de réflexion faibles (figure 1.3).

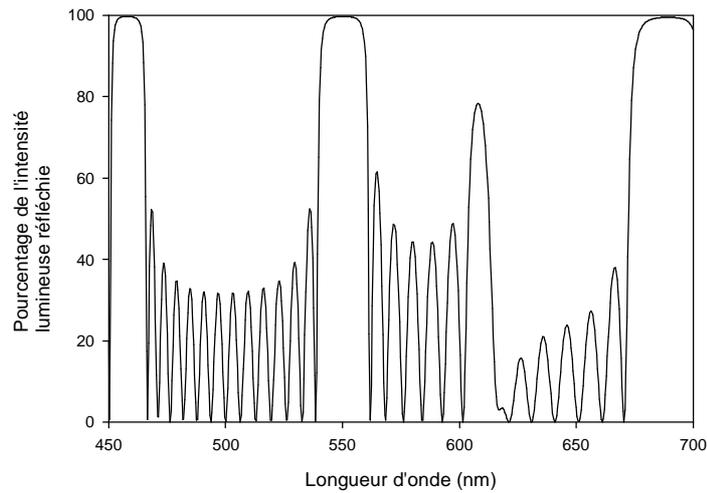


Figure 1.3 : Pourcentage de l'énergie lumineuse réfléchi en incidence normale dans le cas du miroir de Bragg représenté par la figure 1.2.

Le terme de "miroir de Bragg" (nommé également "filtre interférentiel") vient de la similitude entre ce problème et celui rencontré dans le cadre de la diffraction des rayons X par les plans d'atomes d'un cristal étudié par Bragg. Les figures de diffraction sont liées aux conditions nécessaires à l'obtention d'interférences constructives ou destructives. On entrevoit alors le lien entre les cristaux photoniques et les problèmes de diffraction par des réseaux.

On peut noter qu'il existe des cristaux photoniques naturels. Dans la figure suivante (fig. 1.4), on montre une image au microscope électronique d'une opale naturelle constituée d'un réseau quasi-périodique de billes de silice.

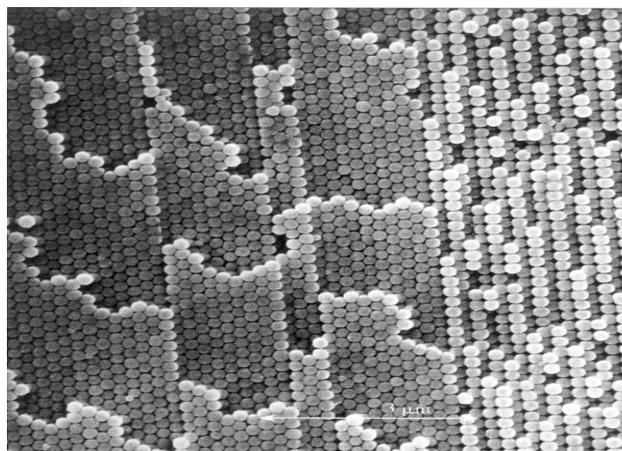


Figure 1.4 : Image au microscope électronique d'une opale naturelle constituée d'un réseau quasi-périodique de billes de silice.

Cet arrangement périodique des billes de silice est responsable des couleurs chatoyantes des opales naturelles, dans la mesure où le caractère périodique de la structure conduit à des effets de diffraction gouvernés par la loi de Bragg.

Par comparaison, l'image suivante montre, toujours en imagerie électronique, un cristal photonique bidimensionnel artificiel.

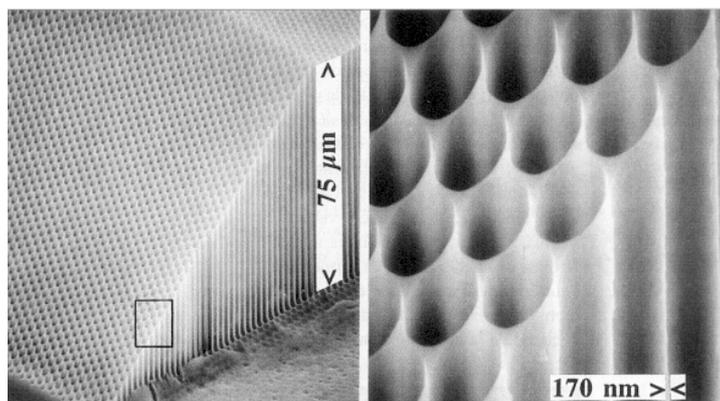


Figure 1.5 : Exemple de cristal photonique bidimensionnel imagé en microscopie électronique. Il a été obtenu par gravure électrochimique de silicium macroporeux le long de plans cristallins du silicium.

(Cliché U. Gruening, Siemens, Appl.Phys.Lett. 68, 747 (1996))

Enfin, le dessin ci-après présente schématiquement quelques représentations de cristaux photoniques mono, bi et tri-dimensionnels.

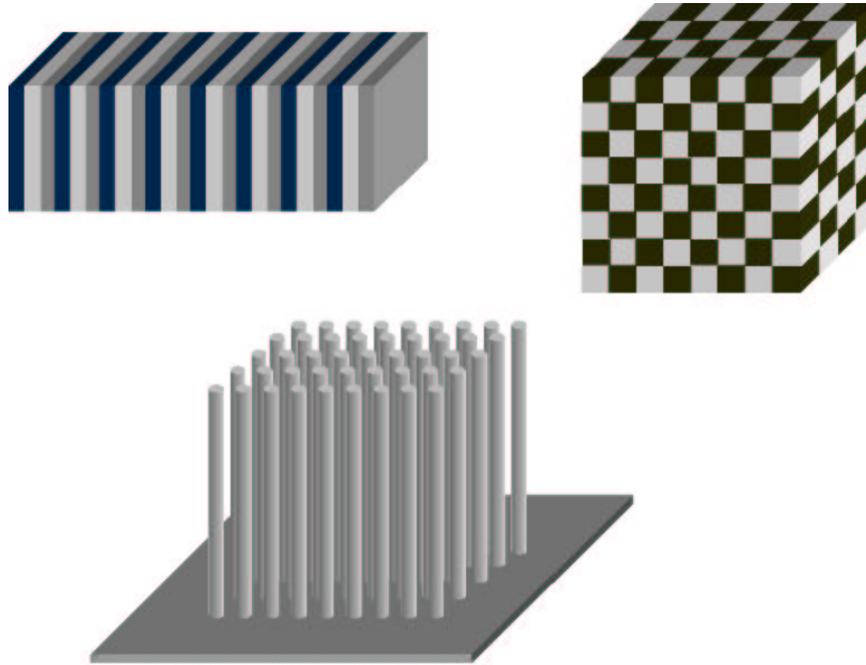


Figure 1.6 : Quelques représentations schématiques de cristaux photoniques mono, bi et tri-dimensionnels (de gauche à droite)

Bien entendu, en dehors des aspects théoriques que soulève l'étude des cristaux photoniques, l'intérêt de ceux-ci réside dans leur potentiel technologique. Ainsi, par exemple, dans la figure suivante, on peut voir une photographie en microscopie électronique de guides d'onde réalisés sur la base d'un cristal photonique. Il s'agit dans ce cas d'exploiter les "band gap" que sont susceptibles de présenter les cristaux photoniques pour empêcher la lumière de se propager en dehors du guide.

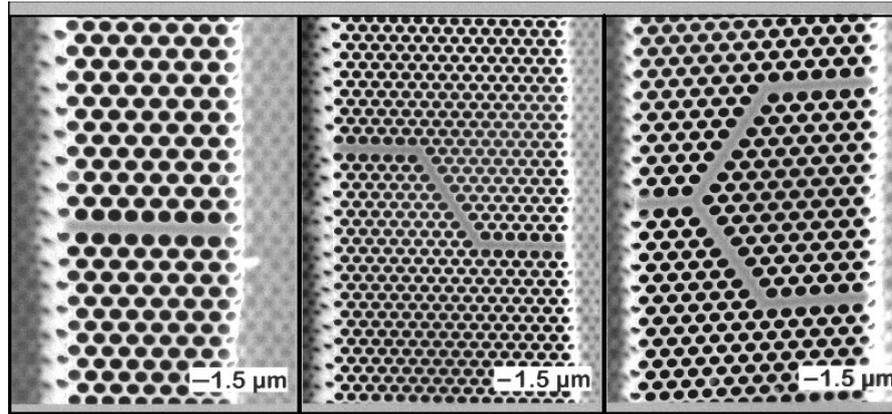


Figure 1.7 : Photographie au microscope électronique de guides d'onde réalisés dans un cristal photonique (Cliché du Max-Planck-Institut, A.Birner Adv. Mater 13 (6), 377 (2001))

Sur la carte de champ représentée ci-après, on peut voir une simulation montrant la propagation du champ électromagnétique dans ce type de guide d'onde.

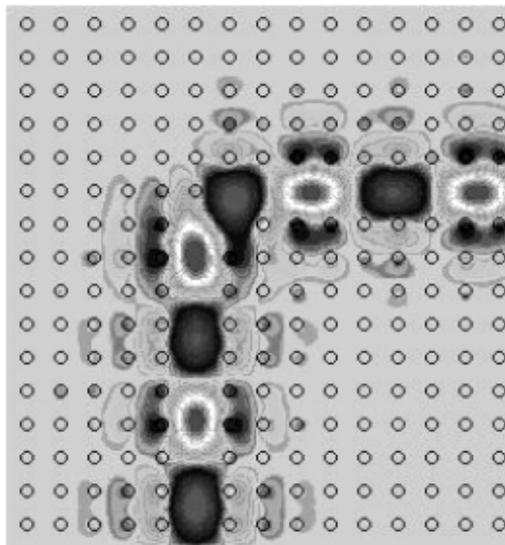


Figure 1.8 : Simulation de la propagation du champ électromagnétique dans un guide d'onde réalisé dans un cristal photonique. (Cliché du MIT, J. Joannopoulos, <http://ab-initio.mit.edu/photons/bends.html>)

On voit dans ce schéma la lumière effectuer un virage quasiment à angle droit et sans pertes au niveau de l'angle du guide. Dans la même idée, on peut également envisager de réaliser des fibres optiques qui, au lieu d'être constituées d'un coeur et d'une gaine, ou encore d'une structure à gradient d'indice, seraient constituées d'un cristal photonique doté d'un défaut permettant de canaliser la propagation lumineuse (voir photo ci-dessous).

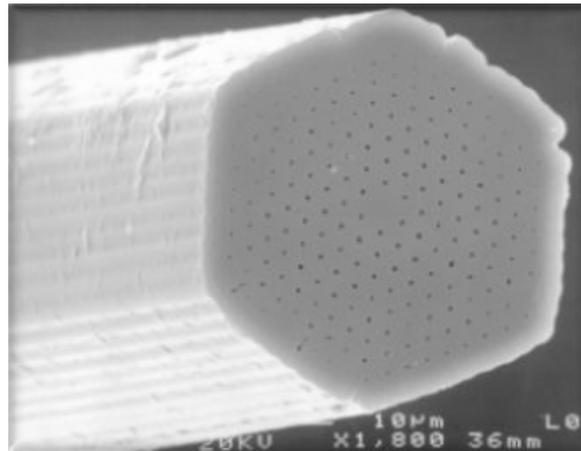


Figure 1.9 : Image par microscopie électronique d'un prototype de fibre optique conçue sur la base d'un cristal photonique (Optoelectronics group, University of Bath, <http://www.bath.ac.uk/Departments/Physics/groups/opto/pcf.html>)

Bien entendu, ceci ne constitue que quelques exemples des applications potentielles des cristaux photoniques ; on notera également l'intérêt croissant pour les applications liées aux problèmes d'électrodynamique en cavité. En effet, les processus physiques tels que la fluorescence, l'émission stimulée ou les interactions de Van der Waals au voisinage d'un environnement donné dépendent de la densité locale de modes électromagnétiques. L'idée est d'utiliser les cristaux photoniques dans le but d'agir sur la densité de modes et, de cette façon, d'altérer de manière contrôlée les effets qui y sont liés [L1-5,7-11]. Par exemple, sur la figure 1.10, on a représenté une diode laser conçue sur la base d'un cristal photonique [L7],

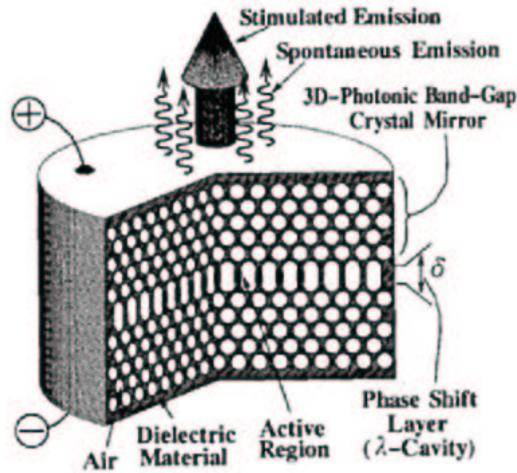


Figure 1.10 : Schémas d'une diode laser conçue sur la base d'un cristal photonique (H. Hirayama *et al* [L7])

Dans ce schéma, on constate la rupture de la périodicité du cristal photonique, obtenue en jouant sur la taille des cavités. On introduit ainsi de nouveaux niveaux d'énergie dans le "band-gap" photonique du cristal. C'est l'analogie de la création de niveaux d'énergie dans un "band-gap" électronique par ajout d'atomes dopants dans les cristaux semi-conducteurs. Des lasers de largeur d'émission étroite peuvent être ainsi fabriqués en employant des cristaux photoniques dopés par des défauts dans la périodicité du système. Le mode de défaut permet d'amplifier seulement les longueurs d'ondes capables de se propager librement dans le cristal. L'utilisation de cristaux photoniques est alors plus efficace que les diodes lasers à semi-conducteur conventionnelles étant donné qu'il y a peu de directions selon lesquelles les photons peuvent s'échapper [L7].

Au final, les cristaux photoniques offrent une large gamme d'applications potentielles partout où le contrôle des modes optiques est recherché. Aussi, bien évidemment les exemples d'applications que nous venons de donner ne constituent pas une liste exhaustive de leur intérêt [A1-14].

# Chapitre 2

## Diffraction par un réseau

Le but de ce chapitre est de rappeler quelques principes généraux relatifs aux réseaux qui nous seront utiles dans les chapitres suivants. Le principe des réseaux de diffraction fut découvert par D. Rittenhouse en 1785 mais sa découverte n'attira aucune attention. Ce sont T. Young en 1801 et J. Fraunhofer en 1819 qui contruisirent les premiers réseaux et qui mirent en évidence le rôle exceptionnellement constructif de la diffraction dans les réseaux. Si dans ce contexte, lorsque l'on se réfère à un réseau on pense à un réseau unidimensionnel, il ne faut cependant pas oublier qu'un réseau peut être également un ensemble périodique bidimensionnel de trous. L'étude des problèmes de diffraction par des réseaux peut être introduite grâce à la théorie scalaire de la diffraction de Huygens-Fresnel [N1,2,4,9]. Celle-ci, pour rappel, dérive de l'expression

$$\psi(\vec{r}) = \int_S \psi_0(\vec{r}') Q \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} dS \quad (2.1)$$

que l'on peut illustrer par le schéma suivant,

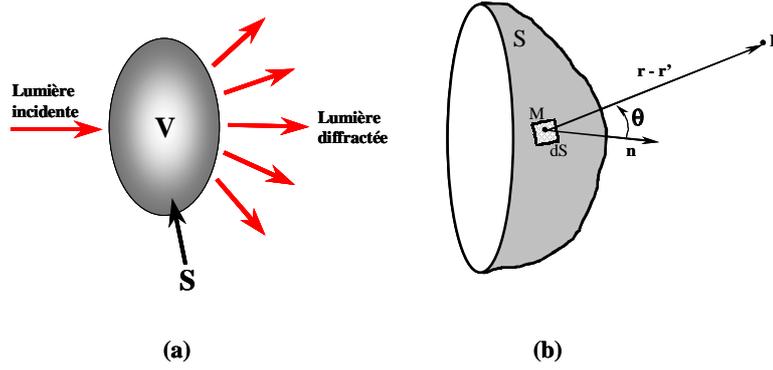


Figure 2.1 : Schéma du problème de diffraction

et telle que le champ  $\psi(\vec{r})$  au point  $P$  soit la somme des contributions des sources virtuelles sur la surface  $S$ . Le point  $M$  représente une source virtuelle, proportionnelle au champ incident  $\psi_0(\vec{r}')$  en  $M$ , et dépendante du facteur  $Q$  qui est une fonction de l'angle  $\theta$  entre la normale  $\vec{n}$  à la surface et  $\vec{MP}$ .

On peut néanmoins introduire un modèle simple de diffraction vectorielle, prenant en compte la polarisation du champ électromagnétique, et basé sur le théorème d'extinction [H1-12] qui a été l'objet de mon travail de DEA.

*On peut d'ores et déjà souligner que le principe de Huygens-Fresnel ne suppose aucune interaction physique entre l'onde incidente et le bord du diaphragme qui délimite cette onde, et il en sera de même dans le modèle que nous allons introduire.* On voit de plus que l'on est conduit à fixer les valeurs prise par  $\psi_0(\vec{r}')$  sur la surface considérée, ce qui induit des limitations discutées un peu plus loin.

En renvoyant le lecteur à l'annexe A pour les détails de calculs, nous introduisons l'expression donnant le champ  $\vec{E}_d(\vec{r})$  diffracté par un réseau bidimensionnel rectangulaire (de paramètres de maille  $a$  et  $b$ ) éclairé par une onde plane  $\vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , où (cf figure 2.2)

$$\vec{k} = \left[ \begin{array}{c} \vec{k}_{//} = \left[ \begin{array}{c} k \sin \vartheta \cos \phi \\ k \sin \vartheta \sin \phi \end{array} \right] \\ k \cos \vartheta \end{array} \right] \quad (2.2)$$

On définit le système de coordonnées sphériques utilisé dans la figure (2.2) qui suit,

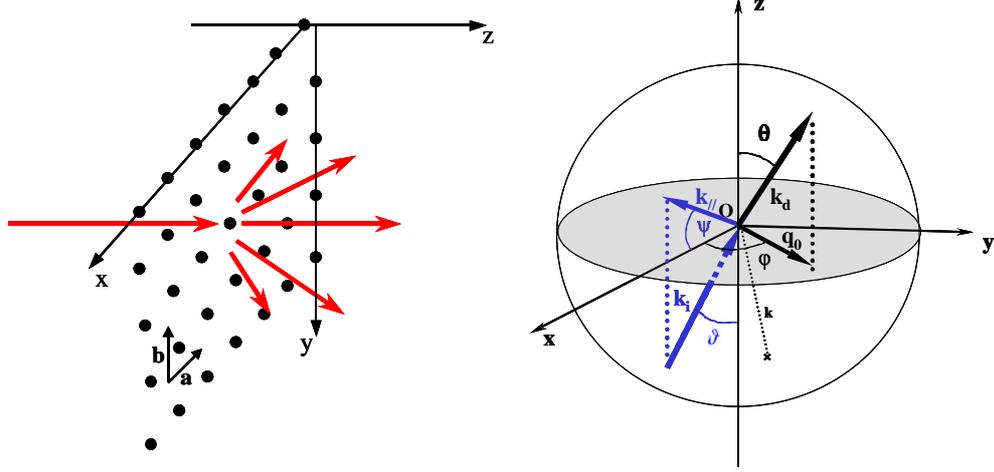


Figure 2.2 : A droite, représentation des coordonnées sphériques utilisées dans la sphère de rayon  $k$ .

Le plan  $Oxy$  est le plan du réseau de diffraction schématisé à gauche.

et ainsi on introduit ( $\vec{k}_d$  étant le vecteur d'onde du champ diffracté selon la direction d'observation définie par les angles  $(\theta, \varphi)$ )

$$\vec{k}_d = \begin{bmatrix} \vec{q}_0 = \begin{bmatrix} k \sin \theta \cos \varphi \\ k \sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} \\ k \cos \theta \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

ainsi que

$$\vec{k}_{//} - \vec{q}_0 = k \begin{bmatrix} \sin \vartheta \cos \phi - \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \phi - \sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

On a ainsi

$$\begin{aligned} \vec{E}_d(\vec{r}) &= \frac{ik}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} [\cos \theta + \cos \vartheta] \int_{\sigma} e^{i(\vec{k}_{//} - \vec{q}_0) \cdot \vec{s}} d^2 s \\ &\frac{\sin(\frac{k}{2}a\eta(\sin \vartheta \cos \phi - \sin \theta \cos \varphi)) \sin(\frac{k}{2}b\eta(\sin \vartheta \sin \phi - \sin \theta \sin \varphi))}{\sin(\frac{k}{2}a(\sin \vartheta \cos \phi - \sin \theta \cos \varphi)) \sin(\frac{k}{2}b(\sin \vartheta \sin \phi - \sin \theta \sin \varphi))} \\ &\begin{bmatrix} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1 & \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \\ \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 1 & \cos \theta \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \theta \sin \varphi & -\sin^2 \theta \end{bmatrix} \vec{E}_0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

avec  $\eta$  le nombre de trous et  $\int_{\sigma} e^{i(\vec{k} // - \vec{q} \cdot \vec{s})} d^2 s$  le facteur de forme du "trou".

On notera que cette expression coïncide avec l'expression obtenue pour un modèle scalaire de la diffraction dans le cadre de la théorie de Huygens-Fresnel [N1,2,4,9], au terme matriciel près qui caractérise les propriétés de la polarisation. Le calcul ainsi effectué donne des résultats qui sont en général vérifiés d'une façon très satisfaisante par l'expérience. Néanmoins, en dépit du succès de ce type de calcul, il est évidemment sujet à de graves objections. Tout d'abord, de part la méthode même de calcul, où l'on a fait l'hypothèse d'un calcul asymptotique à grande distance de l'intégrale de surface (cf annexe A), il est fort probable que l'expression ainsi formulée soit inapte à décrire le champ au voisinage de la surface. De plus, même si le calcul est repris en tenant compte d'une détermination du champ à distance finie, le fait que le calcul qui conduit à l'expression (2.5) soit effectué de manière perturbative et limité au premier ordre (cf annexe A) laisse tout de même un doute quant à l'expression correcte du champ proche. Par ailleurs, même si l'on pousse les calculs aux ordres supérieurs, rien ne prouve que la série ainsi calculée soit convergente. Le problème de ce type de calcul réside ainsi pour l'essentiel dans la détermination des conditions aux limites sur la surface. Il est intéressant de remarquer que ces objections, qui ont fait l'objet d'un certain nombre de travaux dans le cadre de la théorie de la diffraction [B4,5,12], ont été soulevées par Louis de Broglie [N10]. Malgré tout, ce modèle simple permettra d'étudier le comportement du champ électromagnétique limité aux effets liés à la diffraction seule. Aussi, il est possible d'en déduire quelques propriétés générales des réseaux optiques.

Tout d'abord, à partir des expressions (2.4) et (2.5), on obtient la relation fondamentale des réseaux par transmission qui n'est autre que

$$\begin{cases} \vec{a} \cdot (\vec{k}_{//} - \vec{q}_0) = 2\pi m \\ \vec{b} \cdot (\vec{k}_{//} - \vec{q}_0) = 2\pi m' \end{cases} \quad (2.6)$$

où  $m$  et  $m'$  sont des entiers.

Cette relation donne la position des maxima principaux d'intensité.

Ensuite, le caractère vectoriel des équations nous permet d'évaluer l'état de polarisation de chaque ordre de diffraction. Ainsi, considérons une onde en incidence normale sur un réseau bidimensionnel, placé dans un plan  $Oxy$ . Cette onde est caractérisée par un vecteur d'onde  $\vec{k}_i$  parallèle à  $Oz$  et par un champ électrique polarisé selon  $Oy$ . Dans ce cas, l'ordre zéro ( $\vec{g}_0$ ) de diffraction, collinéaire à  $\vec{k}_i$ , voit son champ électrique  $\vec{E}_0$  polarisé également uniquement selon  $Oy$ . Pour un ordre de diffraction  $\vec{g}_1$  contenu dans le plan  $Oxz$ , son champ électrique  $\vec{E}_1$  est polarisé uniquement parallèlement à  $Oy$  (polarisation s); pour un ordre de diffraction  $\vec{g}_2$  contenu dans le plan  $Oyz$ , son champ électrique  $\vec{E}_2$  est polarisé uniquement parallèlement à  $Oyz$  (polarisation p) (cf figure 2.3)

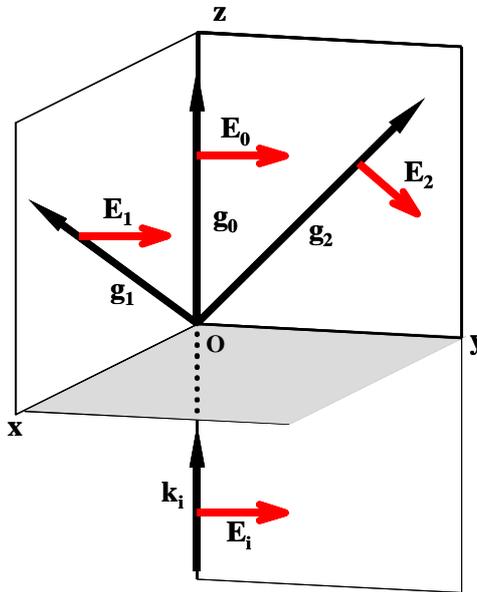


Figure 2.3 : Polarisation des ordres de diffraction

Un autre aspect intéressant réside dans le comportement des différents ordres de diffraction. Si on considère le réseau réciproque (RR) associé à un réseau infini bidimensionnel carré de paramètre de maille  $a$ , supposé très mince, on peut se faire une idée du devenir des ordres de diffraction  $\vec{g}$  selon leurs caractéristiques. Ainsi, si on considère le schéma suivant (à l'incidence normale) où  $b_1 = b_2 = \frac{2\pi}{a}$ , les ordres contenus dans le disque de rayon  $k$ , i.e. tels que  $|\vec{g}| < k$ , sont homogènes. Ailleurs, les ordres sont évanescents (cf figure 2.4). Si on superpose au RR la transformée de Fourier (TF) d'un trou (rond dans le schéma de la figure 2.4) on peut alors se faire une idée de la manière avec laquelle sont sélectionnés les ordres. Ainsi les cercles en niveau de gris correspondent à la TF d'un trou rond qui exprime la manière avec laquelle sont répartis les ordres en amplitude. Dans cet exemple, les ordres de plus en plus élevés présentent une intensité de plus en plus faible.

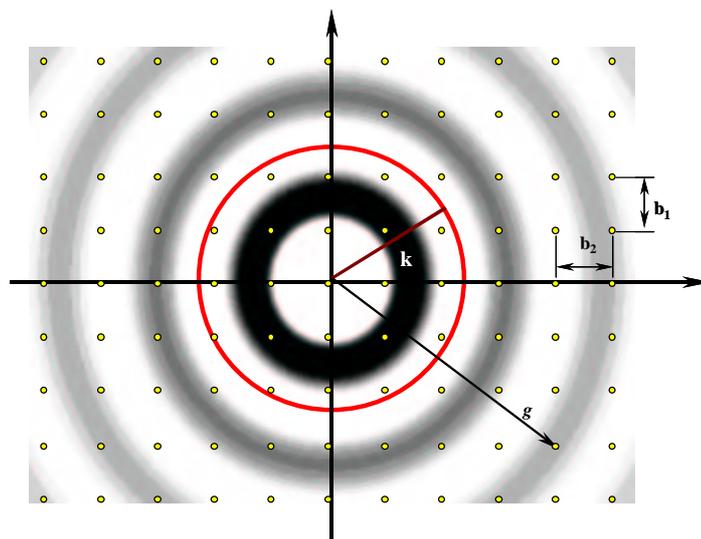


Figure 2.4 : Schéma du réseau réciproque (RR) dans le problème de diffraction par un réseau bidimensionnel de trous ronds. Chaque point correspond à un noeud du RR (i.e. à un ordre de diffraction  $\vec{g}$ ). Le cercle de rayon  $k$  est le cercle à l'intérieur duquel les ordres sont homogènes. A l'extérieur du cercle, les ordres sont évanescents. Les cercles en niveau de gris correspondent à la transformée de Fourier d'un trou rond qui exprime la manière avec laquelle sont répartis les ordres en amplitude.

Pour résumer, on voit que ces quelques notions permettent de se faire une idée simple du comportement d'un réseau de diffraction, sur la base d'un modèle simple dont il convient de mesurer les limites comme nous l'avons indiqué plus haut.

# Chapitre 3

## Les anomalies de Wood

En 1902, R.W. Wood met expérimentalement en évidence les "anomalies" des réseaux de diffraction. Il illumine un réseau de diffraction avec une source de lumière polychromatique. En observant le spectre de diffraction, il constate que certaines images monochromatiques présentent une intensité lumineuse extrêmement faible. En particulier, il remarque que certaines de ces chutes d'intensité ont lieu pour des variations très petites de la longueur d'onde. Comme à cette époque ces phénomènes demeurent assez suprenants et ne trouvent pas immédiatement d'explications, on les qualifie alors "d'anomalies". Dès lors, on désigne sous le nom d'anomalie de Wood le phénomène caractérisé par une variation notable des coefficients de réflexion et transmission lors d'une faible modification des paramètres caractéristiques de l'onde incidente. Sur la figure ci-dessous on a représenté une photographie de spectres obtenus par R.W. Wood en 1935 [C32].

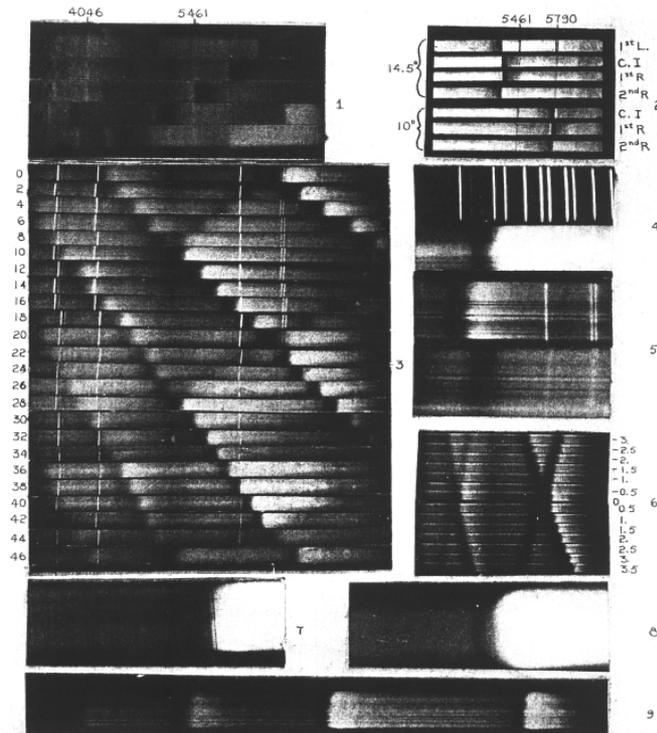


Figure 3.1 : Photographies du spectre d'une lampe à incandescence extrait de l'article de R.W. Wood de 1935. Si on observe, l'image notée "3", les spectres ont été représentés pour divers angles d'incidence (de  $0^\circ$  à  $46^\circ$ , de haut en bas). On constate alors des diminutions de l'intensité du spectre à diverses longueurs d'onde. De telles diminutions d'intensité correspondent aux anomalies de Wood. On notera que les zones correspondant aux longueurs d'onde liées aux anomalies se déplacent, en fonction de l'angle d'incidence, selon des droites.

En 1907, Lord Rayleigh prédit la position et la forme de certaines anomalies [C22], et en 1938 Fano est le premier à suggérer un lien entre les anomalies et l'excitation d'ondes se propageant à la surface du réseau [C5]. Il faut néanmoins attendre les années 70 et les développements des théories électromagnétiques liés à la simulation numérique pour que les anomalies soient mises en évidence de manière théorique. M. Nevière, D. Maystre *et al* [C15,20] montrent que l'étude des anomalies passe par la connaissance des zéros et des pôles complexes de certains éléments de la matrice S de diffraction. En particulier, ils posent une liste non exhaustive des origines physiques des anomalies de Wood.

Le premier type d'anomalies correspond à celles qui se produisent aux longueurs

d'onde de Rayleigh. Pour un réseau et une incidence donnés, une longueur d'onde de Rayleigh caractérise la transition d'un ordre de diffraction entre l'état d'onde homogène et celui d'onde non-homogène. Dans ce cas, la cause des anomalies peut être attribuée à un effet de redistribution de l'énergie diffractée entre les diverses ondes planes s'échappant du réseau. On les observe aussi bien pour les réseaux infiniment conducteurs que pour les réseaux diélectriques et métalliques. Elles peuvent se traduire par des discontinuités des fonctions de transmission ou de réflexion d'un réseau, ou de leurs dérivées premières.

Le second type d'anomalies concerne les réseaux métalliques de conductivité finie recouverts ou non de diélectrique, dans le cas de polarisation TM. Ces anomalies apparaissent au voisinage des longueurs d'onde de Rayleigh, se manifestent par de brutales variations des coefficients de réflexion ou transmission, et sont caractérisées par une baisse notable de l'énergie totale diffractée par le réseau. M. Nevière et D. Maystre les nomment "anomalies de plasmons" pour des raisons exposées par la suite.

La troisième catégorie d'anomalies apparaît lorsque l'on dépose une couche diélectrique sur la surface du réseau, ou lorsque la couche métallique superficielle s'est oxydée. M. Nevière et D. Maystre ont montré que ces anomalies sont liées à l'existence de modes de propagation dans la partie diélectrique. Ils notent que ces anomalies peuvent aussi s'accompagner de fortes absorptions d'énergie. Toutefois, on peut cependant les distinguer des anomalies de plasmon par le fait que ces dernières ne disparaissent pas lorsque l'on enlève progressivement la couche diélectrique.

Par ailleurs, afin d'éclairer les résultats de M. Nevière et D. Maystre, on peut mentionner les résultats obtenus par A. Hessel et A.A. Oliner [C6]. Ces derniers ont établi un modèle original des anomalies de Wood pour lesquelles ils distinguent deux causes. La première apparaît dans les réseaux de diffraction aux longueurs d'ondes de Rayleigh comme nous l'avons déjà mentionné. La seconde correspond à des effets de résonances. De telles résonances proviennent du couplage entre la lumière incidente et les modes propres associés aux réseaux. Les deux types types d'anomalies peuvent se manifester séparément et indépendamment, ou elles peuvent également apparaître à des longueurs d'ondes

voisines. On note alors que les anomalies de plasmons ainsi que les anomalies liées aux modes de propagation (M. Nevière et D. Maystre [C15,20]) relèvent des anomalies "résonnantes" (A. Hessel et A.A. Oliner [C6]). Par ailleurs, il convient de préciser également que la démarche de A. Hessel et A.A. Oliner est assez proche de celle introduite par Fano [C5]. Celle-ci repose sur une écriture du champ électromagnétique diffracté qui prend en compte le couplage entre le champ incident et les modes propres associés au système optique étudié. D'une façon générale, les anomalies de Wood ont fait l'objet de nombreuses publications [C1-32] et, avant d'aller plus loin, on remarquera que le terme d'anomalies est finalement impropre puisqu'elles sont malgré tout une conséquence directe des équations de Maxwell.

# Chapitre 4

## Plasmons et plasmons de surface

Pendant les années 50, un intérêt particulier est apparu quant à l'interprétation des pertes en énergie dans les expériences de diffusion électronique au travers de films de matériaux divers. Pines et Bohm [D5] ont suggéré que ces pertes d'énergie étaient dues à l'excitation d'oscillations de plasma, ou "plasmons", au niveau des électrons de conduction. Ritchie [D6] a été un des premiers à modéliser le concept de plasmon. On note également les nombreuses études de A. Lucas [C14,16,17,26,28,D2] portant, entre autres, sur les plasmons pour diverses configurations géométriques. D'une manière générale une oscillation de plasma dans un métal est une excitation collective longitudinale du gaz des électrons de conduction. Un plasmon est une oscillation de plasma quantifié ; on peut exciter un plasmon en faisant traverser, ou réfléchir, un électron ou un photon, dans un milieu métallique. Dans le cas d'un électron, il y a couplage entre la charge de l'électron et les fluctuations du champ électrostatique des oscillations de plasma. L'électron réfléchi ou transmis perd une énergie égale à un multiple entier de l'énergie du plasmon [D2,M4]. On note qu'il est également possible d'exciter des oscillations collectives de plasma dans des films diélectriques. Dans un diélectrique, l'oscillation de plasma est semblable à celle d'un métal : le nuage d'électrons de valence tout entier oscille par rapport aux ions positifs.

Dans la suite, nous nous intéresserons au cas de l'excitation des plasmons dans le cadre de processus optiques[D1-5,7,8]. Ainsi, dans l'étude des plasmons de surface, l'expression

du champ électrique sur une interface vide/métal prend la forme [D5] :

$$\vec{E} = \vec{E}_0^\pm e^{i(k_{ps}x \pm k_{z,\pm}z - \omega t)} \quad (4.1)$$

avec + pour  $z \geq 0$  et - pour  $z \leq 0$ , et avec  $k_{z,\pm}$  imaginaire, ce qui cause la décroissance exponentielle du champ de part et d'autre de l'interface. De plus,  $k_{ps}$  est parallèle à l'interface.

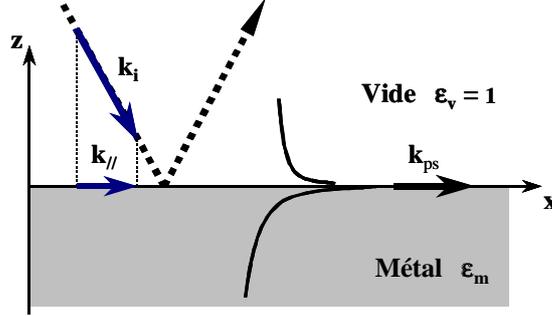


Figure 4.1 : Schéma d'un plasmon de surface (profil exponentiel) sur une interface vide/métal. Le plasmon est caractérisé par un vecteur  $\vec{k}_{ps}$  parallèle à la surface.

On a également représenté une onde lumineuse (en pointillés) se réfléchissant sur la surface. Elle est caractérisée par un vecteur d'onde  $\vec{k}_i$  dont  $\vec{k}_{//}$  est la composante parallèle à la surface.

Il est aisé de montrer que les conditions aux limites doivent alors satisfaire :

$$\frac{k_{z,-}}{\varepsilon_m} + \frac{k_{z,+}}{\varepsilon_v} = 0 \quad (4.2)$$

avec

$$k_{z,+ \text{ ou } -} = \sqrt{\varepsilon_{v \text{ ou } m} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_{ps}^2} \quad (4.3)$$

la composante  $k_{ps}$  étant continue à l'interface.

On obtient alors facilement la relation de dispersion pour les plasmons de surface :

$$k_{ps} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_v \varepsilon_m}{\varepsilon_v + \varepsilon_m}} \quad (4.4)$$

Par ailleurs, dans le cadre d'un modèle de Drüde, il est possible de décrire la permittivité

d'un métal par :

$$\varepsilon_m = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (4.5)$$

Ceci permet en posant

$$\begin{cases} \Omega(\kappa) = \frac{\omega(\kappa)}{\omega_p} \\ \kappa = \frac{ck_{ps}}{\omega_p} \end{cases} \quad (4.6)$$

de tirer l'expression suivante de la relation de dispersion

$$\Omega(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \kappa^2 \left( \frac{\varepsilon_v + 1}{\varepsilon_v} \right) \pm \sqrt{1 + \kappa^4 \left( \frac{\varepsilon_v + 1}{\varepsilon_v} \right)^2 + 2\kappa^2 \left( \frac{\varepsilon_v - 1}{\varepsilon_v} \right)}} \quad (4.7)$$

qui conduit à la courbe typique de dispersion pour les plasmons de surface :

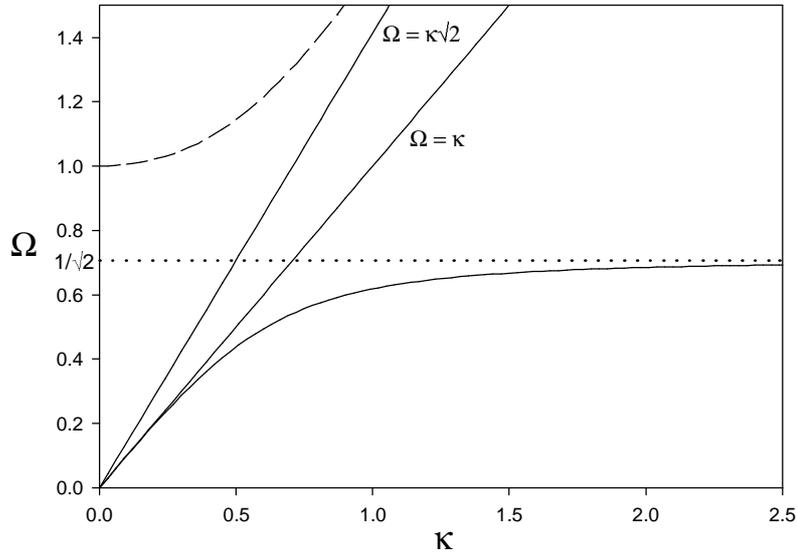


Figure 4.2 : Courbe typique de la relation de dispersion des plasmons de surface

La droite d'équation  $\Omega = \kappa$ , correspond à la relation de dispersion d'une onde incidente dans le vide telle que celle représentée sur la figure (4.1). La droite d'équation  $\Omega = \kappa\sqrt{2}$  est l'asymptote à la branche d'hyperbole que l'on observe en haut du graphique (en tirets). La ligne pleine correspond à la relation de dispersion des plasmons de surface. Le seul moyen, qui apparaît à la vue des courbes tracées, pour exciter un plasmon de

surface serait d'avoir  $k_{//} = k_{ps}$ , or on constate que  $k_{ps} > \frac{\omega}{c}$ , i.e. si on cherche à exciter les plasmons de surface avec une onde homogène, on doit chercher à obtenir  $k_{//} > \frac{\omega}{c}$ . On observe ainsi naturellement qu'une onde électromagnétique homogène ne peut exciter un plasmon de surface. De fait, la condition  $k_{//} > \frac{\omega}{c}$  ne peut être vérifiée que dans le cas où le champ électromagnétique est évanescent. C'est sur ce principe que repose la méthode ATR qui consiste à exciter les plasmons de surface par une onde évanescente produite par la réflexion totale d'un faisceau lumineux sur un prisme [D5]. Cependant, il est possible d'exciter les plasmons de surface autrement que sur le principe de la méthode ATR, et ce grâce à un couplage par réseau [D5]. Cette méthode bien connue consiste à considérer une surface présentant un profil avec une modulation périodique. Le lien entre le vecteur d'onde  $k_{ps}$  décrivant les plasmons de surface et la composante parallèle à la surface du vecteur d'onde incident  $k_{//}$  est donné alors par la relation [C11,D5] :

$$k_{ps} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_v \varepsilon_m}{\varepsilon_v + \varepsilon_m}} = k_{//} + \frac{2\pi}{a} n \quad (4.8)$$

où  $a$  est la période du profil et  $n$  un entier. On peut interpréter cette relation comme un repliement de la relation de dispersion initiale. Ceci est comparable à la situation rencontrée pour la relation de dispersion des électrons libres d'un métal sous l'influence d'un potentiel périodique, créé par la répartition des ions du réseau cristallin de ce métal. Ainsi, la relation de dispersion prend typiquement la forme représentée sur le schéma suivant extrait d'un article de E. S. Kotelès [C11] :

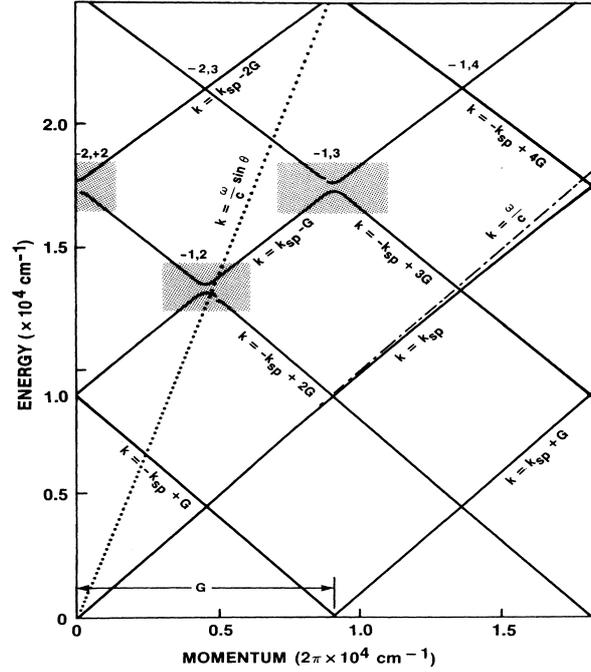


Figure 4.3 : Relation de dispersion des plasmons de surface corruguée. Les courbes "pleines" correspondent aux relations de dispersion des plasmons d'une surface de profil sinusoïdale. Elles sont obtenues à partir du repliement des courbes de dispersion des plasmons de surface plane. La ligne en "pointillés" correspond à la droite de lumière pour une onde avec un angle d'incidence  $\theta$  par rapport au plan moyen du profil de la surface.

Ainsi, on voit qu'il devient possible pour la droite de lumière de couper les courbes correspondant à la relation de dispersion des plasmons de surface. Dès lors, il devient possible d'exciter ceux-ci grâce au couplage avec le réseau qui permet de vérifier

$$k_{//} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_v \epsilon_m}{\epsilon_v + \epsilon_m}} + \frac{2\pi}{a} n \quad (4.9)$$

pour

$$k_{//} < \frac{\omega}{c} \quad (4.10)$$

C'est précisément cette propriété des réseaux qui trouvera son intérêt dans la suite de notre étude.

## Troisième partie

**Les outils théoriques développés,  
aspects numériques et analytiques**

# Chapitre 5

## Présentation de l'algorithme.

## Méthode des modes couplés et formalisme de la matrice $S$

Nous présentons ici le formalisme qui est à la base de l'algorithme du programme de simulation que nous avons employé dans ces travaux. Les principes de cette méthode ont été présentés en détails par J-P. Vigneron *et al* [E6] dans un polycopié [E7] accompagnant le programme d'origine. Par souci de clarté nous en présentons ici quelques extraits. L'algorithme repose sur la méthode des modes couplés utilisée conjointement avec le formalisme de la matrice  $S$ , comme John Pendry *et al* [E3-5] l'ont introduit.

### 5.1 Description d'un système matériel dans une représentation de Fourier

On se propose d'étudier les caractéristiques optiques d'une couche plane diélectrique, présentant une répartition périodique bidimensionnelle des indices de réfraction. Le traitement sera conduit dans un formalisme de matrice de transfert de manière à permettre

l'empilage de ces tranches de guides d'ondes. Dans la couche plane, la constante diélectrique est supposée ne pas dépendre de la coordonnée normale (épaisseur de la couche)  $z$ . La couche diélectrique (constante diélectrique  $\varepsilon(\vec{\rho}, \omega)$ , fonction des coordonnées latérales  $\vec{\rho} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2$ , indépendante de la coordonnée  $z$ ) s'étend entre les coordonnées  $Z_I$  et  $Z_{III}$ . La périodicité bidimensionnelle est décrite par deux vecteurs de base  $\vec{a}_1$  et  $\vec{a}_2$  (non nécessairement orthogonaux).

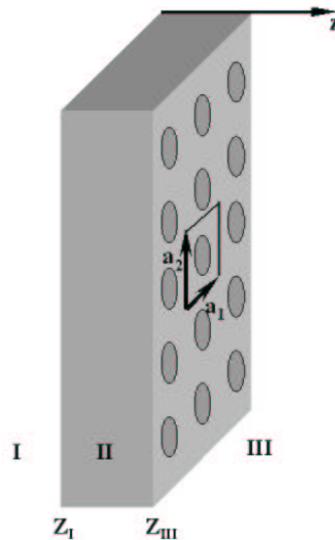


Figure 5.1 : Schéma d'une couche à permittivité périodique

On suppose connue la fonction diélectrique dans l'espace réel, sous la forme d'un assemblage par morceaux de valeurs constantes, îlots dans un milieu homogène :

$$\varepsilon(\vec{\rho}, \omega) = \varepsilon_s(\omega) + \sum_{l=1}^{n_l} [\varepsilon_l(\omega) - \varepsilon_s(\omega)] \Omega_l(\vec{\rho}) \quad (5.1)$$

pour chacune des  $n_l$  régions, on définit d'une part la valeur constante  $\varepsilon_l$  de la fonction diélectrique dans cette région et le domaine géométrique qu'elle occupe, au moyen de la fonction "booléenne"  $\Omega_l(\vec{\rho})$ , qui vaut 1 dans la région et 0 à l'extérieur :

$$\Omega_l(\vec{\rho}) = \begin{cases} 1 & \text{pour tous les points } \vec{\rho} \text{ où } \varepsilon(\vec{\rho}) = \varepsilon_l \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (5.2)$$

On supposera connus les développements en série de Fourier de ces fonctions "région"

$$\Omega_l(\vec{\rho}) = \sum_{\vec{g}} \Omega_{l,\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{\rho}} \quad (5.3)$$

la formule d'inversion permettant le calcul des coefficients étant donnée par une intégrale sur la maille élémentaire  $\sigma$  du réseau périodique bidimensionnel :

$$\Omega_{l,\vec{g}} = \frac{1}{\sigma} \int_{\sigma} \Omega_l(\vec{\rho}) e^{-i\vec{g}\vec{\rho}} d\vec{\rho}^2 \quad (5.4)$$

Le développement en série de Fourier de la constante diélectrique

$$\varepsilon(\vec{\rho}, \omega) = \sum_{\vec{g}} \varepsilon_{\vec{g}}(\omega) e^{i\vec{g}\vec{\rho}} \quad (5.5)$$

trouve alors immédiatement ses coefficients :

$$\varepsilon_{\vec{g}}(\omega) = \varepsilon_s(\omega) \delta_{\vec{g}\mathbf{0}} + \sum_{l=1}^{n_l} [\varepsilon_l(\omega) - \varepsilon_s(\omega)] \Omega_{l,\vec{g}} \quad (5.6)$$

Si les coefficients  $\Omega_{l,\vec{g}}$  sont pré-calculés, il devient très facile d'obtenir le développement en série de Fourier de  $\frac{1}{\varepsilon(\vec{\rho}, \omega)}$  dont on aura besoin par la suite. En effet, on vérifie très facilement que du fait de la localité du développement (5.1),

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{\rho}, \omega)} = \frac{1}{\varepsilon_s(\omega)} + \sum_{l=1}^{n_l} \left[ \frac{1}{\varepsilon_l(\omega)} - \frac{1}{\varepsilon_s(\omega)} \right] \Omega_{l,\vec{g}} \quad (5.7)$$

et les développements en série de Fourier deviennent :

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{\rho}, \omega)} = \sum_{\vec{g}} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right]_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{\rho}} \quad (5.8)$$

où

$$\left[ \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right]_{\vec{g}} = \frac{1}{\varepsilon_s(\omega)} \delta_{\vec{g}\mathbf{0}} + \sum_{l=1}^{n_l} \left[ \frac{1}{\varepsilon_l(\omega)} - \frac{1}{\varepsilon_s(\omega)} \right] \Omega_{l,\vec{g}} \quad (5.9)$$

## Description des motifs élémentaires d'un système périodique bidimensionnel

La transformée de Fourier d'une "région" bidimensionnelle

$$\Omega_l(\vec{\rho}) = \sum_{\vec{g}} \Omega_{l,\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{\rho}} \quad (5.10)$$

peut être calculée analytiquement dans un certain nombre de cas simples.

### Région circulaire

Considérons, d'abord une région circulaire, de centre  $\vec{R}$  et de rayon  $a$ .

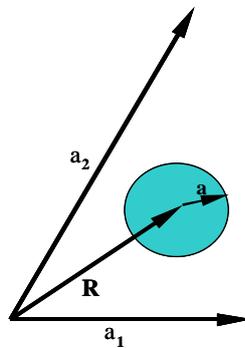


Figure 5.2 : Région circulaire

On trouve une expression analytique utilisant une fonction de Bessel d'indice 1 :

$$\Omega_{\vec{g}} = \frac{2\pi a^2}{\sigma} \frac{J_1(ga)}{ga} e^{-i\vec{g}\vec{R}} \quad (5.11)$$

### Région de section rectangulaire

On prend une région définie par une origine  $\vec{R}$ , une largeur  $a$  et une hauteur  $b$  quelconques.

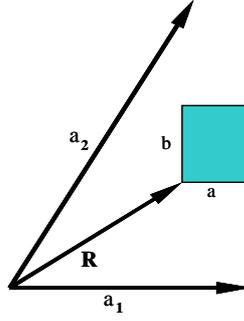


Figure 5.3 : Région rectangulaire

Le calcul du coefficient de Fourier est, ici encore, très facile :

$$\Omega_{\vec{g}} = \frac{ab}{\sigma} \left( \frac{e^{-ig_x a} - 1}{-ig_x a} \right) \left( \frac{e^{-ig_y b} - 1}{-ig_y b} \right) e^{-i\vec{g} \cdot \vec{R}} \quad (5.12)$$

## 5.2 Equations de Maxwell dans une représentation de Fourier

Pour une fonction diélectrique périodique, le théorème de Bloch impose une forme simple aux champs électriques et magnétiques :

$$\begin{bmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{bmatrix} = \sum_{\vec{g}} \begin{bmatrix} E_{x,\vec{g}}(z) \vec{e}_x + E_{y,\vec{g}}(z) \vec{e}_y + E_{z,\vec{g}}(z) \vec{e}_z \\ H_{x,\vec{g}}(z) \vec{e}_x + H_{y,\vec{g}}(z) \vec{e}_y + H_{z,\vec{g}}(z) \vec{e}_z \end{bmatrix} e^{i(\vec{k} + \vec{g}) \cdot \vec{\rho}} e^{-i\omega t} \quad (5.13)$$

Par ailleurs, la constante diélectrique et son inverse peuvent s'exprimer en série de Fourier (cf relations 5.5 et 5.8). En coordonnées cartésiennes, les équations de Maxwell pour un milieu inhomogène prennent la forme :

$$\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon(x, y) \vec{E}) = 0 \quad (5.14)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0 \quad (5.15)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (5.16)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \varepsilon(x, y) \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} \quad (5.17)$$

En injectant les relations 5.5, 5.8 et 5.13 dans les équations 5.14 à 5.17 on obtient une écriture des équations de Maxwell en représentation de Fourier, soit :

$$\frac{dE_{z, \vec{g}''}}{dz} = -i \sum_{\vec{g}, \vec{g}'} \left( \frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{g}'' - \vec{g}' - \vec{g}} \varepsilon_{\vec{g}'} (\vec{k} + \vec{g}' + \vec{g}') \cdot \vec{E}_{//, \vec{g}} \quad (5.18)$$

$$\frac{dH_{z, \vec{g}}}{dz} = -i (\vec{k} + \vec{g}) \cdot \vec{H}_{//, \vec{g}} \quad (5.19)$$

$$\frac{dE_{y, \vec{g}}}{dz} = i(k_y + g_y) E_{z, \vec{g}} - i\mu_0 \omega H_{x, \vec{g}} \quad (5.20)$$

$$\frac{dE_{x, \vec{g}}}{dz} = i(k_x + g_x) E_{z, \vec{g}} + i\mu_0 \omega H_{y, \vec{g}} \quad (5.21)$$

$$H_{z, \vec{g}} = \frac{1}{\mu_0 \omega} [(k_x + g_x) E_{y, \vec{g}} - (k_y + g_y) E_{x, \vec{g}}] \quad (5.22)$$

$$\frac{dH_{y, \vec{g}}}{dz} = i(k_y + g_y) H_{z, \vec{g}} + i\varepsilon_0 \omega \sum_{\vec{g}'} \varepsilon_{\vec{g} - \vec{g}'} E_{x, \vec{g}'}, \quad (5.23)$$

$$\frac{dH_{x, \vec{g}}}{dz} = i(k_x + g_x) H_{z, \vec{g}} - i\varepsilon_0 \omega \sum_{\vec{g}'} \varepsilon_{\vec{g} - \vec{g}'} E_{y, \vec{g}'}, \quad (5.24)$$

$$E_{z, \vec{g}} = \frac{1}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{\vec{g}'} \left( \frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{g} - \vec{g}'} [(k_y + g'_y) H_{x, \vec{g}'} - (k_x + g'_x) H_{y, \vec{g}'}] \quad (5.25)$$

Les équations 5.22 et 5.25 permettent d'éliminer les champs longitudinaux  $E_{z, \vec{g}}$  et  $H_{z, \vec{g}}$ , laissant comme inconnues essentielles les composantes transverses  $\vec{E}_{//, \vec{g}}$  et  $\vec{H}_{//, \vec{g}}$ . Ceci est important, non seulement parce que le nombre d'inconnues s'en trouve réduit, mais aussi parce que les champs restant à déterminer sont précisément ceux qui restent continus au passage d'interfaces perpendiculaires à la direction  $z$ . Ainsi, les équations effectivement traitées sont les suivantes :

$$\frac{dE_{x, \vec{g}}}{dz} = \frac{i(k_x + g_x)}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{\vec{g}'} \left( \frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{g} - \vec{g}'} [(k_y + g'_y) H_{x, \vec{g}'} - (k_x + g'_x) H_{y, \vec{g}'}] + i\mu_0 \omega H_{y, \vec{g}} \quad (5.26)$$

$$\frac{dE_{y, \vec{g}}}{dz} = \frac{i(k_y + g_y)}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{\vec{g}'} \left( \frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{g} - \vec{g}'} [(k_y + g'_y) H_{x, \vec{g}'} - (k_x + g'_x) H_{y, \vec{g}'}] - i\mu_0 \omega H_{x, \vec{g}} \quad (5.27)$$

$$\frac{dH_{x,\vec{g}}}{dz} = \frac{i(k_x + g_x)}{\mu_0\omega} [(k_x + g_x)E_{y,\vec{g}} - (k_y + g_y)E_{x,\vec{g}}] - i\varepsilon_0\omega \sum_{\vec{g}'} \varepsilon_{\vec{g}-\vec{g}'} E_{y,\vec{g}'} \quad (5.28)$$

$$\frac{dH_{y,\vec{g}}}{dz} = \frac{i(k_y + g_y)}{\mu_0\omega} [(k_x + g_x)E_{y,\vec{g}} - (k_y + g_y)E_{x,\vec{g}}] + i\varepsilon_0\omega \sum_{\vec{g}'} \varepsilon_{\vec{g}-\vec{g}'} E_{x,\vec{g}'} \quad (5.29)$$

Ce système d'équations différentielles très simple (les coefficients sont constants) peut être résolu si l'on trouve des conditions initiales appropriées. Dans ce but, on recherche les solutions des équations dans les régions homogènes *I* et *III* de part et d'autre de la région inhomogène *II* (cf fig. 5.1). Dans la région *I*, la fonction diélectrique a la valeur constante  $\varepsilon_I$ , alors que dans la région *III* on prend la valeur constante  $\varepsilon_{III}$ . Dans le cas de valeurs constantes, les relations trouvées se simplifient facilement. On pose alors un autre jeu d'équations obtenues en dérivant par rapport à  $z$  les équations (5.26) à (5.29). Les deux jeux d'équations se simplifient pour donner :

$$\frac{d^2}{dz^2} \begin{bmatrix} \vec{E}_{j,/, \vec{g}} \\ \vec{H}_{j,/, \vec{g}} \end{bmatrix} = - \left( \varepsilon_j(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - |\vec{k} + \vec{g}|^2 \right) \begin{bmatrix} \vec{E}_{j,/, \vec{g}} \\ \vec{H}_{j,/, \vec{g}} \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

où  $j = I$  ou *III*.

On déduit facilement les solutions :

$$\begin{bmatrix} \vec{E}_{j,/, \vec{g}} \\ \vec{H}_{j,/, \vec{g}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{A}_{j, \vec{g}}^+ \\ \vec{B}_{j, \vec{g}}^+ \end{bmatrix} e^{ik_{j, \vec{g}, z} z} + \begin{bmatrix} \vec{A}_{j, \vec{g}}^- \\ \vec{B}_{j, \vec{g}}^- \end{bmatrix} e^{-ik_{j, \vec{g}, z} z} \quad (5.31)$$

où

$$k_{j, \vec{g}, z} = \sqrt{\varepsilon_j(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - |\vec{k} + \vec{g}|^2} \quad (5.32)$$

Ce nombre peut être réel (onde radiative) ou imaginaire (onde évanescente), suivant la grandeur du vecteur d'onde "latéral"  $\vec{k} + \vec{g}$ , comparé au vecteur d'onde total  $\sqrt{\varepsilon_j(\omega)} \frac{\omega}{c}$ .

### 5.3 Choix de la base de polarisation

Pour la suite, il convient d'écrire les champs électrique et magnétique dans une base appropriée liée au réseau réciproque et qui nous permettra de définir les états de polarisation de façon plus explicite et adaptée. Pour cela, on définit les trois vecteurs suivants (ici exprimés uniquement pour le milieu  $I$  comme la formulation est la même pour le milieu  $III$ )

$$\vec{\mu}_{I\vec{g}} = \frac{k_{I\vec{g}z}}{\sqrt{\varepsilon_I \frac{\omega}{c}}} \frac{\vec{k} + \vec{g}}{|\vec{k} + \vec{g}|} \quad (5.33)$$

$$\vec{\eta}_{\vec{g}} = \frac{\vec{k} + \vec{g}}{|\vec{k} + \vec{g}|} \times \vec{e}_z \quad (5.34)$$

$$\vec{\chi}_{I\vec{g}}^{\pm} = \mp \vec{\mu}_{I\vec{g}} + \frac{|\vec{k} + \vec{g}|}{\sqrt{\varepsilon_I \frac{\omega}{c}}} \vec{e}_z \quad (5.35)$$

dont la représentation est schématisée dans le croquis ci-après :

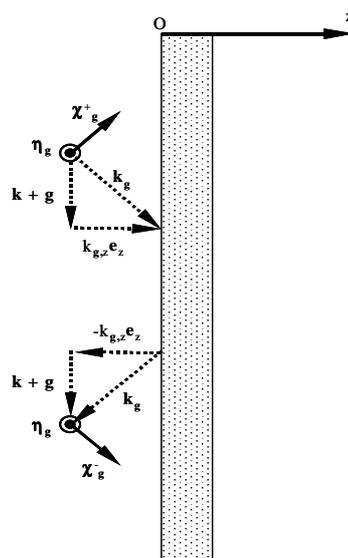


Figure 5.4 : Représentation de la base de polarisation utilisée

De cette façon, il devient possible d'écrire le champ électrique et magnétique sous la forme :

$$\begin{aligned}
\vec{E}_I(\vec{\rho}, z) &= \sum_{\vec{g}} (N_{I\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + N_{I\vec{g}}^- \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^+ \vec{\chi}_{I\vec{g}}^+ e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^- \vec{\chi}_{I\vec{g}}^- e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)}) e^{i(\vec{k} + \vec{g})\vec{\rho}}
\end{aligned} \tag{5.36}$$

$$\begin{aligned}
\vec{H}_I(\vec{\rho}, z) &= \frac{\sqrt{\varepsilon_I}}{c\mu_0} \sum_{\vec{g}} (-N_{I\vec{g}}^+ \vec{\chi}_{I\vec{g}}^+ e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad - N_{I\vec{g}}^- \vec{\chi}_{I\vec{g}}^- e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^- \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)}) e^{i(\vec{k} + \vec{g})\vec{\rho}}
\end{aligned} \tag{5.37}$$

Et pour leur composantes respectives, parallèles à la surface, il vient :

$$\begin{aligned}
\vec{E}_{//,I}(z) &= N_{I\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + N_{I\vec{g}}^- \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad - X_{I\vec{g}}^+ \vec{\mu}_{I\vec{g}} e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^- \vec{\mu}_{I\vec{g}} e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)}
\end{aligned} \tag{5.38}$$

$$\begin{aligned}
\vec{H}_{//,I}(z) &= \frac{\sqrt{\varepsilon_I}}{c\mu_0} (N_{I\vec{g}}^+ \vec{\mu}_{I\vec{g}} e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad - N_{I\vec{g}}^- \vec{\mu}_{I\vec{g}} e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)} \\
&\quad + X_{I\vec{g}}^- \vec{\eta}_{I\vec{g}} e^{-ik_{I\vec{g}}z(z-z_I)})
\end{aligned} \tag{5.39}$$

où les termes  $N_{\vec{g}}^{\pm}$  correspondent aux amplitudes pour des états de polarisation s pour chaque ordre de diffraction associé à un vecteur  $\vec{g}$  du réseau réciproque. Il en est de même pour les termes  $X_{\vec{g}}^{\pm}$  mais qui correspondent quant à eux à des états de polarisation p. Les exposants  $\pm$  indiquent si le champ, lorsqu'il est homogène, se propage selon l'axe  $Oz$  (+), ou dans le sens opposé (-).

On peut donc définir les champs électrique et magnétique parallèles à la surface en fonction des amplitudes de champ, grâce aux équations (5.38) et (5.39), et il vient de part et d'autre du milieu considéré :

$$\vec{E}_{//}(z_I) = N_{I\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{\vec{g}} + N_{I\vec{g}}^- \vec{\eta}_{\vec{g}} - X_{I\vec{g}}^+ \vec{\mu}_{I\vec{g}} + X_{I\vec{g}}^- \vec{\mu}_{I\vec{g}} \quad (5.40)$$

$$\vec{H}_{//}(z_I) = \frac{\sqrt{\varepsilon_I}}{c\mu_0} (N_{I\vec{g}}^+ \vec{\mu}_{I\vec{g}} - N_{I\vec{g}}^- \vec{\mu}_{I\vec{g}} + X_{I\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{\vec{g}} + X_{I\vec{g}}^- \vec{\eta}_{\vec{g}}) \quad (5.41)$$

dans le milieu  $I$ , et

$$\vec{E}_{//}(z_{III}) = N_{III\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{\vec{g}} + N_{III\vec{g}}^- \vec{\eta}_{\vec{g}} - X_{III\vec{g}}^+ \vec{\mu}_{III\vec{g}} + X_{III\vec{g}}^- \vec{\mu}_{III\vec{g}} \quad (5.42)$$

$$\vec{H}_{//}(z_{III}) = \frac{\sqrt{\varepsilon_I}}{c\mu_0} (N_{III\vec{g}}^+ \vec{\mu}_{III\vec{g}} - N_{III\vec{g}}^- \vec{\mu}_{III\vec{g}} + X_{III\vec{g}}^+ \vec{\eta}_{\vec{g}} + X_{III\vec{g}}^- \vec{\eta}_{\vec{g}}) \quad (5.43)$$

dans le milieu  $III$ .

On peut ainsi introduire deux matrices faisant le lien entre le champ électromagnétique et les amplitudes de champ, et dont les expressions se calculent aisément, de façon à obtenir (ici exprimées uniquement pour le milieu  $I$  comme la formulation est la même pour le milieu  $III$ ),



## 5.4 Définition de la matrice de transfert $\mathbf{T}$

La représentation des champs dans les régions homogènes nous conduit à travailler dans l'espace des coefficients  $N_{\vec{g}}^+$ ,  $N_{\vec{g}}^-$ ,  $X_{\vec{g}}^+$ ,  $X_{\vec{g}}^-$  que l'on ordonne comme il suit :

$$\begin{bmatrix} \overline{N}^+ \\ \overline{X}^+ \\ \overline{N}^- \\ \overline{X}^- \end{bmatrix} \quad (5.47)$$

avec successivement,

$$\overline{N}^+ = \begin{bmatrix} N_{\vec{g}_1}^+ \\ N_{\vec{g}_2}^+ \\ \dots \\ N_{\vec{g}_n}^+ \end{bmatrix}, \quad \overline{N}^- = \begin{bmatrix} N_{\vec{g}_1}^- \\ N_{\vec{g}_2}^- \\ \dots \\ N_{\vec{g}_n}^- \end{bmatrix} \quad (5.48)$$

$$\overline{X}^+ = \begin{bmatrix} X_{\vec{g}_1}^+ \\ X_{\vec{g}_2}^+ \\ \dots \\ X_{\vec{g}_n}^+ \end{bmatrix}, \quad \overline{X}^- = \begin{bmatrix} X_{\vec{g}_1}^- \\ X_{\vec{g}_2}^- \\ \dots \\ X_{\vec{g}_n}^- \end{bmatrix} \quad (5.49)$$

La linéarité des équations de Maxwell permet de définir une matrice de transfert  $T$  entre les coefficients définissant les champs dans la région  $I$  et les coefficients définissant les champs dans la région  $III$ , ce qui conduit à poser la relation suivante :

$$\begin{bmatrix} \overline{N}_I^+ \\ \overline{X}_I^+ \\ \overline{N}_I^- \\ \overline{X}_I^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{NN}^{++} & T_{NX}^{++} & T_{NN}^{+-} & T_{NX}^{+-} \\ T_{XN}^{++} & T_{XX}^{++} & T_{XN}^{+-} & T_{XX}^{+-} \\ T_{NN}^{-+} & T_{NX}^{-+} & T_{NN}^{--} & T_{NX}^{--} \\ T_{XN}^{-+} & T_{XX}^{-+} & T_{XN}^{--} & T_{XX}^{--} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{N}_{III}^+ \\ \overline{X}_{III}^+ \\ \overline{N}_{III}^- \\ \overline{X}_{III}^- \end{bmatrix} \quad (5.50)$$

Par ailleurs, les équations (5.28) à (5.31) peuvent aisément être écrites sous une forme matricielle selon :

$$\frac{d}{dz} \begin{bmatrix} \overline{E}_x(z) \\ \overline{E}_y(z) \\ \overline{H}_x(z) \\ \overline{H}_y(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{EE}^{xx} & A_{EE}^{xy} & A_{EH}^{xx} & A_{EH}^{xy} \\ A_{EE}^{yx} & A_{EE}^{yy} & A_{EH}^{yx} & A_{EH}^{yy} \\ A_{HE}^{xx} & A_{HE}^{xy} & A_{HH}^{xx} & A_{HH}^{xy} \\ A_{HE}^{yx} & A_{HE}^{yy} & A_{HH}^{yx} & A_{HH}^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{E}_x(z) \\ \overline{E}_y(z) \\ \overline{H}_x(z) \\ \overline{H}_y(z) \end{bmatrix} \quad (5.51)$$

dont la solution apparaît immédiatement sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \overline{E}_x(z_I) \\ \overline{E}_y(z_I) \\ \overline{H}_x(z_I) \\ \overline{H}_y(z_I) \end{bmatrix} = \exp \left\{ \begin{bmatrix} A_{EE}^{xx} & A_{EE}^{xy} & A_{EH}^{xx} & A_{EH}^{xy} \\ A_{EE}^{yx} & A_{EE}^{yy} & A_{EH}^{yx} & A_{EH}^{yy} \\ A_{HE}^{xx} & A_{HE}^{xy} & A_{HH}^{xx} & A_{HH}^{xy} \\ A_{HE}^{yx} & A_{HE}^{yy} & A_{HH}^{yx} & A_{HH}^{yy} \end{bmatrix} (z_I - z_{III}) \right\} \begin{bmatrix} \overline{E}_x(z_{III}) \\ \overline{E}_y(z_{III}) \\ \overline{H}_x(z_{III}) \\ \overline{H}_y(z_{III}) \end{bmatrix} \quad (5.52)$$

|←    matrice  $A$     ⇒|

On voit ainsi qu'une étape de la résolution numérique de cette méthode passe par le calcul d'une exponentielle de matrice. Le problème réside alors dans le choix de la technique à appliquer pour effectuer ce calcul numériquement. En effet, les moyens à mettre en oeuvre peuvent être divers et plus ou moins appropriés. Une première méthode peut résider dans la diagonalisation de la matrice  $A$ , le calcul de l'exponentielle devient alors trivial. On retrouve le résultat attendu en appliquant les matrices de passage à l'exponentielle diagonalisée. Néanmoins, cette méthode peut s'avérer délicate par rapport au problème du conditionnement des matrices de passage. Une seconde méthode est de développer l'exponentielle de la matrice sous la forme d'un développement de Taylor, puis de calculer les termes successifs de la série. Là encore, si on cherche à obtenir un calcul suffisamment précis en calculant les termes d'ordre élevé dans la série, on se heurte au problème du conditionnement. Une autre méthode, mais notre liste n'est pas exhaustive, repose sur la technique des exposants de Padé qui conduit à des résultats précis. Dans cette méthode,

les limitations numériques liées aux problèmes de convergence et de conditionnement sont moins importantes que celles rencontrées avec les autres méthodes. C'est donc cette dernière technique qui sera utilisée dans le programme grâce à un algorithme déjà existant de type EXPOKIT [N8].

La matrice  $T$  est définie par rapport aux amplitudes de champ, et non directement par rapport au champ électromagnétique. Ainsi, elle peut être obtenue en appliquant les matrices  $U$  et  $V$  définies plus haut à la matrice obtenue après calcul de l'exponentielle (cf eq. 5.52) avec,

$$T = U e^{A(Z_I - Z_{III})} V \quad (5.53)$$

## 5.5 Définition de la matrice de diffraction $S$

Comme nous l'avons défini, la matrice de transfert  $T$  permet de déterminer les champs de la région  $I$  en connaissant les champs de la région  $III$ . Cependant, dans un problème de diffusion, il est également habituel de chercher à définir les amplitudes des ondes sortantes connaissant celles des ondes entrantes. Le lien entre amplitudes sortantes et entrantes est établi par la matrice  $S$ . De plus, comme nous le montrerons par la suite, l'étude de la matrice  $S$  permet de dégager un certain nombre de propriétés importantes liées aux problèmes de diffusion et diffraction.

Nous nous reportons à la forme de la matrice  $T$  donnée par la relation (5.50), et on écrit sous la forme abrégée :

$$T = \begin{bmatrix} T^{++} & T^{+-} \\ T^{-+} & T^{--} \end{bmatrix} \quad (5.54)$$

Par ailleurs, le choix d'exprimer les composantes de champ sortant en fonction du champ entrant, permet de définir la matrice  $S$  sous la forme :

$$\begin{bmatrix} \overline{N}_{III}^+ \\ \overline{X}_{III}^+ \\ \overline{N}_I^- \\ \overline{X}_I^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{NN}^{++} & S_{NX}^{++} & S_{NN}^{+-} & S_{NX}^{+-} \\ S_{XN}^{++} & S_{XX}^{++} & S_{XN}^{+-} & S_{XX}^{+-} \\ S_{NN}^{-+} & S_{NX}^{-+} & S_{NN}^{--} & S_{NX}^{--} \\ S_{XN}^{-+} & S_{XX}^{-+} & S_{XN}^{--} & S_{XX}^{--} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{N}_I^+ \\ \overline{X}_I^+ \\ \overline{N}_{III}^- \\ \overline{X}_{III}^- \end{bmatrix} \quad (5.55)$$

que l'on peut également écrire sous la forme abrégée :

$$S = \begin{bmatrix} S^{++} & S^{+-} \\ S^{-+} & S^{--} \end{bmatrix} \quad (5.56)$$

On montre, qu'il est possible d'exprimer les termes de la matrice  $S$  en fonction des termes de la matrice  $T$ , et un calcul trivial conduit aux 4 relations suivantes :

$$S^{++} = [T^{++}]^{-1} \quad (5.57)$$

$$S^{+-} = -[T^{++}]^{-1} T^{+-} \quad (5.58)$$

$$S^{-+} = T^{-+} [T^{++}]^{-1} \quad (5.59)$$

$$S^{--} = T^{--} - T^{-+} [T^{++}]^{-1} T^{+-} \quad (5.60)$$

On voit ainsi apparaître une autre étape dans le déroulement de notre algorithme, puisque ces relations vont nous permettre, alors que nous venons de calculer la matrice  $T$ , d'en déduire la matrice  $S$ . De plus, la détermination de l'ensemble des amplitudes de champ va nous permettre *via* les relations (5.22), (5.25) et (5.36) à (5.39) de propager le champ électromagnétique dans tout l'espace et ainsi de tracer les cartes de champ proche au voisinage et à l'intérieur d'une couche donnée à condition de subdiviser celle-ci en sous-couches suffisamment minces.

## 5.6 Combinaison des matrices $S$

La propagation du champ électromagnétique à travers une couche peut être étudiée directement par le formalisme de la matrice  $S$ , et ce à condition que l'épaisseur de cette couche ne soit pas trop grande. En effet, non seulement les intégrations numériques sont difficiles sur de grandes distances, mais de plus le caractère évanescent d'une partie des ondes manipulées conduit à une matrice  $T^{++}$  qui devient vite très mal conditionnée. Par ailleurs, calculer les matrices  $T$ , sur des tranches minces de la couche, puis faire le produit de celles-ci afin d'obtenir la matrice  $T$  globale ne résout en rien le problème du conditionnement. Aussi, la meilleure approche revient à calculer les matrices  $S$  pour chacune des tranches minces et de les combiner comme il se doit afin de déterminer la matrice  $S$  globale [E2]. Si on considère une matrice  $S$  correspondant à deux couches successives, en connaissant les deux matrices  $S_1$  et  $S_2$  propres à chacune des deux couches, et en posant :

$$S = \begin{bmatrix} S^{++} & S^{+-} \\ S^{-+} & S^{--} \end{bmatrix} \quad (5.61)$$

pour le système global,

$$S_1 = \begin{bmatrix} S_1^{++} & S_1^{+-} \\ S_1^{-+} & S_1^{--} \end{bmatrix} \quad (5.62)$$

pour la première couche, et

$$S_2 = \begin{bmatrix} S_2^{++} & S_2^{+-} \\ S_2^{-+} & S_2^{--} \end{bmatrix} \quad (5.63)$$

pour la seconde, on montre que les relations permettant de calculer les éléments de la matrice  $S$  en fonction des éléments des matrices  $S_1$  et  $S_2$  s'écrivent sous la forme :

$$S^{++} = S_2^{++}(1 - S_1^{+-}S_2^{-+})^{-1}S_1^{++} \quad (5.64)$$

$$S^{+-} = S_2^{+-} + S_2^{++}(1 - S_1^{+-}S_2^{-+})^{-1}S_1^{+-}S_2^{--} \quad (5.65)$$

$$S^{-+} = S_1^{-+} + S_1^{-+} S_2^{-+} (1 - S_1^{+-} S_2^{-+})^{-1} S_1^{++} \quad (5.66)$$

$$S^{--} = S_1^{--} (1 + S_2^{-+} (1 - S_1^{+-} S_2^{-+})^{-1} S_1^{+-}) S_2^{--} \quad (5.67)$$

Là encore, ces lois de combinaisons constitueront un élément central dans le code de calcul, pour l'étude d'un système constitué de couches physiquement distinctes. Ces lois pourront aussi être appliquées au calcul d'une couche épaisse assimilée à un assemblage de couches minces identiques, avec pour but principal d'assurer au mieux la convergence du problème.

## 5.7 Flux du vecteur de Poynting

Avant de poursuivre, il convient de définir les flux du vecteur de Poynting à travers la surface de la couche étudiée. Ceci nous permettra de calculer les coefficients de transmission et de réflexion, puis de déduire les pertes éventuelles d'énergie dans la couche.

La puissance électromagnétique transmise à travers une cellule unité peut se calculer en intégrant le vecteur de Poynting selon :

$$J = \int_{\sigma} \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\vec{E} \times \vec{H}^*) \cdot \vec{e}_z dS \quad (5.68)$$

Dans la représentation utilisée ici, on obtient :

$$J_I^+ = \frac{\sigma}{2\mu_0\omega} \sum_{\vec{g}} k_{I\vec{g}z} \left[ \left| N_{I\vec{g}}^+ \right|^2 + \left| X_{I\vec{g}}^+ \right|^2 \right] \Theta(\varepsilon_I(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - \left| \vec{k} + \vec{g} \right|^2) \quad (5.69)$$

pour le flux incident dans le milieu  $I$  pour l'expression la plus générale,

$$J_{III}^+ = \frac{\sigma}{2\mu_0\omega} \sum_{\vec{g}} k_{III\vec{g}z} \left[ \left| N_{III\vec{g}}^+ \right|^2 + \left| X_{III\vec{g}}^+ \right|^2 \right] \Theta(\varepsilon_{III}(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - \left| \vec{k} + \vec{g} \right|^2) \quad (5.70)$$

pour le flux transmis dans le milieu *III*, et

$$J_I^- = -\frac{\sigma}{2\mu_0\omega} \sum_{\vec{g}} k_{I\vec{g}z} \left[ \left| N_{I\vec{g}}^- \right|^2 + \left| X_{I\vec{g}}^- \right|^2 \right] \Theta\left(\varepsilon_I(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - \left| \vec{k} + \vec{g} \right|^2\right) \quad (5.71)$$

pour le flux réfléchi dans le milieu *I*, avec  $\Theta(x) = 1$  si  $x > 0$  et  $\Theta(x) = 0$  sinon. La fonction  $\Theta(x)$ , qui apparaît lorsque l'on calcule les flux, garantit que seuls les ordres homogènes soient pris en compte. Bien entendu, en l'absence d'absorption par la couche, on doit vérifier  $J_I^+ + J_I^- + J_{III}^+ = 0$ .

# Chapitre 6

## L'algorithme et son application numérique. Discussion des avantages et des inconvénients de la méthode

Pour clore l'étude des principaux aspects de la méthode employée pour la résolution des équations de Maxwell, nous présentons dans ce chapitre un croquis résumant les différentes étapes des calculs ainsi que la manière dont elles s'enchainent au sein de l'algorithme. Par ailleurs, nous précisons quels sont les avantages et les inconvénients de cette méthode et pourquoi nous avons opté pour celle-ci.

La figure suivante (figure 6.1) schématise l'algorithme du programme utilisé. Il est directement adapté du programme développé par J-P. Vigneron [E6,7].

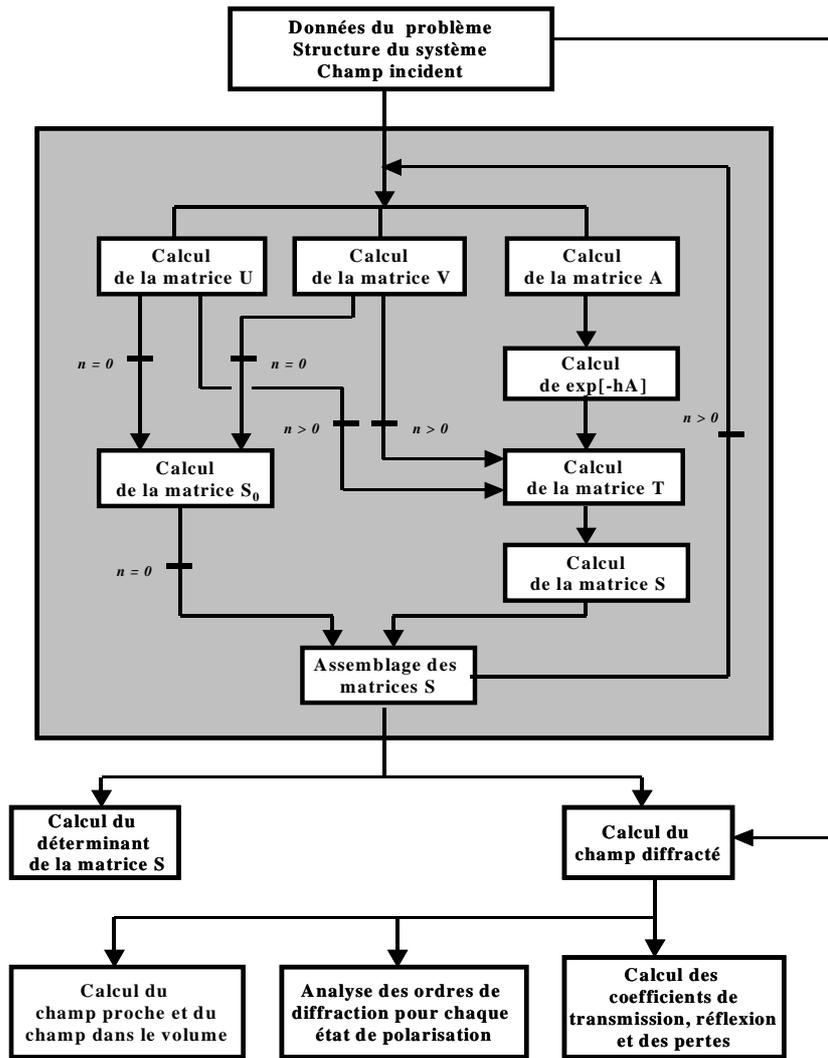


Figure 6.1 : Résumé du principe de l'algorithme.

De manière générale, il existe un certain nombre de méthodes ayant démontré leur efficacité pour la résolution des équations de Maxwell, spécialement pour les problèmes de diffraction et de champ proche. Entre autres, en dehors de la méthode des modes couplés, on peut citer la méthode de Chandezon [J1-3], la méthode de Rayleigh [I1-4], ou bien encore la méthode par fonction de Green utilisant l'équation de Lippmann-Schwinger [G1-9]. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à l'annexe C où nous avons exposé sommairement le principe de ces méthodes et où nous indiquons un certain nombre de références pour de plus amples explications. Néanmoins, il est difficile, *a priori*, de

définir de réels critères permettant de trancher sur le choix de l'une ou l'autre de ces méthodes. Pour notre part, comme nous le verrons par la suite, les problèmes que nous avons à étudier mettent en jeu des structures de grande taille par rapport à la longueur d'onde (en dehors, bien sûr, de la taille des éléments constitutifs de ces structures). Dès lors, nous avons préféré renoncer à l'utilisation d'une méthode basée sur l'équation de Lippmann-Schwinger, à laquelle nous nous sommes intéressés en DEA. En effet, cette équation, qui est une équation intégrale portant sur tout l'espace, nécessite pour sa résolution numérique, de discrétiser l'espace en cellules élémentaires de façon à ramener le problème à un traitement matriciel. L'inconvénient est alors que plus l'environnement étudié sera étendu, plus la taille des matrices sera grande, jusqu'à atteindre la limite des tailles de mémoires disponibles actuellement. Bien entendu, l'avantage de cette méthode est qu'elle permet d'étudier des systèmes localisés et pouvant présenter des défauts. Mais bien que son utilisation soit aisée à une dimension, elle commence à devenir délicate à deux dimensions et voir inextricable à trois dimensions, et ce en raison de l'encombrement des mémoires numériques [G2]. La méthode de Chandezon [J1-3] ou de Rayleigh [I1-4] aurait pu convenir, et il existe des études antérieures où ces méthodes sont utilisées conjointement avec un formalisme lié à la matrice  $S$  [J1]. En effet, le formalisme de la matrice  $S$  n'est qu'une manière parmi d'autres de formuler l'expression du champ électromagnétique, et par là même de formuler un problème de diffraction. La différence entre les méthodes de Chandezon, Rayleigh ou modes couplés réside alors dans la façon de déterminer l'expression de la matrice  $S$ . Bien entendu, ces méthodes peuvent être utilisées en dehors du formalisme de la matrice  $S$ , tout dépend de la façon de décrire le champ électromagnétique. Pour notre part, le choix de la méthode des modes couplés s'est fait dans le cadre de notre collaboration avec Jean-Pol Vigneron de l'université Notre-Dame de la Paix à Namur. En effet, J-P. Vigneron a développé le programme de base que nous avons adapté plus spécialement à notre problématique. De plus, il est vrai que l'étude des cristaux photoniques, par leur caractère périodique, fait souvent usage de la méthode des modes couplés [A7,E3-7]. Le principal inconvénient de notre méthode tient

dans le fait qu'elle s'applique seulement à des structures périodiques. Pour des structures non périodiques, la méthode de Rayleigh perturbative et la méthode de la fonction de Green semblent bien adaptées. En dehors de cet aspect, les différentes méthodes sont équivalentes et les différences apparaissent dans les temps de calculs. Par exemple, nous avons pu constater que le calcul du champ proche, plus rigoureux avec notre méthode qu'avec celle de Rayleigh perturbative, nécessite des temps de calculs qui peuvent devenir rapidement très longs (jusqu'à cent fois plus longs !). En effet, la méthode de Rayleigh apparaît généralement comme une théorie de perturbation développée par rapport à la corrugation des surfaces étudiées (cf annexe C). En revanche, dans notre étude, l'approximation réside dans le nombre d'ordres de diffraction retenus dans le calcul de la matrice  $S$ . Ainsi, la méthode de Rayleigh perturbative pourra présenter l'inconvénient, pour un calcul de perturbation donné, de ne pas tenir suffisamment compte du couplage entre les ordres de diffraction, aspect intrinsèque à la méthode des modes couplés. Par contre, elle permet de prendre en compte un nombre important d'ordres de diffraction. Cependant, la méthode des modes couplés nécessite de tenir compte d'un nombre d'ordres de diffraction suffisamment grand pour pouvoir aboutir à une image acceptable du champ proche. Ainsi, la matrice  $S$ , dont la taille dépend du nombre d'ordres de diffraction retenus, finit par atteindre des dimensions qui conduisent à des temps de calculs importants. C'est là une lacune de la méthode que nous utilisons. En dehors des aspects que nous venons de soulever, il convient néanmoins de soulever une autre limite au programme. En effet, en dehors des aspects méthodologiques qui conduisent à des différences sur les géométries possibles à étudier et sur les temps de calcul, des problèmes purements numériques peuvent surgir. En particulier, il s'avère que dans le cadre des problèmes que nous avons étudiés, de graves problèmes de convergence numérique peuvent apparaître lors de simulations mettant en oeuvre des structures présentant des gradients élevés de la partie réelle de la permittivité. Toutefois, de nombreux paramètres, géométriques et physiques, sont susceptibles d'intervenir simultanément dans les conditions de convergence. Entre autres nous avons constaté : l'influence de la taille des motifs élémentaires par rapport

au paramètres du réseau ; l'influence du rapport de la partie imaginaire à la partie réelle de la permittivité ou encore l'influence de l'épaisseur de la couche corruguée. Ainsi, il est difficile de quantifier les conditions pour lesquelles le programme ne converge pas. En définitive, il est préférable d'effectuer un test de convergence avant tout calcul portant sur une structure donnée. A titre d'exemple, nous présentons deux des tests de convergence que nous avons réalisés au cours de notre étude. Tout deux sont liés à l'étude de la transmission de réseaux bidimensionnels constitués par des trous dans un film métallique déposé sur du verre ( $\text{SiO}_2$ ). Le nombre d'ordres de diffraction  $N_{\vec{g}}$  retenus dans le calcul est fixé par le paramètre  $N$  tel que  $N_{\vec{g}} = (2N + 1)^2$ . Dans le premier cas, nous avons étudié le cas d'un film d'or (cf figure 6.2).

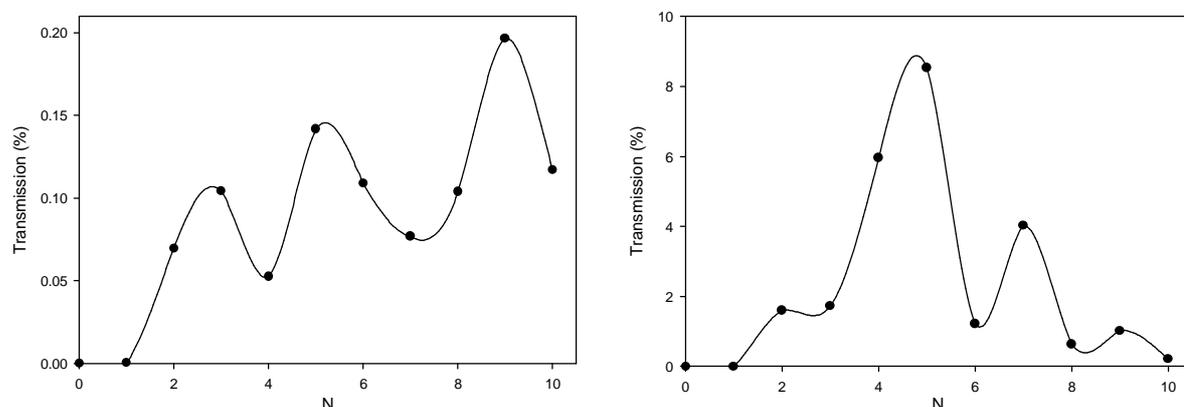


Figure 6.2 : Evolution de la transmission à travers un réseau bidimensionnel de trous dans un film d'or en fonction de  $N$ . Le réseau a un paramètre de maille de  $1 \mu m$ . Les trous ont un diamètre de  $350 nm$ .

le film à une épaisseur de  $300 nm$ . A gauche,  $\lambda = 550 nm$  et  $\varepsilon = -5,501 + i1,612$ . A droite,

$$\lambda = 1175 nm \text{ et } \varepsilon = -51,623 + i3,883.$$

On constate ici que la valeur de la transmission calculée ne converge pas lorsque  $N$  augmente. Au contraire, dans le cas d'un film de chrome on obtient les résultats suivants (figure 6.3)

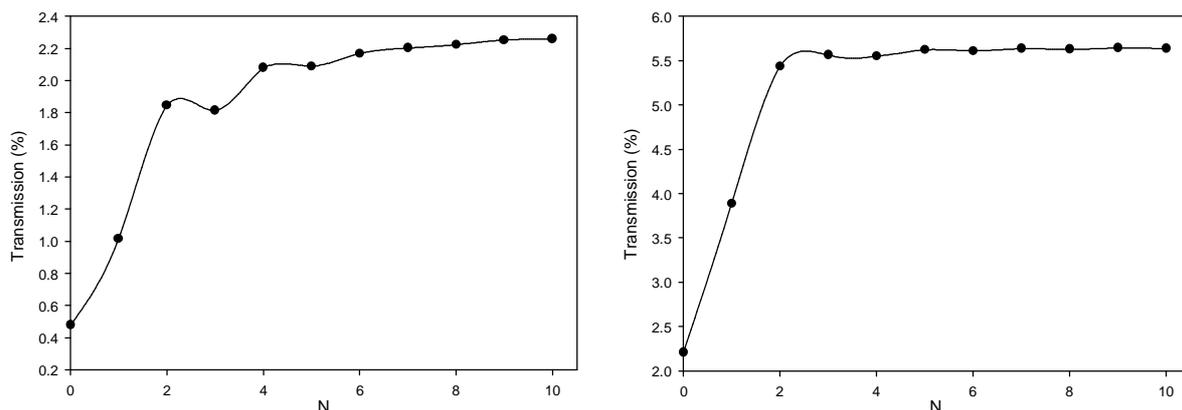


Figure 6.3 : Evolution de la transmission à travers un réseau bidimensionnel de trous dans un film de chrome en fonction de  $N$ . Le réseau a un paramètre de maille de  $1 \mu m$ . Les trous ont un diamètre de  $500 \text{ nm}$ . le film à une épaisseur de  $100 \text{ nm}$ . A gauche,  $\lambda = 800,51 \text{ nm}$  et  $\varepsilon = -2,065 + i21,786$ . A droite,  $\lambda = 1802,23 \text{ nm}$  et  $\varepsilon = -8,834 + i35,023$ .

On constate que la convergence de la valeur de la transmission est rapidement atteinte, d'autant plus que la longueur d'onde est grande. Les limitations des calculs sont liées à l'arrangement et à la construction des matrices déterminées au cours du déroulement du programme. Plus précisément, les matrices présentent alors des éléments, dont certains sont négligeables, mal répartis les uns par rapport aux autres. Il s'en suit un problème de conditionnement pouvant conduire à des instabilités de calculs. La solution à ce problème pourrait alors résider dans une méthode permettant de travailler avec des matrices bloc-diagonales. Toutefois, il ne nous a pas été possible, jusqu'à présent, de trouver un bon compromis permettant de résoudre ce problème, ce qui a limité le choix des configurations de structures que nous pouvions analyser. C'est pourquoi dans l'étude des expériences de T.W. Ebbesen, nous nous sommes limités au cas de couches de chrome en dépit de l'intérêt que présente l'étude de couches d'argent ou de cuivre dont le caractère métallique est bien déterminé.

# Chapitre 7

## Aspects analytiques. Etude des pôles et des zéros de la matrice $S$

Dans ce chapitre, nous allons développer un aspect important de l'étude de la matrice  $S$ . Il s'agit de la détermination de ce que l'on nomme les pôles et les zéros de cette matrice. L'intérêt de cette démarche a été soulevé par D. Maystre et M. Nevière dans les années 70 [C15,18-20] dans l'étude des réseaux de diffraction [N7]; E. Centeno et D. Felbacq l'ont appliquée à l'étude des cristaux photoniques [A4,5].

Comme nous l'avons vu, la matrice  $S$  connecte des états sortants à des états entrants. A ce titre, on peut considérer la matrice  $S$  comme une fonction de transfert  $\Xi$ , dont l'une des propriétés est d'exprimer un état de sortie  $|F_{out}\rangle$  en fonction d'un état d'entrée  $|F_{in}\rangle$  (la notation de type ket étant utilisée pour rappeler que les états entrants et sortants ne sont pas nécessairement décrits par un scalaire unique, mais peuvent être décrits par un vecteur. A ce titre, la fonction de transfert prend une écriture matricielle). En effet, très souvent, un système physique peut être décrit par un opérateur faisant correspondre à tout signal d'excitation  $|F_{in}\rangle$  une réponse  $|F_{out}\rangle$  unique du système :

$$|F_{in}\rangle \xrightarrow{\text{Opérateur}} |F_{out}\rangle \quad (7.1)$$

où  $|F_{in}\rangle$  et  $|F_{out}\rangle$  peuvent être des fonctions du temps, par exemple les tensions à l'entrée et à la sortie d'un circuit électrique, ou des fonctions dans l'espace, par exemple la répartition des intensités lumineuses dans un objet et dans l'image qu'en fournit un système optique.  $|F_{in}\rangle$  et  $|F_{out}\rangle$  ne sont pas forcément des grandeurs de même nature, par exemple  $|F_{in}\rangle$  peut être la force imposée à un système mécanique et  $|F_{out}\rangle$  le mouvement du système sous l'action de cette force. De cette manière, l'étude du système physique se ramène alors à l'étude des propriétés de l'opérateur qui le décrit.

De ce point de vue on peut écrire pour un problème dépendant du temps

$$|F_{out}(t)\rangle = \Xi(t) \star |F_{in}(t)\rangle \quad (7.2)$$

où  $\star$  désigne le produit de convolution, et qui n'est autre que la transformée de Fourier de la relation

$$|F_{out}(\omega)\rangle = \Xi(\omega) |F_{in}(\omega)\rangle \quad (7.3)$$

Ainsi, on voit que l'étude de (7.2) peut se ramener à l'étude de (7.3) *a priori* plus simple, et que la solution temporelle du problème pourra être déduite par une simple transformée de Fourier. On voit alors que l'étude du problème physique considéré peut se ramener à l'étude de  $\Xi(\omega)$ .

Avant de revenir à la matrice  $S$ , nous allons rappeler l'étude du problème de l'oscillateur élémentaire linéaire en régime permanent harmonique.

## 7.1 Oscillateur élémentaire linéaire en régime permanent harmonique

On définit un oscillateur constitué d'une masse  $m$  soumise à une force de rappel modélisable par un ressort de raideur  $k$ , et subissant un amortissement  $c$  proportionnel à la vitesse. Classiquement, l'équation qui régit la dynamique de cet oscillateur soumis à

une force d'excitation  $f(t)$ , est donnée par :

$$m \ddot{x}(t) + c \dot{x}(t) + k x(t) = f(t) \quad (7.4)$$

que l'on peut écrire :

$$\ddot{x}(t) + 2\eta\omega_0 \dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = a(t) \quad (7.5)$$

avec  $\omega_0^2 = k/m$ ,  $2\eta\omega_0 = c/m$  et  $a(t) = f(t)/m$ . En posant  $x(t) = x_0 e^{i\omega t}$  et  $a(t) = a_0 e^{i\omega t}$ , il vient :

$$-\omega^2 x_0 + i2\eta\omega_0\omega x_0 + \omega_0^2 x_0 = a_0 \quad (7.6)$$

et on définit la fonction de transfert  $\Xi(\omega)$  comme :

$$\Xi(\omega) = \omega_0^2 \frac{x_0}{a_0} = \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + i2\eta\omega_0\omega} \quad (7.7)$$

d'où l'on tire  $|\Xi(\omega)|$  :

$$|\Xi(\omega)| = \frac{\omega_0^2}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\eta^2 \omega_0^2 \omega^2}} \quad (7.8)$$

qui présente un maximum à la résonance pour  $\omega = \omega_r$  définie par :

$$\omega_r = \pm \omega_0 \sqrt{1 - 2\eta^2} \quad (7.9)$$

avec  $\omega_r \approx \omega_0$  pour  $\eta \ll 1$ , et

$$|\Xi(\omega_r)| = \frac{1}{2\eta\sqrt{1 - \eta^2}} \quad (7.10)$$

On définit la largeur de bande comme étant  $\Delta\omega = \omega_+ - \omega_-$ , avec  $\omega_+$  et  $\omega_-$  telles que :

$$|\Xi(\omega_{\pm})| = \frac{|\Xi(\omega_r)|}{\sqrt{2}} \quad (7.11)$$

et définies par :

$$\omega_{\pm} = \omega_0 \sqrt{1 - 2\eta^2 \pm 2\eta\sqrt{1 - \eta^2}} \quad (7.12)$$

telles que pour  $\eta \ll 1$  on ait :

$$\Delta\omega = 2\eta\omega_0 \quad (7.13)$$

On associe à la résonance les pôles de la fonction de transfert  $\Xi(\omega)$  qui sont donc solutions de :

$$\omega^2 - i2\eta\omega_0\omega - \omega_0^2 = 0 \quad (7.14)$$

qui conduit à deux pôles  $\omega_+^p$  et  $\omega_-^p$  donnés par :

$$\omega_{\pm}^p = \pm\omega_0 \sqrt{1 - \eta^2} + i\eta\omega_0 \quad (7.15)$$

que l'on peut écrire pour  $\eta \ll 1$  :

$$\omega_{\pm}^p = \pm\omega_0 + i\eta\omega_0 \quad (7.16)$$

soit encore :

$$\omega_{\pm}^p = \pm\omega_0 + i\frac{\Delta\omega}{2} \quad (7.17)$$

On obtient donc un résultat bien connu, à savoir que (dans l'approximation  $\eta \ll 1$ ) la partie réelle des pôles donne la pulsation de résonance et la partie imaginaire la demi largeur de bande.

Cet exemple très simple permet ainsi d'illustrer le fait que, lorsque la réponse d'un système physique à une excitation (en l'occurrence un oscillateur) présente une résonance, il est alors possible d'associer à la position et à la largeur de cette résonance les parties réelle et imaginaire des pôles de la fonction de transfert.

## 7.2 Les résonances et les pôles de la matrice $S$

L'analyse que nous venons de présenter peut être appliquée au cas de la matrice  $S$  (cf chapitre 5). En effet, la matrice  $S$  apparaît du fait de sa nature comme une fonction de transfert. Et ainsi, on peut poser, par analogie avec les différents éléments déjà introduits :

$$|F_{out}\rangle = \begin{bmatrix} \overline{N}_{III}^+ \\ \overline{X}_{III}^+ \\ \overline{N}_I^- \\ \overline{X}_I^- \end{bmatrix}, \quad |F_{in}\rangle = \begin{bmatrix} \overline{N}_I^+ \\ \overline{X}_I^+ \\ \overline{N}_{III}^- \\ \overline{X}_{III}^- \end{bmatrix} \quad (7.18)$$

Dans notre cas, nous choisirons de définir le problème par rapport à la longueur d'onde  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$  plutôt que par rapport à la pulsation  $\omega$ . Mais ceci ne relève que d'un simple choix de variable. Ainsi, conformément à ce qui a été dit précédemment on peut écrire :

$$S(\lambda) |F_{in}(\lambda)\rangle = |F_{out}(\lambda)\rangle \quad (7.19)$$

ou

$$S^{-1}(\lambda) |F_{out}(\lambda)\rangle = |F_{in}(\lambda)\rangle \quad (7.20)$$

De ce point de vue, on peut introduire les modes propres de la structure comme solution de l'équation (7.20) dans le cas  $|F_{in}(\lambda)\rangle = 0$ , i.e.

$$S^{-1}(\lambda_\eta) |F_{out}(\lambda_\eta)\rangle = 0 \quad (7.21)$$

Il s'agit typiquement d'un problème homogène bien connu de la théorie des réseaux. L'ensemble des  $N$  longueurs d'ondes complexes  $\{\lambda_\eta = \lambda_\eta^R + i\lambda_\eta^I \mid \eta = 1, \dots, N\}$ , solutions de l'équation (7.21) sont donc les pôles de  $\det(S(\lambda_\eta))$  à condition de vérifier

$$\det(S^{-1}(\lambda_\eta)) = 0 \quad (7.22)$$

Si on extrait la partie singulière de  $S$  correspondant aux modes propres de la structure, on peut écrire au voisinage des pôles  $\lambda_\eta$  (*en faisant l'hypothèse de pôles simples* [A4,5,C15,20]):

$$S(\lambda) = \sum_{\eta} \frac{R_{\eta}}{\lambda - \lambda_{\eta}} + S_h(\lambda) \quad (7.23)$$

qui n'est rien d'autre qu'une série de Laurent généralisée, où les termes  $R_{\eta}$  sont les résidus associés à chaque pôles  $\lambda_{\eta}$ , et  $S_h(\lambda)$  la partie holomorphe de  $S$  [N3,6].

On note ainsi que les termes  $R_{\eta}$  ont pour expression :

$$R_{\eta} = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma_{\eta}} S(z) dz \quad (7.24)$$

où  $\gamma_{\eta}$  est un lacet entourant le pôle  $\lambda_{\eta}$  dans le plan complexe.

On en déduit que le champ diffracté, i.e. le champ sortant, peut s'écrire selon :

$$|F_{out}(\lambda)\rangle = \sum_{\eta} \frac{R_{\eta}}{\lambda - \lambda_{\eta}} |F_{in}(\lambda)\rangle + S_h(\lambda) |F_{in}(\lambda)\rangle \quad (7.25)$$

Nous allons, dans un premier temps, nous intéresser au comportement d'un élément de  $|F_{out}(\lambda)\rangle$ , i.e. à une  $m^{\text{ème}}$  composante quelconque, notée  $f(\lambda)$ , du vecteur  $|F_{out}(\lambda)\rangle$ . On peut donc écrire :

$$f(\lambda) = \sum_{\eta} \frac{1}{\lambda - \lambda_{\eta}} [R_{\eta} |F_{in}(\lambda)\rangle]_m + [S_h(\lambda) |F_{in}(\lambda)\rangle]_m \quad (7.26)$$

Plus particulièrement, nous allons nous concentrer sur  $|f(\lambda)|^2$  et supposer que  $|F_{in}(\lambda)\rangle = |F_{in}\rangle$  i.e. qu'il ne dépend pas de la longueur d'onde, ce qui nous permet d'écrire ( "" désigne le complexe conjugué) :

$$\begin{aligned} |f(\lambda)|^2 &= \sum_{\eta} \sum_{\sigma} A_{\sigma,\eta} \frac{1}{\lambda - \lambda_{\eta}} \frac{1}{\lambda - \lambda_{\sigma}^*} \\ &+ \sum_{\eta} \text{Re} \left( B_{\eta}(\lambda) \frac{1}{\lambda - \lambda_{\eta}} \right) + C(\lambda) \end{aligned} \quad (7.27)$$

où on a posé

$$\begin{cases} A_{\sigma,\eta} &= [R_\sigma | F_{in} ]_m^* [R_\eta | F_{in} ]_m \\ B_\eta(\lambda) &= 2 [S_h(\lambda) | F_{in} ]_m^* [R_\eta | F_{in} ]_m \\ C(\lambda) &= |[S_h(\lambda) | F_{in} ]_m|^2 \end{cases} \quad (7.28)$$

Un réarrangement simple de l'expression nous conduit finalement à :

$$\begin{aligned} |f(\lambda)|^2 &= \sum_{\eta,\sigma (\eta \neq \sigma)} \frac{1}{\lambda^2 + |\lambda_\eta|^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\lambda_\eta)} \frac{1}{\lambda^2 + |\lambda_\sigma|^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\lambda_\sigma)} A_{\sigma,\eta} (\lambda - \lambda_\eta^*) (\lambda - \lambda_\sigma) \\ &+ \sum_{\eta} \frac{\lambda \alpha_\eta(\lambda) + \beta_\eta(\lambda)}{\lambda^2 + |\lambda_\eta|^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\lambda_\eta)} + C(\lambda) \end{aligned} \quad (7.29)$$

avec

$$\begin{cases} \alpha_\eta(\lambda) &= \operatorname{Re} \{ B_\eta(\lambda) \} \\ \beta_\eta(\lambda) &= A_{\eta,\eta} - \operatorname{Re} \{ B_\eta(\lambda) \} \operatorname{Re} \{ \lambda_\eta \} - \operatorname{Im} \{ B_\eta(\lambda) \} \operatorname{Im} \{ \lambda_\eta \} \end{cases} \quad (7.30)$$

Le calcul que nous venons d'effectuer est exact, mais nous allons formuler quelques hypothèses qui vont simplifier l'expression précédente. Tout d'abord, nous remarquons que le premier terme de l'expression (7.29) est un terme croisé qui fait intervenir les expressions de deux fonctions de la forme  $y(\lambda) = \frac{1}{\lambda^2 + |\lambda_q|^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\lambda_q)}$  qui présente un pic pour  $\lambda = \operatorname{Re}(\lambda_q)$  et une largeur à mi-hauteur proportionnelle à  $\operatorname{Im}(\lambda_q)$ . On peut donc supposer (cf le graphique ci-après) que si les pôles sont tels que les deux fonctions présentent deux pics bien distincts (cf courbes en tirets et en pointillés sur graphique) alors le produit des deux fonctions (cf courbe en trait plein sur le graphique) peut être négligé.

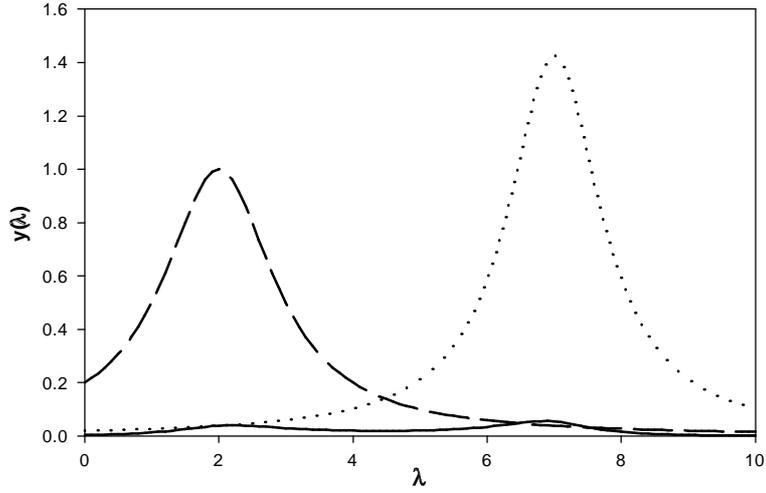


Figure 7.1 : Produit des "résonances"

L'expression (7.29) peut alors être approchée par :

$$|f(\lambda)|^2 \approx \sum_{\eta} \frac{\lambda \alpha_{\eta}(\lambda) + \beta_{\eta}(\lambda)}{\lambda^2 + |\lambda_{\eta}|^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\lambda_{\eta})} + C(\lambda) \quad (7.31)$$

Par ailleurs, on peut envisager les cas où les effets résonants sont largement prépondérants sur les effets non résonants liés à la partie holomorphe de la matrice  $S$ , auquel cas les termes où intervient cette partie peuvent être négligés et la relation (7.31) peut s'écrire *au voisinage d'un pôle*  $\lambda_{\eta}$  :

$$|f(\lambda)|^2 \approx \frac{\rho_{\eta}}{\lambda^2 + |\lambda_{\eta}|^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\lambda_{\eta})} \quad (7.32)$$

où  $\rho_{\eta} = |[R_{\eta} | F_{in}\rangle]_m|^2$  est donc une constante .

Dans le cadre de l'hypothèse des pôles simples, et en supposant que les résonances soient bien distinctes, on peut s'attendre à avoir un comportement pour  $|f(\lambda)|^2$  de la forme (7.32) au voisinage d'une résonance associée à un pôle  $\lambda_{\eta}$ . On obtient alors une courbe typique de résonance où la longueur d'onde  $\lambda_r$  associée à cette même résonance vaut  $\lambda_{\eta}^R$ , et où la largeur à mi-hauteur  $\Gamma$  vaut  $2\lambda_{\eta}^I$ .

Un autre point intéressant concerne l'analyse de la transformée de Fourier de l'expression (7.23) lorsque l'on écrit celle-ci en fonction de la pulsation et non de la longueur d'onde (*toujours dans le cadre de l'hypothèse des pôles simples*) [A4,5,C15,20] :

$$S(\omega) = \sum_{\eta} \frac{\tilde{R}_{\eta}}{\omega - \omega_{\eta}} + S_h(\omega) \quad (7.33)$$

où ici le résidu est exprimé selon

$$\tilde{R}_{\eta} = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma'_{\eta}} S(z) dz \quad (7.34)$$

et où  $\gamma'_{\eta}$  est un lacet entourant le pôle  $\omega_{\eta} = \omega_{\eta}^R + i\omega_{\eta}^I$  dans le plan complexe, avec par définition  $\omega_{\eta} = \frac{2\pi c}{\lambda_{\eta}}$ . Compte tenu des principes déjà énoncés, on peut définir  $|F_{out}(t)\rangle$  par :

$$|F_{out}(t)\rangle = \int S(\omega) |F_{in}(\omega)\rangle e^{i\omega t} d\omega \quad (7.35)$$

Ainsi, si on cherche la réponse impulsionnelle du système décrit par la matrice  $S$ , telle que l'on pose  $|F_{in}(t)\rangle = \delta(t) |F_{in}\rangle$  on est conduit au résultat suivant [A4,5] :

$$|F_{out}(t)\rangle = \sum_{\eta} i\pi e^{i\omega_{\eta} t} \text{sgn}(t) \tilde{R}_{\eta} |F_{in}\rangle + S_h(t) * |F_{in}(t)\rangle \quad (7.36)$$

On relève dans cette expression le terme  $e^{i\omega_{\eta} t}$  qui peut s'écrire naturellement  $e^{i\omega_{\eta}^R t} e^{-\omega_{\eta}^I t}$ , ce qui fait apparaître clairement la durée de vie  $\tau_{\eta}$  des modes propres d'excitation de la structure décrite par la matrice  $S$ . Ainsi,  $\tau_{\eta} = \frac{1}{\omega_{\eta}^I}$  peut s'écrire en fonction de  $\lambda_{\eta}$  comme  $\tau_{\eta} = \frac{1}{2\pi c} \frac{|\lambda_{\eta}|^2}{\lambda_{\eta}^I}$  [A4,5].

### 7.3 Zéros de la matrice $S$ et des ordres de diffraction

Nous venons de voir l'intérêt que présente l'étude et l'analyse des pôles de la matrice  $S$ . Un autre aspect intéressant de l'étude de la matrice  $S$  réside concerne l'existence et

la détermination des zéros de cette dernière. La relation introduite ci-dessus

$$S(\lambda) |F_{in}(\lambda)\rangle = |F_{out}(\lambda)\rangle \quad (7.37)$$

nous a amenés à nous intéresser aux zéros de la matrice  $S^{-1}$ , ce qui se trouve être équivalent à la recherche de solutions de  $|F_{out}(\lambda)\rangle$  pour  $|F_{in}(\lambda)\rangle = 0$ . La question des zéros de la matrice  $S$  revient donc à chercher les conditions telles que pour  $|F_{in}(\lambda)\rangle \neq 0$ , on ait  $|F_{out}(\lambda)\rangle = 0$ . Une telle situation correspondrait à une disparition complète du champ électromagnétique tant en champ proche qu'en champ lointain. La complète disparition des ordres homogènes n'est pas en soit absurde. En effet, ceci correspondrait au fait que l'intégralité des ordres de diffraction n'existe que sous forme évanescence. On pourrait alors interpréter cet effet comme une absorption complète de l'énergie électromagnétique par la structure diffractante. Cette absorption pouvant, par exemple, être liée à l'excitation de plasmons. Ce concept physique fut mis en évidence en 1977 par D. Maystre et M. Nevière [C15,20]. Si un tel effet sur les ordres homogènes peut apparaître lors de l'annulation de certains éléments de la matrice, l'annulation du déterminant pour des valeurs réelles de  $\lambda$ , conduirait à une absence totale de champ diffracté dans tout l'espace. Un tel cas paraît physiquement inacceptable, ce qui nous conduit à formuler la conjecture selon laquelle *le déterminant de la matrice  $S$ , telle que nous l'avons formulé, ne peut s'annuler pour des valeurs réelles de  $\lambda$ . Pour des valeurs complexes, ceci est toutefois possible.*

Cependant, on peut envisager l'annulation d'un certain nombre d'ordres de diffraction. Suivant les explications que nous venons de donner, une autre approximation peut également se révéler utile. Elle consiste à ne pas totalement négliger les effets non résonants et à supposer qu'*au voisinage d'un pôle  $\lambda_\eta$* , la partie holomorphe  $S_h(\lambda)$  de la matrice  $S$  peut s'exprimer en première approximation selon

$$S_h(\lambda) \sim S_0 \quad (7.38)$$

Cette approximation va revenir à prendre en compte les effets non résonants dans l'ex-

pression d'une amplitude  $f(\lambda)$  donnée, même s'ils sont faibles. Ce type d'approche a été introduite la première fois par V. U. Fano, en optique [C5], dans l'étude des anomalies de Wood.

Ainsi, on supposera qu'*au voisinage d'un pôle  $\lambda_\eta$  donné* (et au vu de l'analyse des pages 67 à 70) que l'expression (7.26) peut s'écrire

$$f(\lambda) = \frac{r}{\lambda - \lambda_\eta} + s \quad (7.39)$$

où on a posé

$$[R_\eta | F_{in}]_m = r \quad \text{et} \quad [S_0 | F_{in}]_m = s \quad (7.40)$$

En rappelant que  $\lambda_\eta = \lambda_\eta^R + i\lambda_\eta^I$ , et en posant

$$\lambda_z^R = \lambda_\eta^R - \nu^R \quad \text{et} \quad \lambda_z^I = \lambda_\eta^I - \nu^I \quad (7.41)$$

avec

$$\nu = \frac{r}{s} \quad (7.42)$$

on montre facilement que dans ce cas

$$|f(\lambda)|^2 = \frac{(\lambda - \lambda_z^R)^2 + \lambda_z^{I 2}}{(\lambda - \lambda_\eta^R)^2 + \lambda_\eta^{I 2}} |s|^2 \quad (7.43)$$

Le coefficient  $\nu$  traduit l'importance des effets résonants par rapport aux effets non résonants. *Par définition, la valeur  $\lambda_z = \lambda_z^R + i\lambda_z^I$  correspond à la valeur complexe qui annule l'expression (7.39).* Typiquement l'expression (7.43) conduit aux profils représentés sur la figure (7.2). Il faut garder à l'esprit que ces courbes correspondent à des processus résonants dans le cas où les processus non résonants doivent être pris en compte. Dans ce cas, les interférences entre les effets résonants et non résonants peuvent conduire à des modifications significatives des courbes d'intensité associées aux ordres de diffraction.

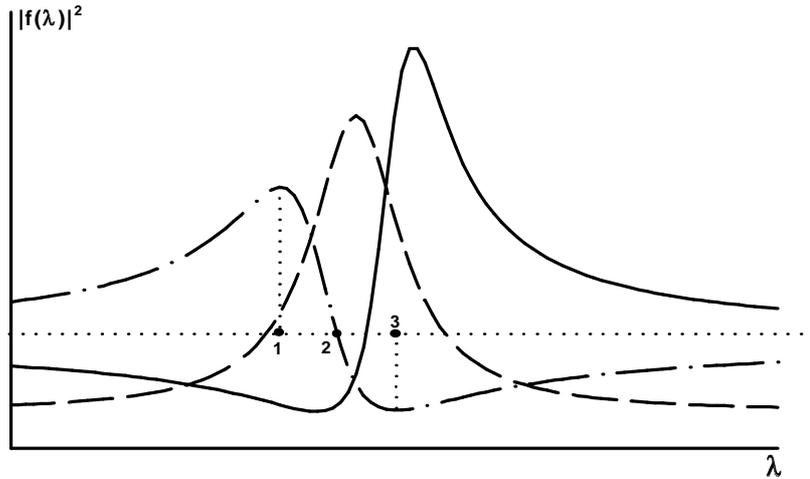


Figure 7.2 : Exemples de profils correspondant à l'intensité des ordres de diffraction (à la résonance) dans le cas où les processus non résonants deviennent non négligeables. Ces profils sont représentés en fonction de la longueur d'onde.

Sur la figure (7.2), la courbe en tirets représente le tracé typique associé à un processus résonant dans le cas où les effets non résonants deviennent négligeables. Dans le cas contraire, deux types de tracés peuvent apparaître (cf courbes en trait plein et en tirets-pointillés), à savoir, soit une courbe présentant un minimum suivi d'un maximum, soit l'inverse et ce en fonction des valeurs prises par  $\nu$ . Ces profils tendent asymptotiquement en  $\pm\infty$  vers  $|s|^2$  (ligne pointillée horizontale). Si on considère l'exemple du tracé en tirets-pointillés, celui-ci présente un maximum en (1) et un minimum en (3). Le point (2), qui coupe l'asymptote, est à égale distance des points (1) et (3), bien que la courbe ne soit pas nécessairement symétrique. De tels profils sont nommés "profils de Fano" [C5,L4,6] en raison des travaux de V. U. Fano [C5,L6] mettant en évidence ce type de comportements pour différentes situations physiques. Loin d'intervenir uniquement en optique, les profils de Fano apparaissent, par exemple, dans l'étude des processus de diffusion résonante en physique quantique. Dans le cas le plus simple, les processus de diffusion mettent en jeu un continuum d'états couplés avec deux niveaux discrets couplés entre eux. Le calcul de l'amplitude de diffusion conduit à une fonction dont le tracé fait apparaître

des profils de Fano. D'une manière générale, ces profils s'avèrent asymétriques et sont ainsi caractéristiques de processus où interfèrent les états discrets et continus du système étudié [L6]. L'asymétrie des profils est alors liée à la valeur du rapport entre le couplage des niveaux discrets et le couplage de ceux-ci avec le continuum [L4,6]. Dans notre cas, c'est une situation analogue qui conduit aux profils de Fano et ceux-ci proviennent de l'interférence entre les effets résonants et non résonants associés aux ordres de diffraction [C5,6].

## 7.4 Remarques sur la détermination des pôles de la matrice $S$ pour une couche plane homogène

A ce stade nous ouvrons une parenthèse afin d'établir quelques remarques sur la détermination des pôles de la matrice  $S$  pour un système optique constitué d'une couche plane homogène dans un milieu diélectrique donné. Cet exemple simple et analytique a pour but de justifier l'intérêt du formalisme présenté dans les chapitres 5 et 7.

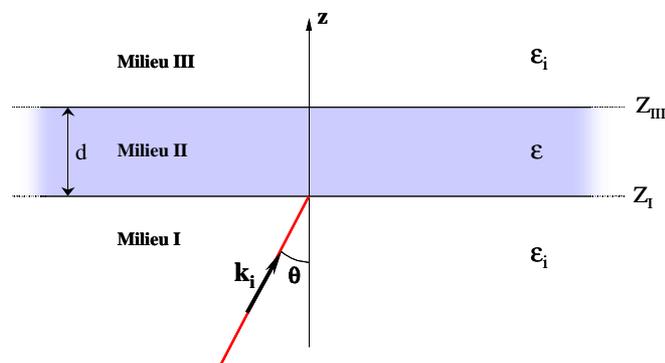


Figure 7.3 : Couche plane homogène constituée d'un milieu de permittivité  $\varepsilon$  dans un environnement de permittivité  $\varepsilon_i$ .

Dans ce cas, les équations introduites dans la formulation des modes couplés restent valables. Ici nous n'aurons plus qu'un seul ordre assimilable à l'ordre zéro et on introduit

le vecteur d'onde incident selon :

$$\vec{k}_i = \begin{bmatrix} k_{i,x} = 0 \\ k_{i,y} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_i} \sin \theta \\ k_{i,z} = \sqrt{\varepsilon_i \frac{\omega^2}{c^2} - k_y^2} \end{bmatrix} \quad (7.44)$$

Il est aisé de voir que les équations (5.26) à (5.29) prennent alors la forme :

$$\frac{dE_x}{dz} = i\mu_0\omega H_y \quad (7.45)$$

$$\frac{dE_y}{dz} = -i \frac{1}{\varepsilon_0\varepsilon\omega} k_z^2 H_x \quad (7.46)$$

$$\frac{dH_x}{dz} = -i\varepsilon\varepsilon_0\omega E_y \quad (7.47)$$

$$\frac{dH_y}{dz} = i \frac{1}{\mu_0\omega} k_z^2 E_x \quad (7.48)$$

et en posant

$$d = Z_I - Z_{III} \quad (7.49)$$

l'expression du champ électromagnétique, solution des équations différentielles ci-dessus, peut s'écrire :

$$\begin{bmatrix} E_x(z_I) \\ E_y(z_I) \\ H_x(z_I) \\ H_y(z_I) \end{bmatrix} = \exp \left\{ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & i\mu_0\omega \\ 0 & 0 & -i \frac{1}{\varepsilon_0\varepsilon\omega} k_z^2 & 0 \\ 0 & -i\varepsilon\varepsilon_0\omega & 0 & 0 \\ i \frac{1}{\mu_0\omega} k_z^2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} d \right\} \begin{bmatrix} E_x(z_{III}) \\ E_y(z_{III}) \\ H_x(z_{III}) \\ H_y(z_{III}) \end{bmatrix} \quad (7.50)$$

On considère la matrice  $M$ , argument de l'exponentielle ci-dessus. On peut construire une matrice diagonale  $M_d$  à partir des valeurs propres de  $M$ . De même, on peut construire la matrice de transfert  $T$ , telle que  $M = T^{-1}M_dT$ , à partir des vecteurs propres de  $M$ . On a alors :  $\exp\{M\} = \exp\{T^{-1}M_dT\} = T^{-1}\exp\{M_d\}T$ . L'exponentielle de la matrice diagonale  $M_d$  est la matrice diagonale constituée des exponentielles des éléments

diagonaux de  $M_d$ . Ainsi, après calcul, on trouve :

$$\begin{bmatrix} E_x(z_I) \\ E_y(z_I) \\ H_x(z_I) \\ H_y(z_I) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(k_z d) & 0 & 0 & -i \frac{\mu_0 \omega}{k_z} \sin(k_z d) \\ 0 & \cos(k_z d) & i \frac{k_z}{\varepsilon_0 \varepsilon \omega} \sin(k_z d) & 0 \\ 0 & i \frac{\varepsilon_0 \varepsilon \omega}{k_z} \sin(k_z d) & \cos(k_z d) & 0 \\ -i \frac{k_z}{\mu_0 \omega} \sin(k_z d) & 0 & 0 & \cos(k_z d) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x(z_{III}) \\ E_y(z_{III}) \\ H_x(z_{III}) \\ H_y(z_{III}) \end{bmatrix} \quad (7.51)$$

En outre, si on exprime le champ électromagnétique dans la base de représentation des amplitudes décrite dans le chapitre 5, de façon à avoir

$$\vec{\mu}_{I \text{ ou } III} = \frac{k_{I \text{ ou } III, z}}{\sqrt{\varepsilon_{I \text{ ou } III}} \frac{\omega}{c}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (7.52)$$

et

$$\vec{\eta} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7.53)$$

alors le lien entre les amplitudes de champ et le champ électromagnétique se fait grâce aux matrices suivantes (cf eqs. 5.44 et 5.45) (ici exprimés uniquement pour le milieu  $I$  comme la formulation est la même pour le milieu  $III$ )

$$\begin{bmatrix} E_x(z_I) \\ E_y(z_I) \\ H_x(z_I) \\ H_y(z_I) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{k_{Iz} c}{\sqrt{\varepsilon_I} \omega} & 0 & \frac{k_{Iz} c}{\sqrt{\varepsilon_I} \omega} \\ 0 & \frac{\sqrt{\varepsilon_I}}{c \mu_0} & 0 & \frac{\sqrt{\varepsilon_I}}{c \mu_0} \\ \frac{k_{Iz}}{\mu_0 \omega} & 0 & -\frac{k_{Iz}}{\mu_0 \omega} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_I^+ \\ X_I^+ \\ N_I^- \\ X_I^- \end{bmatrix} \quad (7.54)$$

et

$$\begin{bmatrix} N_I^+ \\ X_I^+ \\ N_I^- \\ X_I^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{\omega \mu_0}{2 k_{Iz}} \\ 0 & -\frac{\omega \sqrt{\varepsilon_I}}{2 k_{Iz} c} & \frac{\mu_0 c}{2 \sqrt{\varepsilon_I}} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{\omega \mu_0}{2 k_{Iz}} \\ 0 & \frac{\omega \sqrt{\varepsilon_I}}{2 k_{Iz} c} & \frac{\mu_0 c}{2 \sqrt{\varepsilon_I}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x(z_I) \\ E_y(z_I) \\ H_x(z_I) \\ H_y(z_I) \end{bmatrix} \quad (7.55)$$

En suivant la procédure que nous avons décrite plus haut (cf chapitre 5), il est possible d'écrire analytiquement l'expression de la matrice  $S$  attachée au système illustré par la figure (7.3). On obtient donc en posant

$$S = \begin{bmatrix} S^{++} & S^{+-} \\ S^{-+} & S^{--} \end{bmatrix} \quad (7.56)$$

les expressions de chaque bloc, soit :

$$S^{++} = S^{--} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\cos(k_z d) - i \frac{k_z^2 + k_{i,z}^2}{2k_z k_{i,z}} \sin(k_z d)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\cos(k_z d) - i \frac{\varepsilon_i^2 k_z^2 + \varepsilon^2 k_{i,z}^2}{2\varepsilon_i \varepsilon k_z k_{i,z}} \sin(k_z d)} \end{bmatrix} \quad (7.57)$$

et

$$S^{+-} = S^{-+} = \begin{bmatrix} \frac{k_{i,z}^2 - k_z^2}{k_z^2 + k_{i,z}^2 + 2ik_z k_{i,z} \cot(k_z d)} & 0 \\ 0 & \frac{\varepsilon^2 k_{i,z}^2 - \varepsilon_i^2 k_z^2}{\varepsilon_i^2 k_z^2 + \varepsilon^2 k_{i,z}^2 + 2i\varepsilon_i \varepsilon k_z k_{i,z} \cot(k_z d)} \end{bmatrix} \quad (7.58)$$

En plus de l'identité entre les deux blocs diagonaux, et entre les deux blocs anti-diagonaux, on constate que ces quatre matrices sont diagonales. Ceci entraîne que les ondes TE et TM sont indépendantes, ce qui signifie qu'une onde incidente purement TE donne des ondes réfléchies et transmises purement TE, et réciproquement en TM.

A partir de l'expression de  $S$  on trouve naturellement celle de son déterminant qui prend alors la forme :

$$\det(S) = \left[ \frac{1 - \left( -i \frac{k_{i,z}^2 - k_z^2}{2k_z k_{i,z}} \right)^2 \sin^2(k_z d)}{\left( \cos(k_z d) - i \frac{k_z^2 + k_{i,z}^2}{2k_z k_{i,z}} \sin(k_z d) \right)^2} \right] \left[ \frac{1 - \left( -i \frac{\varepsilon^2 k_{i,z}^2 - \varepsilon_i^2 k_z^2}{2\varepsilon_i \varepsilon k_z k_{i,z}} \right)^2 \sin^2(k_z d)}{\left( \cos(k_z d) - i \frac{\varepsilon_i^2 k_z^2 + \varepsilon^2 k_{i,z}^2}{2\varepsilon_i \varepsilon k_z k_{i,z}} \sin(k_z d) \right)^2} \right] \quad (7.59)$$

où le facteur de droite correspond au terme de  $\det(S)$  lié à la polarisation TM, et le facteur de gauche à la polarisation TE. De l'étude de ces deux facteurs, on peut en déduire les pôles de  $S$  de deux façons différentes. La première consiste à faire une étude numérique de  $\det(S)$  permettant de déterminer sans ambiguïté les pôles de  $S$ . Pour cela, une manière

de procéder consiste à effectuer un balayage de  $|\det(S)|$  en fonction du paramètre qui nous intéresse, par exemple  $k_y$  ou  $\lambda$ , que l'on prolonge dans le plan complexe. Ainsi, on peut balayer à différentes échelles du plan complexe, les valeurs prises par  $|\det(S)|$ , et effectuer une recherche des points où  $|\det(S)|$  soit s'annule, soit diverge. Cette façon de procéder est celle que nous avons retenue dans l'étude de la matrice  $S$ , qui est issue du programme utilisé pour un problème de diffraction quelconque. En effet, dans ce cas on ne peut obtenir une expression analytique de  $S$ . L'autre méthode, consiste à étudier analytiquement les deux termes que nous venons de citer. On cherche alors les solutions qui annulent les dénominateurs des deux facteurs.

Pour le facteur TM, la recherche de l'expression qui conduit à l'annulation du dénominateur, donne

$$\begin{cases} \varepsilon k_{i,z} + \varepsilon_i k_z \tanh\left(\frac{k_z d}{2i}\right) = 0 \\ \varepsilon k_{i,z} + \varepsilon_i k_z \coth\left(\frac{k_z d}{2i}\right) = 0 \end{cases} \quad (7.60)$$

de même, pour le facteur TE, on trouve

$$\begin{cases} k_{i,z} + k_z \tanh\left(\frac{k_z d}{2i}\right) = 0 \\ k_{i,z} + k_z \coth\left(\frac{k_z d}{2i}\right) = 0 \end{cases} \quad (7.61)$$

et donc les équations (7.60) et (7.61) sont les expressions bien connues associées à la recherche des relations de dispersion des modes guidés d'une couche homogène [N7,D2,5]. On remarquera ainsi que l'étude des pôles de la matrice  $S$  permet d'avoir accès aux relations de dispersion du système optique étudié. On vérifie ainsi la pertinence de la méthode décrite au chapitre 5, dont l'intérêt est essentiellement d'ordre numérique.

## Quatrième partie

# Analyse de cristaux photoniques bidimensionnels

# Chapitre 8

## Introduction

En 1998, T.W. Ebbesen *et al* [F2] ont rapporté les résultats d'expériences portant sur l'étude de la transmission optique de réseaux bidimensionnels de trous cylindriques sub-longueurs d'onde, percés dans une couche mince métallique (Ag, Au et Cr) déposée sur un substrat diélectrique en verre ( $\text{SiO}_2$ ) (cf figure 8.1).

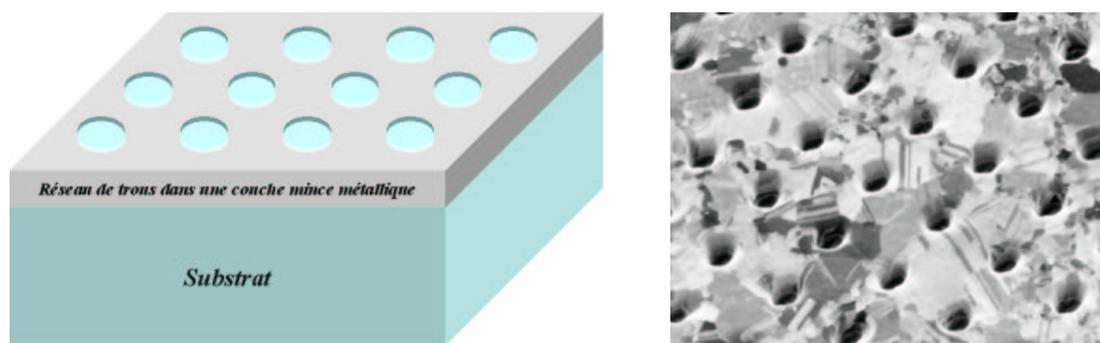


Figure 8.1 : à gauche, schéma du dispositif étudié expérimentalement. A droite, photographie en microscopie électronique de la surface d'un film d'argent percé de trous utilisé expérimentalement [F3].

Le diamètre des trous est de 150 nm. Le paramètre du réseau carré est de 900 nm. Le film a une épaisseur de 200 nm.

Ils obtiennent alors une transmission, déterminée pour l'ordre zéro de diffraction, extraordinairement haute en comparaison, selon eux, avec le taux d'occupation des trous sur la surface [F2]. En considérant une maille élémentaire d'un réseau de paramètre  $a$ , et le motif élémentaire associé à cette maille, ici un trou cylindrique de rayon  $r$ , on définit

le taux d'occupation  $\gamma$  des trous sur la surface selon

$$\gamma = \frac{\pi r^2}{a^2} \quad (8.1)$$

En supposant que la couche métallique est parfaitement opaque, et que dans le meilleur des cas la transmission à travers la seule surface d'un trou vaut 1, alors la transmission  $T$  à travers le réseau devrait être au plus égale à  $\gamma$ . Selon T.W. Ebbesen *et al* [F2], la transmission peut atteindre jusqu'à deux fois la valeur du taux d'occupation  $\gamma$ .

Dans ce contexte, ces résultats sont apparus, en premier lieu, suprenant. Dans un second temps, ces expériences vues au regard de la physique des plasmons de surface ont pu trouver une interprétation. Les interactions entre le champ électromagnétique et les plasmons de surface ont été largement étudiées, sur des surfaces rugueuses ou ayant une épaisseur variant sinusoïdalement [C1-4,7-13,15,18-21,23,29-31,D5]. Les plasmons de surface et les fluctuations de la densité d'électrons sur une surface de métal sont la source de nombreux effets optiques intéressants. Ces effets peuvent être employés, parmi d'autres applications, en spectroscopie Raman [C9,25,D5], en photoémission [C1,D5] et dans l'étude de la réflectance des réseaux [C3,4,7,15,18-21,23,24,31,D5]. Les plasmons de surface (PS) dans le cas de réseaux métalliques sont particulièrement intéressants [C1-4,7-13,15,18-21,23,29-31,D5], entre autres *via* leurs liens possibles avec les anomalies de Wood [C3,15,20,21,23,30,31] comme nous l'avons vu précédemment (cf chapitre 3). Il est possible d'exciter les PS en incidence normale (cf chapitre 4) et on peut observer des intensités accrues du champ électromagnétique [D5]. Cet article [F2] sera le premier d'une longue série [F1-20] se rapportant aux propriétés de transmission de réseaux métalliques comparables à ceux étudiés par T.W. Ebbesen *et al* dans l'article de 1998; ils portent à la fois sur des aspects théoriques et des aspects expérimentaux. Ainsi en 1999, T. Thio *et al* publient leurs résultats concernant le cas de films de chrome percés de trous sub-longueurs d'onde [F17]. Quelques unes des courbes de transmission obtenues pour le chrome à partir des données expérimentales que nous a fournies T. Thio sont reproduites dans les figures ci-dessous.

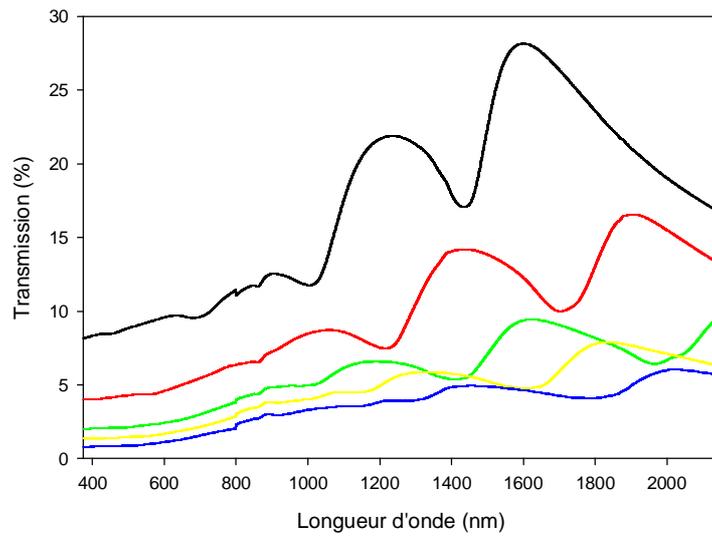


Figure 8.2 : Courbe de la transmission à l'ordre zéro, en incidence normale, en fonction de la longueur d'onde pour des réseaux carrés de différents paramètres. Noire :  $1,0 \mu m$ . Rouge :  $1,2 \mu m$ . Verte :  $1,4 \mu m$ . Jaune :  $1,6 \mu m$ . Bleue :  $1,8 \mu m$ . (D'après les données expérimentales fournies par T. Thio [F17])

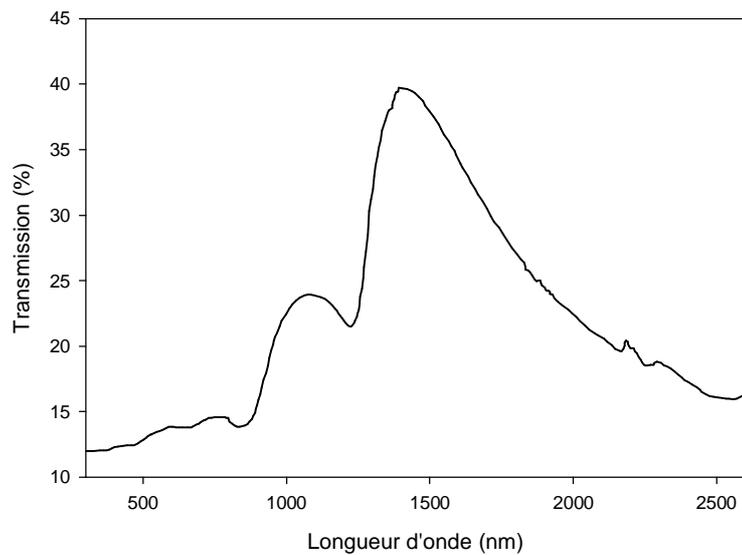


Figure 8.3 : Courbe de transmission à l'ordre zéro, en incidence normale, en fonction de la longueur d'onde pour un réseau hexagonal de paramètre de maille égal à  $1 \mu m$ . (D'après les données expérimentales fournies par T. Thio [F17])

Si la plupart des publications soulignent le rôle des PS dans ces expériences, leur

interaction avec le champ électromagnétique sur certains types de surfaces, dotées d'une géométrie plus ou moins complexe, est toujours mal comprise de manière générale. De plus, on notera que, par définition, les structures étudiées par T.W. Ebbesen *et al* peuvent être considérées comme des cristaux photoniques bidimensionnels [F4].

Par ailleurs, les résultats des expériences peuvent être interprétés dans le cadre d'un effet de diffraction multiple résonant [F19]. Les plasmons de surface excités de manière résonante diffractent alors sur les trous pour donner une contribution à un ordre de diffraction propagatif.

On notera également que dans le cadre des expériences de T.W. Ebbesen, il a été proposé d'autres types de résonances électromagnétiques (i.e. autres que les plasmons de surface) pour expliquer les phénomènes observés, par exemple, celles provenant des modes propres de cavités [F10].

Dans les chapitres suivants nous proposons une analyse susceptible d'éclaircir certains aspects des interprétations trouvées dans la littérature.

Dans un premier temps, nous présentons les résultats de simulations numériques reprenant les expériences de T. Thio *et al* [F17]. Pour les raisons que nous avons expliquées plus haut, nous avons dû nous restreindre au cas des films de chrome (cf chapitre 6).

A partir de cette première analyse des résultats, nous cherchons, dans une deuxième étape, à justifier le rôle de la diffraction multiple dans ces expériences avant de procéder à une analyse des effets résonants qui s'y rattachent. Enfin, on tente d'établir la nature des résonances. Ainsi, nous avons procédé à une étude des modes propres d'une des structures étudiées expérimentalement, et nous avons simulé le comportement des ordres de diffraction dont les contributions sont les plus significatives. Nous avons constaté que les ordres de polarisation  $p$  présentent un comportement résonant typique qui est confirmé par l'existence de pôles associés à ces ordres. D'autre part, les ordres de polarisation  $s$  ne présentent pas un tel comportement. On montre que les profils des courbes de transmission et de réflexion trouvent une interprétation par rapport aux effets résonants.

Dans un troisième temps nous analysons numériquement quelques aspects des pro-

priétés du champ proche pour les structures optiques étudiées, ceci afin d'illustrer nos interprétations.

Enfin, avant de conclure, nous présentons les propriétés de quelques structures où les films métalliques ont été remplacés par des film diélectriques. En effet, nous avons montré que dans certains cas, une surface non métallique permettait d'observer un comportement analogue à celui observé dans le cas métallique. La surface est alors optiquement opaque avec la même géométrie que celle employée par T.W. Ebbesen *et al* [F2,17]

# Chapitre 9

## Analyse théorique et simulations numériques

Les systèmes que nous avons étudiés numériquement correspondent à certaines des structures analysées par T.W. Ebbesen, T. Thio *et al* [F2,17] dont les résultats expérimentaux sont ceux des figures 8.2 et 8.3. De manière générale, nous avons considéré un réseau de trous sub-longueurs d'onde (de diamètres  $d = 500 \text{ nm}$ ) dans une couche de chrome de  $100 \text{ nm}$  d'épaisseur déposée sur un substrat de verre. Par la suite nous mentionnerons tout changement dans les paramètres du système. On suppose que la permittivité de la couche métallique est périodique ce qui permet de décrire celle-ci en termes de série de Fourier (cf chapitre 5 p. 39). Les valeurs des permittivités du chrome et du verre ( $\text{SiO}_2$ ) sont tirées des tables expérimentales établies par D.W. Lynch et W. R. Hunter, publiées dans l'ouvrage de E.D. Palik [N5]. On représente la partie réelle ( $\varepsilon_R$ ) et la partie imaginaire ( $\varepsilon_I$ ) de la permittivité du chrome en fonction de la longueur d'onde,

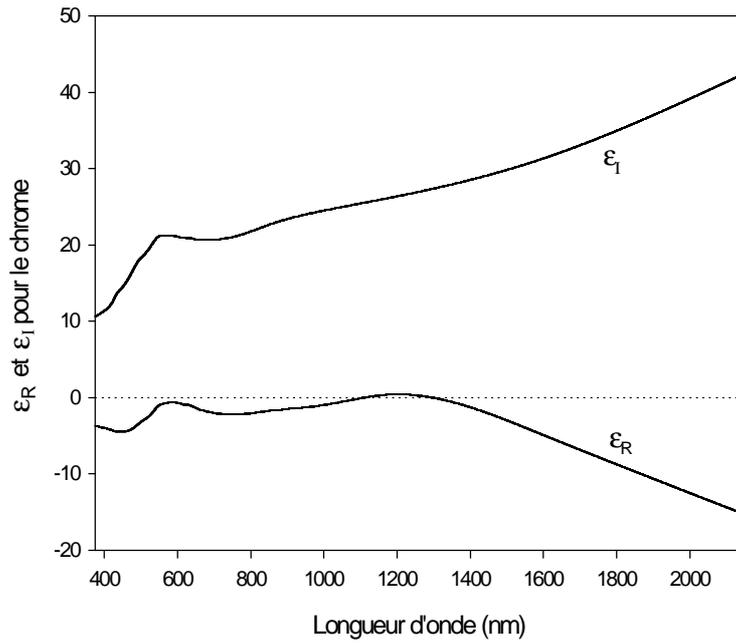


Figure 9.1 : Permittivité du chrome.  $\epsilon_R$  et  $\epsilon_I$  correspondent respectivement à la partie réelle et à la partie imaginaire de la permittivité.

ainsi que les valeurs prises par la permittivité du verre ( $\text{SiO}_2$ ) en fonction de la longueur d'onde (la partie imaginaire de la permittivité est considérée comme nulle),

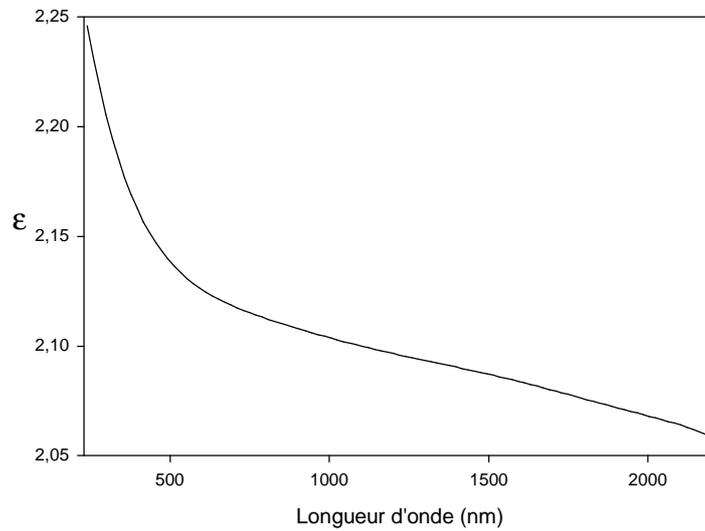


Figure 9.2 : Permittivité du verre ( $\text{SiO}_2$ )

On peut également décrire le champ électromagnétique par des séries de Fourier. En effet, la périodicité du système permet de décrire le champ électromagnétique en terme d'ondes de Bloch. Ceci nous conduit à l'utilisation de la méthode des modes couplés présentée dans la partie précédente et qui nous servira dans les simulations numériques (cf chapitre 5).

La seule approximation par rapport aux expériences est que nous avons considéré un substrat semi-infini dans nos simulations. Dans toutes les simulations réalisées, nous avons considéré une onde incidente caractérisée par un champ électrique de  $1 \text{ V.m}^{-1}$ . De plus, la polarisation de l'onde incidente est rectiligne et sera orientée, soit selon l'axe  $Ox$ , soit selon l'axe  $Oy$ , qui définissent le plan du réseau perpendiculaire à l'axe  $Oz$ . Le schéma suivant résume le système étudié numériquement,

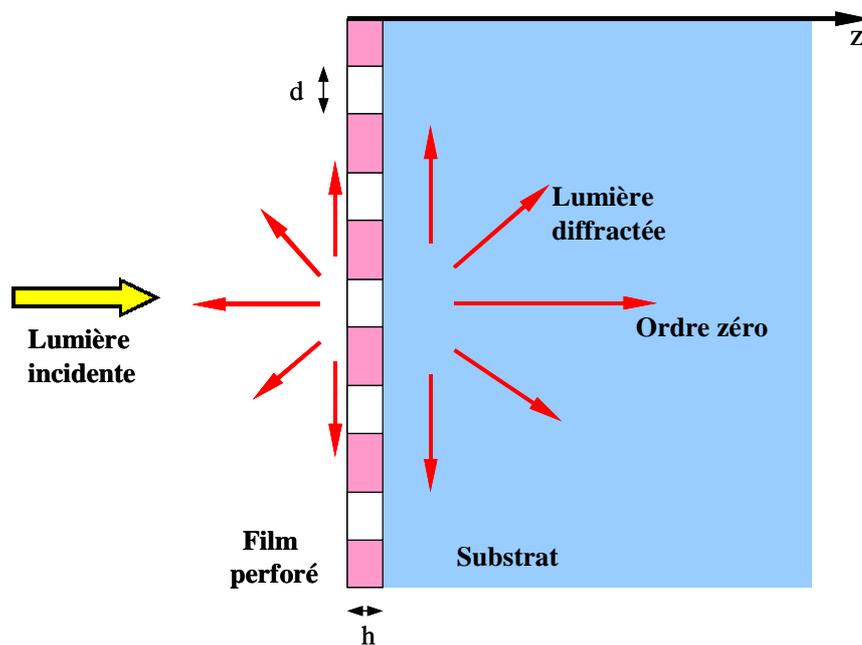


Figure 9.3 : Schéma de la structure étudiée numériquement

## 9.1 Analyse de la transmission, de la réflexion et des pertes en énergie du système

Comme pour la plupart des cas expérimentaux publiés [F2-6,17,18], la transmission est calculée par rapport à l'ordre zéro de diffraction. On étudie la structure en incidence normale. La figure suivante (9.4a) montre la transmission en fonction de la longueur d'onde de l'onde incidente pour l'ordre zéro de diffraction. Le diamètre des trous est  $d = 500nm$  et l'épaisseur du film est  $h = 100 nm$ . La ligne pleine correspond à un paramètre de réseau  $a = 1\mu m$ , la ligne de tirets a un paramètre  $a = 1,2\mu m$  et la ligne pointillée correspond à un système similaire aux précédents mais dénué de trous.

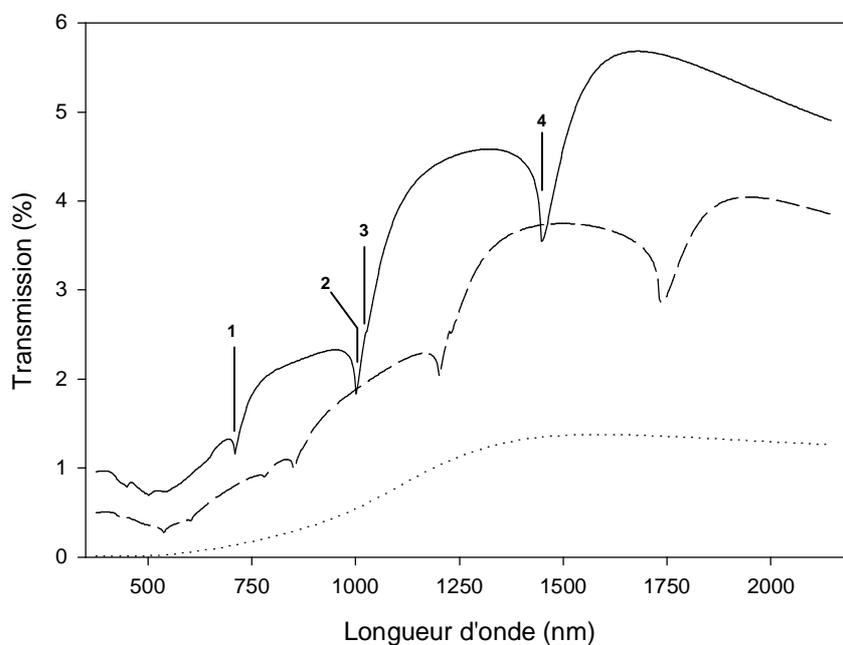


Figure 9.4a : Simulations de la transmission pour trois configurations.

(—), paramètre du réseau de  $1 \mu m$ .

(- - -), paramètre du réseau de  $1,2 \mu m$ .

(.....), couche plane.

Le diamètre des trous est  $d = 500 nm$  et l'épaisseur du film est  $h = 100 nm$ .

On peut voir que lorsque la longueur d'onde augmente, la transmission augmente, bien qu'elle soit marquée par des minima que nous avons notés de 1 à 4. On note que la valeur 3 correspond à un minimum à peine marqué. De plus, les positions des minima sont décalées vers des longueurs d'ondes plus grandes lorsque le paramètre de maille du réseau augmente et disparaissent en l'absence de trous. Les simulations et l'expérience sont très similaires qualitativement, mais bien que nous retrouvions parfaitement les positions des minima on peut constater deux écarts entre théorie et expérience (cf figure 8.2 et 8.3 ainsi que [F2,17]).

Premièrement, les positions des maxima ne coïncident pas tout à fait avec l'expérience, i.e. le profil des régions convexes, de part et d'autre des minima, est légèrement déformé par rapport à l'expérience. Nous proposerons une explication possible de cette différence par la suite.

Deuxièmement, on observe un écart d'environ un facteur 5 entre les valeurs mesurées et calculées des transmissions. En effet, T.W. Ebbesen *et al* trouvent une transmission extraordinairement élevée (au plus de l'ordre de 30 % avec un taux d'occupation  $\gamma = 19,6$  % pour le réseau de paramètre  $1 \mu m$ ) que nous n'obtenons pas dans nos calculs. En l'état actuel de nos investigations, il ne nous a pas été possible d'interpréter une telle différence.

Toutefois, il convient de préciser deux points.

Tout d'abord, comme nous l'avons indiqué au chapitre 6, nous avons vérifié que les résultats obtenus correspondaient bien à une situation où le problème étudié converge numériquement. Par ailleurs, en cherchant à superposer les courbes théoriques et expérimentales de manière à ce que leurs aires soient identiques, on vérifie (figure 9.4b et 9.4c) le bon accord entre les profils théoriques et expérimentaux. Les figures 9.4b et 9.4c correspondent respectivement aux cas de réseaux carrés de paramètres de mailles égaux à  $1 \mu m$  et  $1,2 \mu m$ . L'épaisseur du film de chrome est de  $100 nm$ , le diamètre des trous est de  $500 nm$ .

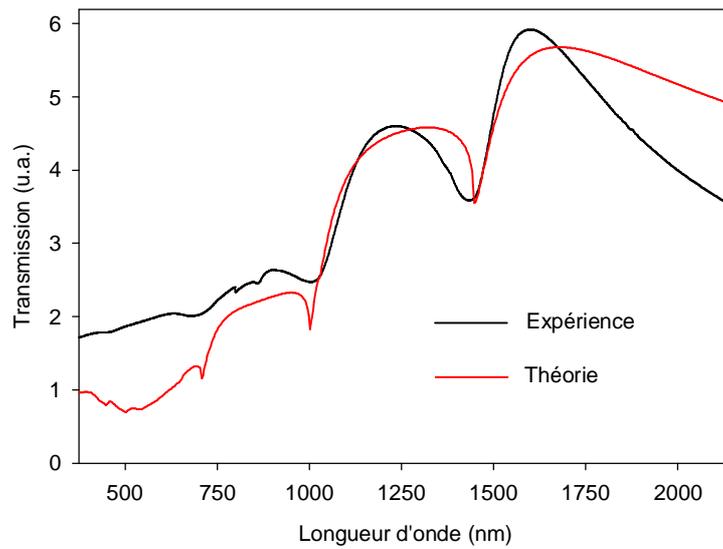


Figure 9.4b : Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux pour un réseau carré de trous ronds d'un diamètre  $d = 500 \text{ nm}$ . Le de paramètre du réseau est de  $1 \mu\text{m}$ .

L'épaisseur du film de chrome est  $h = 100 \text{ nm}$ .

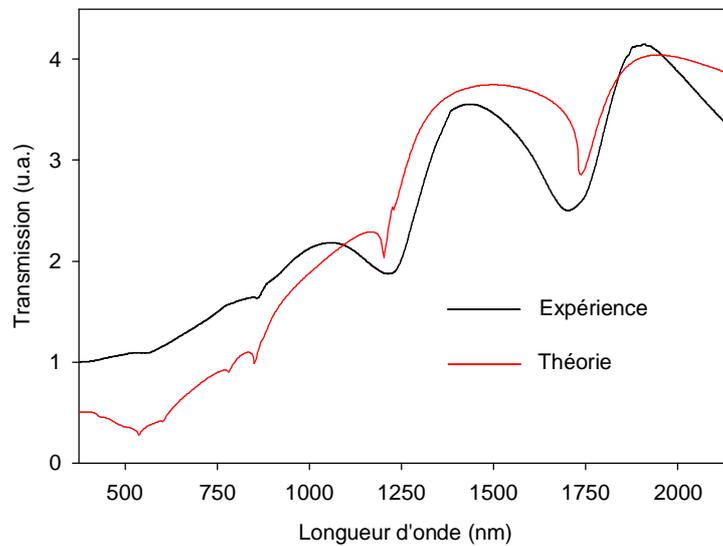


Figure 9.4c : Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux pour un réseau carré de trous ronds d'un diamètre  $d = 500 \text{ nm}$ . Le de paramètre du réseau est de  $1,2 \mu\text{m}$ .

L'épaisseur du film de chrome est  $h = 100 \text{ nm}$ .

Enfin, on pourrait objecter qu'il soit nécessaire que les valeurs de la permittivité du chrome utilisées numériquement soient connues avec précision. Or, si on reproduit les simulations en affectant une erreur relative aux valeurs prise par la permittivité par rapport aux données issues de la littérature [N5], on s'aperçoit que les résultats obtenus restent suffisamment stables pour qu'une erreur sur les valeurs de la permittivité du chrome ne suffise pas à justifier les écarts constatés avec l'expérience.

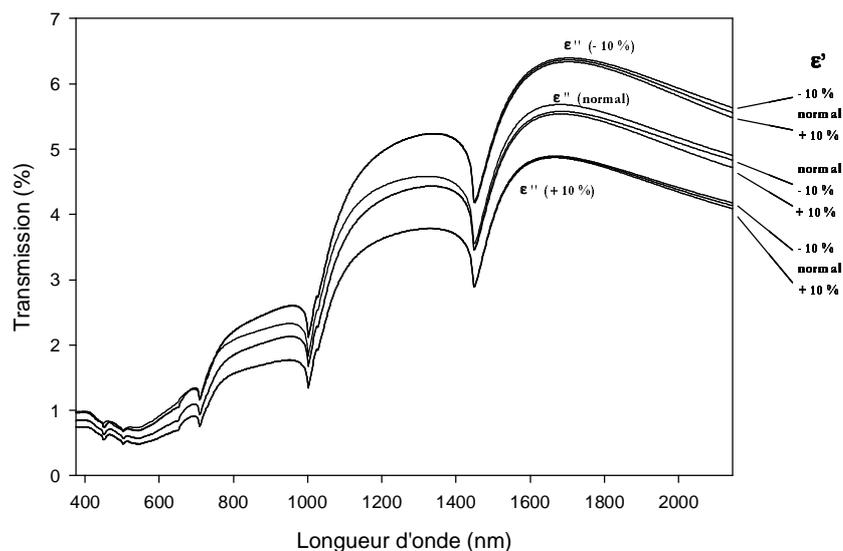


Figure 9.4d : Influence des variations des valeurs des parties réelles et imaginaires de la permittivité du chrome sur la transmission. Le réseau à un paramètre égal à  $1 \mu m$  et est constitué de trous d'un diamètre de  $500 nm$ . Le film de chrome à une épaisseur de  $100 nm$ . Pour chacune des courbes on a indiqué l'erreur relative affectée à la partie réelle ( $\epsilon'$ ) ou imaginaire ( $\epsilon''$ ) de la permittivité du chrome par rapport aux valeurs extraites des tables [N5].

On notera par ailleurs que la structure étudiée expérimentalement présentait le même comportement que la lumière arrive du vide vers le substrat ou du substrat vers le vide [F2]. Ceci est également observé dans nos simulations. C'est ce que nous montrons sur le graphique suivant où nous représentons les deux tracés de transmission pour les deux sens de propagation de l'onde incidente perpendiculairement à la surface, dans le cas du réseau de paramètre de maille  $a = 1 \mu m$ . En raison du théorème de réciprocité ce résultat

n'est pas surprenant, et la légère différence entre les deux courbes provient du fait que le système n'est pas symétrique dans nos simulations. En effet, il faut rappeler que nous avons considéré un substrat semi-infini. Néanmoins, comme nous sommes ici à l'incidence normale, le fait de l'absence ou non d'un dioptré vide/substrat joue un rôle négligeable dans nos résultats. Toutefois, l'interprétation physique de l'identité des courbes quel que soit le sens de propagation de la lumière n'est pas forcément intuitif, comme pour le cas d'un système de couches planes. Nous expliquerons cette identité de comportement un peu plus loin (cf p 107 à 109). Nous verrons qu'elle provient de la symétrie dans le rôle tenu par les ordres de diffraction, lorsque ceux-ci deviennent non-homogènes, quel que soit le sens de propagation de la lumière. Nous montrerons également que cette particularité est en rapport avec les propriétés du champ proche (cf p 135 à 147).

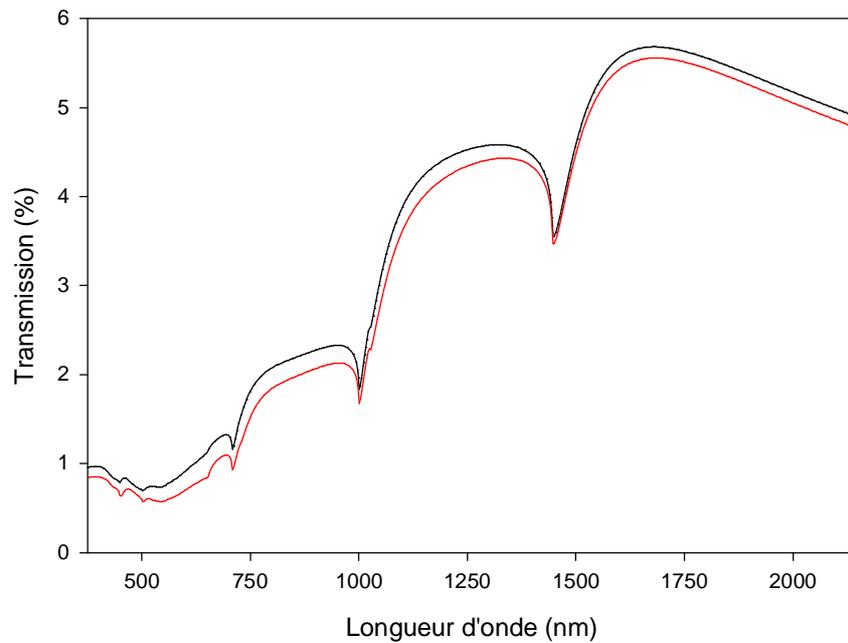


Figure 9.5 : Simulation de la transmission pour un paramètre du réseau de  $1 \mu m$ . En noir, dans le sens vide/substrat. En rouge, dans le sens substrat/vide.

Le graphique suivant concerne les simulations que nous avons réalisées pour le même type de configuration que précédemment mais pour un réseau hexagonal de paramètre  $a = 1\mu m$ . Là encore, on peut aisément comparer cette courbe à celle obtenue expérimentalement dans les mêmes conditions (cf figures (8.2) et (8.3) et [F2,17]).

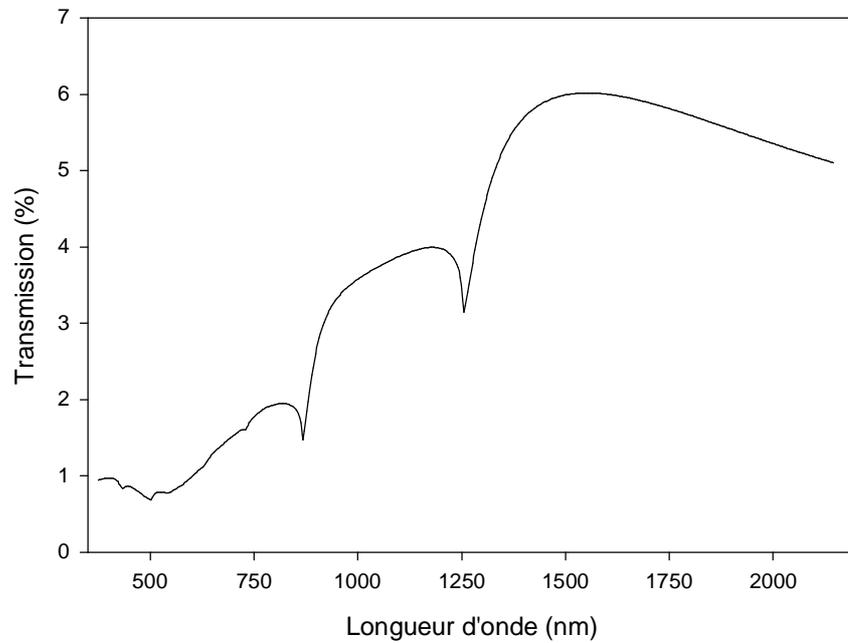


Figure 9.6 : Simulation de la transmission dans le cas d'un réseau hexagonal de paramètre de maille  $1\mu m$ .

La figure ci-après montre la réflexion en fonction de la longueur d'onde de l'onde incidente pour l'ordre de diffraction zéro. La ligne pleine correspond au coefficient de réflexion pour le réseau de paramètre  $a = 1\mu m$ , la ligne de tirets correspond au cas du réseau de paramètre  $a = 1,2\mu m$ . La ligne pointillée est donnée pour référence, elle correspond au cas de la couche sans trous.

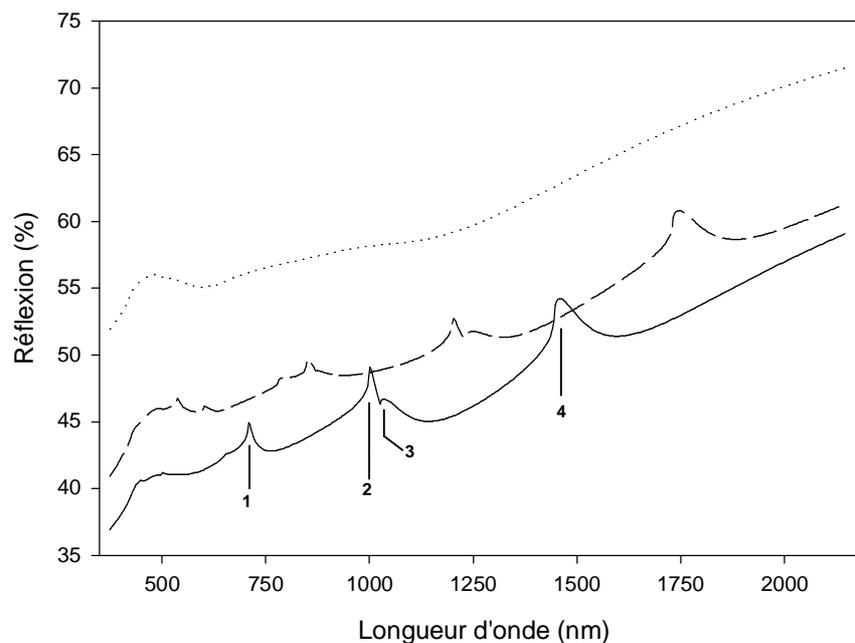


Figure 9.7 : Simulations de la réflexion pour trois configurations.

(—), paramètre du réseau de  $1\mu m$ .

(- - -), paramètre du réseau de  $1,2\mu m$ .

(.....), couche plane.

On peut voir que lorsque la longueur d'onde augmente, la réflexion augmente. Par ailleurs, elle est marquée par des maxima que nous avons notés de 1 à 4 et qui coïncident avec les minima de la transmission. De plus, les positions des maxima sont décalées vers des longueurs d'ondes plus grandes lorsque le paramètre de maille du réseau augmente et disparaissent en l'absence de trous.

La figure ci-dessous montre les pertes en fonction de la longueur d'onde.

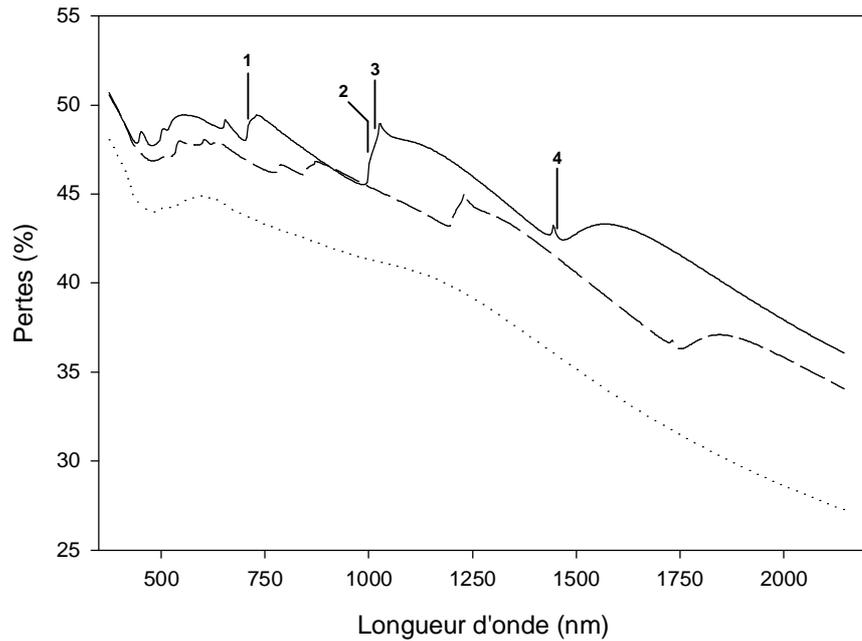


Figure 9.8 : Simulations des pertes en énergie pour trois configurations.

(—), paramètre du réseau de  $1 \mu m$ .

(- - -), paramètre du réseau de  $1,2 \mu m$ .

(.....), couche plane.

Lorsqu'on trace les pertes en énergie, il est intéressant de noter que les longueurs d'ondes notées de (1) à (4) (et correspondant respectivement aux minima et aux maxima des courbes de transmission et de réflexion) ne peuvent être attachées aux minima et aux maxima des pertes. Néanmoins, chacune de ces valeurs semblent se situer sur des transitions entre un minimum et un maximum proches l'un de l'autre. On constate que ces paires de minimum et maximum se situent à des longueurs d'onde plus grandes pour un paramètre de réseau plus grand, et elles disparaissent pour la surface plane. Comme on le montre sur le graphique suivant, ceci se retrouve dans le cas d'un réseau hexagonal.

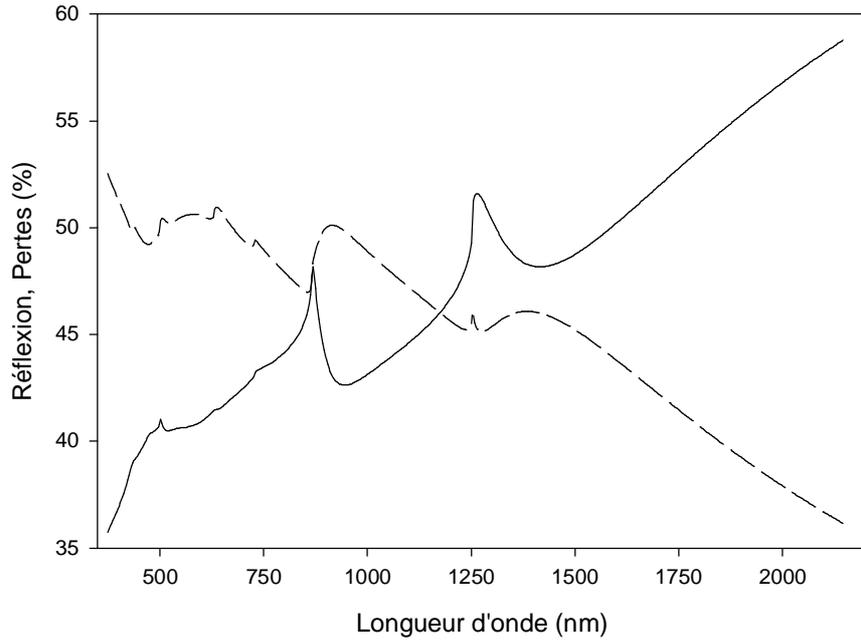


Figure 9.9 : Simulation de la réflexion et des pertes en énergie pour un réseau hexagonal d'un paramètre de maille de  $1 \mu m$

Il apparaît donc que les décroissances soudaines de l'énergie transmise sont corrélées avec une augmentation de l'énergie réfléchie. La dépendance des profils des courbes de transmission et de réflexion par rapport au pas du réseau montre que ceux-ci sont liés à la corrugation de la surface métallique.

De plus, il s'avère que les valeurs de longueur d'onde notées de (1) à (4) correspondent *a priori* aux longueurs d'onde de Rayleigh attachées à différents ordres de diffraction (cf chapitre 3 sur les anomalies de Wood). En d'autres termes, ces valeurs correspondent à la valeur minimale de la longueur d'onde à partir de laquelle un ordre donné devient non-homogène. On considère un ordre de diffraction  $\vec{g}$  dans un milieu donné de permittivité  $\varepsilon$ , d'un côté ou d'un autre du film métallique, pour une composante parallèle  $\vec{k}$  du vecteur d'onde incidente. La longueur d'onde de Rayleigh est la valeur de  $\lambda$  qui annule

$k_{\vec{g},z}$ , la composante selon  $z$  du vecteur d'onde associé à l'ordre  $\vec{g}$ , avec

$$k_{\vec{g},z} = \sqrt{\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\varepsilon - \left| \vec{k} + \vec{g} \right|^2} \quad (9.1)$$

On trouve alors

valeur	Ordres de diffraction	Minima de transmission théoriques (Longueur d'onde de Rayleigh)
(1)	$(\pm 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1)$ , Vide/Film	707, 10 <i>nm</i>
(2)	$(0, \pm 1), (\pm 1, 0)$ , Vide/Film	1000 <i>nm</i>
(3)	$(\pm 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1)$ , Substrat/Film	1025, 37 <i>nm</i>
(4)	$(0, \pm 1), (\pm 1, 0)$ , Substrat/Film	1445, 29 <i>nm</i>

Ces valeurs correspondent à celles trouvées par simulation numérique (cf figures 9.4a et 9.7) et analytiquement à partir de l'équation (9.1). Pour comparaison, nous donnons les valeurs correspondant au cas expérimental,

valeur	Minima de transmission expérimentaux	Erreur relative
(1)	686 <i>nm</i>	3 %
(2)	1006 <i>nm</i>	0,6 %
(3)	"non visible"	—
(4)	1432,5 <i>nm</i>	0,9 %

et on constate un bon accord entre la théorie et l'expérience, mis à part la valeur (3) qui est masquée expérimentalement en raison de sa proximité avec la valeur (2). De plus, les travaux antérieurs auxquels nous nous sommes référés [F2-8,11,14,16-18] identifient généralement les régions convexes des courbes de transmission, i.e. les régions comprises entre les minima locaux, comme des domaines de longueur d'onde où les plasmons de surface apparaissent.

On peut se poser la question de savoir si nous avons bien affaire à des plasmons de surface.

De manière générale, les plasmons de surface associés à un système correspondent à des modes propres de ce système [C15,20]. Ainsi, si nous faisons l'hypothèse qu'il se produit des effets résonants dans les structures que nous étudions ici, nous les regrouperons sous la notion de résonances de modes propres. Il conviendra par la suite de déterminer la nature de ces modes propres, i.e. s'agit-il de modes de type plasmon ou bien encore, par exemple, de modes de cavités ?

Dans le paragraphe 9.3, nous vérifierons l'existence de résonances associées à des modes propres, et nous essaierons d'en déterminer l'origine. Dans les paragraphes suivants, nous proposons une interprétation à l'ensemble de ces résultats. Tout d'abord nous chercherons à mettre en évidence le rôle de la diffraction multiple, puis, dans un second temps nous mettrons en évidence le rôle de l'excitation résonante des modes propres de la structure étudiée.

## 9.2 Contribution des effets de diffraction multiple

Nous venons de voir que les longueurs d'ondes notées de (1) à (4) coïncident avec les longueurs d'onde de Rayleigh associées à divers ordres de diffraction, dans le vide ou dans le substrat. Ces valeurs correspondent aux valeurs à partir desquelles un ordre donné devient non-homogène. Nous allons voir comment on peut, à partir de cette observation, soulever le rôle de la diffraction multiple dans ces expériences, comme cela a été suggéré dans certains travaux [F19,20].

À partir d'une longueur d'onde initiale, correspondant à un nombre d'ordres de diffraction homogènes donné, on constate que le nombre d'ordres de diffraction devenus non-homogènes (i.e. les ordres évanescents) augmente avec la longueur d'onde selon des pas fixés par les longueurs d'onde de Rayleigh. Sur la figure suivante on a représenté le nombre d'ordres de diffraction  $g(\lambda)$  gagnés en tant que modes de surface en fonction de la

longueur d'onde. Pour comparaison, on a représenté également la courbe de transmission correspondante dont on a multiplié l'échelle par soucis de visibilité. On a fixé arbitrairement l'origine de  $g(\lambda)$  à zéro par rapport à l'origine des abscisses et on a reporté les positions des longueurs d'ondes (1) à (4).

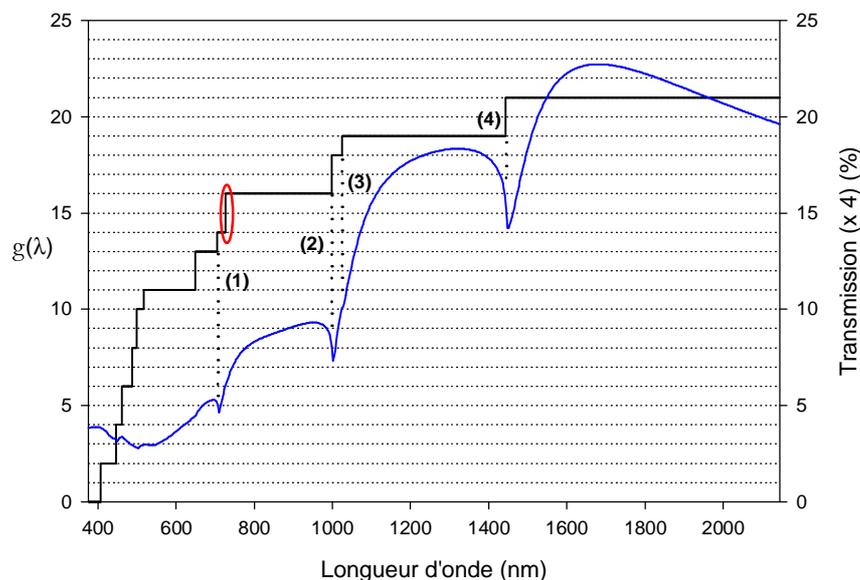


Figure 9.10 : Nombre d'ordres de diffraction devenant inhomogènes en fonction de la longueur d'onde pour le réseau de  $1 \mu m$ . Pour comparaison, on a représenté la courbe de transmission correspondante.

La zone entourée correspond à la longueur d'onde de Rayleigh située à  $723,39 \text{ nm}$  pour les ordres  $(0, \pm 2)$  et  $(\pm 2, 0)$ .

On constate que la progression de  $g(\lambda)$  suit celle de la transmission. On observe que le nombre d'ordres de diffraction devenant non homogènes croît rapidement et de façon rapprochée pour des petites longueurs d'ondes  $\lambda$  (inférieures à la valeur (1)) croissantes. En fait, les ordres de diffraction les plus élevés deviennent évanescents avant les ordres moins élevés. Pour des longueurs d'ondes décroissantes, les profils des courbes de transmission et de réflexion tendent alors à être modélisés par des ordres de diffraction de plus en plus élevés. Par ailleurs, comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 2 (p.26), les ordres de plus en plus élevés tendent vers des contributions de plus en plus faibles. Par exemple, pour de petites longueurs d'onde, le profil de la transmission est déterminé par

un grand nombre d'ordres de diffraction dont les contributions sont rapidement petites. Dès lors, on peut s'attendre à observer un profil dont la structure est plus "grossière" que pour les grandes longueurs d'ondes. C'est ce que nous montrons au travers de la figure suivante qui représente la transmission pour des longueurs d'onde inférieures à  $700 \text{ nm}$ .

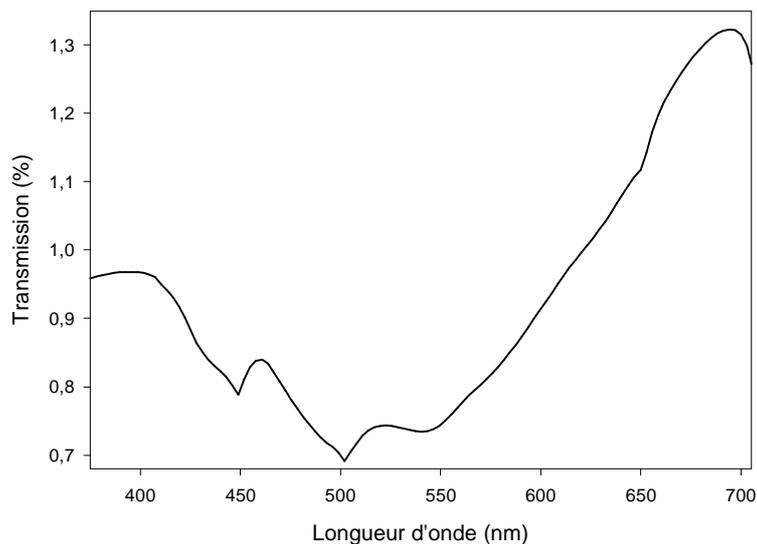


Figure 9.11 : Transmission à l'ordre zéro entre  $350 \text{ nm}$  et  $715 \text{ nm}$  pour le réseau de paramètre égal à  $1 \mu\text{m}$  dans le cas du film de chrome d'une épaisseur de  $100 \text{ nm}$  et percé de trous d'un diamètre de  $500 \text{ nm}$ .

On peut alors envisager que la transmittance augmente par pas, du fait de la conversion progressive des ordres évanescents en ordres homogènes selon un processus de diffraction multiple comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant.

## Un modèle simple de diffraction multiple perturbatif

De façon à mieux comprendre et illustrer le phénomène de diffraction multiple, nous allons introduire un modèle simple de diffraction perturbative. On considère que le champ électromagnétique diffracté par un réseau bidimensionnel peut être décrit par une approche perturbative comme l'ont fait S. T. Ali *et al* [B3]. Ainsi on montre que le champ électromagnétique diffusé par une structure diffractante bidimensionnelle peut s'écrire

selon (cf annexe B et [B3])

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}) &= \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\vec{p}_{\alpha,\beta}\cdot\vec{r}} \vec{E}_0 + \\ &\quad \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha',\beta'=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}\cdot\vec{r}} \vec{E}_0\end{aligned}\quad (9.2)$$

où  $\vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  est le champ incident et, les couples  $(\alpha, \beta)$  et  $(\alpha', \beta')$  désignent les différents ordres de diffraction avec

$$\overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} = -\frac{i}{2kab} \frac{1}{m_{\alpha,\beta}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p}_{\alpha,\beta} \otimes \vec{p}_{\alpha,\beta} \right) \int_v U_0(\vec{s}) e^{i(\vec{k} - \vec{p}_{\alpha,\beta})\cdot\vec{s}} d^3s \quad (9.3)$$

où l'on a

$$\vec{p}_{\alpha,\beta} = \begin{pmatrix} kp_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{a}\alpha + k \sin \theta \cos \varphi \\ kq_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{b}\beta + k \sin \theta \sin \varphi \\ km_{\alpha,\beta} = \pm k \sqrt{1 - p_{\alpha,\beta}^2 - q_{\alpha,\beta}^2} \end{pmatrix} \quad (9.4)$$

ainsi que

$$\overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = -\frac{i}{2kab} \frac{1}{m_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \otimes \vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \right) \int_v e^{i(\vec{p}_{\alpha,\beta} - \vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'})\cdot\vec{s}} U_0(\vec{s}) d^3s \quad (9.5)$$

et, avec dans ce cas

$$\vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \begin{pmatrix} kp_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \frac{2\pi}{a}\alpha' + kp_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{a}(\alpha + \alpha') + k \sin \theta \cos \varphi \\ kq_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \frac{2\pi}{b}\beta' + kq_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{b}(\beta + \beta') + k \sin \theta \sin \varphi \\ km_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \pm k \sqrt{1 - p_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}^2 - q_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}^2} \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

Le vecteur  $\vec{k} = (k \sin(\theta) \cos(\varphi), k \sin(\theta) \sin(\varphi), k \cos(\theta))$  étant le vecteur d'onde incident. De même  $\vec{p}_{\alpha,\beta}$  et  $\vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}$  désigne respectivement les vecteurs d'onde des ordres de diffraction  $(\alpha, \beta)$  et  $(\alpha + \alpha', \beta + \beta')$ .

Nous expliquons dans l'annexe B l'origine de ces expressions qui sont issues de l'équa-

tion de Lippmann-Schwinger. L'intérêt de ce modèle est qu'il permet d'illustrer ce qui est susceptible de se produire dans ces expériences. Ainsi, si on regarde le paramètre  $m_{\alpha,\beta}$ , celui-ci peut être réel ou imaginaire, selon la valeur de la longueur d'onde et de l'ordre de diffraction. S'il est réel, alors l'onde électromagnétique associée est homogène et peut ainsi se propager. S'il est imaginaire, alors l'onde électromagnétique est évanescente et correspond à une onde de surface. L'énergie des ondes de surfaces pourra être convertie en ordres homogènes. De cette façon, les points numérotés de 1 à 4, sur les figures (9.4a),(9.7) et (9.8), correspondent au changement de  $m_{\alpha,\beta}$  qui deviendra complexe lorsque la longueur d'onde augmentera suffisamment.

Pour appliquer ce modèle à notre système, on se place en incidence normale avec

$$\vec{E}_0(\vec{r}) = \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} \quad (9.7)$$

et si on choisit de ne retenir que l'ordre zéro, l'expression du champ (9.2) devient

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = & \vec{E}_0 e^{ikz} + \overleftarrow{\Gamma}_{0,0} e^{i\vec{p}_{0,0}\vec{r}} \vec{E}_0 + \\ & \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{-\alpha,-\beta} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\vec{p}_{\alpha,\beta}^{-\alpha,-\beta}\vec{r}} \vec{E}_0 \end{aligned} \quad (9.8)$$

Ce résultat est intéressant car il nous donne des informations sur le comportement des ondes évanescentes. A partir de ce modèle de diffraction multiple, on voit que les ondes homogènes sont "transformées" en ondes évanescentes qui peuvent à leur tour être diffractées pour redonner une contribution aux ordres homogènes. C'est ce que l'on a schématisé dans les deux croquis suivants. Sur le premier, un trou A diffracte une onde incidente  $i$  pour donner un champ homogène  $h$  et un champ évanescent  $e$ .

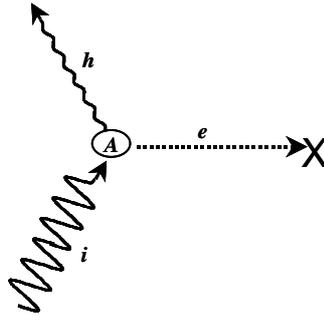


Figure 9.12 : Schéma de diffraction par un trou

Sur le second schéma, un trou A diffracte de la même manière que sur la précédente figure, sauf qu'ici le trou B placé à son voisinage va convertir l'onde évanescente  $e$  en onde homogène.

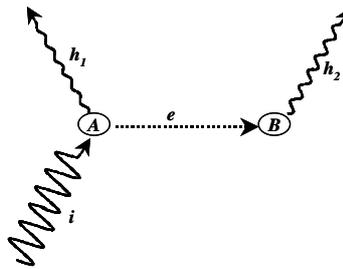


Figure 9.13 : Schéma de la diffraction multiple par deux trous.

On applique cette analyse qualitative au cas du réseau carré de paramètre  $a = 1\mu m$ . On note que chaque vecteur du réseau réciproque  $\vec{g}$  est déterminé par le couple  $(\alpha, \beta)$ . Le résultat est détaillé sur la figure (9.14) que nous avons divisée en cinq parties. Chaque partie montre le comportement des différents ordres de diffraction spécifiés sur la droite. L'axe horizontal indique la longueur d'onde. Une ligne ondulée indique que le champ électromagnétique est homogène alors qu'une ligne au profil "exponentiel" correspond au champ évanescent. Au dessus de la double ligne, qui symbolise le film métallique, se situe le vide qui ici est le milieu d'incidence. Au dessous se situe le substrat. Pour chaque partie, les points numérotés correspondent aux points indiqués sur les courbes.

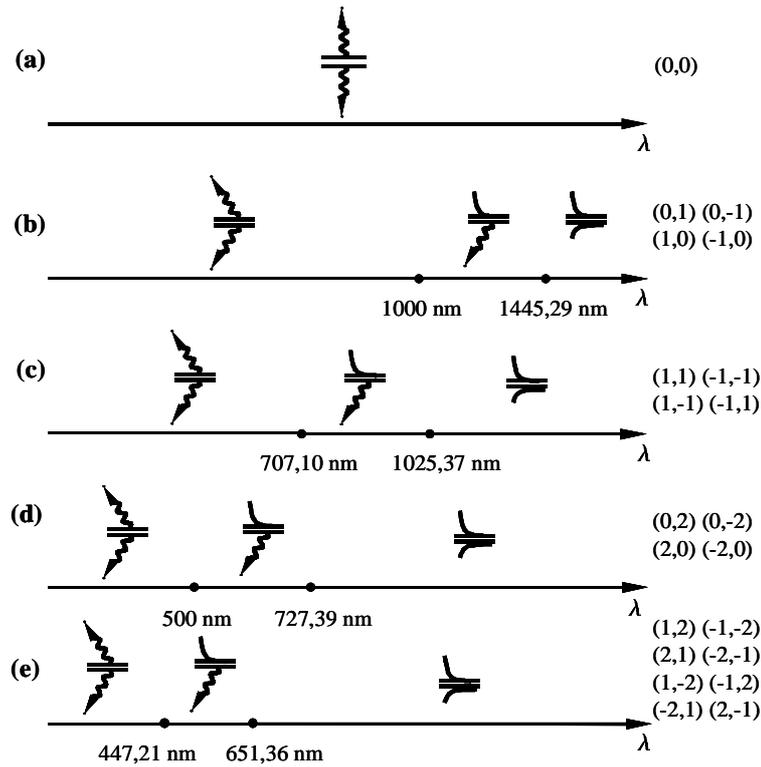


Figure 9.14 : Schéma du comportement des ordres de diffraction aux interfaces

La figure (a) montre que l'ordre de diffraction zéro est homogène quelle que soit la longueur d'onde. Le schéma (b) montre que les ordres  $(0, \pm 1)$  et  $(\pm 1, 0)$  sont homogènes en dessous de 1000 nm. Ensuite, ils restent homogènes dans le vide et évanescents dans le substrat jusqu'à 1445,29 nm. Au delà de 1445,29 nm le champ est évanescent à la fois dans le substrat et dans le vide. Pour les parties (c,d,e) les ordres de diffraction montrent un comportement similaire à l'exception du fait que les changements se font pour des longueurs d'ondes différentes. Chaque minima de la figure (9.4a) correspond approximativement à un point (ou plusieurs) où le caractère évanescent ou homogène d'un ou plusieurs ordres de diffraction est modifié. Ainsi les points numérotés de 1 à 4 correspondent aux longueurs d'onde de Rayleigh telles que  $m_{\alpha,\beta} = 0$ , i.e. l'ordre correspondant devient tangent à la surface. Ces résultats sont conformes avec ceux de précédents travaux [F2-8,11,14,16,17,18,20].

La figure (9.15) montre la contribution à l'ordre zéro de diffraction suggérée par

l'équation (9.8). Le schéma est analogue au précédent à l'exception du fait que nous avons considéré uniquement la contribution à cet ordre. Pour chaque ordre de diffraction, il y a une contribution à l'ordre zéro. L'observation des courbes de transmission permet de vérifier qu'il existe une contribution à l'ordre zéro transmis quel que soit le milieu présentant un terme évanescent,.

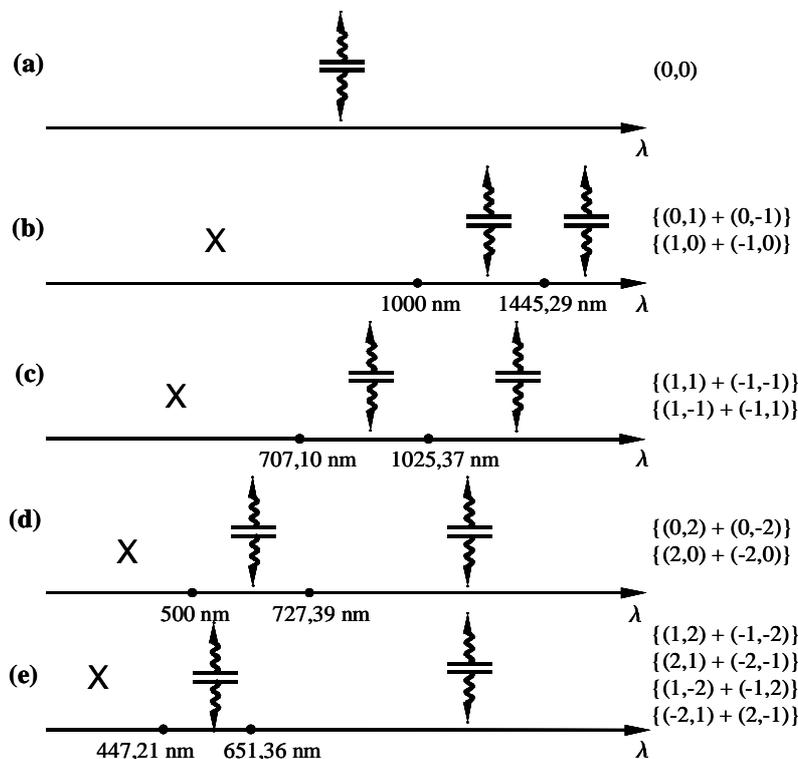


Figure 9.15 : Schéma du comportement des ordres de diffraction après "multi-scattering"

Si l'ordre de diffraction présente une composante radiative, dans le vide et dans le substrat, alors il ne contribue pas à l'ordre zéro. Les ordres avec une composante évanescente, peuvent donner une contribution à l'ordre zéro et ainsi on pourra envisager une transmission plus importante que celle que l'on observerait en l'absence de diffraction multiple. On notera qu'il peut paraître curieux qu'un ordre évanescent, par exemple à la jonction métal/vide, donne une contribution à l'ordre zéro en transmission dans le substrat. Ceci, peut être interprété par l'existence de trous qui permettent un échange d'excitation entre les deux faces du film métallique [F2,7].

Une autre hypothèse, proposée par J. M. Vigoureux [F20] et ne faisant pas intervenir

l'échange d'excitation *via* les trous, consiste à dire que les hausses de transmission ne sont dues qu'aux différents ordres de diffraction à la jonction métal/substrat. Cette hypothèse repose sur le fait que certains ordres de diffractions ont leurs longueurs d'onde de Rayleigh proches l'une de l'autre, comme par exemple l'ordre  $(0, 1)$  à la jonction métal/vide (longueur d'onde de Rayleigh située à  $1000 \text{ nm}$ ) et l'ordre  $(1, 1)$  à la jonction métal/substrat (longueur d'onde de Rayleigh située à vers  $1025 \text{ nm}$ ).

Afin d'étudier cette dernière hypothèse, nous avons fait le test suivant. Les positions des longueurs d'onde de Rayleigh dépendent uniquement du paramètre du réseau et de la permittivité du vide et du substrat. Il est alors intéressant de tracer la courbe de transmission pour une valeur de la permittivité du substrat telle que l'on ne puisse avoir de coïncidences entre les valeurs des longueurs d'onde de Rayleigh d'ordres différents. Ainsi, on a repris les paramètres du système que nous venons d'analyser sauf que le substrat présente une permittivité  $\varepsilon = 3$ . Les longueurs d'onde de Rayleigh des principaux ordres de diffraction sont alors :

valeur	Ordres de diffraction	Longueur d'onde de Rayleigh
<i>a</i>	$(0, \pm 1), (\pm 1, 0)$ , Substrat/Film	$1732,05 \text{ nm}$
<i>b</i>	$(\pm 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1)$ , Substrat/Film	$1224,74 \text{ nm}$
<i>c</i>	$(0, \pm 1), (\pm 1, 0)$ , Vide/Film	$1000 \text{ nm}$
<i>d</i>	$(0, \pm 2), (\pm 2, 0)$ , Substrat/Film	$866,02 \text{ nm}$
<i>e</i>	$(\pm 2, \pm 1), (\pm 1, \mp 2)$ , Substrat/Film	$774,60 \text{ nm}$
<i>f</i>	$(\pm 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1)$ , Vide/Film	$707,10 \text{ nm}$
<i>g</i>	$(0, \pm 1), (\pm 1, 0)$ , Vide/Film	$500 \text{ nm}$
<i>h</i>	$(\pm 2, \pm 1), (\pm 1, \mp 2)$ , Vide/Film	$447,21 \text{ nm}$

et le tracé de la transmission donne (figure 9.16),

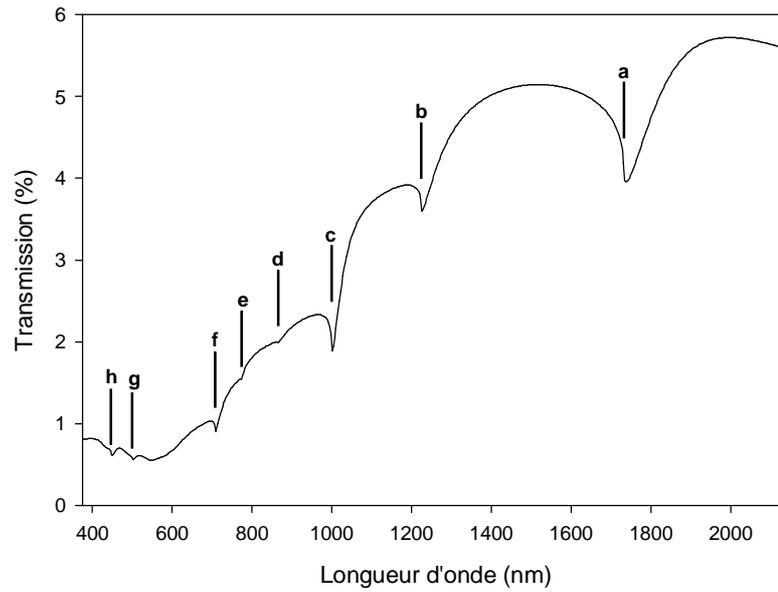


Figure 9.16 : Transmission pour l'ordre zéro de diffraction dans le cas d'un réseau carré (de paramètre de maille  $a = 1\mu m$ ) de trous carrés (de côté égal à  $500 nm$ ) pour un film de chrome de  $100 nm$  d'épaisseur sur un substrat de permittivité  $\varepsilon = 3$ .

On a reporté sur la courbe les positions des différentes longueurs d'ondes de Rayleigh. On constate que l'ensemble de ces longueurs d'onde intervient dans le profil de la courbe de transmission. Nous précisons également que le tracé de cette courbe de transmission pour un parcours de la lumière dans le sens opposé, conduit à une courbe similaire comme dans le cas de la figure 9.5. Ces résultats, similaires à ceux obtenus par A. Krishnan *et al* [F7], tendent à corroborer l'idée qu'il n'y a pas de distinction entre le rôle des ordres liés à la jonction substrat/métal et le rôle des ordres liés à la jonction vide/métal.

Le comportement de la transmission peut alors être considéré comme résultant de la conversion progressive des ordres évanescents en ordres homogènes comme cela est suggéré par les schémas ci-dessus (cf figure 9.15). On peut aussi envisager que les ordres évanescents présentent des résonances géométriques ou encore que ceux-ci sont couplés avec les modes propres de la structure (par exemple les plasmons de surface), et ainsi présentent une réponse résonante. C'est cette dernière interprétation que nous allons

justifier dans le paragraphe 9.3.

## Un test numérique simple

Pour renforcer l'idée selon laquelle la diffraction multiple est impliquée dans les maxima de la transmission, nous avons procédé à un test dans le cas d'un film de chrome auto-supporté dans le vide. Le film présente un réseau carré (paramètre de maille de  $1 \mu m$ ) de trous (diamètre de  $500 nm$ ). Le film a une épaisseur de  $100 nm$ . Dans une première étape, on calcule la transmission de cette structure de la même manière que précédemment (Courbe en tirets de la figure 9.17). Le nombre de minima est diminué du fait de l'absence du substrat. En effet, celui-ci permettait l'existence de longueurs d'ondes de Rayleigh, à la jonction métal/substrat, à des longueurs d'onde différentes de celles de la jonction vide/substrat. La courbe en pointillés donne pour comparaison la transmission en l'absence de trous dans le film. L'idée consiste à supprimer les éventuels contributions des modes non-homogènes aux ordres homogènes. Pour cela, on annule numériquement les coefficients  $\varepsilon_{\vec{g}-\vec{g}'}$  et  $(\frac{1}{\varepsilon})_{\vec{g}-\vec{g}'}$ , dans les équations (5.26) à (5.29) (cf chapitre 5, p. 44) de propagation du champ électromagnétique lorsque  $\vec{g}$  ou  $\vec{g}'$  correspondent respectivement à des ordres de diffraction homogènes et non-homogènes ou réciproquement.

On note que le choix d'un film de chrome dépourvu de substrat correspond alors à une commodité de calcul numérique. Le résultat est la courbe en trait plein où l'on constate une diminution significative de la transmission. Ceci tend à confirmer le rôle des modes de surface dans la hauteur des maxima de transmission, et ce, *via* les processus de diffraction multiple.

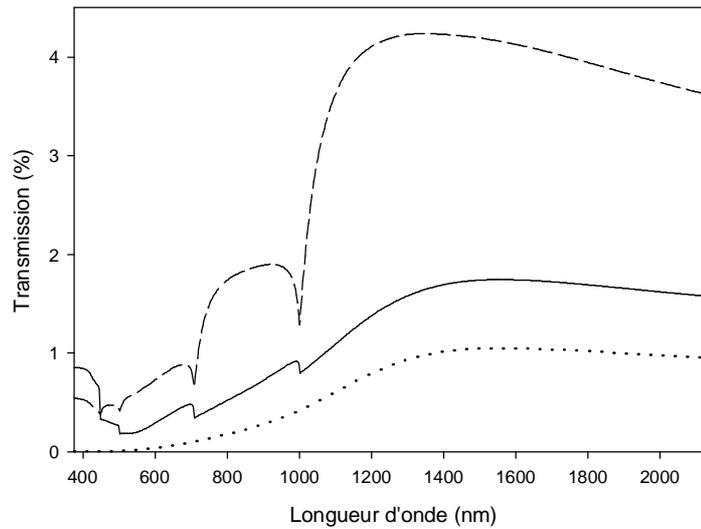


Figure 9.17 : Transmission dans le cas d'un film de chrome auto-supporté dans le vide. Le film présente un réseau carré (paramètre de maille de  $1 \mu m$ ) de trous (diamètre de  $500 nm$ ). Le film a une épaisseur de  $100 nm$ . Courbe en tirets : cas réel sans approximations. Courbe en pointillés : transmission en l'absence de trous dans le film. Courbe en trait plein : transmission calculée en supprimant les ordres non-homogènes.

Ainsi, les transmissions observées seraient dues à des effets optiques liés à la redistribution de l'énergie contenue dans les modes évanescents, la position des pics étant liée aux positions des minima correspondants aux longueurs d'onde Rayleigh. Le paramètre du réseau et la permittivité du substrat déterminent alors seuls la position de ces pics.

## Influence de la forme des trous

Un point susceptible de nous renseigner sur les effets de la diffraction multiple est le rôle de la forme des trous. En effet, si on compare les transformées de Fourier d'un trou rond et d'un trou carré (ci-dessous),

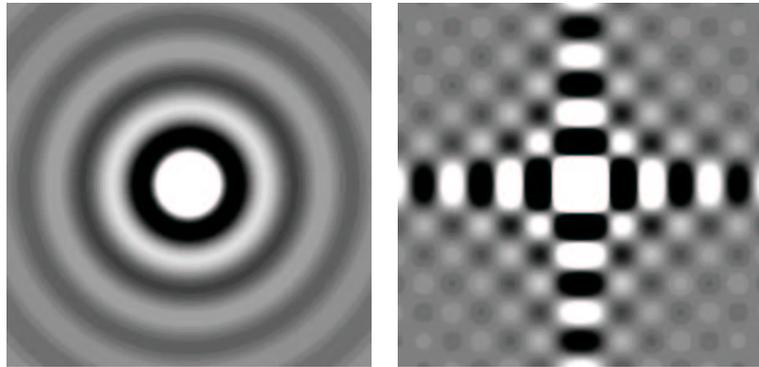


Figure 9.18 : Transformées de Fourier des profils de la section de trous ronds (à droite) et carrés (à gauche).

on constate des différences qui induisent une répartition différente de l'intensité des ordres de diffraction. En effet, comme nous l'avons expliqué au chapitre 2 (p. 26), la transformée de Fourier du motif de la maille élémentaire du réseau nous indique la répartition en intensité des différents ordres de diffraction. Le comportement des courbes de réflexion et de transmission est lié aux ordres de diffraction non-homogènes, *via* la diffraction multiple. On peut alors s'attendre à voir le profil des courbes modifié par le changement de la géométrie des trous. En effet, les intensités des ordres de diffraction varient selon la géométrie des trous, les contributions des ordres de diffraction non-homogènes à l'ordre zéro de diffraction varient également en conséquence. Ainsi, l'ordre zéro de diffraction doit être influencé par la géométrie des trous. Si on modifie la forme des trous, on modifie aussi la répartition des intensités des ordres mais pas leur comportement caractéristique lié aux longueurs d'onde de Rayleigh. Il faut donc s'attendre à observer des courbes présentant une succession de minima tous localisés aux mêmes valeurs de longueur d'onde, quelle que soit la forme des trous. Bien entendu, ceci suppose qu'un nouveau profil des trous ne conduit pas, par exemple, à l'annulation de l'intensité de un ou plusieurs ordres,

quelle que soit la longueur d'onde. Dans ce cas, les pertes majeures des contributions à l'ordre zéro de diffraction conduisent à un changement important du profil de la courbe de transmission. On montre théoriquement que l'annulation forcée de certains ordres de diffraction, par exemple  $(0, \pm 1)$ , conduit à une courbe de transmission dont le profil est proche de la courbe de transmission en l'absence de trous. En dehors de tels cas, les régions convexes, localisées entre les minima, étant dépendantes des intensités des ordres de diffraction non-homogènes, on constate une déformation de la forme de celles-ci comme nous l'illustrons par la courbe de transmission d'un réseau carré (de paramètre de maille  $a = 1\mu m$ ) de trous carrés (de côté égal à  $500\text{ nm}$ ) (Figure (9.19) ci après).

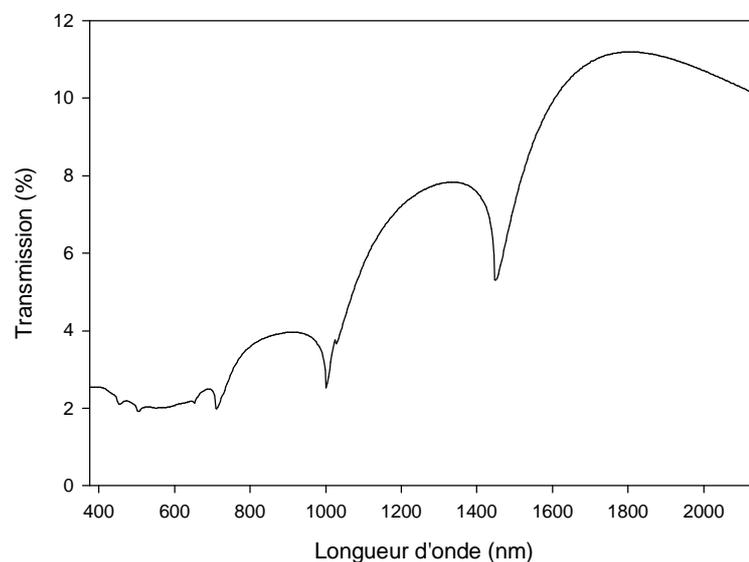


Figure 9.19 : Transmission pour l'ordre zéro de diffraction dans le cas d'un réseau carré (de paramètre de maille  $a = 1\mu m$ ) de trous carrés (de côté égal à  $500\text{ nm}$ ) pour un film de chrome de  $100\text{ nm}$  d'épaisseur.

On observe bien une courbe similaire à la courbe pleine de la figure (9.4a) correspondant au cas des trous ronds. Toutefois, on vérifie que le profil des régions convexes est déformé par rapport au cas des trous ronds, décalant légèrement la position des maxima. Ce résultat illustre le rôle de la diffraction multiple dans le gain obtenu pour l'intensité de l'ordre zéro de diffraction. De plus, cela nous permet de justifier le fait que le profil

des courbes obtenu par simulation ne coïncide pas avec celui obtenu expérimentalement. Dans notre modèle, les trous sont parfaitement cylindriques. Il est probable que les structures étudiées expérimentalement ne présentent pas des trous parfaitement cylindriques et qu'ainsi, les intensités des différents ordres de diffraction soient modifiées par rapport au cas parfait. Dès lors, il est naturel d'observer des profils théoriques "déformés" par rapport au cas expérimental. Ceci est d'autant plus vrai que l'ensemble des trous ne doit pas présenter une répartition de formes quasi-cylindriques homogènes, ce qui complique encore le problème. De plus, on ne tient pas compte dans nos simulations d'un éventuel effet lié à la fonction d'appareil dans l'enregistrement des mesures.

Une question se pose néanmoins. Si un mode non-homogène peut être diffracté pour donner une contribution, par exemple, à l'ordre zéro homogène, pourquoi les longueurs d'onde de Rayleigh sont associées à des minima de transmission à l'ordre zéro ?

En effet, à l'instant précis où un ordre devient non-homogène, on peut s'attendre à voir la transmission augmenter brutalement par paliers. A l'inverse, lorsqu'on observe une augmentation de la transmission, celle-ci est précédée d'un minimum correspondant à une longueur d'onde de Rayleigh.

Dans la mesure où l'on voit apparaître le rôle des anomalies de Wood au travers des longueurs d'onde de Rayleigh, il est naturel de se demander à quel type d'anomalies de Wood on a affaire.

En réalité, comme nous allons le montrer, les longueurs d'onde de Rayleigh ne correspondent pas explicitement aux minima des courbes de transmission, ni même aux maxima des courbes de réflexion. Elles correspondent à des discontinuités en réflexion et en transmission du fait de la transition brutale liée au passage d'un ordre donné de l'état homogène à l'état non-homogène. Le comportement présenté par les courbes de réflexion et de transmission mérite alors une analyse approfondie afin de montrer le rôle des résonances associées aux modes propres de la structure optique étudiée.

## 9.3 Etude des résonances et des modes propres du système

En raison de la manifestation des longueurs d'ondes de Rayleigh dans les résultats expérimentaux ainsi que dans nos résultats théoriques, on s'attend à ce que les anomalies de Wood jouent un rôle important. Comme nous l'avons expliqué au chapitre 3, les anomalies de Wood peuvent être associées à des résonances des modes propres des structures optiques [C5,6,15,20]. Les modes propres du système étant *a priori* des modes non propagatifs (en dehors du système), les résonances de ceux-ci peuvent être mises en évidence en observant le comportement des différents ordres de diffraction en fonction de la longueur d'onde lorsque les ordres sont non-homogènes.

Pour comprendre en détails ces phénomènes, nous avons étudié spécifiquement le comportement d'ordres de diffraction particuliers. Le champ incident est polarisé rectilignement selon l'axe  $Ox$ .

Sur la figure (9.20), la courbe (a) correspond au module du champ électromagnétique de l'ordre  $(\pm 1, 0)$  à l'interface substrat/métal en fonction de la longueur d'onde. Idem pour la courbe (b) mais pour l'interface vide/métal. La courbe (c) correspond à l'ordre zéro en réflexion.

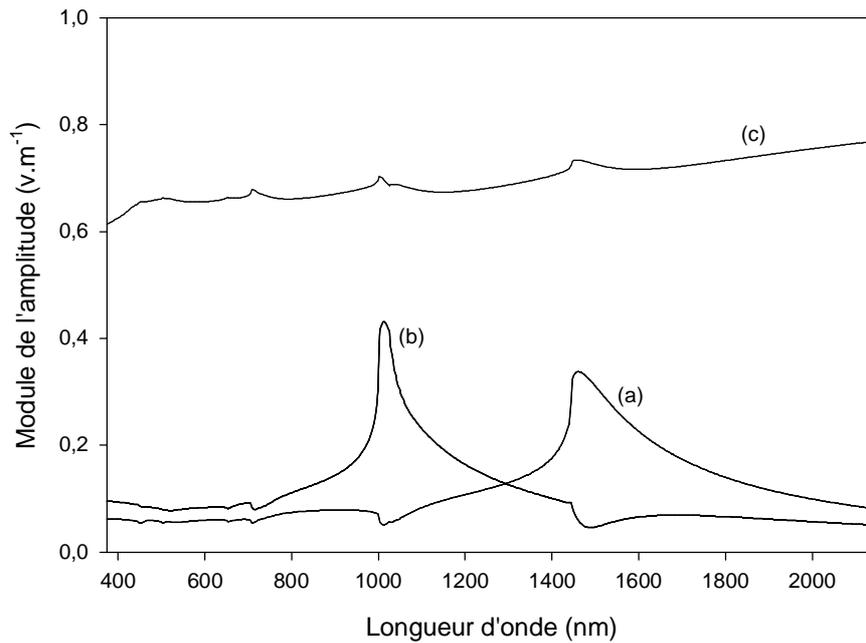


Figure 9.20 : la courbe (a) montre le module du champ électromagnétique de l'ordre  $(\pm 1, 0)$  à l'interface substrat/métal en fonction de la longueur d'onde. La courbe (b), idem mais pour l'interface vide/métal. La courbe (c) montre l'ordre zéro en réflexion.

On note la présence de pics localisés dans les courbes (a) et (b). Les simulations permettent de vérifier que les ordres  $(\pm 1, 0)$  sont de polarisation  $p$  uniquement (cf chapitre 2 p. 25). On vérifie que si le champ incident est polarisé rectilignement selon l'axe  $Oy$ , se sont les ordres  $(0, \pm 1)$  qui occupent le rôle des ordres  $(\pm 1, 0)$  (cf chapitre 2 p. 25). Sur la figure (9.21), les courbes (a) et (b) correspondent au module du champ pour la composante de polarisation  $p$  des ordres  $(\pm 1, \pm 1)$  et  $(\pm 1, \mp 1)$ , respectivement pour les interfaces substrat/métal et vide/métal.

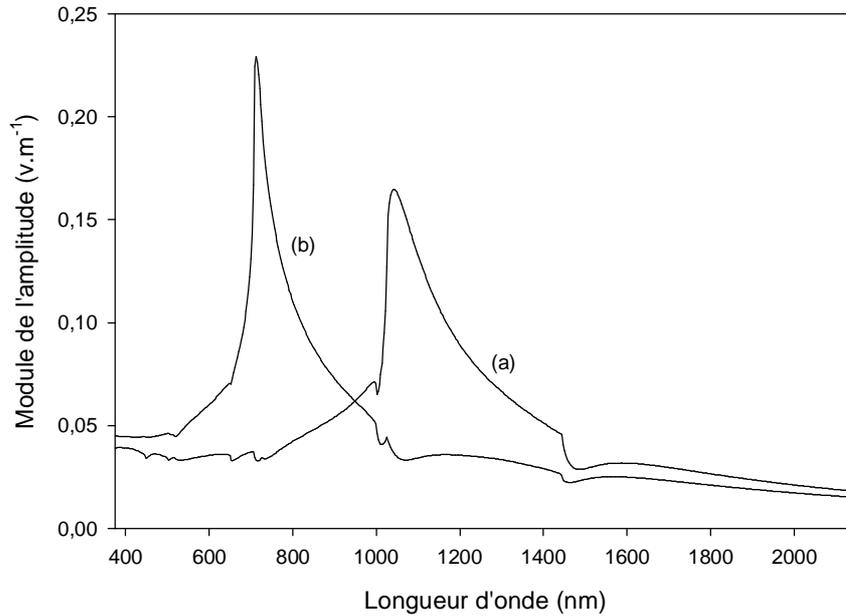


Figure 9.21 : Les courbes (a) et (b) correspondent au module du champ pour la composante de polarisation  $p$  des ordres  $(\pm 1, \pm 1)$  et  $(\pm 1, \mp 1)$ , respectivement pour les interfaces substrat/métal et vide/métal.

On observe comme pour la figure (9.20) des pics localisés. Ces pics semblent correspondre à la position des minima de la courbe de transmission. De plus, comme ces pics sont associés à une polarisation  $p$ , on peut supposer qu'ils correspondent aux résonances de la structure [C5,6,15,20]. Pour confirmer cette hypothèse, on cherche à étudier les pôles de la matrice  $S$  associée au système optique. En effet, nous avons expliqué au paragraphe 2 du chapitre 7 comment relier les processus résonants aux pôles de la matrice de diffraction  $S$ .

Sur la figure (9.22), on a représenté la position des pôles de la matrice  $S$ , déterminés numériquement dans le plan complexe. Ceux-ci sont représentés par les cercles noirs. Les triangles correspondent aux pôles extrapolés à partir des pics des figures (9.20) et (9.21) (cf chapitre 7). On constate un très bon accord entre les pôles calculés et extrapolés, ce qui effectivement confirme que les pics que observés correspondent bien à des résonances.

On note que l'écart au niveau du pôle noté (4) provient de l'asymétrie de la courbe de résonance dont l'approximation par une lorentzienne est insuffisante dans ce cas.

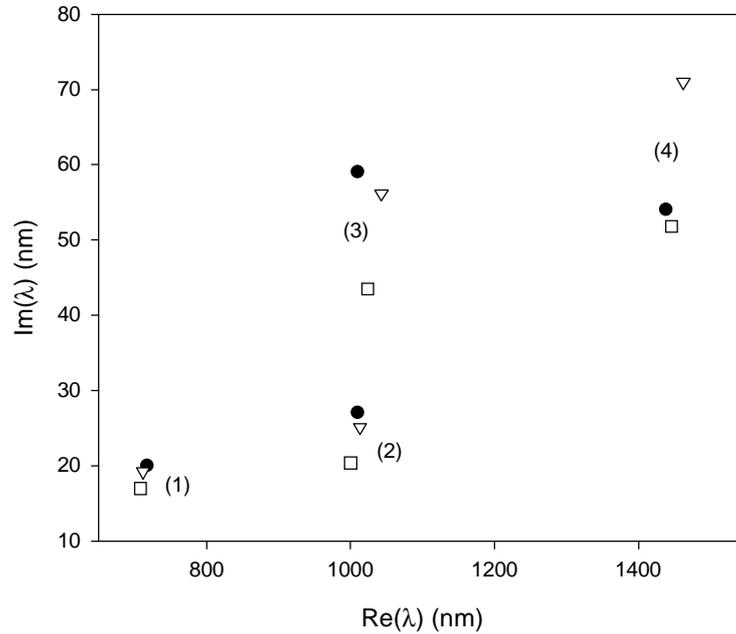


Figure 9.22 : Représentation dans le plan complexe de pôles de la matrice S (cercles noirs) associés à chacune des résonances pré-sitées. Les repères de (1) à (4) indiquent la correspondance avec les ordres de diffraction, associés aux longueurs d'onde de Rayleigh, notées précédemment de la même manière.

Les triangles correspondent aux pôles extrapolés à partir des courbes de résonance. Les carrés sont explicités plus loin dans notre étude.

Ainsi, les ordres de diffraction de polarisation  $p$  que nous venons d'étudier présentent un comportement résonant. C'est ce même type de comportement qui a été observé par A. Hessel et A.A. Oliner [C6], lesquels ont nommé de tels ordres de diffraction "resonant spectral order".

La figure (9.23) montre le comportement du module de l'amplitude des ordres  $(0, \pm 1)$  respectivement pour l'interface vide/métal (courbe (a)) et substrat/métal (courbe (b)) en fonction de la longueur d'onde. La courbe (c) correspond à l'ordre zéro en transmission.

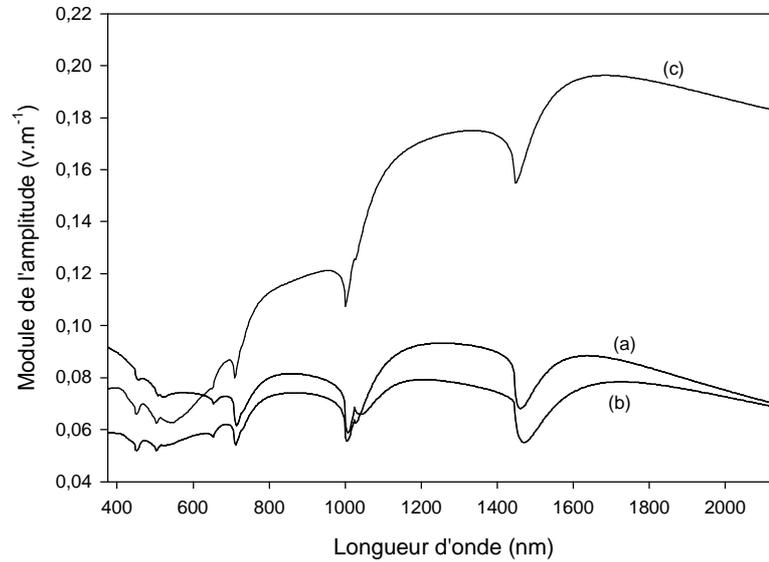


Figure 9.23 : Module de l'amplitude des ordres  $(0, \pm 1)$  pour l'interface vide/métal (courbe (a)) et substrat/métal (courbe (b)) en fonction de la longueur d'onde. La courbe (c) correspond à l'ordre zéro en transmission.

On note que ces ordres n'existent que pour la polarisation  $s$  (cf chapitre 2 p.25). Dans ce cas on vérifie que si le champ incident est polarisé rectilignement selon l'axe  $Oy$ , se sont les ordres  $(\pm 1, 0)$  qui occupent le rôle des ordres  $(0, \pm 1)$  (cf chapitre 2 p. 25). La figure (9.24) représente le comportement des ordres  $(\pm 1, \pm 1)$  et  $(\pm 1, \mp 1)$  pour leur composante de polarisation  $s$ .

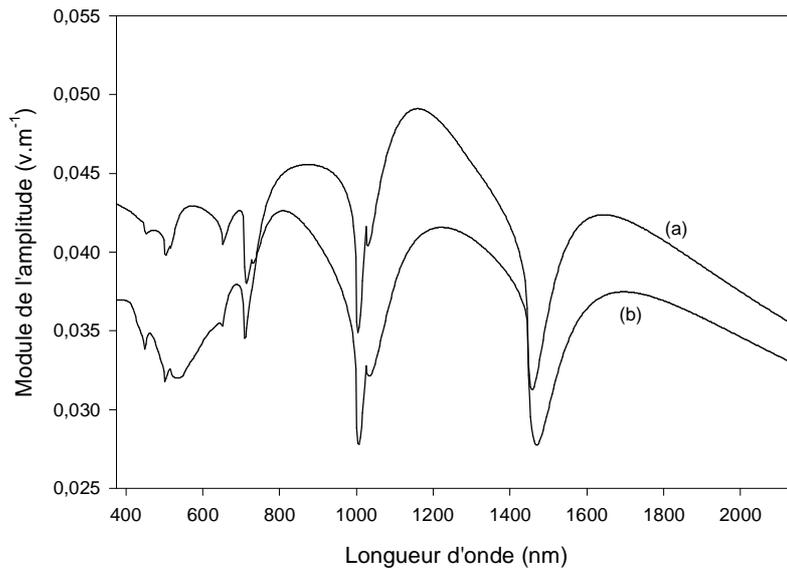


Figure 9.24 : Module de l'amplitude des ordres  $(\pm 1, \pm 1)$  et  $(\pm 1, \mp 1)$ , pour l'interface vide/métal (courbe (a)) et substrat/métal (courbe (b)) en fonction de la longueur d'onde.

On remarque ainsi que les minima des courbes sont corrélés avec les pics des résonances. De plus, les ordres de diffraction de polarisation  $s$  ne présentent pas de caractère résonant. Si on compare les figures, il semble que le comportement des ordres de polarisation  $s$  est guidé par celui des ordres de polarisation  $p$ . De ce point de vue, les minima des courbes de transmission correspondent aux résonances que nous venons de mettre en évidence. La forme des parties convexes de la transmission peut être alors interprétée en fonction du profil des ordres de polarisation  $p$ . On note enfin que les courbes résonantes (cf figures 9.20 et 9.21) n'ont pas un profil parfaitement symétrique, comme par exemple celui d'une simple lorentzienne. On observe des irrégularités plus ou moins importantes et relativement localisées dues au couplage entre les ordres de diffraction.

Pour affiner l'interprétation des courbes obtenues, nous allons chercher à reproduire celles-ci avec une résolution plus fine. Sur la figure suivante, nous avons représenté l'ensemble des trois courbes (transmission, réflexion et résonance) sur un domaine de longueur d'onde plus restreint compris entre  $1300 \text{ nm}$  et  $1900 \text{ nm}$ . La seule longueur d'onde de Rayleigh dans ce domaine est celle associée à l'ordre de diffraction résonant  $(\pm 1, 0)$  pour

la jonction métal/substrat. Aussi, c'est précisément l'amplitude de cet ordre résonant que nous avons représentée ici. Nous avons également indiqué la position de la longueur d'onde de Rayleigh correspondante ainsi que celle du maximum de résonance. On nomme (a) le maximum de la transmission et (b) le minimum de la réflexion.

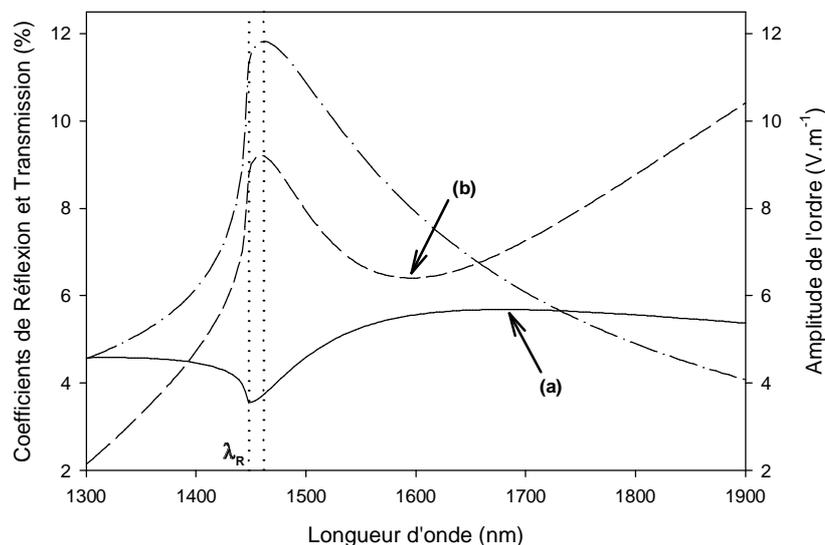


Figure 9.25a : Cas d'un film de chrome d'une épaisseur de 100 nm, présentant un réseau carré de paramètre égal à  $1 \mu m$ , constitué de trous d'un diamètre de 500 nm. Transmission à l'ordre zéro (—), réflexion à l'ordre zéro (- - -) et résonance associée à l'ordre  $(\pm 1, 0)$  pour la jonction métal/substrat (-.-.-), pour un domaine de longueur d'onde compris entre 1300 nm et 1900 nm. La position de la longueur d'onde de Rayleigh  $\lambda_R$  et la position du maximum de résonance sont représentées comme référence.

On peut déjà remarquer que le maximum de résonance ne coïncide pas strictement avec le maximum de réflexion et le minimum de transmission. De même, on s'aperçoit que le maximum de réflexion ne coïncide pas tout à fait avec le minimum de transmission. En revanche la longueur d'onde de Rayleigh  $\lambda_R$  semble bien correspondre avec le minimum de transmission. Nous remarquons que l'ordre de diffraction résonant est homogène pour des longueurs d'onde inférieures à la longueur d'onde de Rayleigh. Pour cette raison, le pic de résonance ne peut pas être observé pour des longueurs d'onde inférieures aux

longueurs d'ondes de Rayleigh. Ainsi, si on envisage d'éloigner la position de la résonance de la valeur de la longueur d'onde de Rayleigh, on ne peut le faire *a priori* que dans le sens des longueurs d'ondes croissantes. Dans le cas contraire, la position du pic de résonance tend asymptotiquement vers la valeur de Rayleigh.

Sur la figure suivante, nous avons représenté les mêmes grandeurs que précédemment pour les mêmes paramètres physiques, à l'exception de la valeur de la permittivité du film métallique ici égale à  $-25 + i1$ . En choisissant cette valeur de la permittivité du métal, nous sélectionnons un pic de résonance plus éloigné de la longueur d'onde de Rayleigh que dans le cas précédent. Comme précédemment, (a) est le maximum de la transmission et (b) le minimum de la réflexion. On nomme alors (c) le minimum de la transmission, et (d) le maximum de la réflexion.

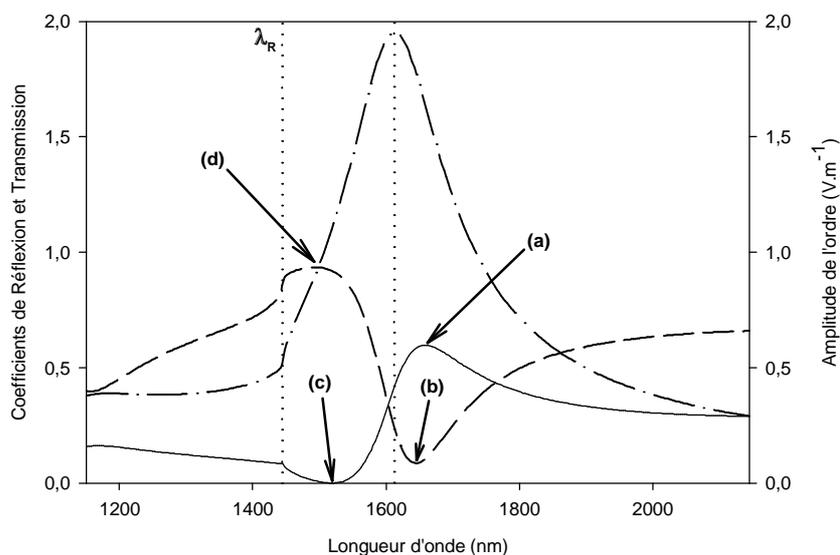


Figure 9.25b : Idem que pour la figure 9.25a, mais le chrome a été substitué par un milieu de permittivité fictive  $\varepsilon = -25 + i1$ .

Cette fois-ci, on constate de façon claire l'absence de coïncidence entre le pic de résonance et les minima et maxima de réflexion et de transmission. Contrairement à ce qui est généralement supposé [F2-6,8,11,14,15,17,18], on voit que les anomalies de Wood liées aux longueurs d'onde de Rayleigh ne sont pas la cause des minima de transmission.

Elles correspondent alors à une simple discontinuité pour chacune des trois courbes. En revanche, il est particulièrement important de noter que les profils de la transmission et de la réflexion correspondent à des profils de Fano tels que nous les avons introduits au paragraphe 3 du chapitre 7. On peut alors interpréter le comportement de ces courbes en terme d'anomalies de Wood résonantes au sens où elles ont été étudiées par V. U. Fano [C5] puis par A. Hessel et A.A. Oliner [C6]. Nous renvoyons le lecteur au chapitre 3 sur les anomalies de Wood et au chapitre 7 sur l'étude des pôles et des zéros de la matrice  $S$ .

Pour comprendre les mécanismes physiques responsables des comportements observés sur les figures (9.25a) et (9.25b), le schéma suivant représente les processus mis en jeu.

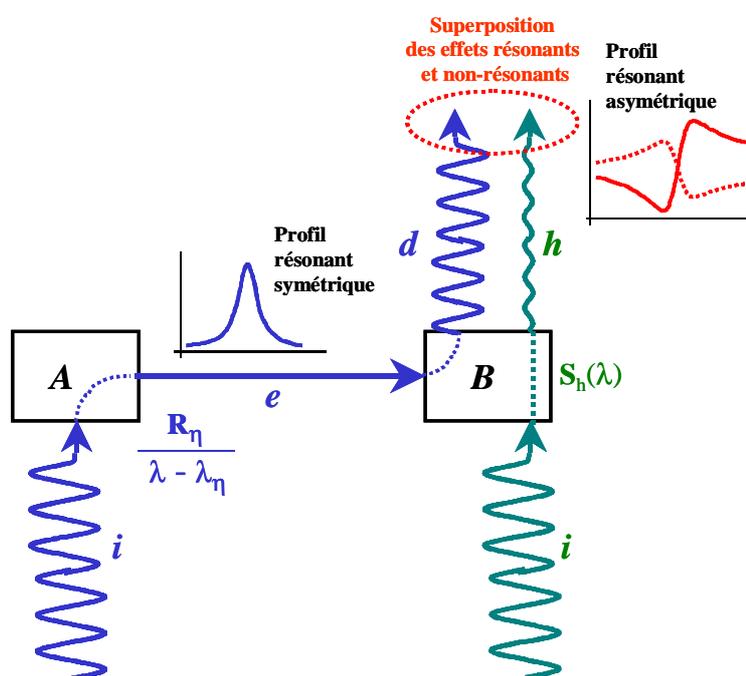


Figure 9.26 : Schémas résumant les processus responsables des profils observés.

Nous rappelons que la matrice  $S$ , qui décrit les processus de diffraction, s'écrit en fonction de la longueur d'onde comme la somme de deux contributions. L'une résonante contenant des termes de la forme  $\frac{R_\eta}{\lambda - \lambda_\eta}$  associés aux modes propres de la structure, l'autre purement non-résonante donnée par  $S_h(\lambda)$  qui est une fonction holomorphe.

Sur le schéma (9.26), les rectangles A et B représentent des éléments diffractants (e.g. des trous). Ainsi, une onde homogène incidente  $i$  diffracte en A et génère entre autres

un ordre de diffraction  $e$  non-homogène (en bleu) (cf figure 9.14 p 106). On suppose que cet ordre est couplé avec un mode de surface donné et caractérisé par une longueur d'onde complexe  $\lambda_\eta$ . Il devient alors possible d'exciter ce mode propre ce qui entraîne une réaction en retour sur l'ordre  $e$ . Ce processus est lié au terme résonant  $\frac{R_\eta}{\lambda - \lambda_\eta}$ . Dans des conditions appropriées, il est possible d'obtenir un couplage résonant entre  $e$  et le mode propre associé à  $\lambda_\eta$  comme pour une résonance dans le cas d'un oscillateur forcé. D'une manière générale, l'ordre de diffraction  $e$  peut diffracter en B en générant, entre autres, un ordre de diffraction homogène, en l'occurrence ici l'ordre zéro de diffraction (cf figure 9.15 p 107). Si la valeur de la longueur d'onde incidente est telle que l'on excite un mode propre, on peut idéalement s'attendre à observer un profil résonant, de type lorentzien, pour l'ordre zéro homogène  $d$  qui apparaît en B. Comme nous l'avons expliqué au chapitre 7, il est nécessaire de tenir compte des effets de diffraction non résonants liés au terme holomorphe  $S_h(\lambda)$ . Ainsi, l'onde incidente  $i$ , ici représentée diffractant en B, génère une onde homogène  $h$  à l'ordre zéro (en vert). On doit alors tenir compte de la superposition des deux contributions, résonante et non-résonante, à l'ordre zéro (cf chapitre 7). Il apparaît des profils qui sont typiquement les profils de Fano caractéristiques d'un processus résonant où l'on tient compte des effets non-résonants (en rouge sur la figure)(cf chapitre 7 et [C5,6,31]). Il faut noter qu'un maximum en transmission ne coïncide donc pas nécessairement avec le maximum de résonance d'un ordre de diffraction donné. C'est précisément le processus observé sur la figure (9.26) où la résonance est associée à l'ordre diffracté  $e$ . Quant aux profils de Fano de la réflexion et de la transmission, ils proviennent de la superposition des effets résonants et non-résonants.

Si l'on se reporte à la figure (9.25a), correspondant au cas concret du chrome, la résonance est plus proche de la longueur d'onde de Rayleigh que dans le cas de la figure (9.25b). Par conséquent, les profils asymétriques "de type Fano" se déplacent de la même façon. Dans le cas de la transmission, le minimum noté (c) dans la figure (9.25b) disparaît au passage de la longueur d'onde de Rayleigh dans la figure (9.25a). Le maximum (a) de la transmission quant à lui se déplace vers de plus grandes longueurs d'onde et le

profil de la courbe tend à s'étaler. Pour la réflexion, le profil tend également à s'étaler avec un déplacement du minimum (b) vers les grandes longueurs d'onde. En revanche, le maximum (noté (d) dans la figure (9.25b)) reste localisé juste après la longueur d'onde de Rayleigh.

On peut à la lumière de ces explications, préciser la lecture de la figure (9.17). En supprimant les ordres non-homogènes, on empêche la diffraction multiple et donc l'apparition d'un profil résonant dans la courbe de transmission. Cela revient à supprimer les termes de la forme  $\frac{R_n}{\lambda - \lambda_n}$ . Il ne reste alors plus que les termes non résonants liés à  $S_h(\lambda)$  et les discontinuités imputables aux anomalies de Wood liées aux longueurs d'ondes de Rayleigh.

Par ailleurs, p 95, nous avons précisé que les minima des courbes de transmission semblaient correspondre aux longueurs d'ondes de Rayleigh associées à différents ordres de diffraction. Nous venons de voir que cela n'était pas tout à fait le cas. Cependant, ces minima, *via* les anomalies de Wood résonantes, correspondent aux ordres de diffraction résonants dont la longueur d'onde de Rayleigh est voisine de la longueur d'onde de résonance de ces ordres. Si on considère les ordres  $(\pm 1, 0)$  ceux-ci présentent la même longueur d'onde de Rayleigh que les ordres  $(0, \pm 1)$ . Toutefois, compte-tenu de la polarisation incidente utilisée, les ordres  $(\pm 1, 0)$  sont de polarisation  $p$  et résonants alors que les ordres  $(0, \pm 1)$  sont de polarisation  $s$  et non résonants. Ainsi, si on regarde le problème du point de vue de la diffraction multiple telle que nous venons de la décrire, seul les ordres de polarisation  $p$  semblent jouer un rôle majeur. Ce qui signifie alors que nous devrions, dans la première approche de la diffraction multiple décrite p 100 à 113, exclure les ordres de diffraction non résonants, par exemple les ordres  $(0, \pm 1)$ , pour ne garder que les ordres résonants, par exemple les ordres  $(\pm 1, 0)$ , de même longueur d'onde de Rayleigh.

L'interprétation généralement faite des effets auxquels nous nous intéressons ici tend à considérer que les résonances sont localisées au niveau des maxima de transmission. Notre étude tend à nuancer cette hypothèse. Elle soulève l'idée selon laquelle les résul-

tats expérimentaux que nous avons simulé numériquement sont entièrement descriptibles en terme d'anomalies de Wood. En effet, comme l'on montré V.U. Fano [C5], A. Hessel et A.A. Oliner [C6], pour des réseaux unidimensionnels, certaines des anomalies de Wood peuvent être traitées en termes d'excitation des modes propres d'une structure optique. Ils ont montré, comme nous venons de le faire, que l'on pouvait alors aboutir à des comportements asymétriques pour l'évolution des intensités des ordres homogènes de diffraction en fonction de la longueur d'onde. On peut donc conclure que les résultats des expériences réalisées par T.W. Ebbesen, T. Thio *et al* relèvent de l'observation d'anomalies de Wood.

## 9.4 Analyse de la nature des modes propres du système

Nous avons mis en évidence l'existence de modes propres dont les résonances permettent d'expliquer le profil des courbes de réflexion et de transmission obtenues par simulations numériques et expérimentalement. On peut alors légitimement se demander quelle est la nature de ces modes propres, i.e. quelle est leur origine physique ? Une interprétation qui rejoint les études réalisés par T.W. Ebbesen *et al*, ainsi que par d'autres auteurs [F2-8,11,14,16-18] consiste à considérer ces modes propres comme étant des plasmons de surface. Nous allons discuter ici cette hypothèse.

Il est intéressant d'étudier la manière dont les pôles mis en évidence, peuvent être reliés aux pôles calculés directement à partir des relations de dispersion des plasmons pour une couche plane [F2-7,11,14,16-18,D5].

En effet, dans le cadre d'un modèle de réseau vide, la longueur d'onde des plasmons de surface est donnée par

$$\lambda = \frac{2\pi}{g} \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_m}{\varepsilon + \varepsilon_m}} \quad (9.9)$$

avec  $\varepsilon$  et  $\varepsilon_m$  respectivement la permittivité du milieu diélectrique et du métal, et

$$g = \frac{2\pi}{a} \sqrt{i^2 + j^2} \quad (9.10)$$

le module d'un vecteur du réseau réciproque. La permittivité  $\varepsilon_m$  du métal étant complexe on peut poser

$$\varepsilon_m = \varepsilon' + i\varepsilon'' \quad (9.11)$$

et donc avec  $|\varepsilon_m|^2 = \varepsilon'^2 + \varepsilon''^2$ , on obtient une longueur d'onde complexe dont on peut définir la partie réelle, qui donne la position des pôles en fonction des permittivités

$$\text{Re}(\lambda) = \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{i^2 + j^2}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_1 + \varepsilon')^2 + \varepsilon''^2}} \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon' + |\varepsilon_m|^2 + |\varepsilon_m| \sqrt{(\varepsilon_1 + \varepsilon')^2 + \varepsilon''^2}} \quad (9.12)$$

et une partie imaginaire, qui donne la durée de vie des modes

$$\text{Im}(\lambda) = \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{i^2 + j^2}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_1 + \varepsilon')^2 + \varepsilon''^2}} \sqrt{-(\varepsilon_1 \varepsilon' + |\varepsilon_m|^2) + |\varepsilon_m| \sqrt{(\varepsilon_1 + \varepsilon')^2 + \varepsilon''^2}} \quad (9.13)$$

A partir de ces relations (9.12) et (9.13), nous avons positionné ces pôles sur le graphique (9.22) (représentés par des carrés). On constate que l'on observe un accord assez remarquable par rapport aux pôles de la matrice  $S$ .

Au vu de cette comparaison, on peut se demander si la relation de dispersion des plasmons de surface (associée à l'expression (9.9)) permet de calculer la position des pôles et donc des résonances de la structure étudiée. Si tel est le cas, nous disposerions alors d'une méthode qui nous indique l'évolution des résonances en fonction des variations de la permittivité du film métallique.

Ainsi, les équations (9.12) et (9.13) constituent des équations paramétriques permettant de tracer la position de  $\lambda = \text{Re}(\lambda) + i \text{Im}(\lambda)$  dans le plan complexe en fonction de  $\varepsilon'$  et  $\varepsilon''$  (parties réelle et imaginaire de la permittivité de la couche métallique). Ainsi, on peut estimer la trajectoire des pôles de résonances dans le plan complexe en fonction des

variations de la permittivité ce qui conduit au tracé suivant pour l'ordre  $(\pm 1, 0)$  pour la jonction métal/verre.

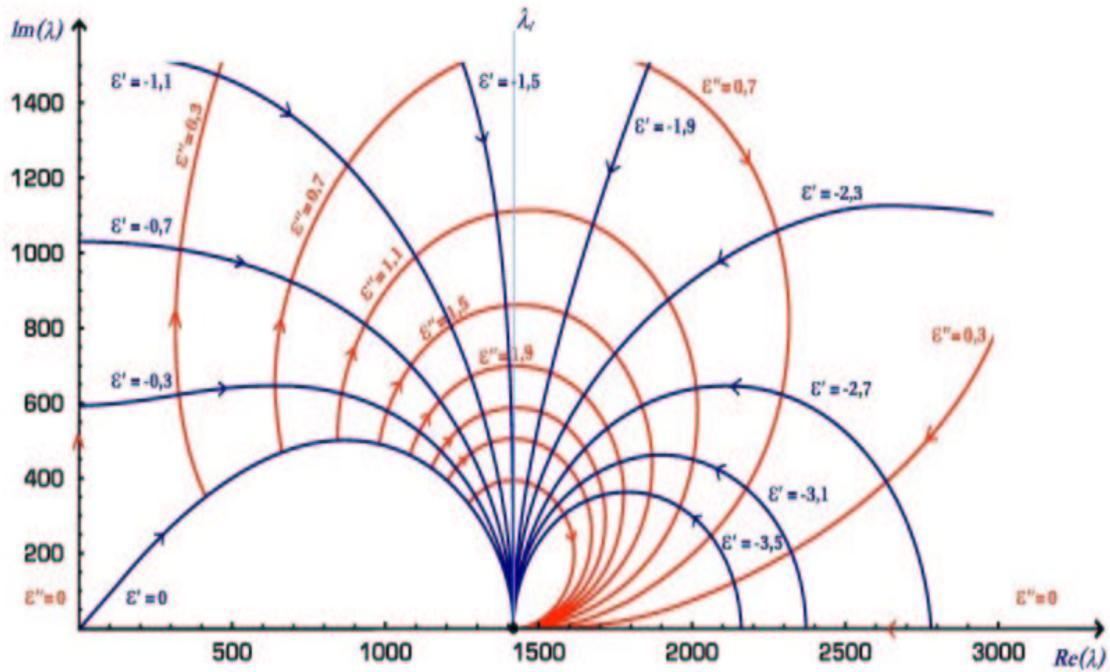


Figure 9.27 : Tracé de la trajectoire du pôle de la résonance plasmon associée à l'ordre  $(\pm 1, 0)$  pour la jonction métal/quartz en fonction de la permittivité du métal (d'après les relations (9.12) et (9.13)). Le trait bleu ciel vertical correspond à la longueur d'onde de Rayleigh associé à l'ordre considéré.

Cependant, comme on le constate sur la figure (9.27), les pôles se déplacent dans l'intégralité du quart de plan complexe représenté. On a de plus spécifié la position de la longueur d'onde de Rayleigh au delà de laquelle les modes sont non-homogènes. Par définition, un mode propre d'un réseau est captif de celui-ci, i.e. qu'il est confiné dans la structure du réseau, et donc doit correspondre à une onde non-homogène. Une contradiction apparaît puisque nous avons vu qu'il n'y a pas de pôles dans la région correspondant à une partie réelle inférieure à la longueur d'onde de Rayleigh. En effet, les trajectoires correctes des pôles doivent être déformées de manière telle qu'elles ne se situent pas en dessous de cette droite limite. Dans la figure suivante, on a représenté deux trajectoires des pôles obtenues à partir des équations (9.12) et (9.13) pour les comparer aux trajectoires des pôles simulées numériquement à partir des résonances.

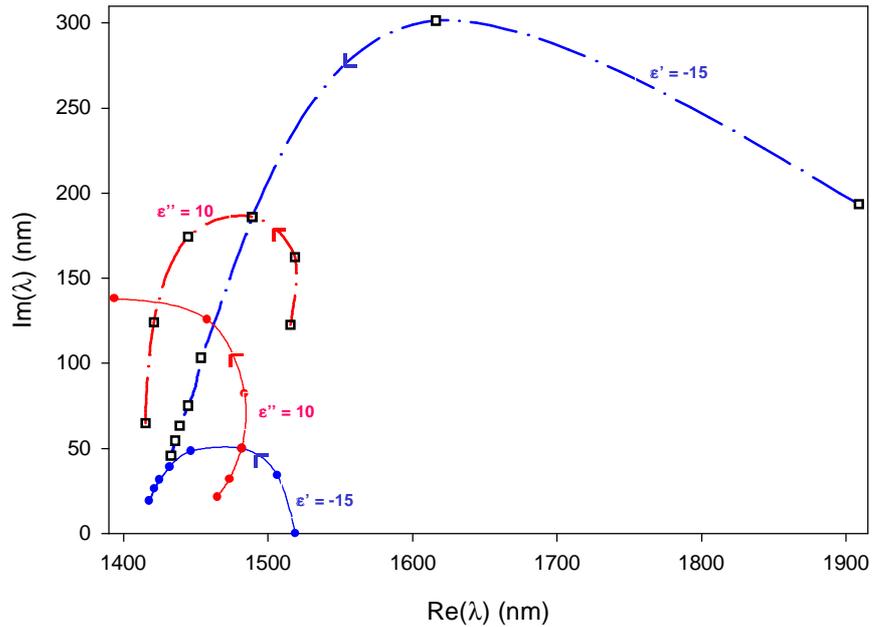


Figure 9.28 : Comparaison entre la trajectoire du pôle de la résonance plasmon associée à l'ordre  $(\pm 1, 0)$  estimée à partir des équations (9.12) et (9.13) (courbes en trait plein avec cercles) et un calcul numérique (courbes en tirets-pointillés avec carrés), pour la jonction métal/quartz en fonction de la permittivité du métal. Les points des trajectoires à  $\varepsilon'$  constant correspondent à des valeurs de  $\varepsilon''$  égales à : 0, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 70 dans le sens de la flèche. Les points des trajectoires à  $\varepsilon''$  constant correspondent à des valeurs de  $\varepsilon'$  égales à : -25, -20, -15, -10, -5, 0 dans le sens de la flèche.

On vérifie alors numériquement que les trajectoires des pôles doivent effectivement être déformées. On peut donc légitimement supposer que les modes propres de la structure correspondent aux plasmons de surface de ce système. Dans ce cadre, on détermine les relations de dispersion associées aux modes de surface à partir de l'évolution des résonances en fonction de la composante parallèle du vecteur d'onde incident. On obtient alors les relations représentées sur la figure suivante. Elles ont été tracées pour un parcours donné dans la première zone de Brillouin du réseau réciproque associé au réseau réel carré de paramètre  $1 \mu m$ . Le système étudié correspond au cas du film de chrome d'une épaisseur de  $100 \text{ nm}$  et percé de trous d'un diamètre de  $500 \text{ nm}$ .

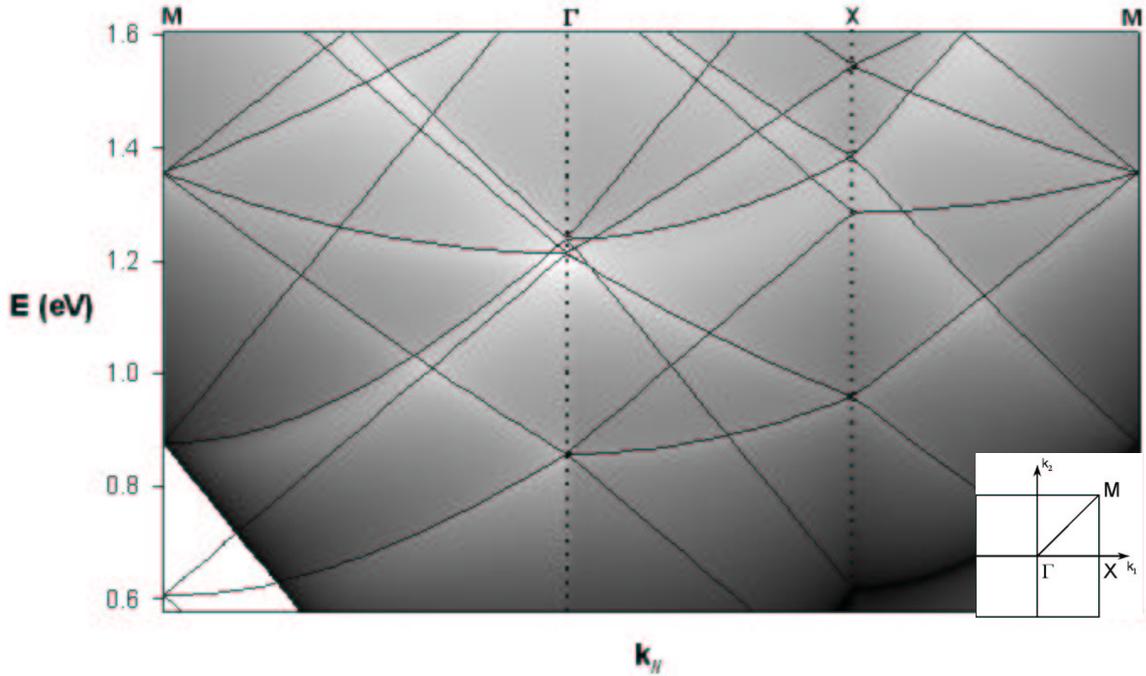


Figure 9.29 : Relations de dispersions des plasmons, tracées selon un parcours  $M \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow M$  dans la première zone de Brillouin du réseau réciproque associé au réseau réel carré de paramètre  $1 \mu m$ . Le système étudié correspond au cas d'un film de chrome d'une épaisseur de  $100 nm$  et percé de trous d'un diamètre de  $500 nm$ .

Les bandes claires de la figure correspondent aux trajectoires des maxima des pics de résonances des modes de diffraction résonants. Elles s'identifient aux relations de dispersion des modes propres de la structure assimilés aux plasmons de surface. Les lignes noires en surimpression des lignes claires sont les relations de dispersion extrapolées à partir de la relation suivante qui généralise l'expression (4.8) introduite au chapitre 4,

$$\frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_m}{\varepsilon + \varepsilon_m}} = |\vec{k}_{ps}| = |\vec{k}_{//} + \vec{g}| \quad (9.14)$$

où  $\varepsilon$  est la permittivité tantôt du substrat, tantôt du vide, et  $\varepsilon_m$  la permittivité du métal.  $\vec{k}_{ps}$  est le vecteur d'onde associé aux plasmons de surface,  $\vec{k}_{//}$  est le vecteur qui suit le parcours défini dans la première zone de Brillouin,  $\vec{g}$  est un vecteur du

réseau réciproque. Le bon accord dans ce cas entre les relations de dispersion calculées numériquement et celles extrapolées à partir des propriétés des plasmons de surface non corruguée n'est pas contradictoire avec les résultats précédents. Le domaine de valeurs prises par la permittivité du chrome permet ici cet accord. L'observation de ces relations de dispersion permet de mettre en évidence deux aspects. D'une part, les "gaps" entre modes dûs aux couplages sont très étroits, et nous les estimons au maximum de l'ordre de  $13,5 \text{ meV}$ . On note, pour l'ordre de grandeur, que Ebbesen *et al* [F2] trouvent des "gaps" estimés entre  $30$  et  $50 \text{ meV}$  dans le cas d'un réseau carré de paramètre  $0,9 \mu\text{m}$ , constitués de trous ronds d'un diamètre de  $150 \text{ nm}$ , dans un film d'argent d'une épaisseur de  $200 \text{ nm}$ . D'autre part, il n'y a pas de gaps complets sur l'ensemble du parcours dans la première zone de Brillouin. On peut se demander quels seraient les résultats obtenus pour les coefficients de transmission et de réflexion, en fonction de la longueur d'onde, pour une structure permettant l'ouverture de "gaps" partiels ou complets. On peut suggérer, bien sûr, que les relations de dispersion de la figure (9.29) relèvent d'effets liés purement à la diffraction. En effet, on constate que lorsque la permittivité du métal  $\varepsilon_m$  devient très grande devant la permittivité  $\varepsilon$  du milieu diélectrique on peut approximer l'expression (9.14) par

$$\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon} = \left| \vec{k}_{//} + \vec{g} \right| \quad (9.15)$$

qui n'est autre que la relation vérifiée par les ordres de diffraction à l'instant où ceux-ci deviennent non-homogènes (cf équation (9.1)). Toutefois, comme nous l'avons expliqué un peu plus haut, les résonances ne peuvent se produire que pour des longueurs d'onde supérieures aux longueurs d'onde de Rayleigh des ordres considérés. Donc, dans les cas où les résonances sont proches des longueurs d'onde de Rayleigh, il est cohérent de constater que les relations de dispersion suivent de près les relations issues de (9.15). C'est ce qui se produit, par exemple, dans le cas présent du chrome. Cependant, les résultats de la figure (9.28) montre que les pôles de résonance, correspondant à un ordre donné, peuvent s'éloigner significativement de la longueur d'onde Rayleigh correspondante en fonction des valeurs prises par la permittivité du métal. Cette indépendance entre la position des

pôles et la longueur d'onde Rayleigh (hormis la limite qu'elle fixe dans le parcours des pôles dans le plan complexe) tend à montrer que les résonances, et ainsi les modes propres correspondants, ne sont pas liés à des effets de diffraction pure.

Par ailleurs, nous avons calculé la durée de vie des modes propres que nous donnons ici à titre indicatif (cf. chapitre 7) :

Mode propre associé au pôle	durée de vie $\tau$ (fs)
(1)	13,7
(2)	20,1
(3)	9,2
(4)	20,4

La durée de vie des modes propres est conditionnée par deux aspects. Premièrement, ces modes possèdent une extension spatiale dans le volume du film métallique de la structure étudiée. Les pertes en énergie  $L$  par effet Joule seront alors proportionnelles à

$$L = -\frac{\varepsilon_0 \omega}{2} \int_v \varepsilon''(\vec{r}') \left| \vec{E}(\vec{r}') \right|^2 d^3 r \quad (9.16)$$

Ceci entraîne que plus l'extension spatiale du champ est grande, et/ou plus le champ est intense, plus les pertes sont susceptibles d'être importantes [C6,N7]. Il en est de même si la partie imaginaire de la permittivité du métal augmente. Deuxièmement, les trous permettent aux modes de surfaces de diffracter pour donner une contribution aux ordres de diffraction homogènes. Ainsi, les modes perdent leur énergie de manière radiative. Ce sont ces deux aspects que nous avons schématisés dans le dessin suivant.

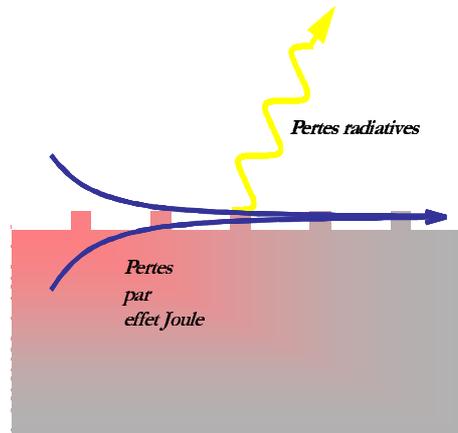


Figure 9.30 : Schéma des processus intervenant dans la durée de vie des modes de surface.

De manière à lever toute ambiguïté, nous avons cherché à étudier si des modes de cavité étaient susceptibles d'être corrélés au processus de résonance. Pour cela, nous avons représenté pour la jonction métal/substrat, l'évolution de la courbe de résonance en fonction du rayon du trou, pour l'ordre de diffraction  $(\pm 1, 0)$ . Ainsi sur le graphique suivant, on peut voir les différentes courbes de résonance pour des valeurs du rayon  $r$  égales à 62.5, 125, 187.5, 250, 312.5 et 375 nm respectivement du bas vers le haut de la figure.

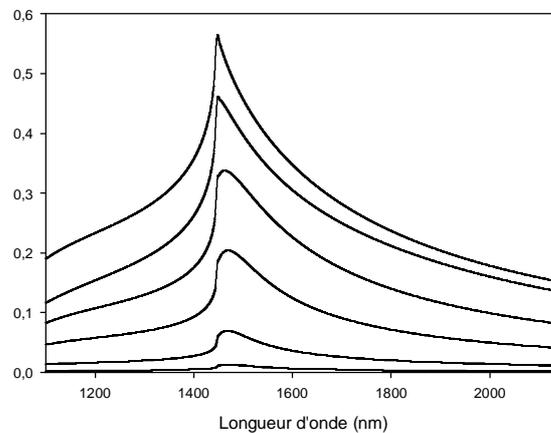


Figure 9.31 : Représentation pour la jonction métal/substrat et pour l'ordre de diffraction  $(\pm 1, 0)$ , de l'évolution de la courbe de résonance en fonction du rayon du trou. Les différentes courbes de résonance sont représentées pour des valeurs du rayon  $r$  égales à 62, 5, 125, 187, 5, 250, 312, 5 et 375 nm respectivement du bas vers le haut de la figure.

On vérifie donc que la position du pic de résonance ne dépend pas du rayon du trou. De plus, le maximum de ce pic décroît avec  $r$ . Ce résultat montre clairement que les résonances ne sont pas liées aux résonances des modes de cavité. En effet, il n'apparaît aucune dépendance des résonances en fonction du rayon des trous comme on s'attendrait à en trouver pour des résonances liées aux modes de cavité.

Pour conclure cette partie de notre analyse, il faut noter que les éléments soulevés ici tendent à justifier l'interprétation des modes observés en tant que plasmons de surface. On sait que la littérature portant sur des réseaux métalliques unidimensionnels associe leur modes propres aux plasmons de surface. Ici, dans le cas d'un réseau métallique bidimensionnel on s'attend à ce qu'il en soit de même. D'une part, on ne peut avoir dans le cas présent de modes guidés du fait du caractère métallique du réseau. Ensuite, nous avons vu que les résonances n'étaient pas liées aux modes de cavité des trous. Enfin, les relations de dispersion obtenues numériquement (cf figure 9.29) sont, dans ce cas, proches de celles obtenues à partir des relations de dispersion des plasmons de surface tenant compte de la périodicité du système. Toutefois, nous avons vu précédemment que l'interprétation des résultats obtenus pour la transmission, la réflexion, ou encore les courbes de résonances, ne nécessite pas la connaissance de la nature des modes propres de la structure. Il paraît alors possible d'obtenir des résultats similaires avec des modes propres d'une autre nature. Ceci peut être mis en parallèle avec les résultats de D. Maystre et M. Nevière [C15,20] qui ont montré l'existence d'anomalies de Wood tantôt liées aux plasmons de surface d'un film métallique corrugué, tantôt liées aux modes guidés d'une couche diélectrique corruguée. Cet aspect est d'autant plus naturel que le formalisme, servant à décrire les relations de dispersion des plasmons de surface pour une couche métallique, est proche de celui utilisé pour décrire les relations de dispersion des modes guidés d'une couche plane diélectrique. On notera également la suggestion selon laquelle on pourrait remplacer les plasmons de surface par d'autres types d'excitations, telles que les polaritons, permettant ainsi de travailler dans d'autres gammes de longueur d'onde.

## 9.5 Aspects liés au champ proche

Dans ce paragraphe, nous proposons une analyse de quelques propriétés en champ proche des expériences auxquelles nous nous intéressons. Le but est alors "d'illustrer" les résultats que nous venons de présenter dans les paragraphes précédents.

Dans cette partie, nous étudions le comportement du champ proche pour des valeurs particulières de la longueur d'onde que nous estimons révélatrices des effets qui nous intéressent. Le champ est alors estimé à la surface de la jonction substrat/métal.

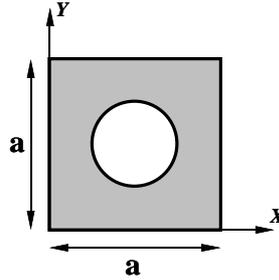


Figure 9.32 : Schéma d'une maille élémentaire selon laquelle le champ sera représenté.

Ce choix est justifié car les propriétés intéressantes concernant les modes de surface pour la jonction vide/métal sont masquées par l'intensité du champ réfléchi, contrairement à la jonction substrat/métal. Ici, le champ incident est polarisé rectilignement selon l'axe  $Oy$ .

Dans la suite, lorsque nous nous référons au vecteur champ électrique  $\vec{\mathcal{E}}$ , celui-ci est défini par la relation  $\vec{\mathcal{E}} = \text{Re}(\vec{E})$ . Le module du champ électrique est donné par  $|\vec{E}|$ . De même, le vecteur de Poynting  $\vec{P}$  est défini par la relation  $\vec{P} = \frac{1}{2} \text{Re}(\vec{E} \times \vec{H}^*)$ .  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  sont donc les vecteurs complexes décrivant respectivement le champ électrique et le champ magnétique obtenus lors des simulations numériques.

Sur la figure suivante, la courbe de résonance pour les ordres de diffraction  $(0, \pm 1)$  à la jonction métal/substrat est reproduite (cf courbe (a) de la figure (9.20)) et on a positionné les deux longueurs d'onde  $\lambda_1 = 1320.6 \text{ nm}$  et  $\lambda_2 = 1447.6 \text{ nm}$ .  $\lambda_1$  correspond à un maximum de transmission alors que  $\lambda_2$  qui est associé au maximum de la courbe de résonance correspond à un minimum de transmission (cf figure (9.33))

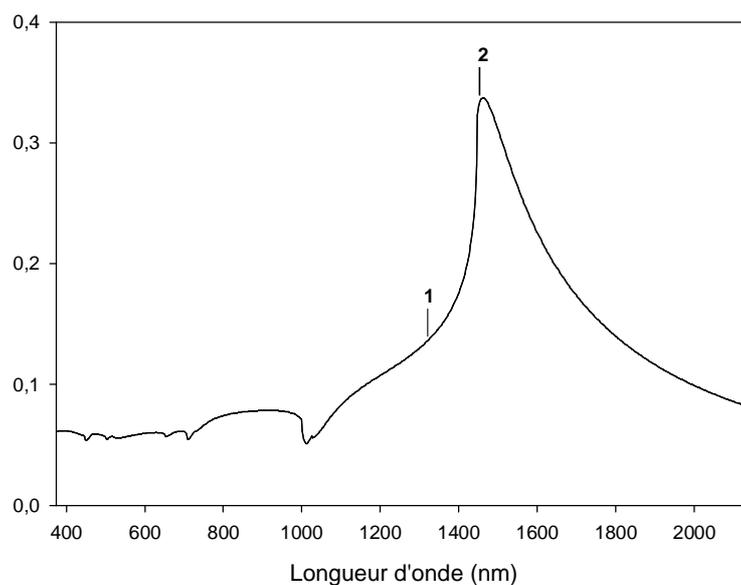


Figure 9.33 : Longueurs d'ondes retenues dans le calcul du champ proche.

On note que l'amplitude du champ en  $\lambda_1$  est très légèrement inférieure à la moitié du maximum atteint à la résonance.

La figure suivante représente le comportement du champ électrique sur la surface pour la longueur d'onde  $\lambda_1$ . La partie (a) de la figure représente la composante parallèle à la surface du champ électrique. Le carré délimité par des pointillés correspond à la limite d'une cellule élémentaire du réseau, alors que le cercle pointillé délimite le trou.

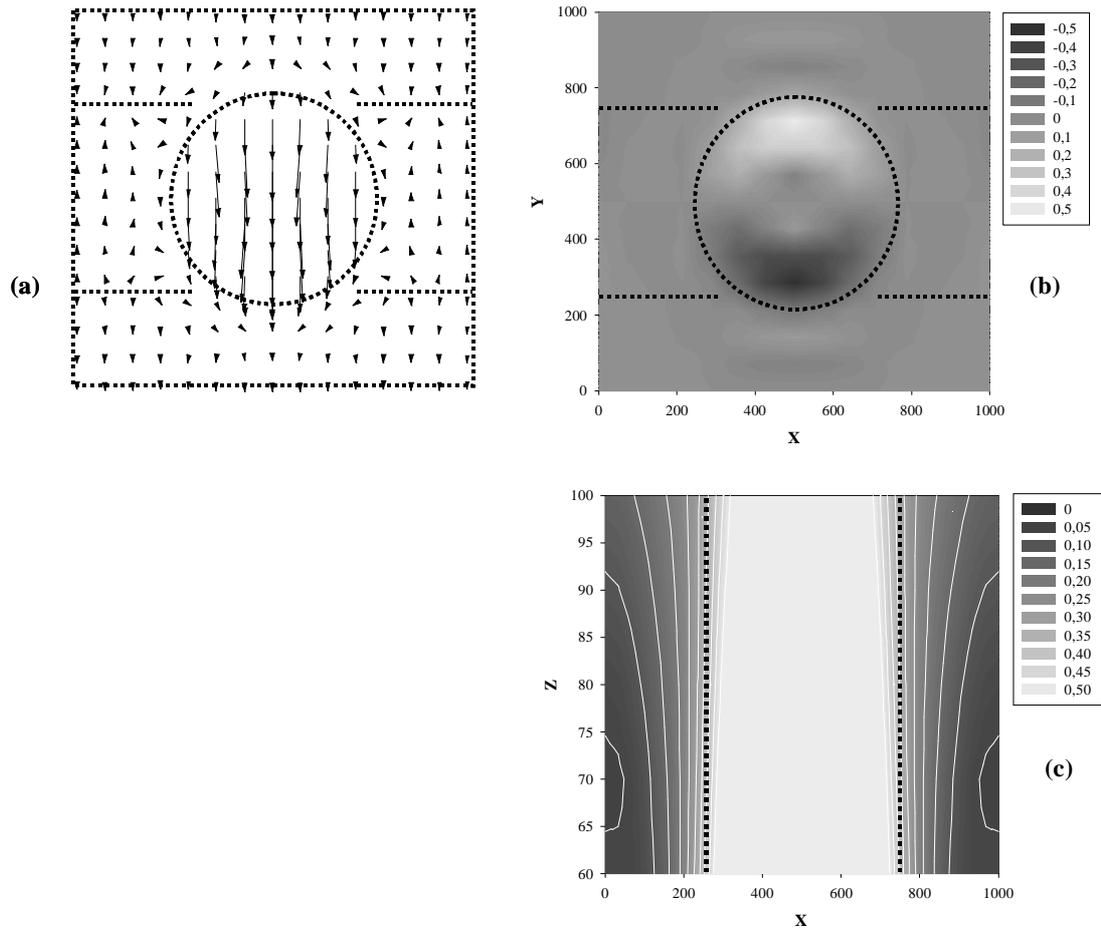


Figure 9.34. Partie (a) : composante parallèle à la surface (substrat/film) du champ électrique pour la longueur d'onde  $\lambda_1$ . Le carré délimité par des pointillés correspond à la limite d'une cellule élémentaire du réseau, alors que le cercle pointillé délimite le trou. Partie (b) : Composante selon la normale à la surface (substrat/film) du champ électrique. Partie (c) : Module du champ électrique selon les axes  $Oxz$  pour  $y = 500$  nm. Les échelles de niveaux de gris sont en  $V.m^{-1}$ .

Sur la surface métallique, la direction du champ électrique présente une inversion périodique caractéristique d'un mode de surface. Les limites où se produisent ces inversions sont représentées par les lignes horizontales pointillées. L'amplitude du champ dans le trou est plus élevée que sur la surface métallique. On note par ailleurs que la polarisation du champ électrique dans le trou est parallèle à la polarisation du champ incident. Le comportement de la composante parallèle à l'axe  $Oz$  du champ est représenté sur la

partie (b). Sur la surface métallique, le champ s'annule, ce qui confirme que les modes de surfaces correspondent à des modes longitudinaux. En revanche, dans le trou, l'amplitude du champ présente un comportement typique d'un mode de cavité d'ordre  $m = 1$ . Un tel comportement peut être décrit en considérant le trou comme étant réalisé dans un métal parfait. Dans ce cas, l'amplitude  $\Phi$  du champ s'exprime selon

$$\Phi = \Phi_0 J_m(kr) \cos(m\theta) \quad (9.17)$$

où l'entier relatif  $m$  est l'ordre du mode de cavité et où les coordonnées cylindriques  $(r, \theta, z)$  usuelles sont utilisées. On notera que l'on n'a pas tenu compte de la dépendance en  $z$  du champ.  $J_m(x)$  est la fonction de Bessel correspondante d'ordre  $m$ . Toutefois, on pourra noter l'interprétation faite de la structure du champ, dans le cas présent, par L. Salomon *et al* [F12], et qui consiste à voir dans cette répartition du champ un effet de la diffraction de Bragg des plasmons de surface associés aux différents ordres de diffraction. Pour illustrer leur idée, nous reproduisons ci-après le schéma publié par L. Salomon *et al* [F12] à ce sujet.

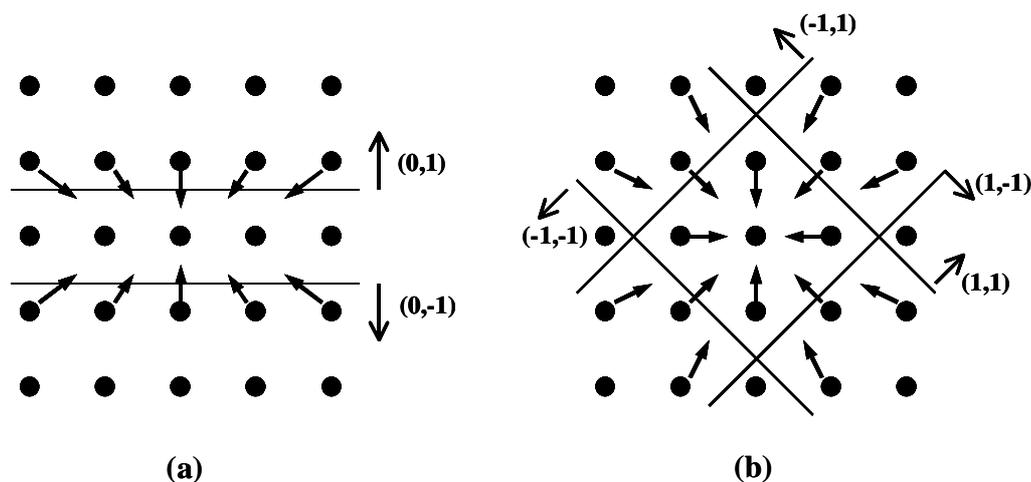


Figure 9.35 : Schémas de processus de réflexion de Bragg des plasmons de surface intervenants dans la distribution du champ proche à la jonction métal/substrat pour différents ordres de diffraction, en (a) pour les ordres  $(0, \pm 1)$ , et en (b) pour les ordres  $(1, \pm 1)$  et  $(\pm 1, 1)$  [F12].

Le schéma (9.35a) considère les deux ordres de diffraction  $(0, \pm 1)$  émis dans des directions opposées l'une par rapport à l'autre. Ces deux ordres sont partiellement réfléchis par diffraction sur les trous (en noir sur la figure) ce qui a pour effet de créer des interférences

multiples entre les différentes ondes réfléchies. La symétrie de la figure d'interférence alors observée est déterminée par l'orientation des rangées de trous par rapport aux ordres de diffraction. Ainsi, les rangées de trous se comportent de la même manière qu'un réseau agissant sur ces ordres de diffraction. Le schéma (9.35b) symbolise le même type d'effet pour les ordres de diffraction  $(\pm 1, 1)$  et  $(1, \pm 1)$ . Dans ce cadre, les effets correspondant au schéma (9.35a) rendent compte du comportement du champ observé [F12].

Quant à la partie (c) de la figure (9.34), elle montre les variations du module du champ électrique selon les directions  $x$  et  $y$ . Le champ apparaît fortement localisé à l'intérieur du trou où il présente une forte amplitude. Par contre, à l'extérieur du trou, le champ présente une décroissance de type exponentielle.

Si on représente en fausses couleurs le module du champ électrique en fonction de  $x$  et  $z$  sur toute l'épaisseur de la couche de métal, on obtient la figure suivante

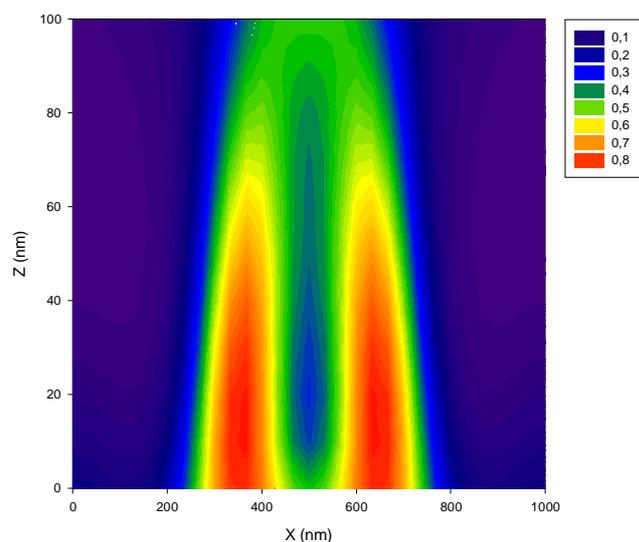


Figure 9.36 : Module du champ électrique en fausses couleurs pour la longueur d'onde  $\lambda_1 \sim 1320$  nm.

Dans le plan  $Oxz$  en  $y = 500$  nm. Les échelles sont en  $V.m^{-1}$ .

On constate que le champ s'étend selon l'axe du trou ( $x = 500$  nm) et pratiquement sur toute sa longueur, tout en restant relativement localisé sur ses bords.

Dans la représentation suivante, le module du champ électrique est reproduit en fausses couleurs en fonction de  $y$  et  $z$  sur toute l'épaisseur de la couche du métal.

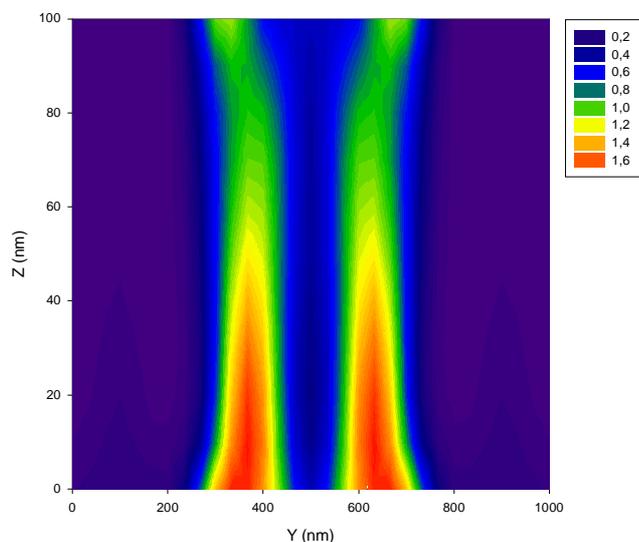


Figure 9.37 : Module du champ électrique en fausses couleurs pour la longueur d'onde  $\lambda_1 \sim 1320$  nm.

Dans le plan Oyz en  $x = 500$  nm. Les échelles sont en  $V.m^{-1}$ .

On constate encore la propagation marquée du champ le long de l'axe du trou, le champ étant confiné sur les bords de celui-ci. Ces résultats tendent à confirmer le rôle important des modes de surface pour ce système. Globalement, le champ est particulièrement faible dans le volume métallique et essentiellement localisé au niveau des surfaces, en particulier sur la surface interne des trous. Ceci peut expliquer le couplage entre les excitations de surface de chacune des deux interfaces métal/substrat et métal/vide. Ainsi, nous supposons que ce couplage peut s'effectuer *via* les excitations de la surface interne des trous. Ceci va dans le sens des hypothèses et résultats présentés dans certains travaux [F2,7].

De la même manière nous pouvons représenter dans le plan Oyz, la projection du vecteur de Poynting.

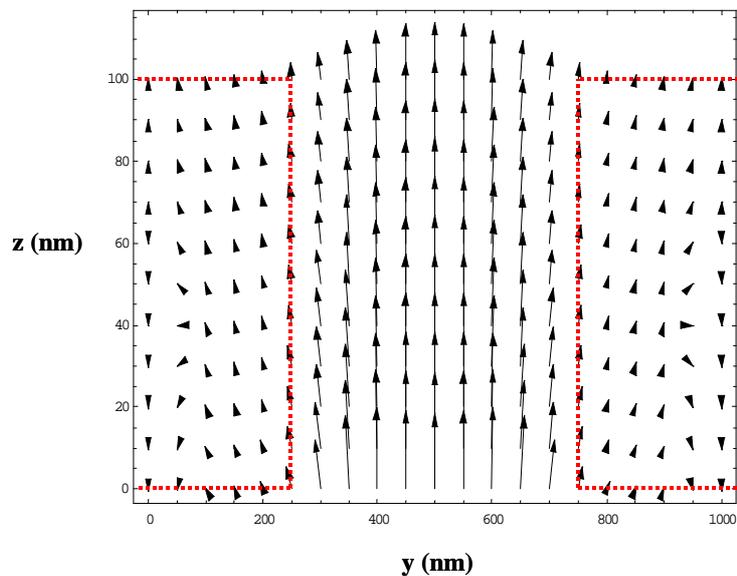


Figure 9.38 : Projection du vecteur de poynting dans le plan Oyz. Les tirets délimitent les bords du film et des trous.

Ce résultat est particulièrement intéressant car il montre que l'essentiel de l'énergie lumineuse est transmise "en se propageant" à l'intérieur du trou. En raison de l'opacité du film de chrome et des dimensions du trou, on peut supposer que c'est une conséquence de la diffraction des modes de surface sur les trous. Sur la figure suivante, nous avons maintenant représenté le champ électrique sur la surface, pour la longueur d'onde  $\lambda_2$ .

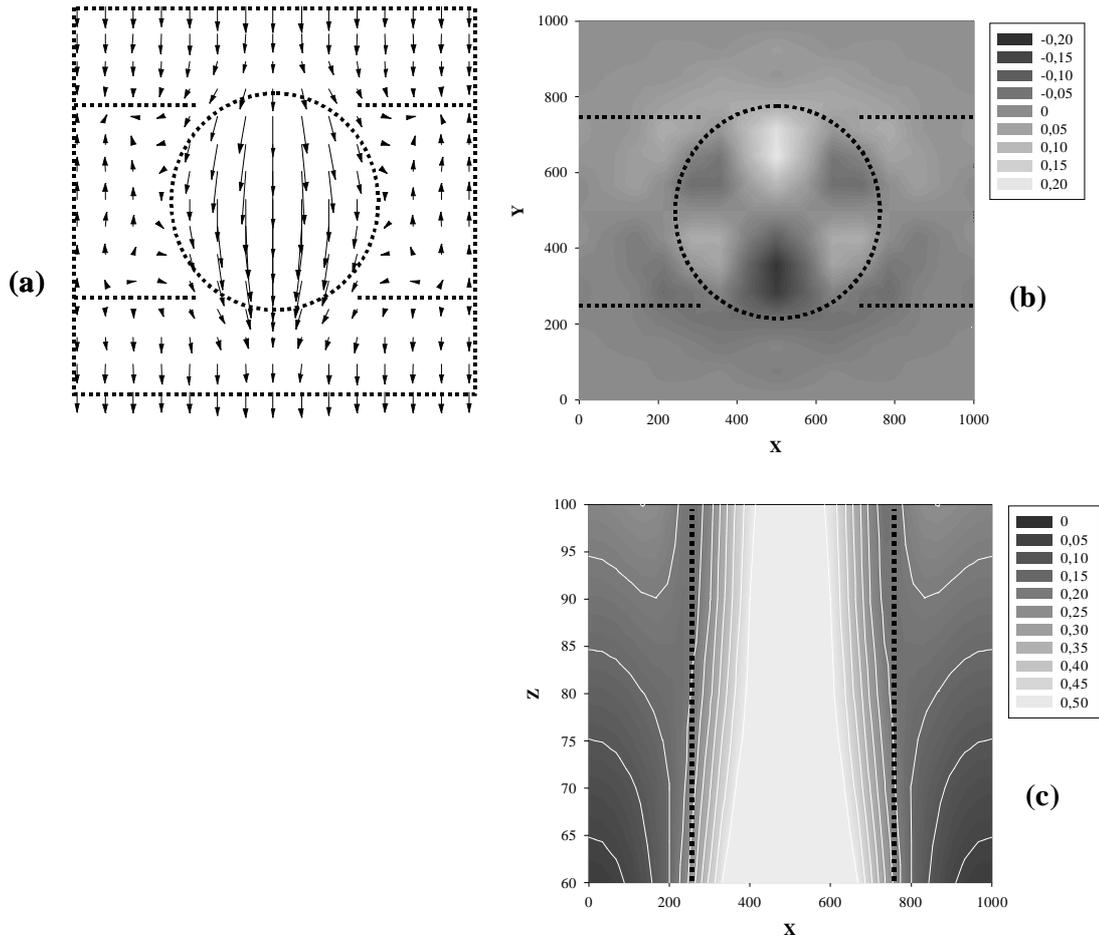


Figure 9.39. Partie (a) : composante parallèle à la surface (substrat/film) du champ électrique pour la longueur d'onde  $\lambda_2$ . Le carré délimité par des pointillés correspond à la limite d'une cellule élémentaire du réseau, alors que le cercle pointillé délimite le trou. Partie (b) : Composante selon la normale à la surface (substrat/film) du champ électrique. Partie (c) : Module du champ électrique selon les axes  $Oxz$  pour  $y = 500$  nm. Les échelles de niveaux de gris sont en  $V.m^{-1}$ .

Comme on peut le voir sur la partie (a) de cette figure, la composante du champ parallèle à la surface, présente un comportement comparable à celui observé pour la longueur d'onde  $\lambda_1$  (cf fig. (9.34)). Cependant, l'amplitude du champ sur la surface métallique est plus importante que dans le cas précédent. A la lumière de notre analyse aux paragraphes 9.3 et 9.4, ceci correspond à la manifestation de la résonance entre le champ électromagnétique et les plasmons de surface. Sur la partie (b), on observe toujours la

composante du champ parallèle à l'axe  $z$  qui s'annule sur la surface métallique. Ici, le champ à l'intérieur du trou présente le comportement d'un mode de cavité d'ordre  $m = 3$ . Par rapport à la symétrie du réseau, il semble toutefois plus délicat d'interpréter la symétrie du champ selon l'étude faite par L. Salomon *et al* [F12]. On voit donc qu'il y a là un travail qui reste à faire pour parvenir à cerner correctement les diverses contributions pouvant conduire à la répartition d'intensité observée. On note que l'intensité maximale à l'intérieur du trou est plus faible que l'intensité maximale observée pour la longueur d'onde  $\lambda_1$  (cf fig. (9.34)). Comme on peut le voir sur la partie (c), le module du champ à l'intérieur du trou est moins étendu que pour la longueur d'onde précédente et décroît selon  $z$ . Par ailleurs, l'extension spatiale des modes de surface selon  $z$  est plus importante que dans le cas précédent.

Ci-après on a représenté en fausses couleurs le module du champ électrique en fonction de  $x$  et  $z$  sur toute l'épaisseur de la couche de métal.

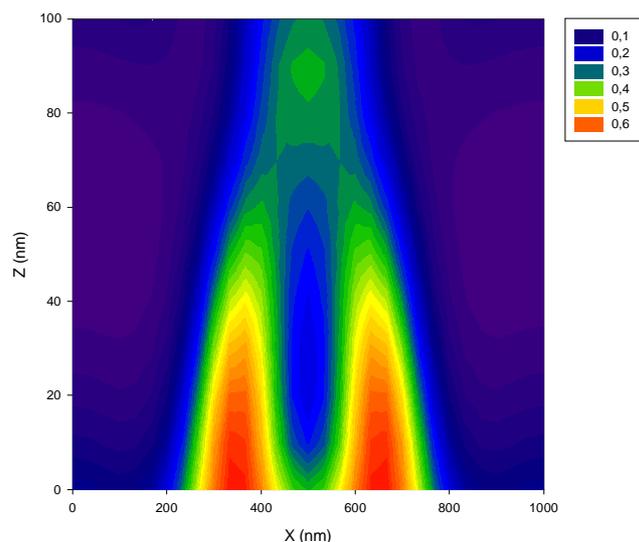


Figure 9.40 : Module du champ électrique en fausses couleurs pour la longueur d'onde  $\lambda_2 \sim 1447$  nm.

Dans le plan  $Oxz$  en  $y = 500$  nm. Les échelles sont en  $V.m^{-1}$ .

Dans ce cas, on constate l'atténuation rapide du champ dans le trou, qui demeure toutefois localisé sur les bords de celui-ci.

Dans la représentation suivante, le module du champ électrique est représenté en fausses couleurs, maintenant en fonction de  $y$  et  $z$  sur toute l'épaisseur de la couche de métal.

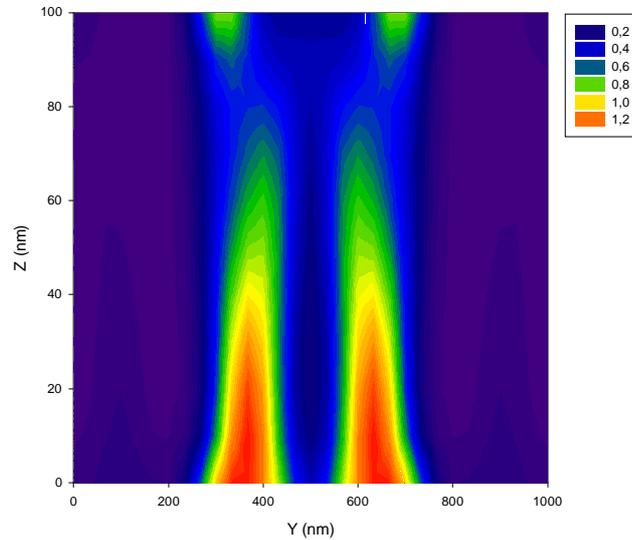


Figure 9.41 : Module du champ électrique en fausses couleurs pour la longueur d'onde  $\lambda_2 \sim 1447$  nm.

Dans le plan  $Oyz$  en  $x = 500$  nm. Les échelles sont en  $V.m^{-1}$ .

Contrairement au cas correspondant à la longueur d'onde  $\lambda_1$ , on observe une atténuation de la propagation le long de l'axe  $z$ . On peut néanmoins constater la rupture de la propagation vers  $z = 80$  nm et une légère augmentation du champ vers  $z = 100$  nm. On peut interpréter ce comportement comme résultant de la diffraction des ondes de surface sur les bords du trou. Afin d'améliorer nos explications, nous avons représenté la projection du vecteur de Poynting dans le plan  $Oyz$ ,

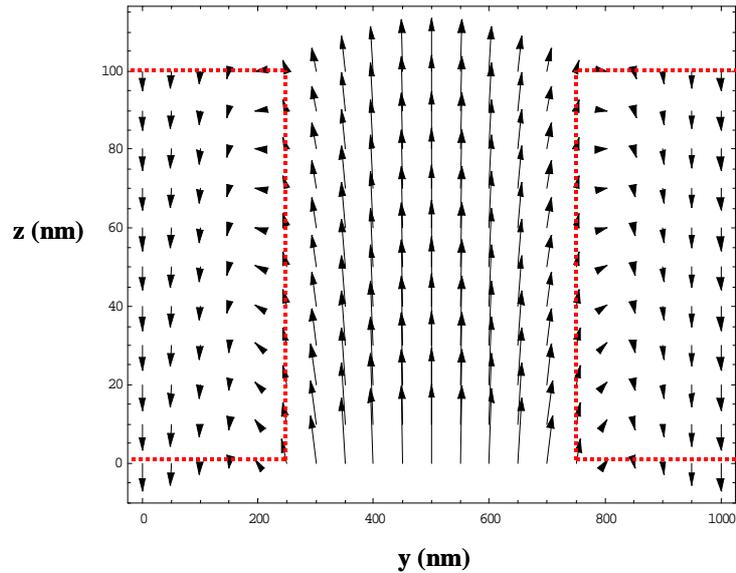


Figure 9.42 : Projection du vecteur de Poynting dans le plan Oyz. Les tirets délimitent les bords du film et des trous.

On peut effectuer les mêmes remarques que pour la longueur d'onde précédente (cf fig. (9.38)). On note cependant que le vecteur de Poynting est opposé au sens de propagation global de la lumière sur la surface métal/vide (en dehors du trou). Ce résultat semble indiquer que la lumière réfléchie provient de la réflexion sur les dioptries.

De façon à mieux comparer l'évolution du champ lorsque l'on passe de la longueur d'onde  $\lambda_1$  à la longueur d'onde  $\lambda_2$ , nous avons représenté le rapport entre le module du champ parallèle à la surface calculé pour  $\lambda_1$  et le module du champ parallèle à la surface calculé pour  $\lambda_2$  (figure ci-après). A l'intérieur du trou, le rapport est de l'ordre de 0.5. En revanche, le long de l'axe y, à l'extérieur du trou, le rapport est de l'ordre de 3.5 entre 250 et 750 nm. En dehors de ces deux zones, le rapport est de l'ordre de 5.

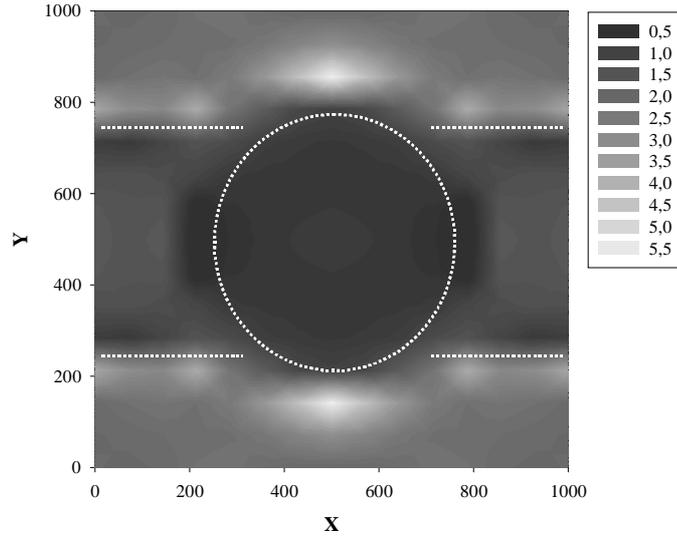


Figure 9.43 : Rapport entre le module du champ parallèle à la surface à  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$

Finalement, pour les deux longueurs d'onde étudiées, les ondes de surface présentent une période de  $1000 \text{ nm}$ . Pour expliquer ceci, nous rappelons que le minimum de transmission correspond à la résonance de l'ordre  $\vec{g} = \frac{2\pi}{a}(0, \pm 1)$ . A l'incidence normale, le vecteur d'onde  $\vec{p}_{\vec{g}}$  qui caractérise la propagation d'un ordre  $\vec{g}$  s'écrit

$$\vec{p}_{\vec{g}} = \begin{bmatrix} \vec{p}_{//, \vec{g}} \\ p_{z, \vec{g}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{g} \\ \sqrt{\varepsilon \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \vec{g}^2} \end{bmatrix} \quad (9.18)$$

où  $\vec{p}_{//, \vec{g}}$  et  $p_{z, \vec{g}}$  sont respectivement les composantes du vecteur d'onde parallèle et normale à la surface. Comme ici nous avons considéré un paramètre de réseau  $a = 1000 \text{ nm}$ , il est aisé de voir que la composante  $p_{z, \vec{g}}$  est imaginaire pour les deux longueurs d'onde  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ . Ainsi, le vecteur d'onde  $\vec{p}_{\vec{g}}$  est alors associé à un mode non homogène, i.e. un mode de surface qui se propage le long de la direction  $y$  avec une longueur d'onde de  $1000 \text{ nm}$ . On note que la valeur de cette longueur d'onde dépend de l'ordre considéré et est différente par exemple pour l'ordre  $\vec{g} = \frac{2\pi}{a}(1, 1)$ . En considérant ces résultats, on schématise la dynamique du champ proche au niveau du trou métallique sur la figure suivante.

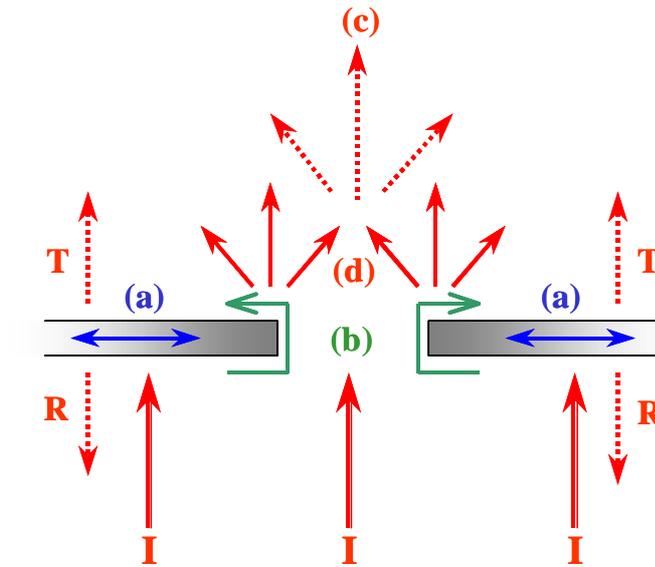


Figure 9.44 : proposition de mécanisme de la dynamique du champ proche.

Lorsqu'il arrive sur la surface métallique, le champ incident (I) est réfléchi (R) et transmis (T). Au niveau du trou, il peut naturellement diffracter (c). Deux cas peuvent alors se présenter.

Dans le premier cas, le champ incident présente une longueur d'onde permettant à un ordre de diffraction non-homogène d'exciter de manière non-résonante les modes propres de la structure, en l'occurrence ici les plasmons de surface. Compte-tenu de l'épaisseur du film, la direction selon laquelle arrive l'onde incidente importe relativement peu sur l'excitation d'un plasmon de surface du dioptre métal/vidé ou métal/substrat. L'idée est en effet que les plasmons de surface associés à chaque dioptre sont couplés par un transfert d'excitation via la surface interne du trou (b). Finalement, l'excitation qui peut se propager sur la surface (a), diffracte au niveau des trous pour redonner des contributions aux différents ordres de diffraction homogènes ou non (d).

Dans le deuxième cas, le champ incident présente une longueur d'onde permettant à un ordre de diffraction non-homogène d'exciter de manière résonante un plasmon de surface d'un côté du film. Dans ce cas, la réflexion (R) est susceptible d'augmenter sachant que la transmission (T) du champ à travers le réseau métallique est frustrée.

Il convient toutefois d'ajouter, et de rappeler, que les effets liés au champ diffracté *via* un effet de type "résonant" (d) peuvent se superposer aux effets de type non-résonants (c) (cf chapitre 9, paragraphe 3, p 123-126). Ainsi, la description et l'interprétation complète du comportement de la réflexion (R) et de la transmission (T) doit-elle tenir compte de ces aspects (cf chapitre 9, paragraphe 3, p 123-126).

## 9.6 Analyse d'un film diélectrique

Nous revenons ici sur la remarque que nous avons faite à la fin du paragraphe 9.4. Nous avons en effet indiqué que l'interprétation des expériences étudiées dans ce chapitre nécessitait l'existence de modes propres de la structure. Cependant, elle n'oblige pas que ces modes doivent être des plasmons de surface. Nous avons suggéré que d'autres types de modes propres peuvent convenir, comme ceux correspondant à des modes guidés dans une couche diélectrique. Ainsi, on peut envisager théoriquement d'obtenir des résultats similaires dans le cas de matériaux diélectriques, moyennant certaines conditions relatives à la permittivité du milieu diélectrique se substituant au métal. Il a été noté qu'expérimentalement la tentative pour observer ce type de phénomène dans le cas d'un film non métallique, en l'occurrence du germanium, s'est soldé par un échec, c'est pourquoi a été renforcée l'importance du caractère métallique du film, et donc, des plasmons de surface [F2]. Nous avons représenté la permittivité du germanium en fonction de la longueur d'onde sur la figure suivante (d'après [N5]).

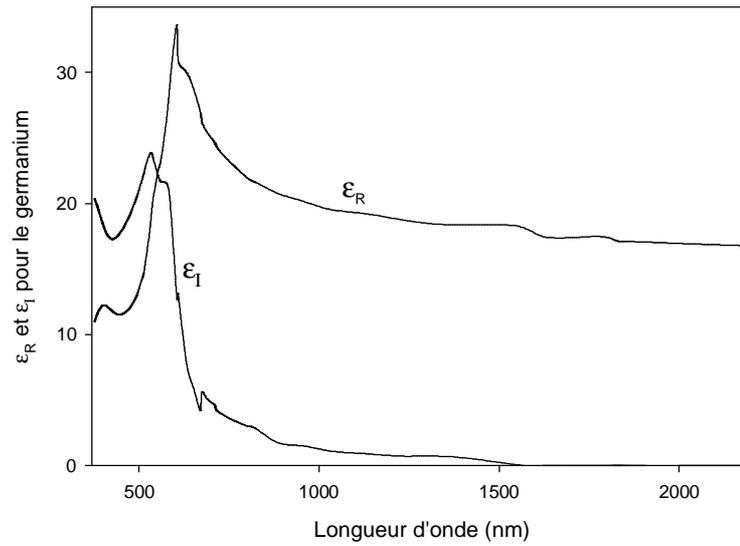


Figure 9.45 : Permittivité du germanium.  $\varepsilon_R$  et  $\varepsilon_I$  correspondent respectivement à la partie réelle et à la partie imaginaire de la permittivité.

On peut constater que la partie imaginaire de la permittivité décroît assez rapidement, et par conséquent le germanium doit devenir assez rapidement transparent. Le problème devient alors naturellement "trivial" comme on peut le voir sur la figure suivante où on a représenté la transmission et la réflexion à l'ordre zéro en fonction de la longueur d'onde pour un réseau carré de trous ronds, de paramètre de maille  $1 \mu m$ . Le film de germanium a une épaisseur de  $100 nm$  et les trous un diamètre de  $500 nm$ .

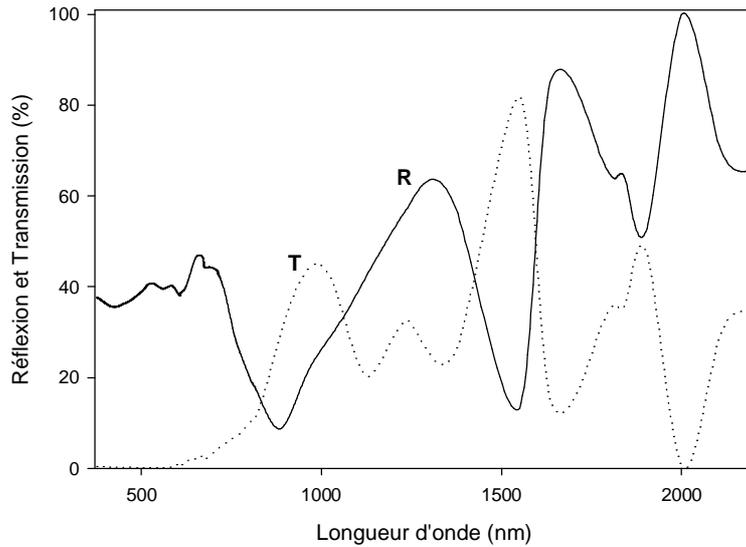


Figure 9.46 : Transmission (T) et réflexion (R) à l'ordre zéro en fonction de la longueur d'onde pour un réseau carré de trous ronds (diamètre 500 nm), de paramètre de maille  $1 \mu m$ , pour un film de germanium d'une épaisseur de  $100 nm$ .

On n'observe plus les courbes caractéristiques observées expérimentalement dans le cas d'un film métallique (cf fig. (9.4a)). Néanmoins, on ne peut pas en conclure qu'un film métallique est obligatoirement nécessaire dans ces expériences. En effet, la quasi-transparence du film considéré dans ce cas fausse les résultats. Nous rappelons que l'expression de la matrice de diffraction  $S(\lambda)$  peut s'écrire comme

$$S(\lambda) = \sum_{\eta} \frac{R_{\eta}}{\lambda - \lambda_{\eta}} + S_h(\lambda) \quad (9.19)$$

Dans le cas présent, le terme holomorphe non résonant  $S_h(\lambda)$  ne peut plus être négligé ou approximé au premier ordre et, le cas échéant, il pourra donner une contribution supérieure à celle des termes résonants. Ainsi, on doit s'attendre à observer des courbes de transmission et de réflexion complètement différentes de celles présentées dans le cas du film de chrome.

Pour montrer l'importance de la transparence du germanium, nous présentons les

courbes de réflexion et de transmission pour un film de  $100 \text{ nm}$  d'épaisseur, homogène, déposé sur du verre ( $\text{SiO}_2$ ).

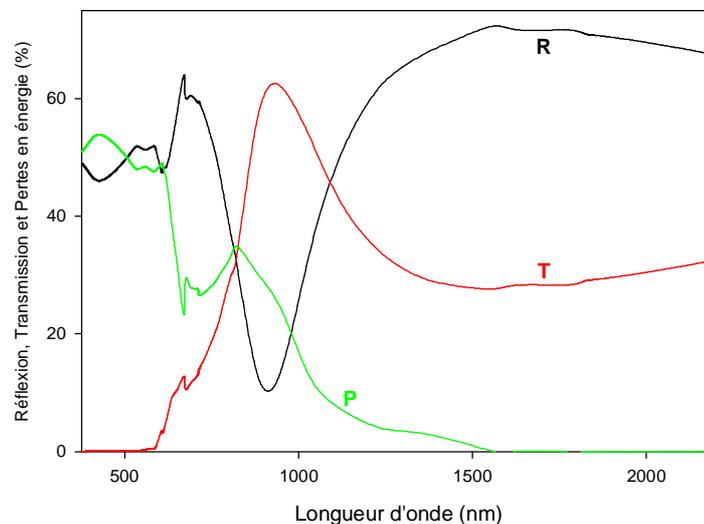


Figure 9.47 : Courbes de réflexion (R), de transmission (T) et de pertes en énergie (P) pour un film de germanium de  $100 \text{ nm}$  d'épaisseur, homogène, déposé sur du quartz.

On observe que le film de germanium présente une bonne transparence au delà de  $1500 \text{ nm}$ , et surtout de faibles pertes en énergie. On note également que cette propriété conduit à l'utilisation du germanium dans les dispositifs optiques infrarouges.

A ce stade, il semble logique de chercher à étudier ces phénomènes pour un film diélectrique doté d'une partie imaginaire de la permittivité qui soit suffisamment élevée pour pouvoir s'affranchir de la transparence. Le problème posé est lié à l'existence un tel milieu diélectrique étant donné qu'habituellement les diélectriques ont une partie imaginaire de la permittivité relativement faible.

On peut concevoir, au moins théoriquement, d'introduire un milieu diélectrique fictif qui réponde à ces critères. On peut remarquer toutefois qu'il existe au moins un cas, à notre connaissance, de milieu réel qui présente cette caractéristique sur la permittivité. Il s'agit du tungstène. En effet, le tungstène, bien qu'étant usuellement un métal, présente la particularité de se comporter comme un diélectrique dans un domaine précis de longueur d'onde (la partie réelle de la permittivité du tungstène est positive pour une longueur

d'onde comprise entre 240 et 920  $nm$ ). Dans ce cas, le tungstène se comporte comme un diélectrique caractérisé par une absorption élevée.

L'intérêt de choisir le tungstène est alors d'avoir une partie imaginaire de la permittivité élevée, comprise environ entre 13 et 23, ce qui est peu fréquent pour un diélectrique (cf figure (9.48) ci-après).

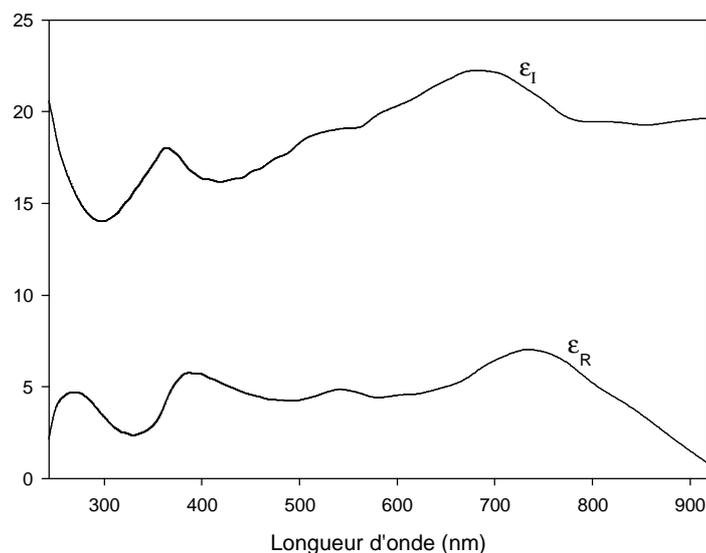


Figure 9.48 : Permittivité du tungstène.  $\epsilon_R$  et  $\epsilon_I$  correspondent respectivement à la partie réelle et à la partie imaginaire de la permittivité.

On peut se représenter les conséquences dues aux valeurs de la permittivité du tungstène en calculant la transmission, la réflexion et les pertes en énergie pour une couche plane de 100  $nm$  d'épaisseur déposée sur un substrat de verre ( $SiO_2$ ), en incidence normale.

Pour la transmission on obtient le résultat suivant,

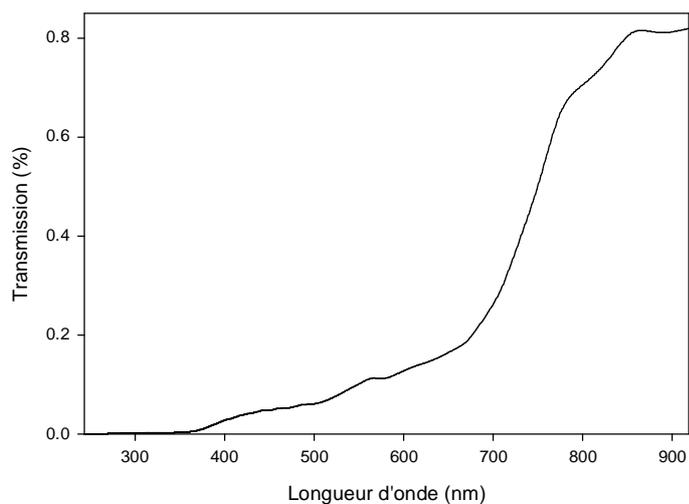


Figure 9.49 : Transmission à travers un film de tungstène de 100 nm d'épaisseur déposé sur du quartz.

où on constate que la transmission est particulièrement faible, comme on pouvait s'y attendre, puisqu'elle n'excède pas 0.8 %. De même, pour la réflexion et les pertes en énergie, on obtient,

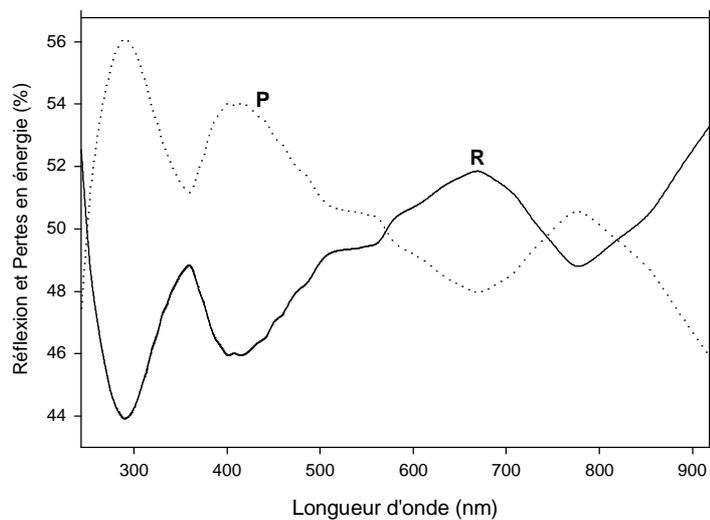


Figure 9.50 : Réflexion (R) et pertes en énergie (P) pour un film de tungstène de 100 nm d'épaisseur déposé sur du quartz.

où on constate que les pertes en énergie sont importantes du fait des valeurs élevées de la partie imaginaire de la permittivité. Par ailleurs, on voit que les variations de la

réflexion, comme celles des pertes, suivent sensiblement les variations de la permittivité en fonction de la longueur d'onde. Ainsi, le tungstène semble un bon candidat pour tester un milieu diélectrique, avec une partie réelle positive de la permittivité, et doté de pertes comparables à celles d'un métal.

Comme nous l'avons déjà indiqué, le domaine de longueur d'onde pour lequel la partie réelle de la permittivité du tungstène est positive s'étend d'environ 240 à 920  $nm$ . Ceci oblige à adapter la configuration du réseau. Notre choix s'est porté alors sur un réseau carré de paramètre de maille de 500  $nm$ . Le motif élémentaire est un trou rond d'un diamètre de 320  $nm$ . L'épaisseur du film de tungstène est de 100  $nm$ . Il est déposé sur un substrat de verre ( $SiO_2$ ). Le calcul par notre programme de simulation de la transmission et de la réflexion à l'ordre zéro de diffraction donne les résultats suivants :

-pour la transmission, la courbe suivante présente une allure comparable avec les courbes que nous avons obtenues auparavant dans le cas du chrome (cf fig. (9.4a)),

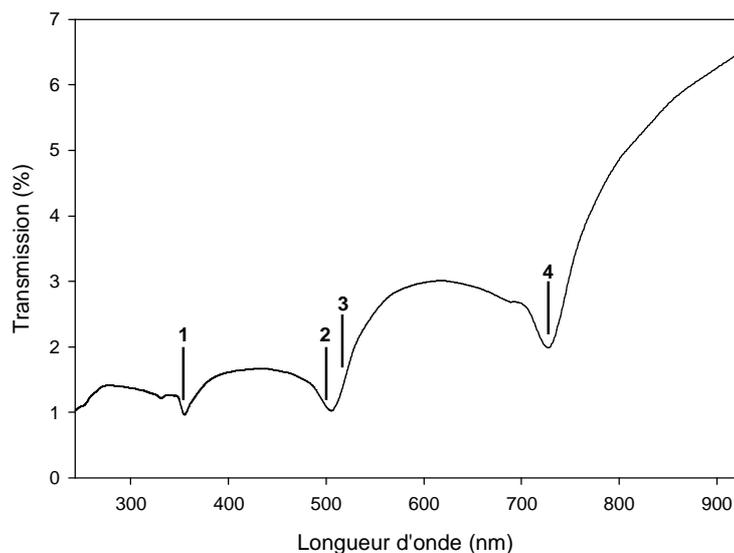


Figure 9.51 : Simulations de la transmission à l'ordre zéro pour un réseau de paramètre égal à  $0,5 \mu m$  dans un film de tungstène. Le diamètre des trous est  $d = 320 nm$  et l'épaisseur du film est  $h = 100 nm$ .

et où on note les positions des principales longueurs d'onde de Rayleigh (de (1) à (4)),

comme pour le chrome, avec dans ce cas,

valeur	Ordres de diffraction	Longueur d'onde de Rayleigh
(1)	$(\pm 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1)$ , Vide/Film	353,55 nm
(2)	$(\pm 1, 0)$ , Vide/Film	500 nm
(3)	$(\pm 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1)$ , Substrat/Film	516,69 nm
(4)	$(\pm 1, 0)$ Substrat/Film	727,39 nm

Les remarques que nous avons émises pour la courbe de transmission du chrome restent toujours valables pour le tungstène. On vérifie que les longueurs d'onde de Rayleigh ne coïncident pas parfaitement avec les minima mais qu'elles se situent un peu avant ceux-ci. On rejoint les remarques faites auparavant où on a associé les minima de transmission aux minima liés aux profils de Fano.

-de même pour la réflexion, le comportement est également très proche de celui observé dans le cas du film de chrome (cf figure (9.52) ci-après).

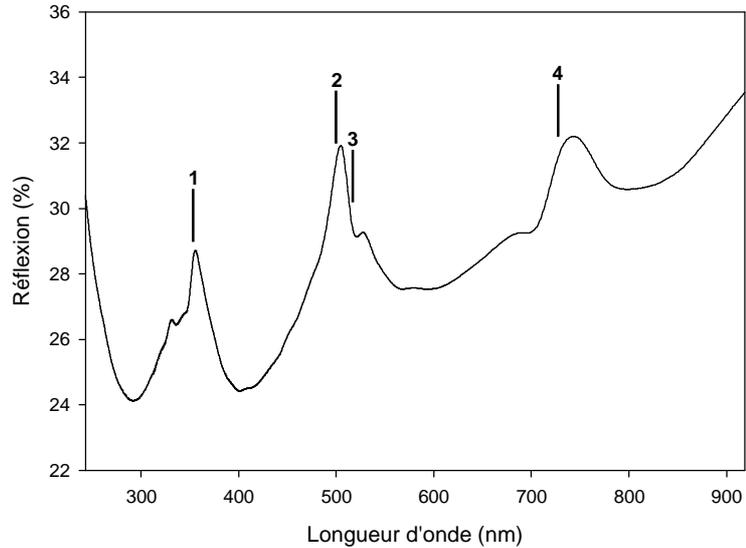


Figure 9.52 : Simulations de la réflexion à l'ordre zéro pour un réseau de paramètre égal à  $0,5 \mu m$  dans un film de tungstène. Le diamètre des trous est  $d = 320 nm$  et l'épaisseur du film est  $h = 100 nm$ .

On a reporté sur la figure (9.52) les longueurs d'ondes de Rayleigh mentionnées précédemment. Les longueurs d'ondes de Rayleigh se situent toujours un peu avant les maxima de la réflexion. Les profils, constitués de maxima suivis de minima, correspondent aux profils de Fano décrit p.121.

-enfin, pour les pertes en énergie déduites des courbes de réflexion et transmission on obtient,

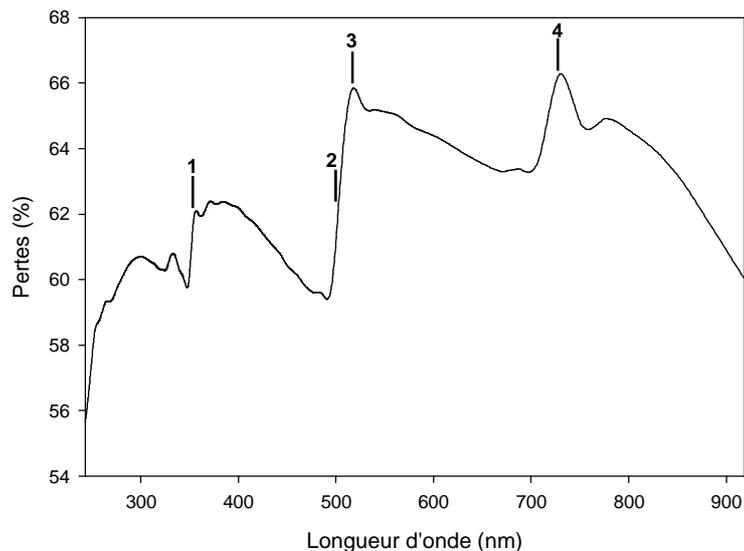


Figure 9.53 : Simulations des pertes en énergie pour un réseau de paramètre égal à  $0,5 \mu m$  dans un film de tungstène. Le diamètre des trous est  $d = 320 nm$  et l'épaisseur du film est  $h = 100 nm$ .

où on a également précisé les longueurs d'ondes de Rayleigh.

Pour argumenter nos observations, on étudie le comportement des ordres  $(0, \pm 1)$  qui n'existent que pour la polarisation  $p$  comme nous l'avions fait pour le cas du chrome. Pour ces ordres, on obtient à l'interface film/substrat et film/vide,

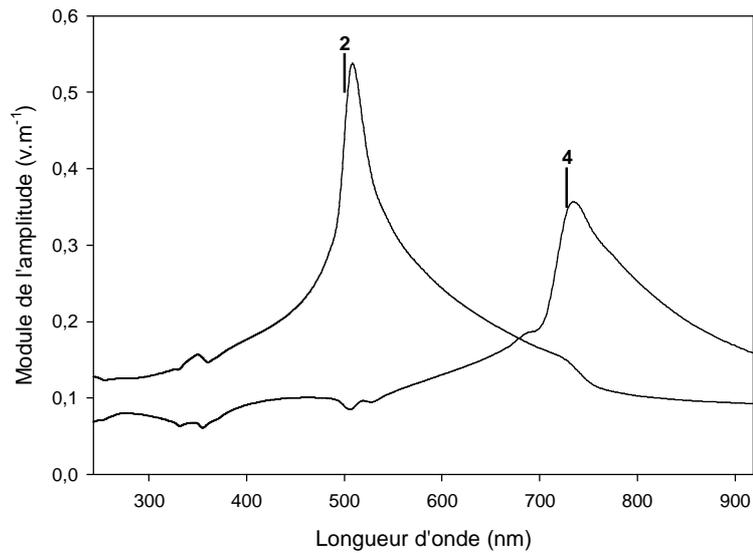


Figure 9.54 : Courbes de résonances associées au module du champ électromagnétique de l'ordre  $(\pm 1, 0)$  à l'interface vide/métal (vers 506,1 nm) et substrat/tungstène (vers 729,3 nm), en fonction de la longueur d'onde.

où les deux courbes de la figure (9.54) dotées d'un profil de type résonant, ont leur maximum localisé à 729,3 nm et 506,1 nm avec pour demi-largeur à mi-hauteur 46 nm et 16 nm environ. De même, la recherche de pôles confirme le caractère résonant de ces courbes, et on trouve respectivement  $731,6 + i49$  (nm) et  $521,9 + i16,6$  (nm) pour chacun de ceux-ci. On a représenté les longueurs d'onde de Rayleigh ((2) et (4) sur la figure) associées à ces ordres de diffraction. On constate qu'elles se situent avant les pics de résonance comme nous l'avons déjà constaté et expliqué dans le cas du chrome. Si on observe le comportement des ordres  $(\pm 1, 0)$  qui n'existent que pour la polarisation  $s$ , on constate toujours un schéma similaire à celui du cas du chrome (cf figure (9.55) ci-après).

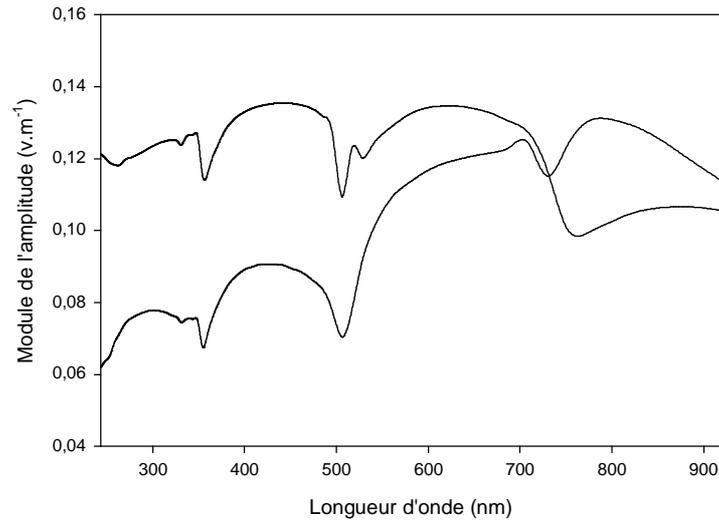


Figure 9.55 : ordres  $(\pm 1, 0)$  qui n'existent que pour la polarisation  $s$  pour la jonction vide/tungstène et substrat/tungstène.

En résumé, on obtient des comportements similaires à ceux étudiés précédemment dans le cas du chrome. Ceci n'est pas surprenant et tend à confirmer notre modèle décrivant le comportement de la transmission et de la réflexion en terme d'anomalies de Wood liées à des résonances de modes propres. Dans le cas présent d'un film de tungstène, le caractère positif de la partie réelle de la permittivité exclut la possibilité que les modes propres puissent être reliés aux plasmons de surface. En posant l'hypothèse que les modes propres de la structure, pour le tungstène, sont reliés à des modes guidés du système, bien que cela reste à démontrer rigoureusement, on peut relier nos résultats aux travaux antérieurs développés par V.U. Fano [C5], A.A. Hessel et A. Oliner [C6] ou encore de D. Maystre et M. Nevière [C15,20]. Il est important de noter que, dans le cas d'un diélectrique, on peut exclure l'existence de plasmons de surface et envisager celle de modes guidés analogues aux modes guidés d'une couche plane diélectrique. Au contraire, dans le cas d'un métal, on peut exclure l'existence de modes guidés et introduire celle de plasmons de surface. Il paraît donc très prometteur de pouvoir initier une étude expérimentale sur le cas particulier du tungstène afin de vérifier nos résultats pour un diélectrique avec une partie imaginaire de la permittivité très élevée.

# Chapitre 10

## Conclusion

Depuis la première mise en évidence des anomalies de Wood, celles-ci ont fait l'objet de nombreux travaux. Loin de correspondre à un seul effet, elles regroupent des processus de nature différente. Ceux-ci sont dus notamment aux effets introduits par la transformation d'un état homogène en un état non-homogène pour un ordre de diffraction donné, ou encore aux effets liés au couplage entre les modes propres d'une structure optique avec un champ incident et les divers ordres de diffraction.

Dans les travaux antérieurs liés aux expériences initiées par T.W. Ebbesen, l'observation de lobes de transmission importante a été interprétée comme une conséquence de l'excitation de plasmons de surface. Les anomalies de Wood associées aux longueurs d'onde de Rayleigh étaient évoquées pour expliquer uniquement l'existence des minima entre les lobes de transmission.

Les résultats que nous venons de présenter tendent à démontrer le rôle clé des "anomalies de Wood" liées aux modes propres des systèmes optiques introduit par T.W. Ebbesen *et al.* En accord avec les résultats déjà établis précédemment, nous avons montré que l'excitation des modes propres du réseau induit des profils de type de ceux décrits par Fano pour l'évolution de l'ordre zéro de diffraction, en fonction de la longueur d'onde. Cet effet est relié à la diffraction multiple d'ordres de diffraction non-homogènes, excités *via* leur couplage avec les modes propres. La contribution apportée par la diffraction multiple aux

ordres homogènes, en particulier pour l'ordre zéro, se superpose avec les contributions liées à des effets de type purement non-résonant. Ceci conduit aux profils de Fano.

Par conséquent, d'après nos résultats, les lobes de transmission ne correspondent pas directement à des maxima de résonance, de même, les minima ne correspondent pas aux anomalies de Wood liées aux longueurs d'onde de Rayleigh. Les minima et les maxima correspondent à ceux observés sur les profils de Fano associés aux anomalies de Wood "de type résonant". Les processus résonants sont donc nécessaires dans l'interprétation des phénomènes mais les modes propres qui y sont associés ne correspondent pas obligatoirement à des plasmons de surface.

Nous avons montré que, dans le cadre des expériences réalisées, on peut effectivement associer les modes propres aux plasmons de surface. Dans un milieu diélectrique approprié (i.e. très peu transparent), on peut substituer le rôle tenu par les plasmons de surface par celui des modes guidés. Dans ce dernier cas, on observe des profils comparables à ceux observés dans le cas d'un réseau bidimensionnel métallique.

L'intérêt d'introduire des modes propres de différentes natures réside dans le fait que l'on peut travailler dans des domaines de longueurs d'onde différents. Ainsi, on peut envisager la mise au point de filtres travaillant plus spécifiquement soit dans l'infrarouge, soit dans le visible, soit encore dans l'ultraviolet. On peut se demander s'il est envisageable de substituer le rôle tenu par les plasmons par celui des polaritons dans les solides ioniques tels que LiH dont la partie réelle de la permittivité est négative entre 9 et 17  $\mu m$  [M4]. Le choix d'une telle gamme de longueur d'onde permettrait de travailler dans un domaine infrarouge particulièrement éloigné des longueurs d'ondes optiques. On peut également envisager l'étude de structures bidimensionnelles conçues de manière à présenter des bandes interdites optiques largement ouvertes, complètes ou non.

Finalement, l'autre conséquence de notre travail réside dans l'intérêt d'une analyse des anomalies de Wood pour l'étude des cristaux photoniques bidimensionnels. En effet, de nombreux travaux introduisent l'étude de ces derniers *via* l'analogie avec la physique du solide. Toutefois, le retour sur des aspects typiquement liés à l'optique, i.e. ici les

anomalies de Wood, peut s'avérer enrichissant dans la compréhension de ces nouveaux matériaux.

## **Cinquième partie**

### **Conclusion générale et perspectives**

Le développement de la technologie des cristaux photoniques est un des grands axes actuels de recherches. L'intérêt des cristaux photoniques couvre une large gamme d'applications comme nous l'avons expliqué au début de ce travail. Ces applications s'étendent de la mise au point de composants optiques, par exemple dans le domaine des communications, jusqu'à l'étude de problèmes d'électrodynamique en cavités mésoscopiques. Les implications de ces recherches dans les technologies de demain peuvent s'avérer très riches. Ces développements se situent sur deux aspects complémentaires : l'un expérimental, visant à relever le défi de la réalisation pratique de tels dispositifs ainsi que de leur étude; l'autre théorique, visant à mieux comprendre les processus physiques en jeu et permettant, idéalement, de suggérer l'amélioration de structures existantes ou la réalisation de structures nouvelles. C'est précisément ce que nous avons cherché au cours de ce travail de thèse. Ainsi, grâce à la maîtrise d'outils analytiques et numériques conduisant à l'étude précise d'un système optique donné, nous avons pu interpréter certains effets décrits dans la littérature, et proposer des alternatives et/ou des améliorations des dispositifs expérimentaux correspondants.

Nous avons présenté formellement, et avec critique, les méthodes théoriques que nous avons employées dans la suite de notre collaboration avec Jean-Pol Vigneron, de l'université Notre-Dame de la Paix à Namur (Belgique). Cette approche, initialement introduite par John Pendry, est basée essentiellement sur une méthode de modes couplés et l'utilisation du formalisme de la matrice  $S$ . Nous avons montré que l'on pouvait ainsi obtenir un certain nombre d'informations pertinentes dans l'étude des systèmes optiques. Ces informations concernent principalement les coefficients de transmission et réflexion, dont on peut déduire les pertes en énergie. Il s'agit aussi des cartes du champ proche et du champ dans le volume du système étudié. Il s'avère alors possible de sélectionner certains ordres de diffraction et certaines polarisations spécifiques dans le cadre d'un problème de diffraction. Enfin, on peut y ajouter la détermination des modes propres du système étudié, dont on déduit les relations de dispersion associées.

Ensuite nous avons appliqué ce formalisme à l'interprétation de résultats expérimentaux.

taux portant des cristaux photoniques bidimensionnels constitués d'une couche métallique percée de trous sublongueurs d'onde répartis selon un réseau à deux dimensions et déposée sur un substrat diélectrique. Les propriétés expérimentales de ce type de structures ayant été observées la première fois par T.W. Ebbesen, notre travail a eu pour objectif principal d'affiner, voire nuancer, l'interprétation qui était faite de ces résultats.

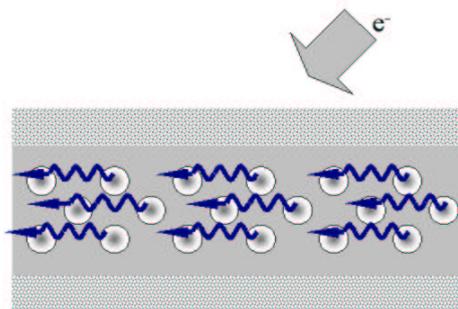
Nous avons montré que, dans le cadre de ces expériences, la notion de modes propres associés à un système donné revêt un intérêt crucial. Plus particulièrement, nous avons soulevé l'importance de l'analyse des anomalies de Wood pour l'étude des cristaux photoniques bidimensionnels. Ainsi, la recherche de structures présentant des modes propres de natures différentes (pour différentes structures ou au sein d'une seule) permet d'envisager des axes de recherches pouvant déboucher sur de nouvelles propriétés.

A ce stade, nous pouvons énumérer certains des problèmes et des questions qui font ou feront l'objet de recherches dans la continuité du travail que nous venons de présenter. Ceux-ci vont de l'étude de nouvelles structures photoniques à l'étude dynamique du champ électromagnétique, en passant par la détermination de la densité (locale ou totale) de modes à partir de la matrice  $S$ .

## **Autres structures envisageables**

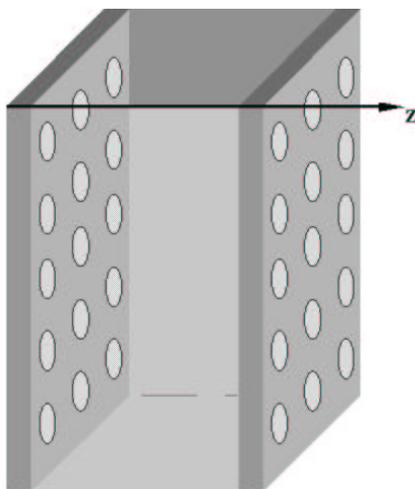
Une perspective intéressante est bien évidemment l'étude de nouvelles structures. En particulier, il est intéressant de se consacrer à l'étude de configurations contenant des milieux optiquement actifs en parallèle avec la question de la détermination de la densité de modes. Cet aspect relativement neuf dans l'étude des cristaux photoniques soulève de nombreuses questions. L'intérêt actuel pour les cristaux photoniques dans le domaine des lasers se concentre essentiellement sur la mise au point de cavités résonantes performantes. On peut cependant se poser la question de la réalisation de milieux optiquement actifs "artificiels". Il s'agit alors de concevoir des cristaux photoniques dans lesquels on inclut des matériaux actifs répartis périodiquement. Le problème est, par exemple, d'adapter la structure de façon à modifier les propriétés d'émissions par le biais de la densité de

modes. On peut ainsi envisager une combinaison de matériaux optiquement actifs avec des milieux dont on peut contrôler la permittivité. Le problème qui se pose concerne la manière d'agir sur la densité de modes, de façon à modifier une longueur d'onde d'émission afin de créer un laser accordable. Une autre possibilité est de créer des inclusions périodiques, dans un milieu solide, de cavités remplies d'un gaz optiquement actif. On peut alors envisager de transposer le milieu actif gazeux de certains lasers sous une forme solide, par exemple comme pour certains lasers eximères.



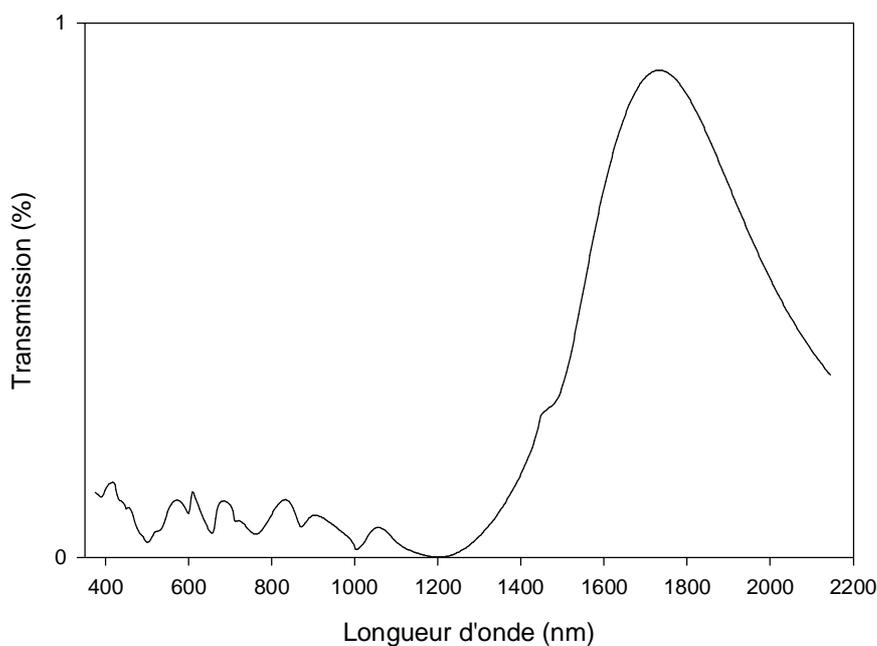
Sphères gazeuses (ou liquides) dans une matrice solide. Le gaz (ou le liquide) présent dans les cavités constitue un milieu actif. L'ensemble cavités-matrice constitue un milieu actif effectif.

Enfin, notons que les structures étudiées par T.W. Ebbesen peuvent présenter des alternatives intéressantes. À titre d'exemple, nous présentons un résultat relativement récent issu de nos simulations sur la structure suivante



Une couche de quartz avec ses faces recouvertes par une couche de chrome percée de trous selon un réseau carré.

Elle est constituée de deux films de chrome de  $100\text{ nm}$  d'épaisseur déposés de part et d'autre d'une couche de verre ( $\text{SiO}_2$ ) d'une épaisseur de  $1\ \mu\text{m}$ . Chaque film est perforé de trous ronds de  $500\text{ nm}$  de diamètre formant un réseau carré caractérisé par un paramètre de maille de  $1\ \mu\text{m}$ . La courbe ci-dessous représente la transmission de cette structure en fonction de la longueur d'onde en incidence normale.



Transmission à l'ordre zéro associée au dispositif décrit précédemment.

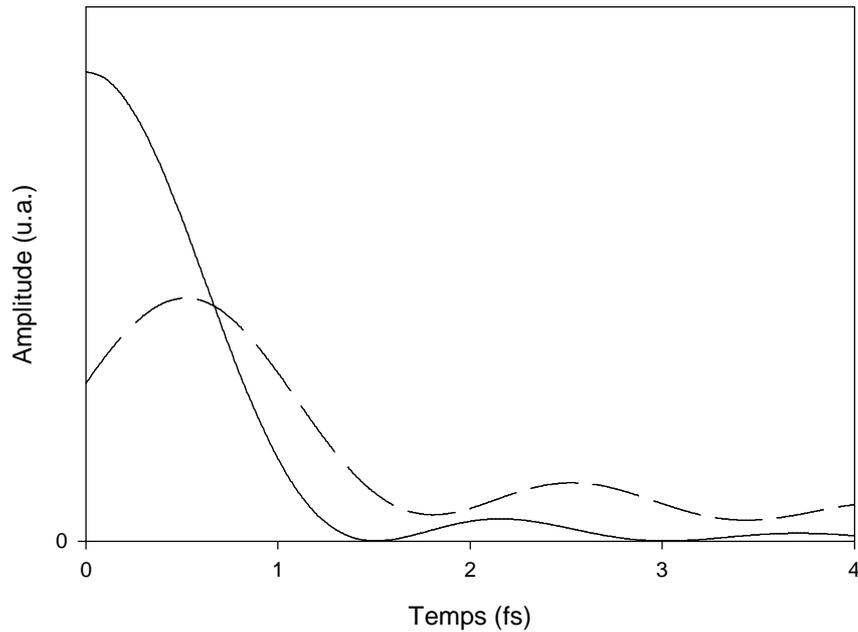
On observe alors un comportement de type passe-bande en fonction de la longueur d'onde. Cette courbe est donnée pour illustrer les possibilités de tels systèmes, cependant son interprétation reste à étudier précisément. L'intérêt de ce système est qu'il montre que des géométries dérivées de celles utilisées par Ebbesen *et al* sont susceptibles de présenter des caractéristiques originales.

## Analyse dynamique du champ électromagnétique

Comme nous l'avons expliqué plus haut, il est possible de remonter aux propriétés dynamiques, i.e. temporelles, du champ électromagnétique grâce à la relation

$$|F_{out}(t)\rangle = \int S(\omega) |F_{in}(\omega)\rangle e^{i\omega t} d\omega \quad (10.1)$$

En choisissant une base de représentation adaptée pour  $|F_{out}(t)\rangle$ , on peut par exemple visualiser l'évolution du champ dans l'espace au cours du temps. Les limitations de cette méthode sont les suivantes. Tout d'abord, on n'a accès aux valeurs de la permittivité du milieu que sur une certaine plage de valeurs de  $\omega$ . Ainsi, on est obligé de limiter la connaissance du spectre sur un domaine restreint ce qui contraint le choix de  $|F_{in}(t)\rangle$ . Ensuite, si on désire effectivement calculer l'évolution des cartes de champ, on doit retenir un grand nombre de vecteurs du réseau réciproque de manière à garantir la résolution du champ dans l'espace. Dès lors, les temps de calculs risquent de devenir excessivement longs. Aussi doit-on envisager, soit d'avoir recours à une méthode complètement différente, soit de trouver le moyen d'optimiser les temps de calculs. Néanmoins, il est intéressant de ne regarder l'aspect dynamique que de certains ordres de diffraction pour lesquels on peut limiter le nombre de vecteurs du réseau réciproque et ainsi le temps de calcul. A titre d'exemple, on a tracé ci-dessous l'évolution dans le temps du module de la composante de polarisation  $p$  de l'ordre  $\vec{g} = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$  (qui présente un caractère résonant). Le trait plein correspond à l'évolution dans le temps de l'onde incidente à l'incidence normale. Le trait discontinu représente la réponse temporelle de l'ordre considéré.

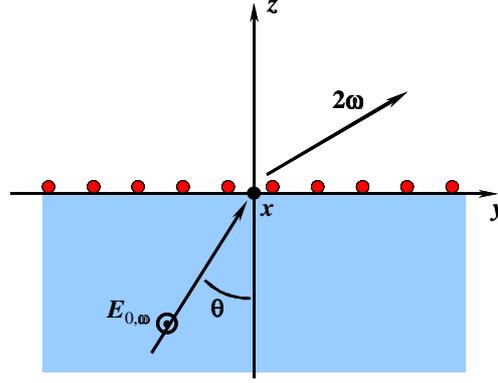


Le calcul est donc simplement effectué à partir de la transformée de Fourier numérique inverse de la composante  $p$  du champ de l'ordre étudié, déterminé à partir de  $|F_{out}(\omega)\rangle$ . Ce dernier est calculé naturellement comme expliqué au chapitre 5. On pourra donc discuter de l'intérêt de la visualisation directe de l'évolution temporelle du champ.

## Structures présentant des non-linéarités

Un problème intéressant, dans la continuité des problèmes de diffraction par un réseau bidimensionnel, est celui de la diffraction opérée par un réseau de sources non-linéaires. Dans le cas particulier de la configuration présentée ci-dessous, on peut introduire un modèle analytique simple dont on présente ici uniquement les grandes lignes du calcul.

On considère dans cet exemple la configuration suivante,



où des défauts non linéaires sont répartis selon un réseau périodique bidimensionnel sur la surface d'un dioptre diélectrique/vide. Une source à la pulsation  $\omega$ , en polarisation TE, arrive en réflexion totale sur le dioptre et il apparaît une onde évanescente dans le vide. On considère le champ incident dans le diélectrique  $\vec{E}_0(\vec{r})$  à  $\omega$  tel que

$$\vec{E}_{0,\omega}(\vec{r}) = \vec{E}_{0,\omega} e^{i\vec{k}_{//} \cdot \vec{\rho}} e^{ik_z z} \quad (10.2)$$

On se propose d'étudier la réponse du champ à  $2\omega$  généré par les sources non linéaires dans le vide. On se place dans le cadre de l'approximation de la pompe non dépeuplée, et on considère que la susceptibilité d'ordre 1 à  $\omega$  des défauts n'affecte pas de façon significative les propriétés du dioptre. La permittivité du diélectrique à  $\omega$  est notée  $\varepsilon_\omega$ , et on écarte du problème la susceptibilité de surface du dioptre.

On considère l'équation de propagation d'une onde caractérisée par un champ électrique  $\vec{E}_{2\omega}(\vec{r})$  à  $2\omega$  se propageant dans un milieu caractérisé par une constante diélectrique  $\varepsilon_{2\omega}(\vec{r})$  et contenant des sources non linéaires  $\vec{P}_{2\omega}^{(2)}(\vec{E}_\omega(\vec{r}))$  ayant pour origine une onde caractérisée par un champ électrique  $\vec{E}_\omega(\vec{r})$  à  $\omega$ ; on a alors

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}_{2\omega}(\vec{r}) - \frac{(2\omega)^2}{c^2} \vec{E}_{2\omega}(\vec{r}) = U_{2\omega}(\vec{r}) \vec{E}_{2\omega}(\vec{r}) + (2\omega)^2 \mu_0 \vec{P}_{2\omega}^{(2)}(\vec{E}_\omega(\vec{r})) \quad (10.3)$$

avec

$$U_{2\omega}(\vec{r}) = \frac{(2\omega)^2}{c^2} (\varepsilon_{2\omega}(\vec{r}) - 1) \quad (10.4)$$

On définit le tenseur de Green associé à cette équation sans second membre selon

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{G}_{2\omega}(\vec{r}, \vec{r}') - \frac{(2\omega)^2}{c^2} \vec{G}_{2\omega}(\vec{r}, \vec{r}') = I\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (10.5)$$

On pose dans une première étape les approximations suivantes. Tout d'abord, le champ à  $2\omega$  existe uniquement du fait des sources non linéaires. Ensuite on ne considère que la propagation du champ à  $2\omega$  à partir des sources non linéaires sans tenir compte des processus de diffusion ou de diffraction au second ordre. On montre alors que l'expression du champ  $\vec{E}_{2\omega}(\vec{r})$  s'écrit sous la forme

$$\vec{E}_{2\omega}(\vec{r}) = (2\omega)^2 \mu_0 \int_v \overleftarrow{G}_{2\omega}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{P}_{2\omega}^{(2)}(\vec{E}_\omega(\vec{r}')) d^3r' \quad (10.6)$$

On envisage le cas de sources non linéaires disposées selon un réseau bidimensionnel sur une surface. De cette façon, le terme source non linéaire se met sous forme d'une série de Fourier que l'on exprime selon

$$\vec{P}_{2\omega}^{(2)}(\vec{E}_\omega(\vec{r})) = \sum_{\vec{g}} \vec{P}_{2\omega, \vec{g}}^{(2)}(\vec{E}_\omega) e^{i(\vec{K}_{//} + \vec{g}) \cdot \vec{p}} \delta(z) \quad (10.7)$$

où les vecteurs  $\vec{g}$  correspondent aux vecteurs du réseau réciproque du système.

On montre, après avoir injecté (10.7) dans (10.6), et en appliquant la décomposition de Weyl au tenseur de Green, que l'on obtient l'expression suivante,

$$\vec{E}_{2\omega}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} \vec{E}_{2\omega, \vec{g}} e^{i(\vec{K}_{//} + \vec{g}) \cdot \vec{p}} e^{i\sqrt{K^2 - |\vec{K}_{//} + \vec{g}|^2} |z|} \quad (10.8)$$

avec

$$\vec{E}_{2\omega, \vec{g}} = -\frac{i\mu_0\omega^2}{\pi |K_z|} \left[ \overleftarrow{I} - \frac{1}{K^2} \vec{K} \otimes \vec{K} \right] \vec{P}_{2\omega, \vec{g}}^{(2)}(\vec{E}_\omega) \quad (10.9)$$

ainsi que

$$\vec{K} = \vec{K}_{//} + \vec{g} + \sqrt{K^2 - |\vec{K}_{//} + \vec{g}|^2} \vec{e}_z \quad (10.10)$$

où

$$\vec{K}_{//} = 2 \vec{k}_{//} \quad (10.11)$$

On définit le coefficient  $\tau = \frac{J_{2\omega}}{J_{0,\omega}}$  comme le rapport du flux du Poynting transmis à  $2\omega$  sur le flux du Poynting incident à  $\omega$ . On montre que

$$\tau = \frac{1}{2 \left| \vec{E}_{0,\omega} \right|^2 \operatorname{Re} [k_z]} \sum_{\vec{g}} \left| \vec{E}_{2\omega, \vec{g}} \right|^2 \operatorname{Re} \left[ \sqrt{K^2 - \left| \vec{K}_{//} + \vec{g} \right|^2} \right] \quad (10.12)$$

On sait de plus que

$$\vec{P}_{2\omega}^{(2)}(\vec{E}_\omega(\vec{r})) = d(\vec{r}) \overline{E}_\omega(\vec{r}) \quad (10.13)$$

où  $d$  est le tenseur qui traduit la susceptibilité non linéaire tel que

$$d = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{bmatrix} \quad (10.14)$$

et

$$\overline{E}_\omega(\vec{r}) = \begin{bmatrix} E_{\omega,x}^2(\vec{r}) \\ E_{\omega,y}^2(\vec{r}) \\ E_{\omega,z}^2(\vec{r}) \\ 2E_{\omega,y}(\vec{r})E_{\omega,z}(\vec{r}) \\ 2E_{\omega,z}(\vec{r})E_{\omega,x}(\vec{r}) \\ 2E_{\omega,x}(\vec{r})E_{\omega,y}(\vec{r}) \end{bmatrix} \quad (10.15)$$

où ici le champ  $\vec{E}_\omega(\vec{r})$  est le champ dans le vide qui s'écrit en fonction du coefficients de Fresnel  $t$  selon

$$\vec{E}_\omega(\vec{r}) = t \vec{E}_{0,\omega} e^{i \vec{k}_{//} \cdot \vec{\rho}} e^{i k_z z} \quad (10.16)$$

et, du fait de la répartition périodique sur la surface des non linéarités, on écrit

$$d(\vec{r}') = \sum_{\vec{g}} d_{\vec{g}} e^{i\vec{g} \cdot \vec{\rho}} \delta(z) \quad (10.17)$$

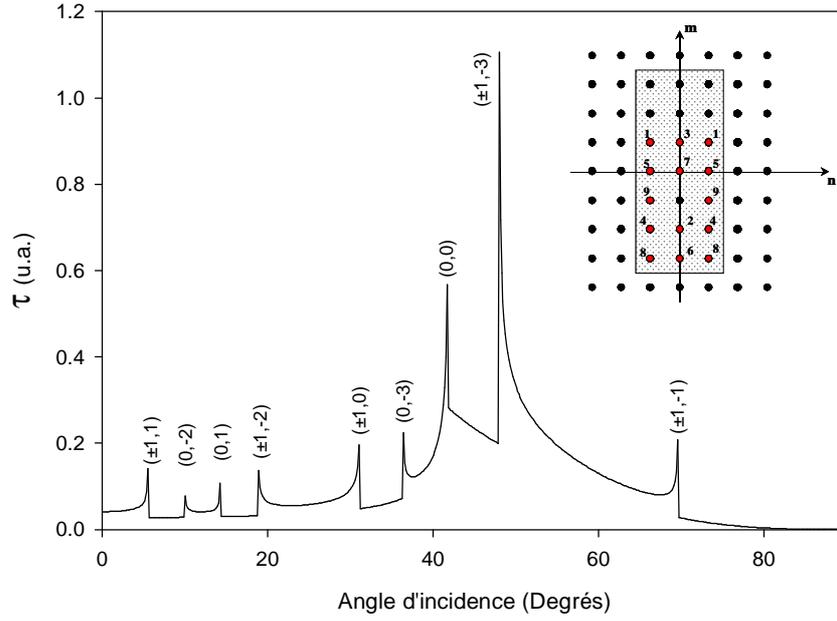
où, pour rappel, on définit

$$d_{\vec{g}} = d \frac{1}{\sigma} \int_{\sigma} e^{-i\vec{g} \cdot \vec{\rho}} d^2\rho \quad (10.18)$$

ainsi, on déduit de ces expressions l'expression de  $\tau$

$$\begin{aligned} \tau = & \frac{\omega^3 |t|^4 |E_{0,\omega}|^2 \beta^2}{2\pi^2 c^3 \sqrt{\varepsilon_\omega} \cos \theta} \sum_{\vec{g}} \sin^2(\Phi_{\vec{g}}) \\ & \frac{\left| \frac{1}{\sigma} \int_{\sigma} e^{-i\vec{g} \cdot \vec{\rho}} d^2\rho \right|^2}{\sqrt{\left(\frac{2\omega}{c}\right)^2 - \left|2\vec{k}_{//} + \vec{g}\right|^2}} \Theta \left[ \left(\frac{2\omega}{c}\right)^2 - \left|2\vec{k}_{//} + \vec{g}\right|^2 \right] \end{aligned} \quad (10.19)$$

où  $\sigma$  est l'aire d'une maille élémentaire,  $\Phi_{\vec{g}}$  un angle fonction de  $\vec{g}$  par rapport aux axes optiques des éléments non-linéaires et  $\beta$  est un coefficient qui traduit la non linéarité. Si on choisit les paramètres suivants pour le système,  $\lambda = 630 \text{ nm}$ ,  $a = 500 \text{ nm}$ ,  $R = 5 \text{ nm}$ ,  $\varepsilon_\omega = 2,25$ ,  $\beta = 2,82 \cdot 10^{-11} \text{ m.V}^{-1}$ , on obtient la courbe suivante en fonction de l'angle d'incidence,



Il est intéressant de remarquer que les positions des pics obtenus correspondent aux angles qui annulent le terme

$$\sqrt{\left(\frac{2\omega}{c}\right)^2 - \left|2\vec{k}_{//} + \vec{g}\right|^2} \quad (10.20)$$

qui apparaît au dénominateur de l'expression (10.19). Ainsi, on montre que les pics qui apparaissent en fonction de la longueur d'onde peuvent être associés à certains vecteurs  $\vec{g}$  du réseau réciproque; l'angle correspondant à un vecteur  $\vec{g}$  donné pouvant être calculé à partir de (10.20). Sur la courbe nous avons spécifié les ordres associés à chaque pic. En encadré, en haut à droite de la courbe, nous avons schématisé le réseau réciproque en numérotant les ordres de diffraction en fonction de l'ordre d'apparition des pics lorsque l'angle d'incidence augmente. De plus, la fonction d'Heaviside qui intervient dans l'expression (10.19) permet de faire une première analyse de la courbe donnant le coefficient  $\tau$  en fonction de l'angle d'incidence. On constate en effet que chaque pic présente une croissance ou une décroissance soit brutale soit progressive. Chaque apparition (ou disparition) soudaine d'un pic correspond alors au passage de l'ordre de diffraction

à  $2\omega$  de l'état non-homogène à homogène (et réciproquement). De ce fait, le calcul que nous avons présenté ne tenant pas compte des effets de diffraction multiple, on peut se demander dans qu'elle mesure les anomalies de Wood sont susceptibles d'intervenir dans le cadre d'un modèle plus détaillé, ce qui nécessite une étude plus approfondie.

## Densité de modes

Deux paramètres importants susceptibles de pouvoir être extraits de la matrice  $S$  sont la densité de modes  $\rho(\omega)$  (DOS) et la densité locale de modes  $\rho(\omega, \vec{r})$  (LDOS).

On montre pour un ensemble d'états propres normalisés  $\left\{ \omega_{\eta, \vec{k}}, \left| \Psi_{\eta, \vec{k}} \right\rangle \right\}$  que l'on peut écrire

$$\rho(\omega, \vec{r}) = \sum_{\eta, \vec{k}} \left| \langle \vec{r} | \Psi_{\eta, \vec{k}} \rangle \right|^2 g(\omega - \omega_{\eta, \vec{k}}) \quad (10.21)$$

avec

$$g(\omega - \omega_{\eta, \vec{k}}) = \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}(\omega_{\eta, \vec{k}})}{(\omega - \text{Re}(\omega_{\eta, \vec{k}}))^2 + \text{Im}^2(\omega_{\eta, \vec{k}})} \quad (10.22)$$

telle que

$$\lim_{\text{Im}(\omega_{\eta, \vec{k}}) \rightarrow 0} g(\omega - \omega_{\eta, \vec{k}}) = \delta(\omega - \omega_{\eta, \vec{k}}) \quad (10.23)$$

Par ailleurs  $\rho(\omega)$  se déduit facilement de  $\rho(\omega, \vec{r})$  comme étant

$$\rho(\omega) = \int \rho(\omega, \vec{r}) d^3r \quad (10.24)$$

Usuellement on définit  $\rho(\omega)$  et  $\rho(\omega, \vec{r})$  en fonction du tenseur de Green associé au système physique caractérisé par l'ensemble  $\left\{ \omega_{\eta, \vec{k}}, \left| \Psi_{\eta, \vec{k}} \right\rangle \right\}$ . Si la matrice  $S$  est exprimée en fonction de  $\omega$ , il est possible d'écrire celle-ci sous la forme (cf Centeno *et al* [A4,5])

$$S(\omega, \vec{k}) = \sum_{\eta} \frac{\left| \Psi_{\eta, \vec{k}} \right\rangle \left\langle \Psi_{\eta, \vec{k}} \right|}{\omega - \omega_{\eta, \vec{k}}} + S_h(\omega, \vec{k}) \quad (10.25)$$

Cette expression de la matrice  $S$  (*ici exprimée dans l'hypothèse de pôles simples*) est

comparable à l'expression d'une fonction de Green au terme  $S_h(\omega, \vec{k})$  près. C'est précisément ce terme qui empêche l'utilisation directe de la matrice  $S$  comme on utiliserait une fonction de Green pour le calcul de  $\rho(\omega)$  et  $\rho(\omega, \vec{r})$ . Néanmoins, on voit que l'on peut déterminer  $\rho(\omega, \vec{r})$  et  $\rho(\omega)$  à partir des expressions (10.21) et (10.24) pourvu que l'on sache extraire de  $S$  les valeurs de  $\omega_{\eta, \vec{k}}$  ainsi que  $\left| \langle \vec{r} | \Psi_{\eta, \vec{k}} \rangle \right|^2$ . Les valeurs de  $\omega_{\eta, \vec{k}}$  peuvent être obtenues, comme nous l'avons déjà vu, par la recherche des pôles de  $S$ . Quant à  $\left| \langle \vec{r} | \Psi_{\eta, \vec{k}} \rangle \right|^2$  on l'obtient comme suit. Il s'agit de déterminer les modes propres  $|\Psi_{\eta, \vec{k}}\rangle$  du champ pour chaque valeurs propres  $\omega_{\eta, \vec{k}}$  définies pour un  $\vec{k}$  donné dans une base donnée  $|\sigma\rangle$ . En prenant quelques précautions, il est aisé de montrer que le projecteur  $|\Psi_{\eta, \vec{k}}\rangle \langle \Psi_{\eta, \vec{k}}|$  se détermine à partir de l'expression suivante ( $\varepsilon$  complexe)

$$|\Psi_{\eta, \vec{k}}\rangle \langle \Psi_{\eta, \vec{k}}| = \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \varepsilon S(\omega_{\eta, \vec{k}} + \varepsilon, \vec{k}) \quad (10.26)$$

Ainsi, si on cherche  $\left| \langle \sigma | \Psi_{\eta, \vec{k}} \rangle \right|^2$ , il vient naturellement

$$\left| \Psi_{\eta, \vec{k}}(\sigma) \right|^2 = \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} \varepsilon \langle \sigma | S(\omega_{\eta, \vec{k}} + \varepsilon, \vec{k}) | \sigma \rangle \quad (10.27)$$

Dans notre cas, l'intérêt de la détermination de la densité de modes électromagnétique concerne le calcul des forces de Van der Waals et des propriétés de fluorescences de molécules [L1-5,7-11]. Il serait alors possible de voir, entre autre, comment les structures que nous avons étudiées pourraient éventuellement modifier le comportement des interactions inter-atomiques ou encore les propriétés de fluorescence de certaines molécules.

Pour terminer, nous espérons fortement que les domaines que nous avons commencé à explorer dans la suite de ce travail de thèse déboucheront sur des applications concrètes et/ou d'autres idées intéressantes.

# Sixième partie

## Annexes

# Annexe A : Diffraction par un réseau

On introduit ici le modèle de diffraction vectorielle, prenant en compte la polarisation du champ électromagnétique. Ce modèle est basé sur le théorème d'extinction, qui a été l'objet de notre travail de DEA. Le théorème d'extinction constitue une généralisation de la théorie scalaire de la diffraction de Huygens-Fresnel.

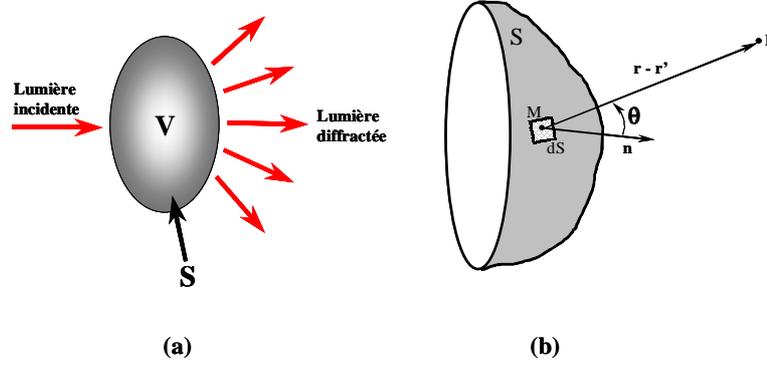


Figure A1 : Schéma du problème de diffraction

Avant tout, nous rappelons l'expression du théorème d'extinction (cf schémas A1) :

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{r}) - \frac{1}{k^2} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \int_S \left\{ \vec{E}(\vec{r}') \frac{\partial g(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{n}} - g(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}')}{\partial \vec{n}} \right\} d^2 r' \quad (10.28)$$

pour  $\vec{r}, \vec{r}' \notin V$ , et

$$\vec{E}_0(\vec{r}) = \frac{1}{k^2} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \int_S \left\{ \vec{E}(\vec{r}') \frac{\partial g(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \vec{n}} - g(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}')}{\partial \vec{n}} \right\} d^2 r' \quad (10.29)$$

pour  $\vec{r} \in V, \vec{r}' \notin V$ ,

et où

$$g(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (10.30)$$

est le terme scalaire du propagateur du champ électromagnétique dans un milieu homogène. Nous notons que ce théorème peut être également démontré à partir de considérations sur la structure de la matière, assimilée alors à un ensemble de dipôles couplés. Cet aspect qui a été également traité lors du DEA est particulièrement bien expliqué dans l'ouvrage de Born et Wolf [N2]. On peut également se reporter aux références suivantes [H1-12].

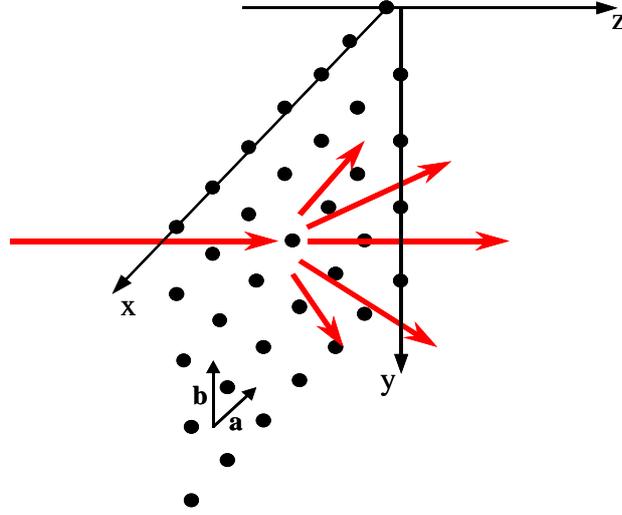


Figure A2 : Schéma de la configuration étudiée.

Dans le problème qui nous intéresse, nous nous focalisons sur l'expression (10.28), qui peut s'écrire symboliquement :

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{r}) + \mathfrak{S} \vec{E}(\vec{r}) \quad (10.31)$$

et qui peut être développée selon l'expression :

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{r}) + \mathfrak{S} \vec{E}_0(\vec{r}) + \mathfrak{S}\mathfrak{S} \vec{E}_0(\vec{r}) + \mathfrak{S}\mathfrak{S}\mathfrak{S} \vec{E}_0(\vec{r}) + \dots \quad (10.32)$$

qui permet d'exprimer le champ  $\vec{E}(\vec{r})$  uniquement en fonction du champ incident

$\vec{E}_0(\vec{r})$ . Dans la suite, nous nous limitons aux seuls termes  $\vec{E}_0(\vec{r})$  et  $\Im \vec{E}_0(\vec{r})$  de la série. On note que l'on est en droit de se demander dans quel mesure cette série est susceptible de converger. On introduit le champ incident comme une onde plane telle que :

$$\vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (10.33)$$

Par ailleurs, la fonction de Green  $g(\vec{r}, \vec{r}')$  peut s'écrire, selon le théorème de Weyl, sous la forme :

$$g(\vec{\rho}, \vec{\rho}', z, z') = -\frac{i}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \frac{e^{i\sqrt{k^2-q^2}|z-z'|}}{\sqrt{k^2-q^2}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{\rho}-\vec{\rho}')} d^2q \quad (10.34)$$

Ainsi, à partir de (10.28),(10.32),(10.33) et (10.34), un calcul simple permet d'expliciter le terme  $\Im \vec{E}_0(\vec{r})$  sous la forme :

$$\Im \vec{E}_0(\vec{r}) = -\frac{1}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \overleftrightarrow{[d]} \left[ 1 + \frac{k_z}{\sqrt{k^2-q^2}} \right] e^{i\sqrt{k^2-q^2}z} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} d^2q \int_S e^{i(\vec{k} // -\vec{q}) \cdot \vec{\rho}'} d^2\rho' \vec{E}_0 \quad (10.35)$$

où on a posé

$$\overleftrightarrow{[d]} = \frac{1}{k^2} \begin{bmatrix} q_x^2 - k^2 & q_x q_y & q_x q_z \\ q_x q_y & q_y^2 - k^2 & q_y q_z \\ q_x q_z & q_y q_z & -q^2 \end{bmatrix} \quad (10.36)$$

On considère la surface d'intégration  $S$  comme étant  $S = \bigcup_{\alpha,\beta=-N}^N S_{\alpha,\beta}$  avec  $S_{0,0} = S_0$  et de façon telle que l'on ait :

$$\vec{\rho}(\alpha, \beta) = \alpha \vec{a} + \beta \vec{b} \quad (10.37)$$

(où  $|\vec{a}| = a$  et  $|\vec{b}| = b$  et  $\vec{a}, \vec{b}$  orthogonaux et  $S_0 = ab$ ), et il vient :

$$\begin{aligned} \Im \vec{E}_0(\vec{r}) &= -\frac{1}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \overleftrightarrow{[d]} \left[ 1 + \frac{k_z}{\sqrt{k^2-q^2}} \right] e^{i\sqrt{k^2-q^2}z} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} d^2q \\ &\quad \sum_{\alpha,\beta=-N}^N e^{i(\vec{k} // -\vec{q}) \cdot \vec{\rho}(\alpha,\beta)} \int_{S_0} e^{i(\vec{k} // -\vec{q}) \cdot \vec{s}} d^2s \vec{E}_0 \end{aligned} \quad (10.38)$$

Dès lors cette expression peut nous conduire à l'écriture du champ lointain. On montre en effet que lorsque  $z$  tend vers l'infini il est possible d'écrire :

$$\int_{\Sigma} g(\vec{q}) e^{i\sqrt{k^2-q^2}z} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} d^2q = -i2\pi k g(\vec{q}_0) \frac{e^{ikr}}{r} \cos\theta \quad (10.39)$$

Avec :

$$\vec{q}_0 = \begin{bmatrix} k \sin\theta \cos\varphi \\ k \sin\theta \sin\varphi \\ 0 \end{bmatrix} \quad (10.40)$$

et

$$\vec{r} = \begin{bmatrix} \vec{\rho} \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \sin\theta \cos\varphi \\ r \sin\theta \sin\varphi \\ r \cos\theta \end{bmatrix} \quad (10.41)$$

où  $(r, \theta, \varphi)$  sont les coordonnées sphériques usuelles dont est fonction  $\Im \vec{E}_0(\vec{r})$ .

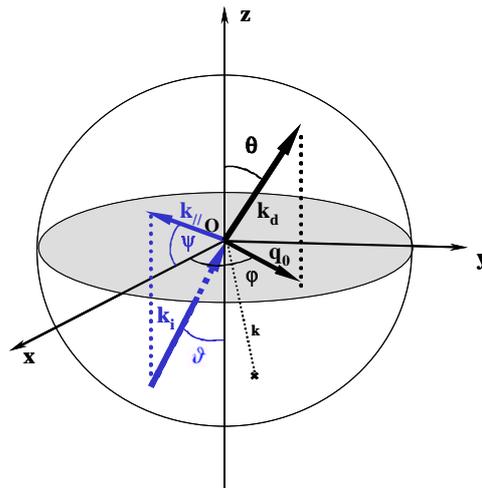


Figure A3 :Représentation des coordonnées sphériques utilisées dans la sphère de rayon  $k$ .

Le plan Oxy est le plan du réseau de diffraction.

Ainsi on obtient après arrangement de l'expression :

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S} \vec{E}_0(\vec{r}') &= \frac{ik}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} [\cos \theta + \cos \vartheta] \int_{S_0} e^{i(\vec{k}_{//} - \vec{q}_0) \cdot \vec{s}} d^2s & (10.42) \\
&\frac{\sin(\frac{k}{2}a\eta(\sin \vartheta \cos \phi - \sin \theta \cos \varphi))}{\sin(\frac{k}{2}a(\sin \vartheta \cos \phi - \sin \theta \cos \varphi))} \frac{\sin(\frac{k}{2}b\eta(\sin \vartheta \sin \phi - \sin \theta \sin \varphi))}{\sin(\frac{k}{2}b(\sin \vartheta \sin \phi - \sin \theta \sin \varphi))} \\
&\begin{bmatrix} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1 & \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \\ \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 1 & \cos \theta \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \theta \sin \varphi & -\sin^2 \theta \end{bmatrix} \vec{E}_0
\end{aligned}$$

où

$$\vec{k} = \begin{bmatrix} k \sin \vartheta \cos \phi \\ k \sin \vartheta \sin \phi \\ k \cos \vartheta \end{bmatrix} \quad (10.43)$$

avec  $(\vartheta, \phi)$  les angles des coordonnées sphériques usuelles décrivant l'orientation du vecteur d'onde  $\vec{k}$  de l'onde incidente.

Ainsi on définit

$$\vec{k}_{//} - \vec{q}_0 = k \begin{bmatrix} \sin \vartheta \cos \phi - \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \phi - \sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} \quad (10.44)$$

# Annexe B : Modèle analytique de diffraction sur réseau basé sur l'équation de Lippmann-Schwinger

Nous présentons ici une généralisation au cas de l'électromagnétisme du modèle scalaire de diffraction perturbatif introduit par S. T. Ali *et al* [B3]. On se propose d'étudier une géométrie identique à celle de l'annexe A (cf figure A2).

On considère l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{r}) + \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d^3r' \quad (10.45)$$

telle que  $U(\vec{r})$  puisse s'écrire selon une répétition périodique de motifs élémentaires (cf figure A2) :

$$U(\vec{r}) = \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} U_0(\vec{r} - \vec{\rho}(\alpha, \beta)) \quad (10.46)$$

avec

$$\vec{\rho}(\alpha, \beta) = \alpha \vec{a} + \beta \vec{b} \quad (10.47)$$

(où  $|\vec{a}| = a$  et  $|\vec{b}| = b$  et  $\vec{a}, \vec{b}$  orthogonaux), et on pose pour expression de l'onde incidente

$$\vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (10.48)$$

ainsi que :

$$\vec{E}_D(\vec{r}) = \vec{E}(\vec{r}) - \vec{E}_0(\vec{r}) \quad (10.49)$$

Ensuite, l'équation de Lippmann-Schwinger peut se développer au second ordre selon :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) &= \vec{E}_0(\vec{r}) + \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}_0(\vec{r}') d^3 r' + \\ &\int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') d^3 r' \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}', \vec{r}'') U(\vec{r}'') \vec{E}_0(\vec{r}'') d^3 r'' \end{aligned} \quad (10.50)$$

Soit encore :

$$\begin{aligned} \vec{E}_D(\vec{r}) &= \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}'} d^3 r' + \\ &\int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') d^3 r' \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}', \vec{r}'') U(\vec{r}'') \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}''} d^3 r'' \end{aligned} \quad (10.51)$$

## Calcul du premier ordre

On calcule dans un premier temps  $I$  telle que :

$$I = \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}_0(\vec{r}') d^3 r' = \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U_0(\vec{r}' - \vec{\rho}(\alpha, \beta)) \vec{E}_0(\vec{r}') d^3 r' \quad (10.52)$$

on pose :

$$\vec{s} = \vec{r}' - \vec{\rho}(\alpha, \beta) \quad (10.53)$$

d'où

$$I = \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{s} + \vec{\rho}(\alpha, \beta)) U_0(\vec{s}) \vec{E}_0(\vec{s} + \vec{\rho}(\alpha, \beta)) d^3 s \quad (10.54)$$

Par ailleurs, on sait que le propagateur du vide s'écrit comme [G8] :

$$\overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') = (\overleftarrow{I} + \frac{1}{k^2} \overleftrightarrow{\nabla} \overleftrightarrow{\nabla}) g_0(\vec{r}, \vec{r}') \quad (10.55)$$

avec

$$g_0(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (10.56)$$

La décomposition de Weyl permet d'écrire  $\overleftrightarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}')$  sous la forme

$$\overleftrightarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{ik}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \frac{dpdq}{m} \left( \overleftrightarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p} \otimes \vec{p} \right) e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (10.57)$$

avec

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} kp \\ kq \\ km \end{pmatrix} \quad (10.58)$$

où

$$p^2 + q^2 + m^2 = 1 \quad (10.59)$$

Ainsi si l'on reprend l'intégrale  $I$ , il vient :

$$I = \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} \int_V \left[ -\frac{ik}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \frac{dpdq}{m} \left( \overleftrightarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p} \otimes \vec{p} \right) e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{s}-\vec{p}(\alpha, \beta))} \right] U_0(\vec{s}) \vec{E}_0(\vec{s} + \vec{p}(\alpha, \beta)) d^3s \quad (10.60)$$

Compte tenu de l'expression de  $\vec{E}_0(\vec{r})$ , on peut écrire  $I$  comme

$$I = -\frac{ik}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \frac{dpdq}{m} \left( \overleftrightarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p} \otimes \vec{p} \right) \vec{E}_0 e^{i\vec{p}\vec{r}} \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} e^{i(\vec{k}-\vec{p})\vec{p}(\alpha, \beta)} \int_V U_0(\vec{s}) e^{i(\vec{k}-\vec{p})\vec{s}} d^3s \quad (10.61)$$

En définissant  $\vec{k}$  comme :

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k \sin \theta \cos \varphi \\ k \sin \theta \sin \varphi \\ k \cos \theta \end{pmatrix} \quad (10.62)$$

On a

$$\sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} e^{i(\vec{k}-\vec{p})\vec{p}(\alpha, \beta)} = (2\pi)^2 \sum_{\alpha = -\infty}^{\infty} \delta((pka - ka \sin \theta \cos \varphi) - 2\pi\alpha) \quad (10.63)$$

$$\sum_{\beta=-\infty}^{\infty} \delta((qbk - kb \sin \theta \sin \varphi) - 2\pi\beta)$$

Ce qui implique :

$$pk = \frac{2\pi}{a}\alpha + k \sin \theta \cos \varphi \quad \text{et} \quad qk = \frac{2\pi}{b}\beta + k \sin \theta \sin \varphi \quad (10.64)$$

et on a :

$$I = -\frac{i}{2kab} \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \frac{1}{m_{\alpha,\beta}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} \otimes \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} \right) \int_V U_0(\overrightarrow{s}) e^{i(\overrightarrow{k} - \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta})\overrightarrow{s}} d^3s e^{i\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}\overrightarrow{r}} \overrightarrow{E}_0 \quad (10.65)$$

Finalement on obtient :

$$I = \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}\overrightarrow{r}} \overrightarrow{E}_0 \quad (10.66)$$

avec :

$$\overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} = -\frac{i}{2kab m_{\alpha,\beta}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} \otimes \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} \right) \int_V U_0(\overrightarrow{s}) e^{i(\overrightarrow{k} - \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta})\overrightarrow{s}} d^3s \quad (10.67)$$

et :

$$\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} = \begin{pmatrix} kp_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{a}\alpha + k \sin \theta \cos \varphi \\ kq_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{b}\beta + k \sin \theta \sin \varphi \\ km_{\alpha,\beta} = \pm k \sqrt{1 - p_{\alpha,\beta}^2 - q_{\alpha,\beta}^2} \end{pmatrix} \quad (10.68)$$

## Calcul du second ordre

On considère maintenant la double intégrale suivante :

$$J = \int_V \overleftarrow{G}_0(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}') U(\overrightarrow{r}') d^3r' \int_V \overleftarrow{G}_0(\overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}'') U(\overrightarrow{r}'') \overrightarrow{E}_0(\overrightarrow{r}'') d^3r'' \quad (10.69)$$

Or, on a vu que :

$$\int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}_0(\vec{r}') d^3 r' = \sum_{\alpha, \beta = -N}^N \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha, \beta} e^{i \vec{p}_{\alpha, \beta} \vec{r}} \vec{E}_0 \quad (10.70)$$

Donc on peut écrire :

$$J = \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') d^3 r' \sum_{\alpha, \beta = -N}^N \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha, \beta} e^{i \vec{p}_{\alpha, \beta} \vec{r}'} \vec{E}_0 \quad (10.71)$$

et compte tenu des calculs déjà entrepris, on peut encore mettre l'expression ci-dessus sous la forme :

$$J = \int_V \left[ -\frac{ik}{8\pi^2} \int_{\Sigma} \frac{dpdq}{m} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p} \otimes \vec{p} \right) e^{i \vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')} \right] \sum_{\alpha', \beta' = -\infty}^{\infty} U_0(\vec{r}' - \vec{\rho}(\alpha', \beta')) d^3 r' \sum_{\alpha, \beta = -N}^N \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha, \beta} e^{i \vec{p}_{\alpha, \beta} \vec{r}'} \vec{E}_0 \quad (10.72)$$

On pose :

$$\vec{s} = \vec{r}' - \vec{\rho}(\alpha', \beta') \quad (10.73)$$

et ainsi on écrit :

$$J = -\frac{ik}{8\pi^2} \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{\infty} \int_{\Sigma} \frac{dpdq}{m} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p} \otimes \vec{p} \right) e^{i \vec{p} \vec{r}} \sum_{\alpha', \beta' = -\infty}^{\infty} e^{i(\vec{p}_{\alpha, \beta} - \vec{p}) \vec{\rho}(\alpha', \beta')} \int_V e^{i(\vec{p}_{\alpha, \beta} - \vec{p}) \vec{s}} U_0(\vec{s}) d^3 s \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha, \beta} \vec{E}_0 \quad (10.74)$$

On a :

$$\sum_{\alpha', \beta' = -\infty}^{\infty} e^{i(\vec{p}_{\alpha, \beta} - \vec{p}) \vec{\rho}(\alpha', \beta')} = (2\pi)^2 \sum_{\alpha' = -\infty}^{\infty} \delta((pka - kap_{\alpha, \beta}) - 2\pi\alpha') \sum_{\beta' = -\infty}^{\infty} \delta((qbk - kbq_{\alpha, \beta}) - 2\pi\beta') \quad (10.75)$$

Ce qui implique :

$$pk = \frac{2\pi}{a}\alpha' + kp_{\alpha,\beta} \quad \text{et} \quad qk = \frac{2\pi}{b}\beta' + kq_{\alpha,\beta} \quad (10.76)$$

et :

$$J = -\frac{i}{2\pi kab} \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha',\beta'=-\infty}^{\infty} \frac{1}{m_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \otimes \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \right) \int_V e^{i(\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} - \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}) \cdot \overrightarrow{s}} U_0(\overrightarrow{s}) d^3 s \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \cdot \overrightarrow{r}} \overrightarrow{E}_0 \quad (10.77)$$

Finalement on obtient :

$$J = \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha',\beta'=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \cdot \overrightarrow{r}} \overrightarrow{E}_0 \quad (10.78)$$

avec :

$$\overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = -\frac{i}{2kab} \frac{1}{m_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \otimes \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \right) \int_V e^{i(\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} - \overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}) \cdot \overrightarrow{s}} U_0(\overrightarrow{s}) d^3 s \quad (10.79)$$

et :

$$\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \begin{pmatrix} kp_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \frac{2\pi}{a}\alpha' + kp_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{a}(\alpha + \alpha') + k \sin \theta \cos \varphi \\ kq_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \frac{2\pi}{b}\beta' + kq_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{b}(\beta + \beta') + k \sin \theta \sin \varphi \\ km_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \pm k \sqrt{1 - p_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}{}^2 - q_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}{}^2} \end{pmatrix} \quad (10.80)$$

## Expression du champ développée au second ordre

En définitive on peut donc écrire :

$$\overrightarrow{E}_D(\overrightarrow{r}) = \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta} \cdot \overrightarrow{r}} \overrightarrow{E}_0 + \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha',\beta'=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\overrightarrow{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \cdot \overrightarrow{r}} \overrightarrow{E}_0 \quad (10.81)$$

Soit encore :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) &= \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}} + \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\vec{p}_{\alpha,\beta}\vec{r}} \vec{E}_0 + \\ &\quad \sum_{\alpha,\beta=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha',\beta'=-\infty}^{\infty} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} e^{i\vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}\vec{r}} \vec{E}_0 \end{aligned} \quad (10.82)$$

avec pour rappel :

$$\overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta} = -\frac{i}{2kab m_{\alpha,\beta}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p}_{\alpha,\beta} \otimes \vec{p}_{\alpha,\beta} \right) \int_V U_0(\vec{s}) e^{i(\vec{k} - \vec{p}_{\alpha,\beta})\vec{s}} d^3s \quad (10.83)$$

et :

$$\vec{p}_{\alpha,\beta} = \begin{pmatrix} kp_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{a}\alpha + k \sin \theta \cos \varphi \\ kq_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{b}\beta + k \sin \theta \sin \varphi \\ km_{\alpha,\beta} = \pm k \sqrt{1 - p_{\alpha,\beta}^2 - q_{\alpha,\beta}^2} \end{pmatrix} \quad (10.84)$$

ainsi que :

$$\overleftarrow{\Gamma}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = -\frac{i}{2kab m_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'}} \left( \overleftarrow{I} - \frac{1}{k^2} \vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \otimes \vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} \right) \int_V e^{i(\vec{p}_{\alpha,\beta} - \vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'})\vec{s}} U_0(\vec{s}) d^3s \quad (10.85)$$

et :

$$\vec{p}_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \begin{pmatrix} kp_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \frac{2\pi}{a}\alpha' + kp_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{a}(\alpha + \alpha') + k \sin \theta \cos \varphi \\ kq_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \frac{2\pi}{b}\beta' + kq_{\alpha,\beta} = \frac{2\pi}{b}(\beta + \beta') + k \sin \theta \sin \varphi \\ km_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta'} = \pm k \sqrt{1 - p_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta' 2} - q_{\alpha,\beta}^{\alpha',\beta' 2}} \end{pmatrix} \quad (10.86)$$

# Annexe C : Présentation de quelques méthodes d'analyse du champ électromagnétique

Nous présentons ici le principe de quelques méthodes d'analyse du champ électromagnétique, à savoir les méthodes de Lippmann-Schwinger, Rayleigh et Chandezon. Le but n'est pas d'en refaire la théorie mais seulement de donner au lecteur une idée du principe de chacune de ces méthodes. Aussi, nous avons choisi quelques cas particuliers, à titre d'exemple, tirés de la littérature [G1-9,I1-4,J1-3]. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à un certain nombre de références.

## Méthode basée sur l'équation de Lippmann-Schwinger

La méthode de l'équation de Lippmann-Schwinger est basée sur l'utilisation des méthodes de Green. Ainsi, par exemple, on considère l'équation de propagation du champ électromagnétique dans le vide donnée par

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}_0(\vec{r}) - k^2 \vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{0} \quad (10.87)$$

et dont  $\vec{E}_0(\vec{r})$  est une solution connue qui pourra être assimilée à l'onde incidente dans la suite de notre problème.

On considère ensuite l'équation de propagation suivante

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) - k^2 \varepsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) = \vec{0} \quad (10.88)$$

qui tient compte de la présence d'un milieu matériel décrit par la permittivité  $\varepsilon(\vec{r})$ , et on cherche ainsi le champ  $\vec{E}(\vec{r})$  en présence de cet environnement sous l'effet du champ incident  $\vec{E}_0(\vec{r})$ .

On pose alors

$$U(\vec{r}) = k^2(\varepsilon(\vec{r}) - 1) \quad (10.89)$$

ce qui permet d'écrire (10.88) sous la forme

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) - k^2 \vec{E}(\vec{r}) = U(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) \quad (10.90)$$

On rappelle que le tenseur de Green  $\overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}')$  pour l'équation (10.88) est solution de

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') - k^2 \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') = \overleftarrow{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (10.91)$$

et dont l'expression est donné dans l'annexe B.  $\vec{E}(\vec{r})$  peut s'écrire comme

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{r}) + \int_V \overleftarrow{G}_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d^3 r' \quad (10.92)$$

relation qui constitue donc l'équation intégrale auto-cohérente de Lippmann-Schwinger. Celle-ci peut être résolue numériquement en discrétisant l'espace en cellules de volume  $\Delta V_j$  et ainsi on peut écrire l'intégrale sous la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}_i) = \vec{E}_0(\vec{r}_i) + \sum_j \overleftarrow{G}_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j) U(\vec{r}_j) \vec{E}(\vec{r}_j) \Delta V_j \quad (10.93)$$

qui n'est finalement qu'une relation matricielle de la forme

$$E = E_0 + M E \quad (10.94)$$

où on a

$$E_i = \vec{E}(\vec{r}_i) \quad (10.95)$$

$$E_{0i} = \vec{E}_0(\vec{r}_i) \quad (10.96)$$

ainsi que

$$M_{ij} = \overleftarrow{G}_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j) U(\vec{r}_j) \Delta V_j \quad (10.97)$$

On voit qu'il est alors possible de déduire de (10.94) la solution de  $E$  en fonction de  $E_0$  grâce à

$$E = (I - G_0 U)^{-1} E_0 \quad (10.98)$$

Le problème numérique se ramène au calcul de  $(I - G_0 U)^{-1}$  afin d'en déduire  $E$  et ainsi être capable de connaître le champ dans tout l'espace. La difficulté est que dans l'espace à 3 dimensions, la taille des matrices croît comme  $n^3$  ce qui conduit rapidement à saturer les mémoires numériques. Pour plus de précisions le lecteur peut se reporter aux références suivantes [G1-9].

## Méthode de Rayleigh 2D

On considère une surface présentant le profil suivant

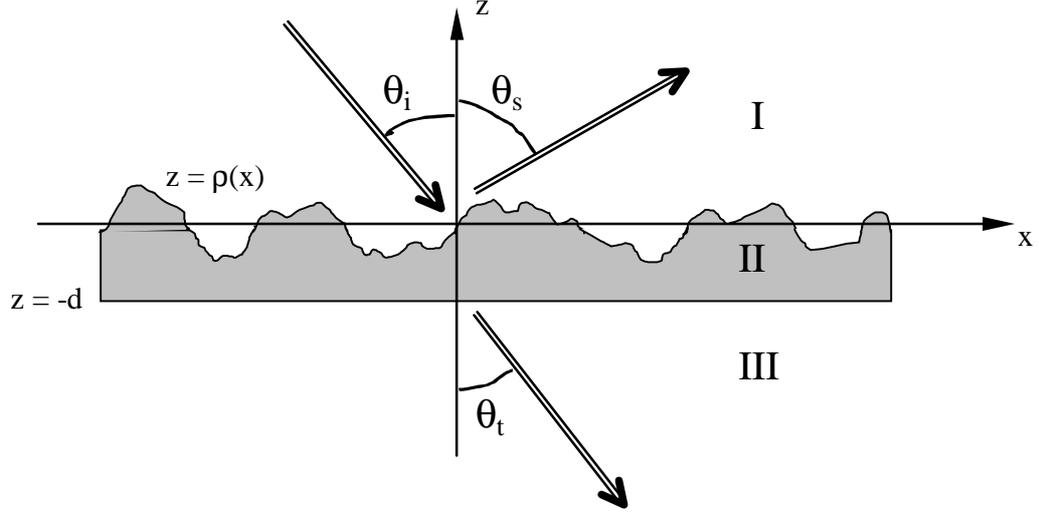


Figure C1 : Exemple de profil rugueux

où  $Oxz$  est le plan d'incidence.

L'hypothèse de Rayleigh consiste à supposer que dans chacune des régions de l'espace le champ peut s'écrire sous la forme d'une superposition d'ondes planes telle que :

$$H_y^I(x, z|\omega) = e^{ikx - i\alpha_0(k, \omega)z} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) e^{iqx + i\alpha_0(q, \omega)z} \quad (10.99)$$

$$H_y^{II}(x, z|\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \{ A(q|k) e^{i\alpha(q, \omega)z} + B(q|k) e^{-i\alpha(q, \omega)z} \} \quad (10.100)$$

$$H_y^{III}(x, z|\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) e^{iqx - i\alpha_0(q, \omega)(z+d)} \quad (10.101)$$

où ici nous avons supposé que nous nous intéressons au cas d'un champ de polarisation TM. On définit par ailleurs

$$\alpha_0(q, \omega) = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - q^2} \quad (10.102)$$

et

$$\alpha(q, \omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - q^2} \quad (10.103)$$

La suite de la procédure consiste alors à établir les conditions aux limites sur chacune

des interfaces. A l'interface II/III, on a ainsi :

$$H_y^{II}(x, z|\omega) = H_y^{III}(x, z|\omega) \quad (10.104)$$

et

$$\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \frac{\partial}{\partial z} H_y^{II}(x, z|\omega) = \frac{\partial}{\partial z} H_y^{III}(x, z|\omega) \quad (10.105)$$

ce qui permet de définir

$$A(q|k) = f_-(q, \omega)T(q|k) \quad (10.106)$$

et

$$B(q|k) = f_+(q, \omega)T(q|k) \quad (10.107)$$

où on a posé

$$f_{\pm}(q, \omega) = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \varepsilon(\omega) \frac{\alpha_0(q, \omega)}{\alpha(q, \omega)} \right] e^{\mp i\alpha(q, \omega)d} \quad (10.108)$$

A l'interface I/II, on doit vérifier

$$H_y^I(x, z|\omega) = H_y^{II}(x, z|\omega) \quad (10.109)$$

ainsi que

$$\frac{\partial}{\partial n} H_y^I(x, z|\omega) = \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \frac{\partial}{\partial n} H_y^{II}(x, z|\omega) \quad (10.110)$$

où  $n$  est la normale à la surface dont le profil est caractérisé par la fonction  $\rho(x)$ .

A partir de là on montre que l'on peut faire apparaître deux relations à savoir :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} M_R(p|q)R(q|k) = N_R(p|k) \quad (10.111)$$

et

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} M_T(p|q)T(q|k) = N_T(p|k) \quad (10.112)$$

où les termes  $M_R(p|q)$ ,  $N_R(p|k)$ ,  $M_T(p|q)$ ,  $N_T(p|k)$  ont chacun une expression analytique.

Dans la mesure où cela ne fait pas l'objet de cet exposé, nous ne les détaillons pas ici, mais

le lecteur peut trouver leur expression dans la référence [12]. On voit alors que les termes  $R(q|k)$  et  $T(q|k)$  qui déterminent complètement le champ peuvent être déduits de ces deux relations. Pour cela on peut procéder de deux manières. Soit on résout les équations numériquement en discrétisant les intégrales, ce qui reviendra à déterminer  $R(q|k)$  et  $T(q|k)$  grâce à une inversion de matrice. Soit on procède à une estimation perturbative de  $R(q|k)$  et  $T(q|k)$ , ce qui définit ce que l'on nomme la méthode de Rayleigh perturbative. On écrit alors :

$$R(q|k) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} R^{(n)}(q|k) \quad (10.113)$$

et

$$T(q|k) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} T^{(n)}(q|k) \quad (10.114)$$

On montre que chaque terme de ces développements peut être calculé par récurrence grâce à des expressions de la forme,

$$R^{(n)}(q|k) = \frac{1}{\varepsilon(\omega)\alpha_0(q, \omega)D_-(q, \omega)} \left[ N_R^{(n)}(q|k) - M_R^{(n)}(q|k) \frac{D_+(k, \omega)}{D_-(k, \omega)} \right] \quad (10.115)$$

$$- \frac{1}{\varepsilon(\omega)\alpha_0(q, \omega)D_-(q, \omega)} \sum_{m=1}^{n-1} \binom{n}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} M_R^{(n-m)}(q|p) R^{(m)}(p|k)$$

avec

$$R^{(0)}(q|k) = 2\pi\delta(q-k) \frac{D_+(k, \omega)}{D_-(k, \omega)} \quad (10.116)$$

et

$$T^{(n)}(q|k) = \frac{-1}{\alpha_0(q, \omega)D_-(q, \omega)} M_T^{(n)}(q|k) \frac{2}{D_-(k, \omega)} \quad (10.117)$$

$$- \frac{1}{\alpha_0(q, \omega)D_-(q, \omega)} \sum_{m=1}^{n-1} \binom{n}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} M_T^{(n-m)}(q|p) T^{(m)}(p|k)$$

avec

$$T^{(0)}(q|k) = 2\pi\delta(q-k) \frac{2}{D_-(k, \omega)} \quad (10.118)$$

Ici les termes  $M_R^{(n)}(q|k)$ ,  $N_R^{(n)}(q|k)$ ,  $M_T^{(n)}(q|k)$  et  $N_T^{(n)}(q|k)$  correspondent aux différents ordres du développement perturbatif de  $M_R(q|k)$ ,  $N_R(q|k)$ ,  $M_T(q|k)$  et  $N_T(q|k)$ , qui présentent une expression analytique pour chaque ordre. Pour indication on a :

$$D_{\pm}(q, \omega) = \Delta_+(q, \omega) \pm \frac{\alpha(q, \omega)}{\varepsilon(\omega)\alpha_0(q, \omega)}\Delta_-(q, \omega) \quad (10.119)$$

où

$$\Delta_{\pm}(p, \omega) = f_-(p, \omega) \pm f_+(p, \omega) \quad (10.120)$$

Pour finir on pourra noter que les expressions de  $M_R(q|k)$ ,  $N_R(q|k)$ ,  $M_T(q|k)$  et  $N_T(q|k)$  font intervenir l'expression de la forme

$$I(\gamma|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\gamma\rho(x)} e^{-iQx} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(i\gamma)^n}{n!} \hat{\rho}^{(n)}(Q) \quad (10.121)$$

avec

$$\hat{\rho}^{(n)}(Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iQx} \rho^n(x) \quad (10.122)$$

qui intervient de façon explicite dans les expressions de  $M_R^{(n)}(q|k)$ ,  $N_R^{(n)}(q|k)$ ,  $M_T^{(n)}(q|k)$  et  $N_T^{(n)}(q|k)$ , et où  $\rho(x)$  est le profil de la surface considérée (cf schéma en début d'annexe). Ainsi, la méthode de Rayleigh perturbative apparaît comme un développement perturbatif par rapport aux  $\hat{\rho}^{(n)}(Q)$  issus directement de l'expression du profil de la surface. La présentation que nous venons de faire de la méthode de Rayleigh n'est pas unique, et pour de plus amples détails nous renvoyons le lecteur aux références [11-4].

## Méthode de Chandezon

La méthode de Chandezon ou méthode C est une méthode en soi originale qui part d'une expression covariante des équations de Maxwell. Ainsi on montre que les équations

de Maxwell peuvent alors s'écrire sous la forme condensée :

$$\begin{cases} e^{ijk} \partial_j E_k = ik_0 \mu \sqrt{g} g^{ij} H_j \\ e^{ijk} \partial_j H_k = -ik_0 \varepsilon \sqrt{g} g^{ij} E_j \end{cases} \quad (10.123)$$

où  $\varepsilon$  et  $\mu$  sont la permittivité et la perméabilité du milieu,  $k_0$  est le vecteur d'onde dans le vide; de plus  $g^{ij}$  est le tenseur métrique contravariant associé au système de coordonnées curvilinéaires qui servent à décrire la géométrie de la surface étudiée. On a  $g = [\det(g^{ij})]^{-1}$ ,  $e^{ijk}$  est l'indice de Levi-Civita et  $i, j$  et  $k$  sont les indices qui définissent les trois axes de coordonnées spatiales. Pour un profil similaire à celui introduit précédemment (cf figure C1) on peut introduire par exemple le système de coordonnées :

$$v = x, \quad u = z - \rho(x), \quad w = y \quad (10.124)$$

et le tenseur métrique contravariant prend la forme :

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} 1 & -\dot{\rho} & 0 \\ -\dot{\rho} & 1 + \dot{\rho}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (10.125)$$

Par exemple, le système d'équations covariantes peut s'écrire dans le cas TE :

$$\frac{\partial}{\partial u} H_v - \frac{\partial}{\partial v} H_u = ik_0 \varepsilon E_y \quad (10.126)$$

$$\frac{\partial}{\partial u} E_y = ik_0 \mu (H_v - \dot{\rho} H_u) \quad (10.127)$$

$$\frac{\partial}{\partial v} E_y = ik_0 \mu (\dot{\rho} H_v - (1 + \dot{\rho}^2) H_u) \quad (10.128)$$

On peut alors éliminer  $H_u$  des équations et on aboutit à :

$$\frac{\partial}{\partial u} E_y = D(v) \frac{\partial}{\partial v} E_y + ik_0 \mu C(v) H_v \quad (10.129)$$

$$\frac{\partial}{\partial u} H_v = \frac{i}{\mu k_0} \left[ \varepsilon \mu k_0^2 E_y + \frac{\partial}{\partial v} \left( C(v) \frac{\partial}{\partial v} E_y \right) \right] + \frac{\partial}{\partial v} (D(v) H_v) \quad (10.130)$$

où on a posé

$$C(v) = \frac{1}{1 + \dot{\rho}} \quad \text{et} \quad D(v) = \frac{\dot{\rho}}{1 + \dot{\rho}} \quad (10.131)$$

Par exemple, si on suppose que le profil décrit est périodique alors il est possible d'expliciter les équations (10.129) et (10.130) en terme de série de Fourier. On définit les coefficients de Fourier  $f_m$  pour une fonction  $f(v)$  tels que

$$f(v) = \sum_m f_m e^{i\alpha_m v} \quad (10.132)$$

ce qui nous conduit alors à l'expression suivante :

$$\frac{d}{du} F = M F \quad (10.133)$$

avec

$$M = \begin{bmatrix} iD_{m-n}\alpha_n & i\mu k_0 C_{m-n} \\ \frac{i}{\mu k_0} (\varepsilon \mu k_0^2 \delta_{m,n} - \alpha_m C_{m-n} \alpha_n) & \alpha_m D_{m-n} \end{bmatrix} \quad (10.134)$$

ainsi que

$$F = \begin{bmatrix} E_{y,m} \\ H_{v,m} \end{bmatrix} \quad (10.135)$$

Le champ dans le réseau complet peut alors être calculé à partir des solutions propres de l'équation (10.133) résolue par des techniques standards. On notera que du fait de la présence des termes en  $\dot{\rho}$ , les profils présentant des variations brutales peuvent conduire à des matrices mal conditionnées susceptibles de présenter des problèmes de résolution numérique. Comme pour la méthode de Rayleigh, nous avons juste présenté ici un cas particulier visant à donner un exemple d'application de la méthode C. Pour plus de détails le lecteur peut se reporter aux références suivantes [J1-3].

# Septième partie

## Bibliographie

## A. Cristaux Photoniques

- [1] H. Benisty, C. Weisbuch, "Les nouveaux concepts de matériaux émetteurs de lumière", Lettre SPM n° 32, Juin 1998
- [2] D. Cassagne, C. Jouanin, D. Bertho, "Photonic band gaps in a two-dimensional graphite structure", Phys. Rev. B 52 (4) R2217 (1995)
- [3] D. Cassagne, C. Jouanin, D. Bertho, "Hexagonal photonic-band-gap structures", Phys. Rev. B 53 (11) 7134 (1996)
- [4] E. Centeno, D. Felbacq "Optical bistability in finite-size nonlinear bidimensional photonic crystals doped by a microcavity", Phys. Rev. B 62 (12) R7683 (2000)
- [5] E. Centeno, D. Felbacq "Rabi oscillations in bidimensional photonic crystals", Phys. Rev. B 62 (15) 10101 (2000)
- [6] C. Girard, A. Dereux, C. Joachim, "Photonic transfer through subwavelength optical waveguides", Europhys. Lett. 44 (6) 686-692 (1998)
- [7] J.D. Joannopoulos R.D. Meade J.N. Winn "Photonic crystals" Princeton University Press 1995
- [8] Ohtaka K. " Energy band of photons and low-energy photon diffraction " Phys. Rev. B 19 (10) 1979 5057-5067
- [9] Pendry J.B. MacKinnon A. " Calculation of Photon Dispersion Relations " Phys. Rev. Lett. 69 (19) 1992 2772-2775
- [10] C.M. Soukoulis "Photonic Band Gap Materials" NATO ASI Series E Vol. 315 1995
- [11] G. Tayeb, D. Maystre, "Rigorous theoretical study of finite-size two-dimensional photonic crystals doped by microcavities", JOSA A 14 (12) 3323 (1997)
- [12] H.M. Van Driel, W.L. Vos "Multiple Bragg wave coupling in photonic band-gap crystals", Phys. Rev. B 62 (15) 9872 (2000)
- [13]-E. Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-states physics and electronics", Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987)
- [14] Divers auteurs, "Photonic Band structures", Journal of Modern Optics 41 (2),

## B. Diffraction, réseaux et surface rugueuse

- [1] Agarwal G.S. " Integral equation treatment of scattering from rough surfaces " Phys. Rev. B 14 (2) 1976 846-848
- [2] Agawal G.S. " Interaction of electromagnetic waves at rough dielectric surfaces " Phys. Rev. B 15 (4) 1977 2371-2383
- [3] S. T. Ali, M. Bace, J.H. Eberly, "Evanescent waves in potential scattering from regular lattices" Phys. Rev. D, 5, 1262 (1972)
- [4] H.A. Bethe, "Theory of diffraction by small holes", Phys. Rev., 66, 163 (1944)
- [5] C.J. Bouwkamp, "On the diffraction of electromagnetic waves by small circular disks and holes", Philips Res. Rep. 5, 401-422, 1950
- [6] C. Eckart, "A general derivation of the formula for the diffraction by a perfect grating", Phys. Rev., 44, 12 (1933)
- [7] J.-J. Greffet "Scattering of electromagnetic waves by rough dielectric surfaces", Phys. Rev. B 37 (11) 6436 (1988)
- [8] Maradudin A.A. Mills D.L. " Scattering and absorption of electromagnetic radiation by a semi-infinite medium in the presence of surface roughness " Phys. Rev. B 11 (4) 1975 1392-1415
- [9] A. M. Marvin, F. Nizzoli, "Theory of Brillouin scattering on a surface grating : Role of surface polaritons", Phys. Rev. B, 45, 20, 12160 (1992)
- [10] L. Pilozzi, A. D'Andrea, R. Del Sole, "Electromagnetic properties of a dielectric grating. I. Propagating, evanescent, and guided waves", Phys. Rev. B, 54, 15, 10751 (1996)
- [11] L. Pilozzi, A. D'Andrea, R. Del Sole, "Electromagnetic properties of a dielectric grating. II. Quantum wells excited by surface waves", Phys. Rev. B, 54, 15, 10763 (1996)
- [12] A. Roberts, "Electromagnetic theory of diffraction by a circular aperture in a

thick, perfectly conducting screen”, JOSA A 4 (10) 1970 (1987)

[13] J.L. Roumiguieres, D. Maystre, R. Petit, ”Diffraction par un réseau lamellaire infiniment conducteur en présence de dioptries parallèles aux lamelles”, Opt. Commun., 7, 402 (1973)

[14] M.G. Weber, D.L. Mills ”Symmetry and the reflectivity of diffraction gratings at normal incidence”, Phys. Rev. B 31 (4) 2510 (1985)

[15] A. Wirgin, A.A. Maradudin ”Resonant enhancement of the electric field in the grooves of bare metallic gratings exposed to S-polarized light” Phys. Rev. B 31 (8) 5573 (1985)

## **C. Réseaux, anomalies de réseaux, plasmons de surface**

[1] A. Adams, J. Moreland, P. K. Hansma, Z. Schlesinger, ”Light emission from surface-plasmon and waveguide modes excited by N atoms near a silver grating”, Phys. Rev. B, 25, 6, 3457 (1982)

[2] R. H. Bjork, A. S. Karakashian, Y. Y. Teng, ”Behaviour of surface-plasma oscillations on grating surfaces”, Phys. Rev. B, 9, 4, 1394 (1974)

[3] P.J. Bliiek, L.C. Botten, R. Deleuil, R.C. Mc Phedran, D. Maystre, ”Inductive grids in the region of diffraction anomalies : theory, experiment, and applications”, IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques, MTT-28 1119-1125 (1980)

[4] D. Deaglehole, ”Coherent and incoherent radiation from optically excited surface plasmons on a metal grating”, Phys. Rev. Lett., 22, 14, 708 (1969)

[5] V.U. Fano, ”Zur theorie der intensitätsanomalien der beugung”, Ann. Phys. 32, 393 (1938)

[6] A. Hessel, A. A. Oliner, ”A new theory of Wood’s anomalies on optical gratings”, Applied Optics 4 (10) 1275 (1965)

[7] A. P. Hibbins, J. R. Sambles, C. R. Lawrence, ”The coupling of microwave radiation

to surface plasmon polaritons and guided modes via dielectric gratings”, *J. Appl. Phys.* 87 (6) 2677 (2000)

[8] T. Inagaki, M. Motosuga, K. Yamamori, E. T. Arakawa, ”Photoacoustic study of plasmon resonance absorption in diffraction grating”, *Phys. Rev. B*, 28, 4, 1740 (1983)

[9] M. Kahl, E. Voges, ”Analysis of plasmon resonance and surface-enhanced Raman scattering on periodic silver structures”, *Phys. Rev. B* 61 (20) 14078 (2000)

[10] S.C. Kitson, W.L. Barnes, G.W. Bradberry, J.R. Sambles, ”Surface profile dependence of surface plasmon band gaps on metallic gratings”, *J. Appl. Phys.* 79 (9) 7383 (1996)

[11] E.S. Koteles, Y.J. Chen, G.J. Sonek, J.M. Ballantyne, ”Influence of surface corrugations on surface electromagnetic waves” *Journal de Physique*, C5, 213 (1984)

[12] H. Lochbihler ”Surface polaritons on metallic wire gratings studied via power losses” *Phys. Rev. B* 56 (15) 10289 (1996)

[13] F. Löser, Yu. A. Kosevich, K. Köhler, K. Leo, ”Dynamics of Bloch oscillations under the influence of scattering and coherent plasmon coupling”, *Phys. Rev. B* 61 (20) R13373 (2000)

[14] A.A. Lucas, M. Sunjié, ”Fast-Electron Spectroscopy of Surface Excitations”, *Phys. Rev. Lett.*, 26, 5, 229 (1971)

[15] D. Maystre, M. Nevière, ”Sur une méthode d’étude théorique quantitative des anomalies de Wood des réseaux de diffraction : application aux anomalies de plasmons”, *J. Optics*, 8, 165 (1977)

[16] A. Moussiaux, A. Ronveaux, A. Lucas, ”Interactions dans une chaîne de sphères ou de cavités alignées. Plasmons de surface et énergie de Van der Waals”, *Can. J. Phys.*, 55, 1407 (1977)

[17] A. Moussiaux, A. Ronveaux, A. Lucas, ”Surface plasmon oscillations for different geometrical shapes”, *Can. J. Phys.*, 55, 1423 (1977)

[18] M. Nevière, R. Petit, M. Cadilhac, ”About the theory of optical grating coupler-waveguide systems”, *Opt. Commun*, 8, 113 (1973)

- [19] M. Nevière, P. Vincent, R. Petit, M. Cadilhac, "Systematic study of resonances of holographic thin film couplers" *Opt. Commun.*, 9, 48 (1973)
- [20] M. Nevière, D. Maystre, P. Vincent, "Application du calcul des modes de propagation à l'étude théorique des anomalies des réseaux recouverts de diélectrique", *J. Optics*, 8, 231 (1977)
- [21] E. Popov, L. Tsonev, D. Maystre "Lamellar metallic grating anomalies", *Applied Optics* 33 (22) 5214 (1994)
- [22] Lord Rayleigh, "On the dynamical theory of gratings", *Proc. Roy. Soc. (London)* A79, 399 (1907)
- [23] R. H. Ritchie, E. T. Arakawa, J. J. Cowan, R. N. Hamm, "Surface-plasmon resonance effect in grating diffraction", *Phys. Rev. Lett.*, 21, 22, 1530 (1968)
- [24] J.A. Sanchez-Gil, A.A. Maradudin "Near-field and far field scattering of surface plasmon polaritons by one-dimensional surface defects", (9904347) <http://xxx.lanl.gov>
- [25] J.A. Sanchez-Gil, J.V. Garcia-Ramos, E.R. Mendez, "Near-field EM wave scattering from random self-affine fractal metal surfaces : spectral dependence of local field enhancements and their statistics in connection with SERS", (0003291) <http://xxx.lanl.gov>
- [26] J. Schmit, A.A. Lucas, "Continuum surface waves and surface energy", *Collective Phenomena*, Vol. 1, 127 (1973)
- [27] P. Sheng, R.S. Stepleman, P.N. Sanda "Exact eigenfunction for square-wave gratings : application to diffraction and surface-plasmon calculations" *Phys. Rev. B* 26 (6) 2907 (1982)
- [28] M. Sunjié, A.A. Lucas, "Multiple Plasmon Effects in the Energy-Loss Spectra of Electrons in Thin Films", *Phys. Rev. B*, 3, 3, 719 (1971)
- [29] W.-C. Tan, T.W. Preist, J.R. Sambles, N.P. Wanstall, "Flat surface-plasmon-polariton bands and resonant optical absorption on short-pitch metal gratings", *Phys. Rev. B* 59 (19) 12661 (1999)
- [30] K. Utagawa "Theory of diffraction efficiency and anomalies of shallow metal gratings of finite conductivity", *JOSA* 69 (2) 333 (1979)

[31] L. Wendler, T. Kraft, M. Hartung, A. Berger, A. Wixforth, M. Sundaram, J. H. English, A. C. Gossard, "Optical response of grating-coupler-induced intersubband resonances : the role of Wood's anomalies", Phys. Rev. B, 55, 4, 2303 (1997)

[32] R.W. Wood, "Anomalous diffraction gratings", Phys. Rev. 48, 928 (1935)

## D. Plasmons

[1] F.I. Baïda, D. Van Labeke, J.M. Vigoureux, "Near-field surface plasmon microscopy", Phys. Rev. B 60 (11) 7812 (1999)

[2] A.A. Lucas "Phénomènes de surface" Notes Provisoires, Chaire Francqui Belge 1975-1976

[3] Madrazo A. Nieto-Vesperinas " Scattering of electromagnetic waves from a cylinder in front of a conducting plane" JOSA A 12 (6) 1995 1298-1309

[4] Madrazo A. Nieto-Vesperinas " Surface structure and polariton interactions in the scattering of electromagnetic waves from a cylinder in front of a conducting grating : theory for the reflection photon scanning tunneling microscope " JOSA A 13 (4) 1996 785-795

[5] H. Raether, Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings, Springer Tracts in Modern Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1988)

[6] R.H. Ritchie "Plasma losses by fast electrons in thin films" Phys. Rev. 106 (5) 1957

[7] Y.-Y. Teng, E.A. Stern "Plasma radiation from metal grating surfaces" Phys. Rev. Lett. 19 (9) 511 (1967)

[8] D. Van Labeke, F.I. Baïda, J.-M. Vigoureux, "A theoretical study of near-field detection and excitation of surface plasmons", Ultramicroscopy 71 (1998) 351-359

## **E. Modélisation et simulation**

[1] L. Belmar-Letelier, "La méthode de Rayleigh appliquée aux systèmes de multicouches rugueuses : application à la modélisation des microscopes optiques en champ proche et à la nano-optique", Thèse, Université de Franche-comté. UFR des sciences et techniques 2001.

[2] L. Li, "Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings", JOSA A 13 (5) 1996 1024-1035

[3] A. Modinos, N. Stefanou, V. Karathanos, "Layer-by-layer methods in the study of photonic crystals and related problems", C.M. Soukoulis "Photonic Band Gap Materials" NATO ASI Series E Vol. 315 1995

[4] J.B. Pendry, "Low energy electron diffraction", Academic Press, London, 1974

[5] J.B. Pendry, P.M. Bell, "Transfer matrix techniques for electromagnetic waves", C.M. Soukoulis "Photonic Band Gap Materials" NATO ASI Series E Vol. 315 1995

[6] J.P. Vigneron, F. Forati, D. André, A. Castiaux, I. Derycke, A. Dereux, "Theory of electromagnetic energy transfer in three-dimensional structures" Ultramicroscopy, 61, 21 (1995)

[7] J.P. Vigneron, "Electromagnetisme tridimensionnel en représentation de Fourier", (Notes internes) (1998)

## **F. Publications se rapportant aux expériences de T.W. Ebbesen *et al.***

[1] S. Astilean, Ph. Lalanne, M. Palamaru, "Light transmission through metallic channels much smaller than the wavelength", Optics Comm. 175 (2000) 265-273

[2] T.W. Ebbesen, H.J. Lezec, H.F. Ghaemi, T. Thio, P.A. Wolff, Nature (London) 391, 667 (1998)

[3] H.F. Ghaemi, T. Thio, D.E. Grupp, T.W. Ebbesen, H.J. Lezec, "Surface plas-

mons enhance optical transmission through subwavelength holes”, *Phys. Rev. B*, 58, 6779 (1998)

[4] D. E. Grupp, H.J. Lezec, T. Thio, T.W. Ebbesen, ”Beyond the Bethe limit : Tunable Enhanced Light Transmission Through a Single Sub-Wavelength Aperture” *Adv. Mater*, 11, 860 (1999)

[5] D.E. Grupp, H.J. Lezec, T.W. Ebbesen, K.M. Pellerin, T. Thio, ”Crucial role of metal surface in enhanced transmission through subwavelength apertures”, *Applied Physics Letters* 77 (11) 1569 (2000)

[6] T.J. Kim, T. Thio, T.W. Ebbesen, D.E. Grupp, H.J. Lezec, ”Control of optical transmission through metals perforated with subwavelength hole arrays”, *Opt. Lett*, 24, 256 (1999)

[7] A. Krishnan, T. Thio, T. J. Kim, H. J. Lezec, T. W. Ebbesen, P.A. Wolff, J. Pendry, L. Martin-Moreno, F. J. Garcia-Vidal, ”Evanescently coupled resonance in surface plasmon enhanced transmission”, *Optics Comm.*, 200, 1-7 (2001)

[8] L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal, H.J. Lezec, K.M. Pellerin, T. Thio, J.B. Pendry, T.W. Ebbesen, ”Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays”, *Phys. Rev. Lett.*, 86, 1114 (2001)

[9] E. Popov, M. Nevière, ”Grating theory : new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization” *JOSA A* 17 (10) 1773 (2000)

[10] E. Popov, M. Nevière, S. Enoch, R. Reinisch, ”Theory of light transmission through subwavelength periodic hole arrays”, *Phys. Rev. B*, 62, 16100 (2000)

[11] J.A. Porto, F.J. Garcia-Vidal, J.B. Pendry, ”Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits” *Phys. Rev. Lett.*, 83, 2845 (1999)

[12] L. Salomon, F. Grillot, A.V. Zayats, F. de Fornel, ”Near-field distribution of optical transmission of periodic subwavelength holes in a metal film”, *Phys. Rev. Lett.*, 86 (6), 1110 (2001)

[13] J.A. Sanchez-Gil ”Coupling, resonance transmission, and tunneling of surface-plasmon polaritons through metallic gratings of finite length”, *Phys. Rev. B* 53 (15)

10317 (1996)

[14] U. Schröter, D. Heitmann, "Surface-plasmon-enhanced transmission through metallic gratings", Phys. Rev. B, 58, 15419 (1998)

[15] Y. M. Strelniker, D. J. Bergman, "Optical Transmission through metal films with a subwavelength hole array in the presence of a magnetic field" Phys. Rev. B, 59, 12763, (1999)

[16] W.-C. Tan, T.W. Preist, R.J. Sambles, "Resonant tunneling of light through thin metal films via strongly localized surface plasmons", Phys. Rev. B 62 (16) 11134 (2000)

[17] T. Thio, H.F. Ghaemi, H.J. Lezec, P.A. Wolff, T.W. Ebbesen, "Surface-plasmon-enhanced transmission through hole arrays in Cr films", JOSA B, 16, 1743 (1999)

[18] T. Thio, H.J. Lezec, T.W. Ebbesen, "Strongly enhanced optical transmission through subwavelength holes in metal films", Physica B 279 (2000) 90-93

[19] M.M.J. Treacy, "Dynamical diffraction in metallic optical gratings", Appl. Phys. Lett., 75, 606, (1999)

[20] J.-M. Vigoureux, "Analysis of the Ebbesen experiment in the light of evanescent short range diffraction", Optics Comm., 198, 4-6, 257 (2001)

## G. Méthode de Green

[1] Carminati R. "Analyse de la formation des images en optique de champ proche" thèse Ecole Centrale Paris (1996)

[2] Castiaux A. "Modélisation du comportement du champ proche optique en microscopie et en interférométrie" Thèse Namur, Belgique (1996)

[3] Dereux A. "Théorie de l'optique du champ proche" Thèse Namur, Belgique

[4] Lax M. "Multiple Scattering of Waves. II. The effective Field in Dense Systems" Phys. Rev. 85 (4) 1952 621-629

[5] Leung K.M. "Korringa-Kohn-Rostoker method for electron band calculation of the Kronig-Penney model" Am. J. Phys. 61 (11) 1993 1020-1021

[6] Martin O. " A numerical Green's function approach to investigate vectorial field-matter interactions " thèse Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

[7] O.J.F. Martin, C. Girard, D.R. Smith, S. Schultz "Generalized field propagator for arbitrary finite-size photonic band gap structures", Phys. Rev. Lett. 82 (2) 315 (1999)

[8] Tai C.T. " Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory " second edition, IEEE PRESS

[9] Tomas M.S. " Green function for multilayers : Light scattering in planar cavities " Phys. Rev. A 51 (3) 1995 2545-2559

## H. Théorème d'extinction

[1] Ewald P.P. Ann. Physik 49 (1916) 1

[2] Fearn H. James D.F.V. Milonni P.W. " Microscopic approach to reflection, transmission, and the Ewald-Oseen extinction theorem " Am. J. Phys. 60 (6) 1996 986-995

[3] Hill N.E. " Reflection and transmission in terms of polarization " Am. J. Phys. 48 (9) 1980 752-755

[4] Keller O. " An approach to the nonlinear selvedge response in nonlocal metals optics within the framework of the Ewald-Oseen extinction theorem " Optica Acta 33 (5) 1986 673-684

[5] Kohn W. Rostoker N. " Solution of the Schrödinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium " Phys. Rev. 94 (5) 1954 1111-1120

[6] Oseen Ann. Physik 48 (1915) 1

[7] Pattanayak D.N. Wolf E. " General form and a new interpretation of the Ewald-Oseen extinction theorem " Optics Comm. 6 (3) 1972 217-220

[8] Pattanayak D.N. Wolf E. " Scattering states and bound states as solutions of the Schrödinger equation with nonlocal boundary conditions " Phys. Rev. D 13 (4) 1976 913-923

[9] Pattanayak D.N. Wolf E. " Resonance states as solutions of the Schrödinger equa-

tion with a non local boundary condition ” Phys. Rev. D 13 (6) 1976 2287-2290

[10] Reali G.C . ” Exact solution of the equations of molecular optics for refraction and reflection of an electromagnetic wave on a semi-infinite dielectric ” JOSA 72 (10) 1982 1421-1424

[11] Reali G.C. ” Reflection, refraction, and transmission of plane electromagnetic waves from a lossless dielectric slab ” Am. J. Phys. 60 (6) 1992 532-536

[12] Sein J.J. ” A note on the Ewald-Oseen extinction theorem ” Optics Comm. 2 (4) 1970 170-172

## **I. Méthode de Rayleigh**

[1] D. Barchiesi, D. Van Labeke, ” A perturbative diffraction theory of a multilayer system : applications to near-field optical microscopy SNOM and STOM”, Ultramicroscopy 57 (1995) 196-203

[2] V. Freilikher, E. Kanziiper, A.A. Maradudin ”Coherent scattering enhancement in systems bounded by rough surfaces”, Physics Reports 288 (1997) 127-204

[3] D. Van Labeke, A. Vial, V.A. Novosad, Y. Souche, M. Schlenker, A.D. Dos Santos, ”Diffraction of light by a corrugated magnetic grating : experimental results and calculation using a perturbation approximation to the Rayleigh method”, Optics Comm. 124 (1996) 519-528

[4] A. Vial, ”Etude théorique de la diffraction de la lumière par des surfaces magnétooptiques : applications au champ lointain et au champ proche”, Thèse, Université de Franche-comté. UFR des sciences et techniques 1999.

## **J. Méthode de Chandezon**

[1] J. Chandezon, D. Maystre, G. Raoult, ”A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application”, J. Opt. (Paris) 11, 235-241 (1980)

[2] P. Cornet, J. Chandezon, C. Faure, "Conical diffraction of a plane wave by an inclined parallel-plate grating", *JOSA A* 14 (2) 437 (1997)

[3] L. Li, J. Chandezon "Improvement of the coordinate transformation method for surface-relief gratings with sharp edges", *JOSA A* 13 (11) 2247 (1996)

## **K. Champ proche**

[1] D. Barchiesi, C. Girard, O.J.F. Martin, D. Van Labeke, D. Courjon, "Computing the optical near-field distributions around complex subwavelength surface structures : A comparative study of different methods", *Phys. Rev. E* 54 (4) 4285 (1996)

[2] S. I. Bozhevolnyi, I. I. Smolyaninov, A. V. Zayats, "Near-field microscopy of surface plasmon polaritons : localization and internal interface imaging", *Phys. Rev. B*, 51, 24, 17916 (1995)

[3] R. Carminati, "Phase properties of the optical near field", *Phys. Rev. E*, 55, 5, R4901 (1997)

[4] A. Castiaux, C. Girard, A. Dereux, O. J. F. Martin, J. P. Vigneron, "Electrodynamics in complex systems : application to near-field probing of optical microresonators", *Phys. Rev. E*, 54, 5, 5752 (1996)

[5] C. Girard, A. Dereux, O. J. F. Martin, M. Devel, "Importance of confined fields in near-field optical imaging of subwavelength objects", *Phys. Rev. B*, 50, 19, 14467 (1994)

[6] C. Girard, A. Dereux, O. J. F. Martin, "Theory of near-field optics ", *Photons and Local Probes NATO ASI Series E Kluwer Academic Publishers* 1995 1-20

[7] C. Girard, J.-C. Weeber, A. Dereux, O. J. F. Martin, J. P. Goudonnet, "Optical magnetic near-field intensities around nanometer-scale surface structures", *Phys. Rev. B*, 55, 24, 16487 (1997)

[8] Keller O. " Short and long range interactions in near field optics ", *Optics at the Nanometer Scale NATO ASI Series E Kluwer Academic Publishers* 1996 63-96

[9] M.A. Paesler P.J. Moyer "Near Field Optics" *Wiley-Interscience Publication* 1996

- [10] L. Salomon, C. Charbonnier, F. de Fornel, P.M. Adam, P. Guérin, F. Carcenac, "Near-field optical study of mesoscopic Au periodic samples : Effect of the polarization and comparison between different imaging modes", *Phys. Rev. B*, 62, 24, 17072 (2000)
- [11] M. Specht, J. D. Pedarnig, W. M. Heckl, T. W. Hänsch, "Scanning plasmon near-field microscope", *Phys. Rev. Lett.*, 68, 4, 476 (1992)
- [12] P.J. Valle, F. Moreno, J. M. Saiz, F. Gonzalez, "Near-field scattering from sub-wavelength metallic protuberances on conducting flat substrates", *Phys. Rev. B*, 51, 19, 13681 (1995)
- [13] D. Van Labeke, D. Barchiesi, "Theoretical problems in scanning near-field optical microscopy " *NATO ASI Series E* (1993) 157-178
- [14] M. Xiao, A. Zayats, J. Siqueiros, "Scattering of surface-plasmon polaritons by dipoles near a surface : optical near-field localization", *Phys. Rev. B*, 55, 3, 1824 (1997)

## **L. Electrodynamique et electrodynamique en cavités**

- [1] Abram I. Bourdon G. "Photonic-well microcavities for spontaneous emission control " *Phys. Rev. A* 54 (4) 1996 3476-3479
- [2] M. Boroditsky, R. Coccioli, E. Yablonovitch, "Analysis of photonic crystals for light-emitting diodes using the finite difference time domain technique", *Proc. SPIE Vol. 3283*, 184, (1998).
- [3] M. Boroditsky, R. Vrijen, T.F. Krauss, R. Coccioli, R. Bhat, E. Yablonovitch "Control of spontaneous emission in photonic crystals," *Proc. SPIE (Photonics West '99)*, vol. 3621, 190, (1999)
- [4] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, "Processus d'interaction entre photons et atome", Editions du CNRS (1988)
- [5] D.G. Deppe, C. Lei, C.C. Lin, D.L. Huffaker, "Spontaneous emission from planar microstructures", *J. Mod. Optics* 41 (2) 325 (1994)
- [6] U. Fano, "Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts",

Phys. Rev., 124, 6, 1866 (1961)

[7] Hirayama, H. ; Hamano, T. ; and Aoyagi, Y., "Novel surface emitting laser diode using photonic band-gap crystal cavity", Appl. Phys. Lett. 69, 791 (1996).

[8] A.G. Kofman, G. Kurizki, B. Sherman, "Spontaneous and induced atomic decay in photonic band structures", J. Mod. Optics 41 (2) 353 (1994)

[9] G. Kurizki, A. Z. Genack, "Suppression of molecular interactions in periodic dielectric structures", Phys. Rev. Lett. 61, 19, 2269 (1988)

[10] G.-I. Kweon, N.M. Lawandy, "Resonance dipole-dipole interaction in electromagnetically confined geometry", J. Mod. Optics 41 (2) 311 (1994)

[11] Zheng Q. Kobayashi T. Sekigushi T. " Comment on " Suppression of Molecular Interactions in Periodic Dielectric Structures " " Phys. Rev. Lett. 77 (2) 406-407 (1996)

## M. Physique du solide et des surfaces

[1] M.C. Desjonquère, D. Spanjaard, "Concepts in surface physics", Springer

[2] J. Feinberg, A. Zee, "Non-hermitean random matrix theory : method of hermitean reduction", Nucl. Phys. B504 (1997) 579-608

[3] J. Feinberg, A. Zee, "Spectral curves of non-hermitean hamiltonians", Nucl. Phys. B552 (1999) 599-623

[4] C. Kittel, "Physique de l'état solide" 7<sup>e</sup>édition Dunod

[5] C. Mudry, P.W. Brouwer, B.I. Halperin, "Density of states in the non-hermitian Lloyd model", Phys. Rev. B 58, 13539 (1998)

[6] T. Taniguchi "Conductance and density of states as the Kramers-Kronig dispersion relation", <http://xxx.lanl.gov> (0012282)

[7] T. Taniguchi "Charge current density from the scattering matrix", Physics Letters A 279 (2001) 81-86

## N. Ouvrages d'optique, de mathématiques, tables de constantes et divers

- [1] Baker B.B. Copson E.T. " The Mathematical Theory of Huygens' Principle " second edition, IEEE PRESS
- [2] Born M. Wolf E. " Principles of Optics " Pergamon Press 5th edition, 1975
- [3] Hassani S. " Foundations of Mathematical Physics " Prentice-Hall International Editions 1991
- [4] Jackson J.D. " Classical Electrodynamics " second edition, Wiley
- [5] D.W. Lynch, W.R. Hunter, in Handbook of Optical Constants of Solids II, E.D. Palik, (Academic Press, Inc., 1991)
- [6] Petit R. "L'outil mathématique" 4ème édition MASSON
- [7] Petit R. "Ondes électromagnétiques en radioélectricité et en optique" 2ème édition MASSON
- [8] R.B. Sidge "EXPOKIT : software package for computing matrix exponentials" ACM Trans. Math. Software 24 (1998) 130-156.
- [9] A. Sommerfeld "Optics" Academic Press inc., Publishers, N.Y. 1954
- [10] Divers Auteurs, "Louis de Broglie, sa conception du monde physique", Gauthier-Villars Editeur (1973)