



HAL
open science

Manipulation d'atomes froids par champs optiques confinés : théorie et simulation numérique

Gaëtan Lévêque

► **To cite this version:**

Gaëtan Lévêque. Manipulation d'atomes froids par champs optiques confinés : théorie et simulation numérique. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2003. Français. NNT: . tel-00006141

HAL Id: tel-00006141

<https://theses.hal.science/tel-00006141>

Submitted on 25 May 2004

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'UNIVERSITÉ TOULOUSE III
ÉCOLE DOCTORALE DE PHYSIQUE ET NANOPHYSIQUE

pour obtenir le grade de

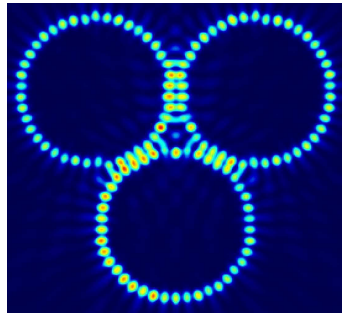
DOCTEUR

Spécialité : optique et physique atomique

par

Gaëtan LÉVÊQUE

**MANIPULATION D'ATOMES FROIDS PAR
CHAMPS OPTIQUES CONFINÉS :
THÉORIE ET SIMULATION NUMÉRIQUE.**



Soutenue le 19 décembre 2003 devant le jury composé de Messieurs :

J. BAUDON	professeur, université Paris XIII	Examineur
A. DEREUX	professeur, université de Bourgogne	Président
Ch. GIRARD	directeur de recherche, CNRS-Toulouse	Directeur de thèse
D. VAN LABEKE	professeur, université de Besançon	Rapporteur
O.J.F. MARTIN	professeur, E.P.F.L. de Lausanne	Rapporteur
J. WEINER	professeur, université Toulouse III	Directeur de thèse

Remerciements

Je tiens dans un premier temps à remercier Messieurs Alain Dereux, Jacques Baudon, Olivier J.F. Martin et Daniel van Labeke d'avoir accepté de faire partie de mon jury de soutenance.

Je remercie également mes deux directeurs de thèse, John Weiner et Christian Girard, pour les discussions fructueuses que j'ai pu avoir avec eux, l'efficacité de leur encadrement ainsi que leurs encouragements dans la réalisation de ce travail. Je tiens également à souligner le rôle particulièrement important qu'ont joué Chris Meier, qui m'a fait bénéficier de son expérience en méthodes de simulation numérique, et Renaud Mathevet avec qui j'ai travaillé tout au long de ces trois années et qui m'a apporté une aide précieuse notamment dans tous les aspects analytiques de ce travail.

Je suis heureux d'avoir pu rencontrer Carsten Henkel lors des diverses réunions du réseau Fastnet. Son séjour à Toulouse a été notamment l'occasion d'explorer de nouvelles pistes de recherche.

J'en profite pour souhaiter une bonne continuation aux autres membres de l'équipe : Guillaume, Olivier (thésards de la "vraie vie" expérimentale) et Bruno Viaris. Je voulais en outre saluer Arnaud et Alain, les "prochains sur la liste", ainsi que Bruno Lepetit, Arnaud Le Padellec et Didier Lemoine, avec qui j'ai eu plaisir à discuter durant cette période.

Je tiens également à remercier mes amis thésards ou non, grâce à qui ces trois années ont été très variées et agréables, en particulier Chico, Laurent, Kenshi, Olivier, Manu, Jacques ainsi que Patrick, Stéphane, Raphaël, Pierre et Jacky.

Et enfin, je remercie mes parents et ma famille (en particulier ma sœur pour sa courageuse relecture du manuscrit) pour leur constants encouragements et à qui j'espère avoir fait comprendre un peu du contenu de ce mémoire.

Table des matières

1	Introduction générale	9
1.1	Notion de champ proche optique	12
1.2	Diffraction d'atomes neutres	17
1.3	Diffraction par champ évanescent stationnaire	19
1.3.1	Fonction miroir	20
1.3.2	Fonction réseau	23
I	Champ proche diffracté par une nanostructure périodique	27
2	Propriétés générales	31
2.1	Présentation du problème	31
2.2	Expression des champs	32
2.3	Étude des portées des différentes harmoniques	36
2.3.1	Expression de l'intensité à grande distance	38
2.3.2	Deux exemples	39
2.3.2.1	Réseau unidimensionnel	39
2.3.2.2	Réseau bidimensionnel	41
2.4	Conclusion	42
3	Théorie différentielle des réseaux	45
3.1	Expression du champ dans tout l'espace	46
3.2	Équations de propagation dans la zone modulée	47
3.3	Les différentes étapes de la méthode DTG	49
3.4	La méthode des réflexions multiples	52
3.5	Composantes normales du champ électromagnétique	54
3.6	Résultats numériques	55
3.6.1	Étude de l'intensité diffractée par un réseau 1D.	55
3.6.2	Quelques résultats en deux dimensions	56
3.7	Conclusion	58
II	Évolution d'atomes dans un champ optique	61
4	L'interaction atome-champ	63
4.1	Le modèle de l'atome à deux niveaux	64
4.1.1	Expression de l'hamiltonien	64
4.1.2	Équations de Bloch optiques.	66
4.1.2.1	Équations de Bloch pour l'atome à deux niveaux	66

4.1.2.2	Expression de la force et du potentiel	68
4.2	Prise en compte de la structure fine	70
4.3	Conclusion	74
5	Traitement analytique	75
5.1	Potentiel perturbatif	76
5.2	Diffraction dans l'approximation de Born	77
5.2.1	États propres du potentiel non modulé et paramètres sans dimension	77
5.2.2	Amplitude diffractée	78
5.2.2.1	Onde évanescente stationnaire	79
5.2.2.2	Potentiel évanescent nanostructuré	82
5.3	Approximation du réseau de phase mince	86
5.3.1	Présentation de l'approximation du réseau de phase mince	86
5.3.2	Calcul des amplitudes de diffraction	88
5.3.2.1	Onde évanescente stationnaire	88
5.3.2.2	Potentiel nanostructuré	90
5.3.3	Extension à deux dimensions	93
5.4	Conclusion	93
6	Traitement numérique	95
6.1	Méthode de calcul	95
6.2	Résultats numériques	100
6.2.1	Diffraction par un réseau unidimensionnel	100
6.2.2	Diffraction par un réseau bidimensionnel	104
6.3	Conclusion	107
7	Conclusion sur la diffraction atomique	109
 III Champ proche diffracté par des nanostructures localisées : application au guidage		111
8	Formalisme des fonctions de Green	115
8.1	Fonctions de Green en électromagnétisme	115
8.1.1	Notion de fonction de Green	116
8.1.2	Fonction de Green dyadique pour un milieu diélectrique linéaire, homogène et isotrope	118
8.1.3	Équation de Lippmann-Schwinger	123
8.1.4	Tenseur de Green surfacique	124
8.1.5	Changement de milieu de référence et équation de Dyson	125
8.2	Implémentation numérique	127
8.2.1	Faisceau gaussien focalisé.	129
8.2.2	Moyens de calcul et exemples	131
8.3	Conclusion	133
9	Étude d'un ensemble d'anneaux couplés	135
9.1	Fréquences propres d'un anneau	136
9.2	Description du couplage - orientabilité	139
9.3	Système de deux anneaux couplés	142

9.4	Trois anneaux couplés	145
9.5	Quatre anneaux couplés : isométrie	149
9.6	Trois anneaux couplés en boucle	155
9.7	Conclusion	160
10	Conclusion générale	163
IV	Annexes	173
A	Diffraction de la lumière par un réseau mince	175
B	Invariance du spectre d'une chaîne sans boucles	179
C	Programme Mathematica : chaîne orientable	185

Chapitre 1

Introduction générale

Si la manipulation d'atomes neutres par la lumière s'est développée depuis une trentaine d'années [1, 2], l'étude de leur interaction avec des champs optiques confinés au voisinage d'une surface est un domaine relativement récent. C'est en 1982 que R.J. Cook et R.K. Hill [3] décrivent le principe du miroir atomique : un faisceau d'atomes peut être dévié par une onde évanescente se propageant à la surface d'un prisme si la fréquence du rayonnement est légèrement supérieure (de l'ordre de quelques largeurs de raie) à la fréquence de transition des particules. Elles subissent alors une force dite "dipolaire", qui résulte de l'interaction du gradient de l'intensité lumineuse avec le dipole atomique induit par le champ électrique.

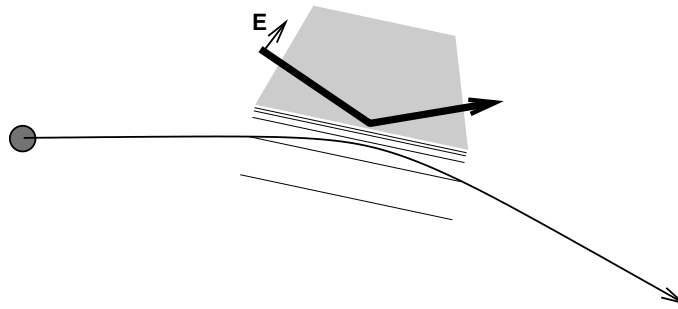


FIG. 1.1 – Principe du miroir atomique.

Le premier miroir atomique a été réalisé expérimentalement par V.I. Balykin et V.S. Lethokov en 1987 [4, 5]. Suite à ce premier succès, de nombreux dispositifs de manipulation d'atomes ont été développés sur le même principe. Dans les années 1990, plusieurs équipes proposent et démontrent expérimentalement le guidage d'atomes par une onde évanescente confinée au voisinage de la paroi d'une fibre optique creuse de diamètre micronique [6, 7, 8]. Ce domaine s'est également enrichi des techniques de refroidissement des atomes neutres développées dès le début des années 1980 [2, 9, 10, 11], pour lesquelles S. Chu, C. Cohen-Tannoudji et W.D. Phillips ont reçu le prix Nobel en 1998 [12, 13, 14]. Ainsi, l'utilisation de plusieurs champs évanescents, combinée avec les techniques de refroidissement, permettent de réaliser des pièges de surface contenant une population dense d'atomes froids [15, 16, 17, 18]. C'est actuellement une voie utilisée pour l'étude de la condensation de Bose-Einstein.

Un des principaux domaines de recherche en optique atomique dans les années 1990 est la diffraction d'atomes neutres. Les premières expériences ont été réalisées en trans-

mission à travers des réseaux optiques à ondes stationnaires, obtenus par superposition de deux faisceaux laser se propageant en sens opposé [19, 20, 21, 22] (figure 1.2-a). En 1988, D.E. Prichard *et al.* réalisent la diffraction d'un faisceau atomique avec un réseau matériel [23]. Puis, suite aux observations de déviations d'atomes par une onde évanescente, J.V. Hajnal et G.I. Opat ont proposé en 1989 de faire interférer deux ondes de surface de manière à créer un réseau de diffraction en réflexion [24]. L'expérience a été réalisée quelques mois plus tard par les auteurs [25]. Ces réseaux optiques de surface ont depuis fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales [26, 27].

Un enjeu important de la diffraction est la création d'un dispositif permettant la séparation d'un faisceau atomique incident en deux faisceaux cohérents (séparatrice atomique). L'objectif est la réalisation d'interféromètres de grande précision qui permettraient d'effectuer des mesures expérimentales extrêmement fines dans le domaine de la mécanique quantique ou de la relativité générale [28, 29]. Les interféromètres tels que celui représenté sur la figure 1.2-b sont d'autant plus précis que la surface délimitée par les deux bras est grande. Ainsi, une question importante a été l'augmentation de l'angle de séparation des faisceaux. Une solution consiste à diminuer la période, mais celle des réseaux qui utilisent des ondes stationnaires est limitée à la demi-longueur d'onde du champ électromagnétique.

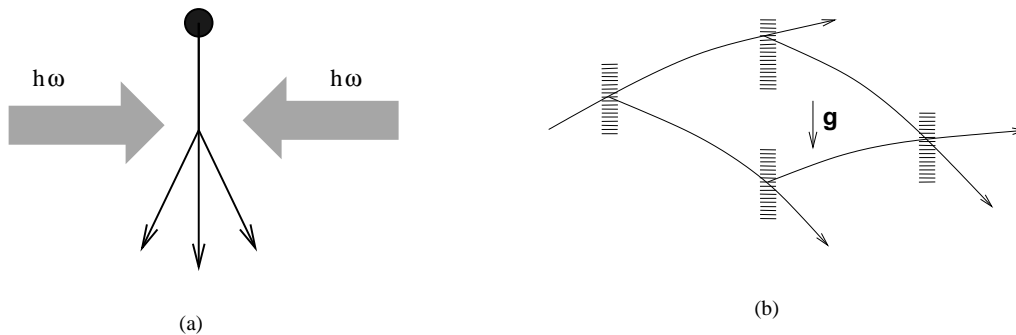


FIG. 1.2 – (a) Réseau de diffraction en transmission. (b) Interféromètre à bras séparés sensible à la gravité.

Cette limite semble infranchissable dans le cas des réseaux en transmission, obtenus par superposition cohérente d'ondes propageantes libres. En effet, il est connu que le champ électromagnétique varie alors spatialement sur une échelle dont la valeur minimale est une fraction de la longueur d'onde (limite de diffraction). En revanche, si cette limite concerne les ondes électromagnétiques libres, l'amplitude d'une onde évanescente peut varier sur une distance beaucoup plus courte. De nombreuses expériences et études théoriques ont en effet montré que des objets de dimensions sub-longueur d'onde étaient capables de confiner la lumière dans leur voisinage immédiat [30]. L'amplitude du champ électromagnétique varie alors sur une échelle bien inférieure à la longueur d'onde. C'est l'optique de champ proche qui étudie l'ensemble des phénomènes optiques associés au confinement de la lumière par des objets déposés sur une surface.

Ainsi, A. Roberts *et al.* ont proposé en 1996 de déposer sur le prisme un réseau matériel de période sub-longueur d'onde [31, 32]. L'onde de surface est alors confinée par les nanostructures : il en résulte une modulation périodique de l'amplitude du champ électromagnétique, de période identique à celle du réseau matériel. Un autre point de vue est de dire que l'onde évanescente est diffractée par le réseau de nanostructures : la modulation provient alors de la superposition cohérente des différents ordres de diffraction.

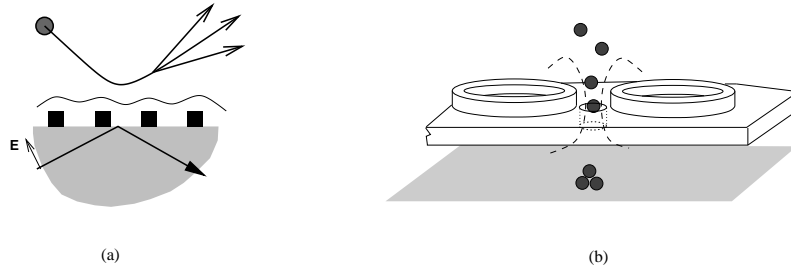


FIG. 1.3 – (a) Diffraction d’atomes par une onde évanescente nanostructurée. (b) Entonnoir atomique composé de deux anneaux résonants. Les atomes sont concentrés radialement par l’action de forces dipolaires. Le mode d’excitation des anneaux n’a pas été représenté.

Une part importante de ce mémoire de thèse est consacrée à l’étude théorique d’une expérience de diffraction d’atomes froids par un tel réseau optique (figure 1.3-a). L’utilisation d’atomes froids permet d’augmenter significativement l’angle de diffraction en diminuant leur longueur d’onde de de Broglie. Dans la première partie, nous étudions en détail la structure tridimensionnelle du champ proche obtenu par couplage d’une onde évanescente avec un réseau matériel sub-longueur d’onde unidimensionnel ou bidimensionnel. Nous commençons par décomposer le champ électromagnétique sur l’ensemble de ses composantes diffractées. Une étude portant uniquement sur les vecteurs d’ondes des harmoniques du rayonnement permet de comprendre comment la structure spatiale du champ se modifie en fonction des paramètres du réseau et de la géométrie d’illumination. Cette partie se termine par l’exposé d’un algorithme de calcul exact du champ proche diffracté par un objet périodique, puis par un calcul numérique de l’intensité électrique dans plusieurs configurations expérimentales.

Dans la deuxième partie est abordée l’étude de la diffraction atomique par le champ optique précédent. Nous commençons par la description de l’interaction atome-champ au moyen des équations de Bloch optiques. Deux modèles de structure interne atomique sont envisagés. La description la plus simple ne prend en compte que deux niveaux. Dans ce cas, et sous certaines hypothèses, le potentiel d’interaction est un scalaire proportionnel à l’intensité du champ optique. Puis, afin d’étudier l’influence de la polarisation du champ proche sur la diffraction, nous introduisons un second modèle prenant en compte la structure fine de l’atome. Nous poursuivons par une description analytique de la diffraction atomique qui nous permettra de dégager et d’interpréter les paramètres pertinents intervenant dans le processus de diffraction. Cette étude est complétée par l’exposé d’un algorithme de propagation de paquets d’ondes. Cet algorithme est appliqué à l’étude de la diffraction atomique par un réseau uni- ou bidimensionnel et les résultats sont comparés aux calculs analytiques.

Dans la dernière partie de ce mémoire, nous nous intéresserons à une autre application de l’optique de champ proche à la manipulation d’atomes : l’utilisation de champs optiques confinés pour la nanolithographie. Le principe repose sur la création d’un entonnoir atomique permettant la déposition d’atomes dans un petit volume sur une surface, de manière à créer une nanostructure de forme arbitraire. Un premier dispositif a été proposé en 1996 puis réalisé en 2001 par M. Ohtsu *et al.* [33, 34]. Il consiste en un miroir

atomique conique (axicon) percé d'un trou à son extrémité. Des atomes froids effectuent plusieurs rebonds dans l'onde évanescente, et sont conduits par la gravitation jusqu'au trou de sortie, par lequel ils s'échappent en une fine colonne.

La géométrie à laquelle nous nous intéressons est différente (voir figure 1.3-b). Le principe est de concentrer un faisceau d'atomes froids en chute libre au moyen de forces dipolaires, proportionnelles au gradient de l'intensité du rayonnement. Afin d'obtenir des gradients importants, l'utilisation d'anneaux diélectriques de section sub-longueur d'onde est envisagée. Ces structures se comportent comme des cavités Fabry-Pérot et exaltent le champ électrique lorsque la longueur d'onde du champ d'excitation obéit à une condition de résonance spécifique. Lorsque plusieurs anneaux sont couplés, les résonances individuelles sont alors remplacées par des résonances collectives, de longueurs d'onde modifiées.

Il s'agit principalement dans ce mémoire d'étudier différents arrangements de ces résonateurs dans le but de trouver une configuration optimale de champ permettant la concentration des atomes. Dans un premier chapitre, nous décrivons une méthode numérique exacte fondée sur les fonctions de Green dyadiques du champ électromagnétique qui permet de calculer le champ proche diffracté par une structure de forme quelconque supportée par une surface. Dans une deuxième partie, nous introduisons un modèle analytique simplifié permettant de décrire le spectre ainsi que la structure modale d'un ensemble de résonateurs annulaires couplés. Ce modèle permet d'interpréter les cartes de champs et les spectres calculés numériquement.

Le champ proche optique étant une notion centrale de ce travail, nous commençons par en donner un bref panorama.

1.1 Notion de champ proche optique

La notion de champ proche désigne une large classe de phénomènes de surface rencontrés dans beaucoup de domaines de la physique. En mécanique quantique, il désigne par exemple l'extension de la fonction d'onde électronique en dehors des limites physiques d'un conducteur. En physique du solide, la surface d'un cristal ionique impose naturellement un champ statique évanescent dans le vide. Ces différents aspects ont été exposés en détails par C. Girard *et al.* dans l'article de revue [35].

En optique, la notion de champ proche peut être introduite à partir d'une approche très simple exposée par J.J. Greffet dans la référence [36]. Dans un repère cartésien $(0xyz)$, considérons une distribution de champ électrique monochromatique $\mathbf{E}(x, y, z)e^{-i\omega t}$ dans le vide, de pulsation ω . Nous allons nous intéresser à son comportement au voisinage du plan $z = 0$, qui pourra représenter par exemple le plan d'un dioptre ou la surface d'un objet diffractant. Il obéit à l'équation d'Helmoltz homogène, dans laquelle le temps n'intervient plus explicitement :

$$\Delta \mathbf{E}(x, y, z) + \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(x, y, z) = 0 \quad (1.1)$$

où Δ est l'opérateur laplacien et c est la vitesse de la lumière dans le vide. Le champ électrique peut être décomposé comme une somme d'ondes planes selon les variables x

et y :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \int \int \tilde{\mathbf{E}}(u, v, z) e^{i(ux+vy)} du dv \quad (1.2)$$

En injectant cette décomposition dans 1.1, nous trouvons :

$$\frac{d^2 \tilde{\mathbf{E}}(u, v, z)}{dz^2} + \left(\frac{\omega^2}{c^2} - u^2 - v^2 \right) \tilde{\mathbf{E}}(u, v, z) = 0 \quad (1.3)$$

Cette expression est une équation différentielle d'une seule variable z , dans laquelle u et v interviennent comme des paramètres. La solution générale est une somme de deux exponentielles complexes de la forme :

$$\tilde{\mathbf{E}}(u, v, z) = \mathbf{A}(u, v) e^{i w z} + \mathbf{B}(u, v) e^{-i w z} \quad \text{avec} \quad w = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - u^2 - v^2} \quad (1.4)$$

Si l'on suppose que le champ se propage uniquement dans la direction $z > 0$, le terme $\mathbf{B}(u, v)$ est nul et par conséquent :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \int \int \tilde{\mathbf{E}}(u, v, 0) e^{i(ux+vy+wz)} du dv \quad (1.5)$$

Pour calculer les amplitudes $\tilde{\mathbf{E}}(u, v, 0)$ dans le plan $z = 0$, on utilise la formule d'inversion :

$$\tilde{\mathbf{E}}(u, v, 0) = \frac{1}{4\pi^2} \int \int \mathbf{E}(x, y, 0) e^{-i(ux+vy)} dx dy$$

Ainsi, on peut déduire de l'expression du champ électrique sur une interface la valeur de ce champ dans tout le demi-espace $z > 0$. Ceci est un cas particulier du théorème de Green bien connu en optique, fondement des diffractions de Fresnel et de Fraunhofer en champ lointain par un objet d'amplitude ou de phase s'interposant sur le trajet d'une onde plane.

Le point clé de ce raisonnement est que la composante w du vecteur d'onde peut être soit réelle soit imaginaire. Cette différence est à la base d'une distinction entre champ lointain et champ proche :

- ▶ w est réel si $u^2 + v^2 \leq \omega^2/c^2$. Il s'agit des basses fréquences spatiales. Les composantes de Fourier correspondantes se propagent dans la direction du vecteur d'onde $(u, v, w = \sqrt{\omega^2/c^2 - u^2 - v^2})$. Leur amplitude peut alors être mesurée par un détecteur placé en champ lointain. Cette méthode nous donne accès au spectre de Fourier des basses fréquences spatiales du champ électrique ;
- ▶ en revanche, lorsque $u^2 + v^2 > \omega^2/c^2$, w est imaginaire et le champ s'atténue exponentiellement avec la hauteur z , sur une distance $1/\sqrt{u^2 + v^2 - \omega^2/c^2}$. Le champ, dit évanescent, ne se propage plus que selon la direction $(u, v, 0)$ parallèle à la surface. Cela signifie que les détails de sa structure (hautes fréquences spatiales) sont confinés au voisinage du plan $z = 0$, et ne peuvent pas être détectés en champ lointain.

Le champ proche est la partie du rayonnement qui n'est composée que de ces contributions évanescentes. Il est donc localisé au voisinage de la surface.

Génération et observation du champ proche. L'optique de champ proche a d'abord été développée dans le but de dépasser la limite de résolution des instruments d'optique travaillant en champ lointain. Il est en effet connu que l'observation d'un objet au moyen d'un microscope optique classique se heurte à une limite de résolution donnée par l'expression :

$$d = 1,22 \frac{\lambda}{2n \sin \theta}$$

où n est l'indice du milieu dans lequel se trouve l'échantillon, θ le demi-angle d'ouverture du microscope et d le diamètre minimal de l'objet observé. Cette relation, connue sous le nom de critère de Rayleigh, provient du fait que tout point source placé au point focal objet du système imageur crée sur l'écran d'observation une tâche de largeur d . Son origine physique est la limitation de l'étendue spatiale du champ électromagnétique par l'instrument lui-même. Ainsi, l'ordre de grandeur de la résolution d'un microscope classique est la demi-longueur d'onde.

C'est en 1928 que E. Synge propose d'utiliser la lumière émergeant d'un trou sub-longueur d'onde pratiqué dans un écran opaque afin de fabriquer une source de lumière extrêmement localisée [37]. Approchée de la surface à une distance inférieure à la longueur d'onde, elle illumine une portion de l'objet observé sur une dimension de même ordre de grandeur. Le champ diffracté, détecté en champ lointain, permet alors d'accéder à des détails de l'objet bien en dessous de la limite de résolution imposée par le critère de Rayleigh. Cette expérience a été réalisée beaucoup plus tard dans le domaine des micro-ondes par E.A. Ash et G. Nicholls en 1972 [38]. Ils ont effectivement obtenu une résolution de l'ordre de $\lambda/60$. Cependant, la technologie de l'époque ne permettait pas de réaliser les mêmes performances dans le domaine de l'optique visible. Il faudra attendre 1984, après le développement du microscope à effet tunnel électronique en 1982, pour que soit créé sur le même principe le premier microscope optique en champ proche par D. Pohl [39].

Depuis, de multiples méthodes d'observation en champ proche ont été développées. Une amélioration importante a été de remplacer le trou par une pointe métallisée jouant le même rôle tout en éliminant les défauts liés au contact entre la sonde et l'échantillon. Aujourd'hui, de nombreux types de microscopes se distinguent suivant le mode d'illumination, le type de la pointe, le mode de collection. Il ne s'agit pas ici de faire une énumération de tous les systèmes de microscopes optiques de champ proche. Pour illustration, nous indiquons sur la figure 1.4 deux configurations classiques de microscopes en transmission.

La première configuration, dite SNOM, pour *Scanning Near-field Optical Microscope*, repose sur la détection en champ lointain de la lumière rayonnée par l'échantillon. L'éclairage se fait dans ce cas par la pointe, l'échantillon convertissant le champ évanescent en ondes propagatives. La pointe est la plupart du temps recouverte d'une couche métallique afin d'avoir une meilleure localisation de la lumière.

La deuxième configuration est celle qui se rapproche le plus de la géométrie étudiée dans ce mémoire. Elle fait partie de la famille des microscopes à effet tunnel optique, analogue électromagnétique du microscope à effet tunnel électronique, et porte le nom de *Photon Scanning Tunnelling Microscope* (PSTM). La surface sur laquelle est déposée l'échantillon est ici éclairée en champ lointain par une onde plane sous un angle supérieur à l'angle critique de réflexion totale. En surface règne donc une onde évanescente couplée

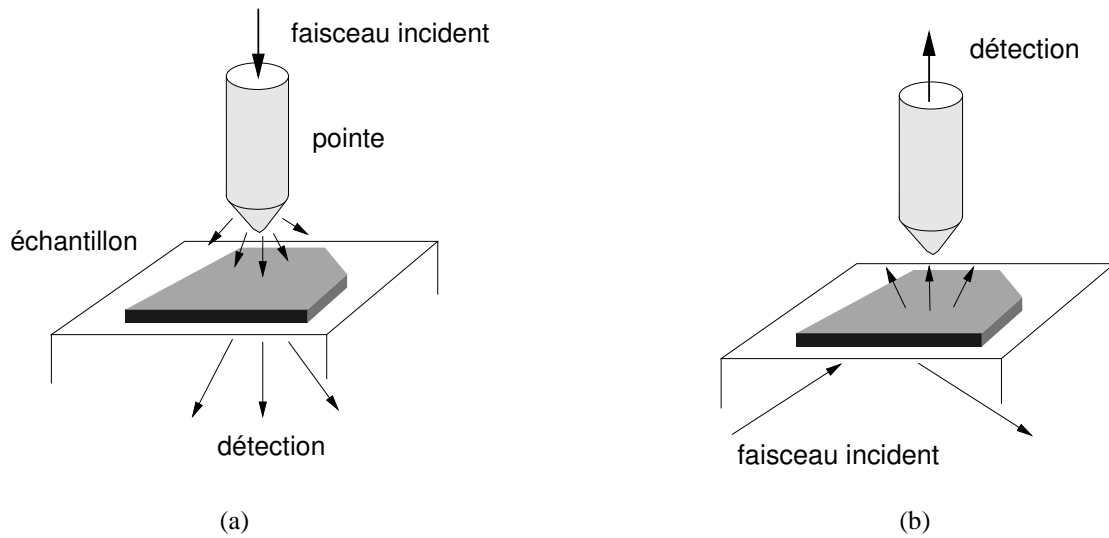


FIG. 1.4 – Deux configurations classiques en microscopie optique de champ proche : (a) SNOM ; (b) PSTM.

avec l'échantillon. La pointe d'observation collecte le signal en convertissant ces modes localisés en modes propagatifs. Ce type de microscopie a été développé pour la première fois simultanément en France et aux États-Unis (voir références [40, 41, 42]).

Cependant, de nombreuses études ont montré qu'il n'y a pas toujours de relation directe entre la mesure effectuée et la topographie de l'objet. La nature de la grandeur détectée dépend en effet fortement de la configuration adoptée et parfois également de la longueur d'onde. E. Devaux *et al.* ont montré en 2000 [43] qu'une pointe métallisée avec de l'or en configuration PSTM permet de détecter, selon la longueur d'onde, l'intensité du champ magnétique ou bien celle du champ électrique. Au contraire, pour une pointe diélectrique, c'est toujours le champ électrique qui est détecté. De même, C. Chicanne *et al.* [44] et G. Colas des Francs *et al.* [45] ont mis en évidence le fait que, sous certaines conditions expérimentales, c'est la densité locale d'états photoniques, analogue de la densité locale d'états électroniques en physique du solide, qui est mise en évidence en configuration SNOM. De nombreuses recherches sont actuellement orientées vers la possibilité de remplacer la pointe, dont l'extrémité est de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres, par une molécule unique [46, 47].

Actuellement, l'optique de champ proche et les différentes microscopies associées sont devenues un outil privilégié d'étude de nombreux phénomènes optiques de surface, ainsi que pour l'excitation de nanoparticules diélectriques ou métalliques [48, 49] et de molécules fluorescentes par des structures sub-longueurs d'onde [50, 51, 52]. Dans ce contexte, l'étude du transport de la lumière dans des structures de section sub-longueur d'onde suscite beaucoup d'intérêt [53, 54, 55, 56]. Certains aspects de cette nouvelle discipline vont être abordés dans la troisième partie de ce mémoire.

La simulation numérique du champ proche optique constitue une part importante de ce travail de thèse, aussi allons-nous présenter brièvement les méthodes les plus fréquemment utilisées dans ce domaine.

Méthodes numériques en optique de champ proche. Depuis l'établissement par J.C. Maxwell des équations de base de l'électromagnétisme, on dispose d'un outil permettant une description a priori exacte du champ électromagnétique régnant dans un système donné. Toutefois, ces équations ne sont solubles que dans un nombre restreint de cas limites ou pour des systèmes présentant une symétrie élevée. Par exemple, la théorie scalaire de la diffraction établie dès le XVII^{ème} siècle par Huygens puis par Fresnel a été justifiée par Sommerfeld à la fin du XIX^{ème} siècle, mais ne décrit que le champ lointain. En 1908, G. Mie a établi une théorie permettant de décrire le champ diffracté par une sphère conductrice ou diélectrique, qui a souvent été utilisée afin d'étudier l'influence du rayon de la pointe du microscope sur les images obtenues avec un PSTM [57]. H.A. Bethe en 1944 [58] a décrit la diffraction de la lumière par une ouverture sub-longueur d'onde, dont les prédictions ont été confirmées expérimentalement par E. Betzig *et al.* en 1993 [59]. Avec l'émergence de la microscopie optique de champ proche, il est devenu nécessaire de disposer d'outils théoriques précis afin de comprendre l'origine des images acquises [60]. La description précise des phénomènes d'optique de champ proche dans le cadre de géométries complexes passe donc nécessairement par la simulation numérique.

Dans ce rapide exposé des différentes techniques de calcul du champ proche, nous allons distinguer les méthodes développées dans l'espace réciproque, et celles développées dans l'espace direct. Dans le premier cas, elles s'appliquent uniquement aux objets périodiques, dans le deuxième aux objets localisés. Pour fixer les idées, nous pouvons avoir à l'esprit la configuration PSTM de la figure 1.4-b, dans laquelle l'échantillon déposé sur une surface est couplé à une onde évanescente dans le demi-espace d'observation.

La méthode de Rayleigh perturbative permet de traiter de manière non exacte des objets diffractants dont la rugosité d a une hauteur suffisamment faible devant la longueur d'onde (voir figure 1.5-a). Elle repose sur un développement de Fourier des champs électrique et magnétique¹ et sur l'hypothèse que l'on peut appliquer les conditions classiques de continuité du champ électromagnétique au niveau du plan moyen de la rugosité (que l'on appelle *hypothèse de Rayleigh*). L'hypothèse de faible amplitude de la rugosité permet de linéariser le champ électromagnétique au voisinage de ce plan. Cette méthode, comparée avec succès à des techniques dites exactes [61], décrit beaucoup de phénomènes optiques et a l'avantage d'être rapide et de demander peu de mémoire aux ordinateurs, contrairement aux méthodes suivantes [62].

La théorie différentielle des réseaux est une méthode exacte, qui sera expliquée en détail dans la première partie. De même que la méthode de Rayleigh perturbative, elle repose sur un développement de Fourier du champ électromagnétique, mais également sur le calcul, par intégration des équations de Maxwell, de matrices de réflexion et de transmission du champ électromagnétique à travers l'échantillon (voir chapitre 3).

Parmi les méthodes travaillant dans l'espace direct, les plus communes sont la méthode FDTD (pour *Finite Difference Time Domain*) et la méthode des fonctions de Green dyadiques. La première, au départ essentiellement utilisée dans le domaine des micro-ondes, repose sur une discrétisation des équations de Maxwell-Ampère et de Maxwell-Faraday en chaque point d'un maillage remplissant toute la zone de calcul [63, 64]. Il s'agit d'une méthode agissant dans le domaine temporel : elle permet de suivre l'évolution au cours du temps d'une distribution initiale de champ. Elle s'adapte aussi bien à l'étude de la propagation d'un paquet d'ondes à travers un système optique qu'à la

¹Nous verrons par la suite qu'il s'agit en fait d'un développement de Rayleigh, dans lequel le champ n'est développé que dans les directions parallèles au plan moyen de l'objet.

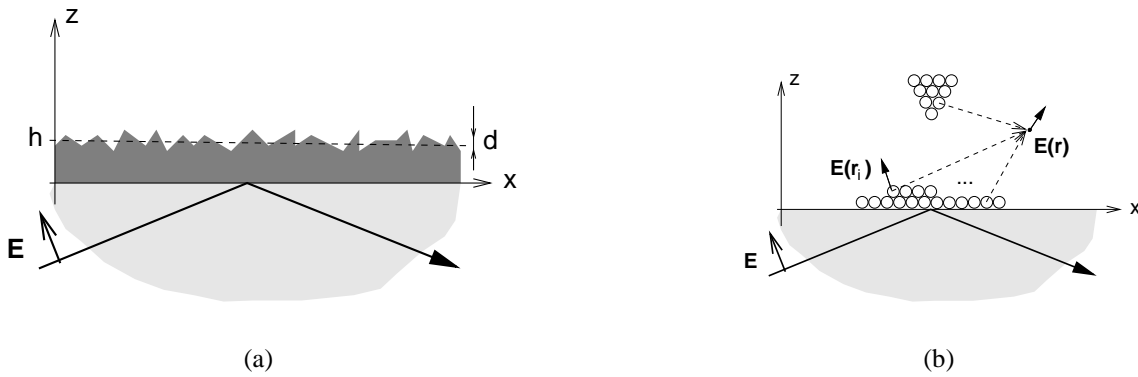


FIG. 1.5 – (a) Méthode de Rayleigh perturbative. (b) Méthode des fonctions de Green.

recherche d'états stationnaires d'un système soumis à une excitation continue (voir par exemple [65]). Cependant cette méthode se heurte au problème de mémoire des ordinateurs qui limite le nombre de points de discrétisation. De plus, il est nécessaire de prendre en compte des conditions aux limites complexes afin de décrire les comportements à l'infini du champ calculé.

Malgré les importants besoins en mémoire de la méthode des fonctions de Green² (expliquée au début de la troisième partie), son principe même lui permet de ne pas souffrir de cet inconvénient [66, 67, 68, 69]. Le point de départ est de considérer l'objet diffractant comme un ensemble d'éléments polarisables couplés au champ ainsi qu'à l'ensemble de la structure (voir figure 1.5-b). Une équation spécifique dite de *Lippmann-Schwinger* permet de décrire le champ diffracté en un point de l'espace comme la superposition du champ émis par chaque élément : il s'agit en fait d'une généralisation du principe de Huygens-Fresnel au cas de l'optique de champ proche. Tout le problème est de calculer le champ interne à chaque cellule. Cette méthode permet également d'inclure dans le système des constituants microscopiques tels que des atomes ou des molécules.

Une deuxième thématique que nous avons développée est l'interaction d'atomes avec le champ proche optique. Voyons-en à présent les grandes lignes.

1.2 Diffraction d'atomes neutres

Le principe de la diffraction d'atomes neutres repose sur l'acquisition par l'atome d'un nombre entier d'impulsions fournies par une structure périodique. La direction de propagation de la particule est alors modifiée d'un angle quantifié, et les atomes sont répartis de manière cohérente dans ces différentes directions.

Cette structure peut être de différente nature. Les particules interagissent en général avec un réseau de champ électromagnétique non résonant, afin d'éviter la perte de cohérence due à l'émission spontanée (voir chapitre 4). D'autres méthodes ont cependant été développées. D.W. Keith *et al.* [23] ont notamment montré expérimentalement en 1988, bien après les premiers interféromètres à ondes stationnaires optiques, que la diffraction atomique pouvait être effectuée avec un réseau matériel. Il fonctionnait en transmission, un faisceau supersonique d'atomes ou de molécules de sodium traversant un réseau de

²Également appelée *Direct Space Integral Equation Method*.

lignes parallèles espacées de $0,4 \mu\text{m}$. En 1991, ils ont réalisé sur ce même principe un interféromètre à bras séparés de type Mach-Zhender, avec lequel ont été obtenues des franges contrastées de 13% [70].

Historiquement, les premières expériences mettant en évidence la déviation d'un faisceau d'atomes par une onde stationnaire presque résonante datent de la fin des années 1970 et du début des années 1980 [71, 19].

Du point de vue de la dynamique interne à l'atome, on peut distinguer deux mécanismes principaux de diffraction. Le premier, que nous n'abordons pas dans ce mémoire, fait intervenir un changement d'état interne de l'atome. Plusieurs expériences ont mis en évidence ce processus, appelé résonances doppler ou résonances accordées en vitesse [72, 73, 74]. Dans notre cas, il s'agit d'une interaction élastique, au cours de laquelle l'état interne de l'atome ne change pas.

Diffraction sans changement d'état interne : transition Raman. Dans leur publication sus-citée [71, 19], E. Arimondo *et al.* ont notamment mis en évidence que la déviation du faisceau correspond à l'échange d'un nombre pair d'impulsions photoniques entre les atomes et le rayonnement. Il s'agit d'un processus de diffraction élastique, dans lequel l'énergie cinétique de la particule est conservée.

Ce mécanisme est illustré du point de vue cinématique sur la figure 1.6-b. Le réseau de diffraction est une onde stationnaire, composée de photons de vecteur d'onde $\pm \mathbf{q}_1$. L'atome a une quantité de mouvement initiale $\hbar \mathbf{k}_i$, avec $k_i = 2\pi/\lambda_{dB}$, où λ_{dB} est sa longueur d'onde de de Broglie. Il subit un processus d'absorption/émission stimulée de photons transitant par un état virtuel, d'énergie supérieure à celle de l'état excité.

Supposons que l'atome soit excité par un photon d'impulsion $\hbar \mathbf{q}_1$: sa quantité de mouvement est donc $\hbar \mathbf{k}_i + \hbar \mathbf{q}_1$. Deux voies sont alors possibles. Dans la première, l'atome se désexcite par émission stimulée dans la même onde. Il émet alors un photon d'impulsion $\hbar \mathbf{q}_1$ et son impulsion finale est inchangée par rapport à sa valeur de départ : l'atome n'est donc pas diffracté. La deuxième possibilité fait intervenir la deuxième onde. L'atome se désexcite alors par émission stimulée en émettant un photon d'impulsion $-\hbar \mathbf{q}_1$. Sa quantité de mouvement finale est donc $\hbar \mathbf{k}_f = \hbar \mathbf{k}_i + 2\hbar \mathbf{q}_1$ et l'atome est dévié.

Notons que si l'atome absorbe d'abord un photon $-\mathbf{q}_1$ puis réémet un photon \mathbf{q}_1 , la variation d'impulsion est opposée et la quantité de mouvement atomique finale est $\hbar \mathbf{k}_f = \hbar \mathbf{k}_i - 2\hbar \mathbf{q}_1$. L'impulsion totale $2\hbar \mathbf{q}_1$ absorbée par l'atome est l'impulsion du réseau à onde stationnaire.

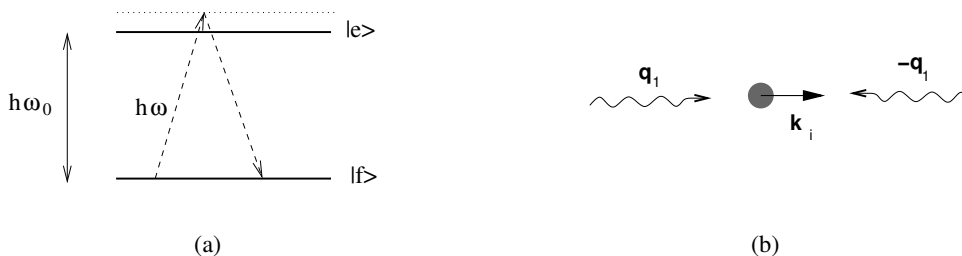


FIG. 1.6 – Diffraction sans changement d'état atomique interne par transition Raman dans une onde stationnaire.

Plus généralement, comme nous le verrons dans ce mémoire, le processus de diffraction peut provenir de l'interaction de l'atome avec deux photons d'impulsions dif-

férentes en norme, comme indiquée sur la figure 1.7. La variation de quantité de mouvement de l'atome lors de la transition Raman est alors un multiple entier de $\hbar\Delta\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{q}_1 + \hbar\mathbf{Q} - \mathbf{q}_1) = \hbar\mathbf{Q}$. En projection sur la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)$, les composantes des vecteurs

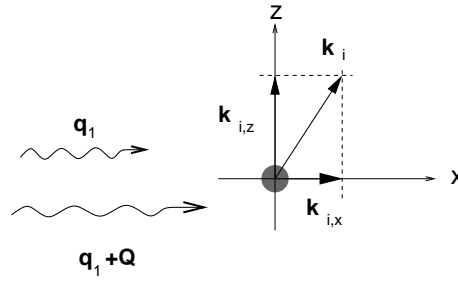


FIG. 1.7 – Diffraction par transition Raman faisant intervenir deux photons d'impulsions différentes de $\hbar\mathbf{Q}$.

d'onde atomiques s'écrivent :

$$\begin{cases} p_{f,x} = p_{i,x} + n\hbar Q \\ p_{f,z} = \sqrt{p_{i,z}^2 - 2np_{i,x}\hbar Q - n^2\hbar^2 Q^2} \end{cases} \quad (1.6)$$

La composante z de l'impulsion finale se déduit de la composante x par conservation de l'énergie cinétique. Dans le cas où les atomes sont en incidence normale sur le réseau et si leur impulsion est grande devant $\hbar Q$, la valeur de l'angle de diffraction est $\theta_{diff} = \lambda_{dB}/a$, où $a = Q/2\pi$ est la période du réseau. Dans cette étude, les atomes sont supposés être très lents, avec une vitesse de l'ordre de quelques 10 cm/s. Ceci correspond à une longueur d'onde de de Broglie de $\lambda_{dB} \approx 10$ nm. Nous allons voir que la période typique du réseau étudié est 200 nm, ce qui conduit à un angle de diffraction de l'ordre du degré.

Bien entendu, cette approche cinématique permet uniquement de déterminer les directions de diffraction. Les amplitudes diffractées dans chaque ordre dépendent de la géométrie complète du champ.

De même que la lumière peut être diffractée par des réseaux fonctionnant en transmission ou en réflexion, il a été proposé à la fin des années 1980 de créer un réseau atomique en réflexion. L'onde évanescente de Fresnel est à la base du principe du miroir à atomes. La modulation du potentiel n'est alors plus obtenue par interférence de deux ondes libres mais de deux ondes évanescentes. Nous allons donc dans la suite présenter en détail le réseau de diffraction à onde évanescente stationnaire.

1.3 Diffraction par champ évanescent stationnaire

Contrairement au réseau optique en transmission, le réseau en réflexion doit assurer le double rôle de "miroir" et de potentiel diffractant. Commençons par étudier la réflexion des atomes.

1.3.1 Fonction miroir

En 1982, R.J. Cook et R.K. Hill proposent d'utiliser l'onde évanescente qui s'établit à la surface d'un prisme éclairé en réflexion totale interne par une onde plane pour réfléchir les atomes [3]. Si la fréquence du rayonnement est supérieure à celle de la transition atomique (on dit que le laser est désaccordé vers le bleu de la transition), l'atome voit un potentiel répulsif proportionnel à l'intensité du champ électrique³. Il sera repoussé de la surface si l'amplitude du champ est suffisamment grande. Les premières réalisations expérimentales par Balykin *et al.* en 1987 et 1988 [4, 5] et Hajnal *et al.* en 1989 [24] ont suivi cette proposition théorique quelques années plus tard.

L'onde évanescente de Fresnel est créée à l'interface de deux milieux 1 et 3 d'indice de réfraction $n_1 > n_3 = 1$, lorsque la lumière se propage du milieu le plus réfringent (1) vers le milieu le moins réfringent (3). Si l'on considère un champ d'illumination de la forme $\mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$ éclairant la surface sous un angle θ par rapport à la normale, l'invariance du système par translation selon le plan du dioptré impose la conservation de la composante parallèle du vecteur d'onde.

La figure 1.8-a représente la construction de Huygens du rayon réfracté. Il y a trans-

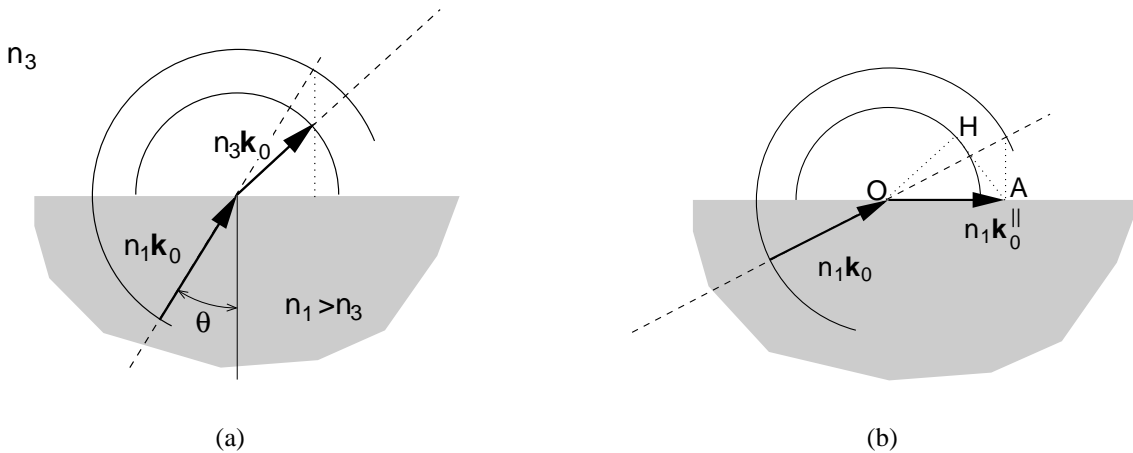


FIG. 1.8 – Construction de Huygens du rayon réfracté. Dans cette configuration $n_1 > n_3$. (a) Transmission. (b) Réflexion totale ; on a alors $\kappa_0 = AH$.

mission dans le vide seulement si la valeur tangentielle du vecteur d'onde $n_1 k_0 \sin \theta$ ne dépasse pas sa valeur maximale permise dans le milieu 3, à savoir k_0 . La composante normale du vecteur d'onde transmis s'écrit alors $k_3^z = k_0 \sqrt{1 - n_1^2 \sin^2 \theta}$. Cette expression montre que k_3^z n'est réelle que si l'angle d'incidence est inférieur à l'angle limite de réfraction $\theta_l = \arcsin 1/n_1$ ⁴.

Dans le cas contraire, l'onde incidente est totalement réfléchie et k_3^z devient imagi-

³En fait, plusieurs niveaux de complexité sont possibles pour décrire la structure interne de l'atome. Dans le modèle le plus simple, il ne comporte que deux niveaux. Nous verrons dans la deuxième partie que le potentiel est dans ce cas proportionnel à l'intensité. Ce n'est plus vrai lorsque l'on prend en compte la structure fine et, a fortiori, hyperfine.

⁴Dans notre cas où le milieu d'incidence est du quartz d'indice $n_1 = 1,46$, cet angle vaut environ $43,3^\circ$.

naire : le champ transmis est évanescents. Son expression est :

$$\tilde{\mathbf{E}}_3(x, z) = \mathbf{E}_3 e^{-\kappa_0 z} e^{in_1 k_0 \sin \theta x} \quad \text{avec} \quad \kappa_0 = k_0 \sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta - 1} \in \mathbf{R}^+ \quad (1.7)$$

Il s'agit donc d'une onde qui se propage dans la direction parallèle à l'interface. Elle est caractérisée par sa longueur d'onde de surface $\lambda_{surf} = 2\pi/n_1 k_0 \sin \theta$ ⁵. Son amplitude décroît exponentiellement dans la direction perpendiculaire Oz .

Ainsi, le champ $\tilde{\mathbf{E}}_3$ dans le milieu 3 est caractérisé par deux paramètres :

- tout d'abord le coefficient de décroissance κ_0 de l'amplitude du champ électrique. Sur la figure 1.8-b, nous voyons que κ_0 correspond à la distance HA dans le triangle OHA rectangle en H. L'évolution de la portée $\Lambda_0 = 1/\kappa_0$ en fonction de l'angle d'incidence θ est représentée sur la figure 1.9. Lorsque θ tend vers θ_l , le point H tend vers A et la portée devient infinie. Elle vaut en revanche environ 127 nm pour l'incidence rasante $\theta = \pi/2$ ⁶.

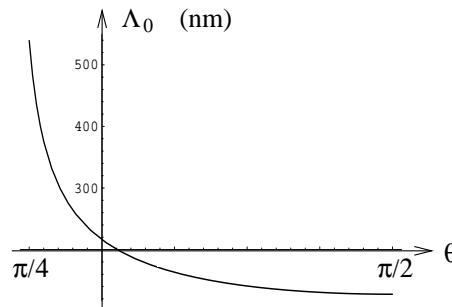


FIG. 1.9 – Évolution de la portée Λ_0 en fonction de l'angle d'incidence θ .

- la valeur du champ électrique \mathbf{E}_3 en $z = 0$. Parce qu'elle est une grandeur vectorielle, elle est caractérisée par sa polarisation et son amplitude. La polarisation est liée directement à celle du champ d'illumination. Celui-ci est une combinaison linéaire à coefficients complexes des deux polarisations de base TE (pour *transversal électrique*) et TM (*transversal magnétique*). Dans la première, le champ électrique est perpendiculaire au plan d'incidence. La surface induisant, par rapport à un espace homogène, une brisure de symétrie uniquement selon la direction normale au plan du dioptre, le vecteur champ électrique restera perpendiculaire au plan d'incidence dans le milieu 3. Dans le deuxième mode, c'est la situation inverse : le champ électrique \mathbf{E}_0 est contenu dans le plan d'incidence. Dans le milieu 3, il a alors une composante suivant chacun des axes $0x$ et $0z$. Les champs électriques transmis en mode TE et TM s'écrivent respectivement :

$$\mathbf{E}_3(x, z) = E_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} T_{TE} e^{in_1 k_0 \sin \theta x} e^{-\kappa_0 z} \quad \text{avec} \quad T_{TE} = \frac{2n_1 k_0 \cos \theta}{n_1 k_0 \cos \theta + i\kappa_0}$$

⁵Notons que la composante parallèle du vecteur d'onde est supérieure à celle obtenue avec une onde propagative. Cette particularité permet l'excitation de modes électromagnétiques localisés au voisinage d'une interface, tels que les modes plasmons qui existent à la surface de milieux conducteurs, inexcitables par une lumière totalement propagante (configuration Kretschmann) [75].

⁶Cette longueur doit être comparée à la longueur d'onde de de Broglie des atomes incidents, de l'ordre de 10 nm. Cette dernière étant faible devant la portée, nous sommes dans un régime où le comportement de l'atome sera bien décrit par des méthodes semi-classiques, comme nous le verrons dans la seconde partie.

et :

$$\mathbf{E}_3(x, z) = E_0 \begin{pmatrix} i\kappa_0 \\ 0 \\ n_1 \sin \theta \end{pmatrix} T_{TM} e^{in_1 k_0 \sin \theta x} e^{-\kappa_0 z} \quad \text{avec} \quad T_{TM} = \frac{2n_1 k_0 \cos \theta}{k_0 \cos \theta + in_1 \kappa_0}$$

Les coefficients T_{TE} et T_{TM} sont les coefficients de Fresnel en transmission, à valeurs complexes quand $\theta > \theta_l$. L'évolution du module de \mathbf{E}_3 en fonction de θ est tracée sur la figure 1.10-a. Il apparaît que la transmission est plus importante en mode TM qu'en mode TE. D'un point de vue expérimental, c'est donc un mode d'éclairage privilégié car une intensité importante est recherchée pour réfléchir des atomes rapides à des angles d'incidence les plus grands possibles (par rapport à la surface)⁷. Dans le cas d'atomes froids qui est le nôtre, l'intérêt réside dans le fait de pouvoir faire rebondir les particules le plus loin de la surface et d'être ainsi moins sensible aux interactions de van der Waals.

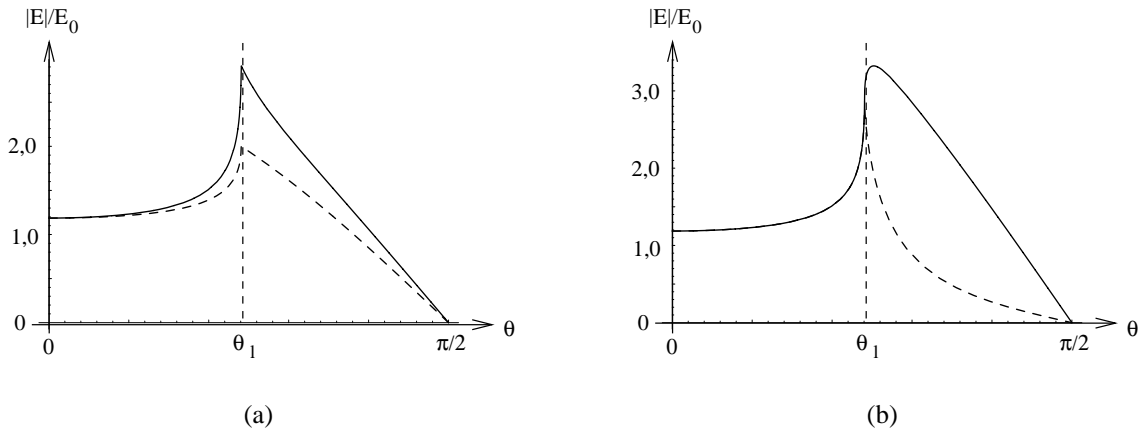


FIG. 1.10 – (a) Tracé de $|\mathbf{E}_3|$ en fonction de θ , en mode TM (trait plein), et TE (trait pointillé). (b) Intensité des composantes E_- (trait plein) et E_+ (trait pointillé).

Si la polarisation du champ transmis en mode TE est simple, celle correspondant au mode TM est plus complexe. Elle est polarisée elliptiquement dans le plan xOz , et tourne "dans le sens" de propagation de l'onde de surface. Sur la figure 1.10-b sont tracées les amplitudes des polarisations circulaires "+" (le sens trigonométrique de rotation) et "-" (sens inverse), quand le vecteur de base \mathbf{e}_y oriente le plan xOz . En dessous de l'angle limite θ_l , les deux sont égales car la polarisation est linéaire. Pour $\theta > \theta_l$, il apparaît que plus l'angle d'incidence θ augmente, plus la composante rétrograde "-" domine. C'est une propriété importante pour la suite, puisque les transitions entre les niveaux internes d'un atome sont régies par ces composantes.

Point de rebroussement classique et interaction de van der Waals. Considérons maintenant la dépendance globale du potentiel, dans le cas le plus simple d'un atome

⁷Afin d'augmenter l'amplitude du champ évanescent, plusieurs expériences ont été effectuées en ajoutant une couche métallique sur le prisme. Cette méthode permet d'exciter un mode plasmon de surface et de générer des intensités électriques plus importantes [76, 77].

à deux niveaux. Le potentiel est alors proportionnel à l'intensité (voir chapitre 4), par conséquent :

$$V(x, z) = V_0 e^{-2\kappa_0 z} \quad (1.8)$$

Un atome incident sur la surface ne sera réfléchi que si son énergie cinétique selon z est inférieure à la hauteur de la barrière de potentiel V_0 . Dans une description classique de l'interaction, les atomes font demi-tour à une altitude définie par l'égalité du potentiel et de l'énergie cinétique incidente selon la direction verticale (voir figure 1.11) :

$$V_0 e^{-2\kappa_0 z_r} = E_c^{z,i} \quad \Rightarrow \quad z_r = \frac{1}{2\kappa_0} \ln \left(\frac{V_0}{E_c^{z,i}} \right)$$

La distance z_r est la hauteur de rebroussement classique. Il est supposé dans tout ce

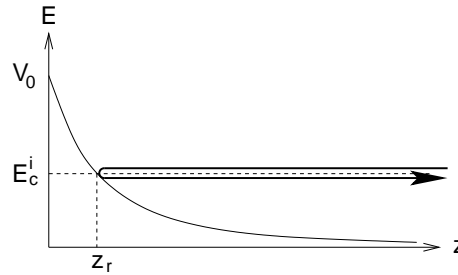


FIG. 1.11 – Hauteur de rebroussement classique d'un atome entrant dans une onde évanescente.

mémoire que z_r est suffisamment grand pour pouvoir négliger les interactions de van der Waals. Leur effet est d'abaisser la hauteur de la barrière de potentiel à une valeur $V_m < V_0$: les atomes adhéreront alors à la surface pour une énergie cinétique plus faible [78]. D'autre part, l'atome peut passer par effet tunnel à travers l'onde évanescente dès que son énergie cinétique avoisine V_m [79]. Dans notre cas, nous aurons toujours des hauteurs de rebroussement classique supérieures à 200 nm, ce qui assure une bonne description du potentiel par l'expression 1.8.

Nous allons voir dans le paragraphe suivant comment ce miroir à atomes peut être modifié afin de créer un réseau de diffraction atomique en réflexion.

1.3.2 Fonction réseau

Le schéma 1.12 indique le mode courant d'obtention d'un réseau optique de diffraction fondé sur l'onde évanescente. Il a été proposé en 1989 par J.V. Hajnal et G.I. Opat [24]. Le champ incident sous réflexion totale interne, d'amplitude \mathbf{E}_1 , est rétro-réfléchi avec une amplitude \mathbf{E}_2 : l'onde de surface est donc partiellement stationnaire. Les deux ondes ont des vecteurs d'onde surfaciques de même module, ce qui implique que la périodicité du réseau est égale à la demi longueur d'onde de surface de l'onde évanescente. Le champ électromagnétique a donc la forme suivante :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \mathbf{E}_1 e^{im_1 k_0 x} e^{-\kappa_0 z} + \mathbf{E}_2 e^{-im_1 k_0 x} e^{-\kappa_0 z}$$

Il peut être réécrit en introduisant le vecteur d'onde du réseau optique $Q = -2n_1 k_0^{\parallel}$:

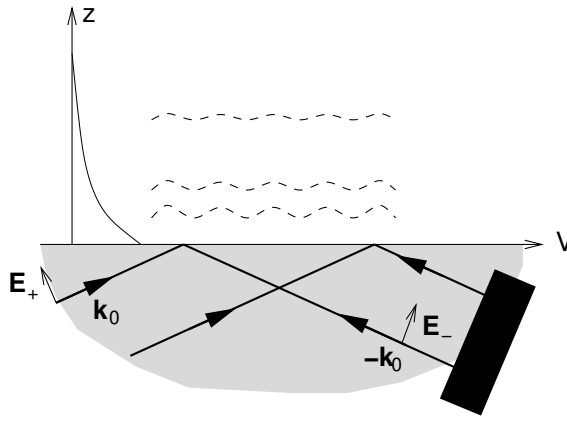


FIG. 1.12 – Onde évanescente partiellement stationnaire créée par rétro réflexion d'un champ incident totalement réfléchi sur l'interface.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x, y, z) &= \mathbf{E}_1 e^{in_1 k_0^{\parallel} x} e^{-\kappa_0 z} + \mathbf{E}_2 e^{i(n_1 k_0^{\parallel} - 2n_1 k_0^{\parallel})x} e^{-\kappa_0 z} \\ &= \mathbf{E}_1 e^{in_1 k_0^{\parallel} x} e^{-\kappa_0 z} + \mathbf{E}_2 e^{i(n_1 k_0^{\parallel} + Q)x} e^{-\kappa_0 z} \end{aligned} \quad (1.9)$$

Cette forme permet de faire apparaître le champ total comme la somme d'une onde évanescente de vecteur d'onde de surface $n_1 k_0^{\parallel}$ et d'une composante modulante, d'amplitude plus faible, dont le vecteur d'onde diffère du premier par la quantité Q . Les deux ondes ont bien entendu des portées identiques. Le potentiel s'exprime alors comme :

$$V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-2\kappa_0 z} \{1 + \varepsilon \cos(Qx)\} \quad (1.10)$$

où le contraste ε est donné par l'expression :

$$\varepsilon = \frac{2|\mathbf{E}_1(\mathbf{E}_2)^*|}{|\mathbf{E}_1|^2 + |\mathbf{E}_2|^2} \quad (1.11)$$

Il est important de remarquer que le contraste du potentiel est indépendant de la hauteur z . Par la suite, nous désignerons fréquemment ce dispositif par l'appellation *onde évanescente stationnaire*.

Découplage fonction miroir-fonction réseau. En représentation de Fourier, l'expression 1.9 montre que le champ ne comporte que deux ordres dont les fréquences spatiales diffèrent d'un vecteur d'onde de réseau Q . Cette grandeur, qui détermine la période du réseau de diffraction, est reliée de manière univoque à la portée du miroir atomique par la relation de dispersion :

$$\kappa_0^2 + k_0^2 = (Q/2)^2$$

En ce sens, les fonctions de réflexion et de diffraction du potentiel que nous venons de décrire sont interdépendantes : le fait de fixer la longueur d'onde (imposée par la fréquence de la transition atomique) et l'angle d'incidence (qui fixe la hauteur de rebroussement) détermine la période du réseau.

De plus, le motif est de forme simple puisqu'il est unidimensionnel, et l'orientation des lignes est perpendiculaire au plan d'incidence de la lumière.

Une alternative à cette méthode est de coupler une onde évanescente de Fresnel avec

un réseau matériel déposé sur la surface. Ce mode original de modulation fut proposé en premier en 1996 par A. Roberts et J.E. Murphy [31], qui ont mis théoriquement en évidence le fait que l'intensité du champ a la même période que le réseau. Cette suggestion a été suivie en 1998 de la réalisation par V.I. Balykin *et al.* d'un potentiel optique modulé par un réseau de lames métalliques absorbantes [32], dont ils ont mesuré la forme au moyen d'un microscope PSTM.

L'intérêt d'utiliser des nanostructures pour créer un réseau de diffraction en réflexion repose sur deux principaux points :

- ▶ les paramètres géométriques du réseau (dimensionnalité, période, orientation des axes principaux) ne dépendent que de la structure matérielle déposée sur le prisme. En particulier, l'angle entre le plan d'incidence de la lumière et les axes du réseau peut être choisi arbitrairement ;
- ▶ le champ évanescent de surface est a priori plus riche, puisque son spectre spatial est relié à la forme et à l'indice du motif. Par ailleurs, sa période peut être notablement inférieure à la demi-longueur d'onde.

Nous verrons par la suite qu'il est ainsi possible de découpler les fonctions miroir et réseau.

Dans le chapitre suivant, nous allons introduire les expressions générales du champ électrique diffracté dans le vide et dégager un premier ensemble de résultats sur l'évolution spatiale du potentiel diffractant.

Première partie

Champ proche diffracté par une nanostructure périodique

L'objet de cette première partie est l'étude du champ proche diffracté dans le vide par un réseau périodique. Le principe de diffraction de la lumière par des réseaux plans est connu depuis le début du XIX^{ème} siècle. Les progrès technologiques effectués depuis les réseaux fabriqués par H.A. Rowland en 1882 à l'aide d'une pointe de diamant ont rapidement permis d'en faire un instrument privilégié d'analyse spectrale de la lumière. Les techniques actuelles de fabrication de réseaux par transfert photolithographique permettent d'obtenir des périodes de quelques centaines de nanomètres. La création de nanostructures par faisceau d'ions autorise une plus grande souplesse sur la forme des objets créés, qui peuvent être de profil quelconque.

Le principe de diffraction de la lumière par un réseau matériel de période L repose sur l'échange avec le rayonnement d'une ou plusieurs impulsions $(2\pi/L)\mathbf{u}$ fournies par la structure. Lorsque le champ incident est propageant, la modification de la composante du vecteur d'onde parallèle à \mathbf{u} qui en résulte entraîne un changement de la direction de propagation de la lumière, par conservation de la fréquence. La quantification de l'impulsion du réseau implique une quantification des angles de diffraction (voir figure 1.13-a). De même, un réseau peut permettre de convertir en lumière propageante des modes électromagnétiques normalement confinés au voisinage d'une surface. Par exemple, T.W. Ebbesen *et al.* ont montré en 1998 [80] qu'un réseau de trous percés dans un film métallique plasmonique conduit à une transmission exaltée de la lumière comparée aux prédictions de la théorie de Bethe [58]. Celle-ci prévoit en effet que la transmission décroît en $(r/\lambda)^4$, où r est le rayon du trou, alors que la valeur mesurée, une fois rapportée à la surface totale des trous, est 1000 fois plus importante. Ce phénomène peut être vu, en première approximation, comme le résultat de l'excitation d'un mode plasmon de surface par la lumière, assistée par le réseau. En effet, la relation de dispersion d'un mode plasmon de surface ne permet pas l'excitation directe par un faisceau propageant classique (voir figure 1.13-b). Un autre exemple plus étonnant a été, sur un principe similaire, l'obtention en 2002 par J.J. Greffet *et al.* d'un rayonnement thermique cohérent dans l'infrarouge, et ce, sans aucune excitation extérieure [81].

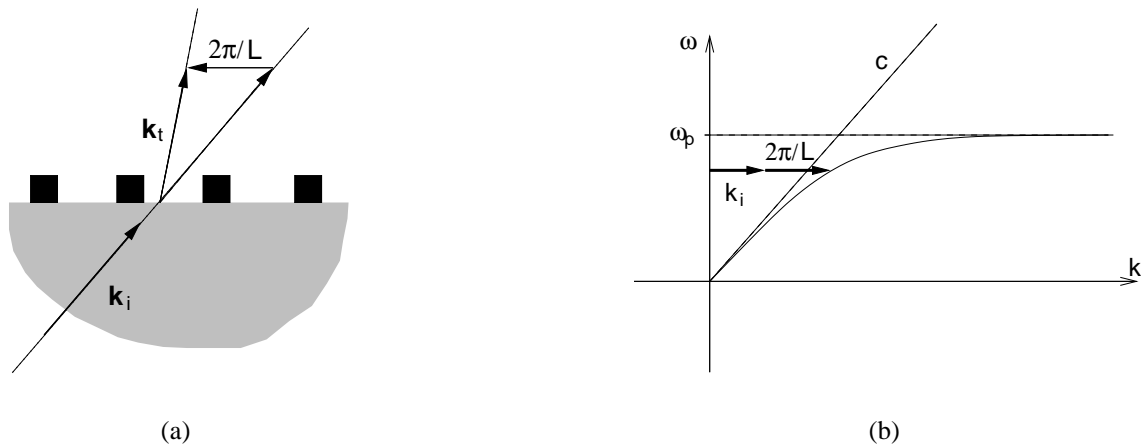


FIG. 1.13 – (a) Diffraction d'une onde propageante par un réseau. (b) Excitation d'un mode plasmon de surface assistée par un réseau.

Dans le cas qui nous intéresse, nous utilisons le réseau pour moduler périodiquement l'intensité d'une onde évanescente, de manière à créer un miroir atomique diffractant. Ce

mode original d'obtention de la modulation a été suggéré en premier par A. Roberts et J.E. Murphy en 1996 [31]. Ils ont mis théoriquement en évidence le fait que l'intensité du champ possède la même période que le réseau. L'intérêt est d'utiliser des réseaux sub-longueur d'onde afin de transférer aux atomes des impulsions plus grandes que celles fournies par deux ondes évanescentes contrapropageantes, et ainsi d'augmenter l'angle de diffraction. En 1998, V.I. Balykin *et al.* ont fabriqué un champ optique modulé par un réseau de lames métalliques absorbantes [32]. Ils l'ont ensuite cartographié avec un microscope à effet tunnel optique (PSTM). Néanmoins, la période de leur réseau était bien au-dessus de la longueur d'onde ($10\ \mu\text{m}$).

L'intérêt principal de l'utilisation d'un réseau nanostructuré pour étudier la diffraction atomique réside dans le découplage entre la période du potentiel et la longueur d'onde du laser : la période du réseau n'est alors plus limitée que par les performances technologiques. Nous allons voir cependant que l'intérêt majeur de cette méthode n'est pas dans l'augmentation de l'angle de diffraction, qui reste minime. La diminution de la période joue même en notre défaveur : le gain pour le photon en impulsion parallèle se paie dans la direction verticale par une diminution de la portée de la modulation de l'onde, donc par un effet diffractant a priori plus faible.

En fait, la nanostructure fixe non seulement la période mais également l'orientation du réseau. On gagne donc deux degrés de liberté supplémentaires. Le premier sur la longueur d'onde, qui peut être choisie en fonction des caractéristiques atomiques sans affecter l'angle de diffraction ; le deuxième sur l'orientation du faisceau incident par rapport au réseau. Nous allons voir que ce paramètre influence de manière importante la structure spatiale du champ diffracté.

Cette première partie est organisée en deux chapitres. Dans le premier, nous établissons l'expression générale des champs électrique et magnétique sous la forme d'un développement en série de Fourier. Nous dégageons l'influence de la période et de l'orientation du plan d'incidence par rapport au réseau sur la variation verticale du champ. Dans le deuxième chapitre, nous présentons la théorie différentielle des réseaux, à la base d'un algorithme de calcul exact du champ proche diffracté par une structure périodique. Nous appliquons cette méthode à une étude quantitative du champ diffracté par un réseau unidimensionnel puis par un réseau bidimensionnel.

Chapitre 2

Propriétés générales

2.1 Présentation du problème

Étudions le champ diffracté par un réseau matériel déposé sur un prisme diélectrique. Le prisme est le milieu d'entrée de la lumière, et son indice sera noté n_1 . Le motif du réseau, de forme a priori arbitraire, est constitué d'un matériau d'indice n_2 ¹. L'axe Oz est orienté vers l'intérieur du prisme, et la référence $z = 0$ est le plan passant par la surface externe du réseau. Le milieu de sortie, d'indice n_3 , est donc le demi-espace $z < 0$ (Figure 2.1).

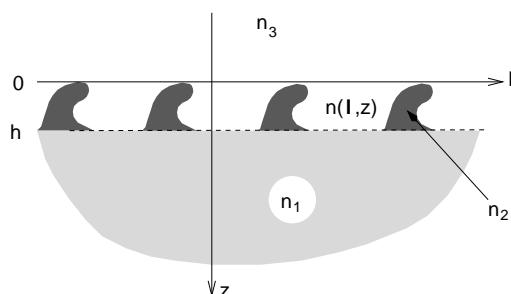


FIG. 2.1 – Le réseau de diffraction est déposé sur la surface d'un prisme. Les milieux d'entrée et de sortie sont respectivement les demi-espaces $z > h$ et $z < 0$.

Nous nous limitons à la réponse linéaire du milieu. Par conséquent, tout champ incident pouvant être décomposé par transformation de Fourier en une somme d'ondes planes de fréquence spatiale k_0 , le champ électrique incident est supposé de la forme $\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$. Le vecteur d'onde \mathbf{k}_0 a pour module $k_0 = 2\pi/\lambda$, où λ est la longueur d'onde. Sa direction est repérée par l'angle azimutal θ et l'angle polaire φ . Il s'écrit en projection sur la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ (figures 2.2) :

$$\begin{cases} k_{x,0} &= -k_0 \sin \theta \cos \varphi \\ k_{y,0} &= -k_0 \sin \theta \sin \varphi \\ k_{z,0} &= -k_0 \cos \theta \end{cases} \quad (2.1)$$

On introduit également la notation $\mathbf{k}_0^{\parallel} = k_{x,0}\mathbf{e}_x + k_{y,0}\mathbf{e}_y$ pour la composante du vecteur

¹Dans notre cas le prisme est en silice ($n_1 = 1,46$), et le motif en dioxyde de titane (TiO_2 , $n_2 = 2,1$). Ce dernier a été choisi pour son fort contraste d'indice avec la silice, ce qui favorise le confinement du champ par les nanostructures (cf. chapitre 8).

d'onde qui se projette sur le plan Ok_xk_y . De même, nous identifierons dans la suite la composante parallèle du vecteur position \mathbf{r} par $\mathbf{l} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y$.

On appelle "zone modulée" l'espace compris entre les plans $z = 0$ et $z = h$, dans laquelle est contenu le réseau de diffraction. L'indice de réfraction n dépend des coordonnées de l'espace, et sera noté $n(\mathbf{l}, z)$. Il s'agit d'une fonction périodique de la variable \mathbf{l} , qui vaut n_2 lorsque (\mathbf{l}, z) désigne un point du motif. Il peut éventuellement dépendre de z afin de décrire des profils complexes du réseau².

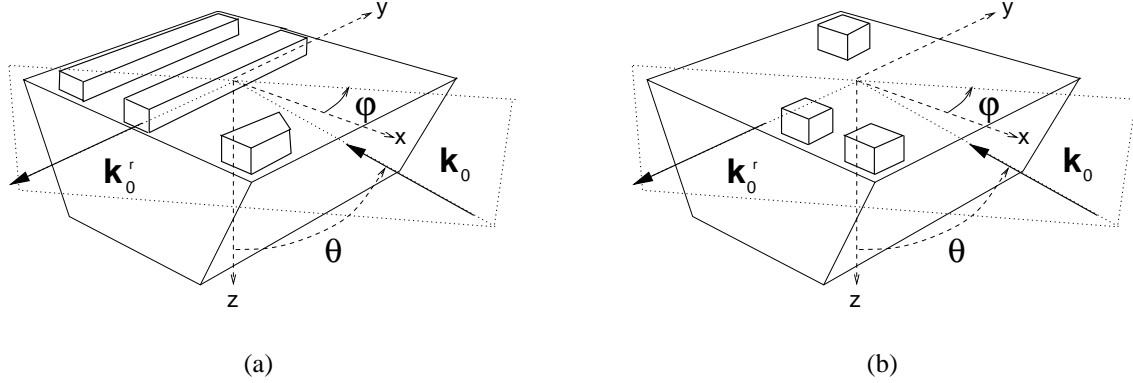


FIG. 2.2 – (a) Réseau de diffraction unidimensionnel. (b) Réseau bidimensionnel.

Réseaux réciproques 1D et 2D. Nous allons nous intéresser dans ce mémoire à deux types de réseau. Le premier est unidimensionnel, comme indiqué sur la figure 2.2-a. Sa période selon l'axe x est notée L . Remarquons que lorsque l'angle φ est nul, le plan d'incidence du laser est orthogonal aux lignes de la structure. Au contraire, il est parallèle pour $\varphi = \pi/2$. Nous verrons dans la suite que l'orientation du vecteur d'onde du champ incident joue un rôle important sur la forme du champ diffracté. Sur la figure 2.2-b est représenté un réseau bidimensionnel de périodicité selon x et y respectivement L_x et L_y . Étant donné que nous allons travailler aussi bien dans l'espace direct qu'en représentation de Fourier, il est indispensable d'introduire dès maintenant les vecteurs du réseau réciproque \mathbf{Q}_v . Chaque fois que cela sera possible, nous adopterons une notation indicelle commune pour les cas à une et deux dimensions, en désignant par v soit un seul indice m , de telle sorte que $\mathbf{Q}_v = \mathbf{Q}_m = m\frac{2\pi}{L}\mathbf{e}_x$, soit le couple d'indice (m, n) en deux dimensions : $\mathbf{Q}_v = \mathbf{Q}_{m,n} = m\frac{2\pi}{L_x}\mathbf{e}_x + n\frac{2\pi}{L_y}\mathbf{e}_y$. Nous utiliserons cette notation à chaque fois que les expressions développées dans la suite seront indifféremment applicables à chacune de ces situations.

2.2 Expression des champs

Compte tenu de la périodicité de la structure, on peut écrire dans tout l'espace les champs électromagnétiques sous la forme d'un développement de Fourier suivant les coordonnées x et y :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x, y, z) &= \sum_v \mathbf{E}(v, z) e^{i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{l}} \\ \mathbf{H}(x, y, z) &= \sum_v \mathbf{H}(v, z) e^{i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{l}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

²Dans notre cas, le motif est à flancs raides, et l'indice ne dépend que de la coordonnée l .

$$\mathbf{k}_v = n_1 \mathbf{k}_0^{\parallel} + \mathbf{Q}_v$$

Cette expression traduit le fait que la lumière incidente peut acquérir des quantas d'impulsion $\hbar \mathbf{Q}_v$ par interaction avec le réseau. Nous désignerons dans la suite les champs \mathbf{E} et \mathbf{H} par la notation commune \mathbf{F} chaque fois que ces deux champs vérifieront la même forme d'équation.

Expression de $\mathbf{F}(v, z)$ dans les milieux 1 et 3. Les milieux d'entrée et de sortie étant homogènes, les champs obéissent à l'équation d'onde :

$$\Delta \mathbf{F}^{(r)}(\mathbf{r}) + n_r^2 k_0^2 \mathbf{F}^{(r)}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{avec } r = 1, 3. \quad (2.3)$$

On peut noter que cette équation n'est pas valable dans la zone modulée à cause des discontinuités d'indice entre les plots et le vide. Après substitution dans cette relation des expressions développées 2.2, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{F}^{(r)}(v, z)}{\partial z^2} + (n_r^2 k_0^2 - \mathbf{k}_v^2) \mathbf{F}^{(r)}(v, z) = 0$$

Chacune des composantes de Fourier du champ obéit à l'équation d'Helmholtz homogène. Les solutions sont la superposition d'ondes "montantes" (notées u) et "descendantes" (notées d) :

$$\mathbf{F}^{(r)}(v, z) = \mathbf{F}^{(r,u)}(v) e^{i\gamma_v^{(r)} z} + \mathbf{F}^{(r,d)}(v) e^{-i\gamma_v^{(r)} z}$$

où $\gamma_v^{(r)}$, la composante z du vecteur d'onde, obéit à la relation de dispersion :

$$\gamma_v^{(r)2} + \mathbf{k}_v^2 = n_r^2 k_0^2 \quad (2.4)$$

Suivant la valeur de la composante parallèle \mathbf{k}_v , la composante $\gamma_v^{(r)}$ peut être soit réelle, auquel cas l'ordre v sera propagatif, soit imaginaire pur, et l'ordre v sera évanescent. Le champ électromagnétique s'écrit donc de manière générale dans les milieux d'entrée et de sortie :

$$\mathbf{F}^{(r)}(x, y, z) = \sum_v \left[\mathbf{F}^{(r,u)}(v) e^{i\gamma_v^{(r)} z} + \mathbf{F}^{(r,d)}(v) e^{-i\gamma_v^{(r)} z} \right] e^{i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{l}} \quad (2.5)$$

Cette écriture générale des champs porte le nom de développement de Rayleigh.

Conditions aux limites. Nous pouvons maintenant simplifier l'expression des champs en tenant compte des conditions aux limites spécifiques du problème. Dans un premier temps, observons que l'interface est éclairée par un faisceau laser monochromatique provenant de $+\infty$. Il s'ensuit que l'unique onde descendante existant dans le milieu 1 est l'ordre $v = 0$. Ce champ incident est réfléchi par l'interface et donc diffracté dans tous les ordres de Fourier :

$$\mathbf{F}^{(1)}(x, y, z) = \mathbf{F}_0 e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} + \sum_v \mathbf{F}^{(1,u)}(v) e^{i\gamma_v^{(1)} z} e^{i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{l}} \quad (2.6)$$

De même, les seules ondes se propageant dans le vide sont descendantes, puisqu'aucune source de lumière n'est présente en $-\infty$. Le champ dans le milieu 3 sera donc de la forme :

$$\mathbf{F}^{(3)}(x, y, z) = \sum_{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{(3,d)}(\mathbf{v}) e^{-i\gamma_{\mathbf{v}}^{(3)} z} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{l}} \quad (2.7)$$

Caractère évanescent des ondes partielles. En pratique, l'angle d'incidence de la lumière dans le verre est supérieur à l'angle limite de réfraction. Par conséquent, l'onde non modulée dans le milieu de sortie, qui s'identifie à l'ordre zéro de diffraction, est évanescente, de coefficient de décroissance $\kappa_0 = k_0 \sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta - 1}$.

Pour un réseau sub-longueur d'onde, nous allons voir que toutes les ondes partielles diffractées sont évanescentes sauf au plus une, ce qui signifie que $\gamma_{\mathbf{v}}$ sera en général imaginaire pur³. La grandeur pertinente est donc le coefficient de décroissance de l'onde $\kappa_{\mathbf{v}} = \gamma_{\mathbf{v}}/i$, qui est relié à la composante parallèle du vecteur d'onde par :

$$\kappa_{\mathbf{v}} = \sqrt{\mathbf{k}_{\mathbf{v}}^2 - k_0^2}$$

Ainsi, pour un réseau unidimensionnel, les différentes portées sont données par l'expression :

$$\kappa_m = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\left(n_1 \sin \theta \cos \varphi + m \frac{\lambda}{L}\right)^2 + (n_1 \sin \theta \sin \varphi)^2 - 1}$$

tandis que pour un réseau bidimensionnel nous avons :

$$\kappa_{m,n} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\left(n_1 \sin \theta \cos \varphi + m \frac{\lambda}{L_x}\right)^2 + \left(n_1 \sin \theta \sin \varphi + n \frac{\lambda}{L_y}\right)^2 - 1}$$

D'un point de vue général, quand l'ordre \mathbf{v} augmente, la valeur du coefficient de décroissance $\kappa_{\mathbf{v}}$ augmente et la portée de l'ordre \mathbf{v} décroît. La conséquence en est que les hautes fréquences spatiales sont filtrées avec la hauteur d'observation. À grande distance, seul l'ordre 0 subsiste : le champ se comporte uniquement comme un miroir. À distance intermédiaire, seuls les ordres de plus grande portée sont à prendre en compte : ce sont ceux-là qui vont dominer la structure du champ.

Un exemple est donné figure 2.3. Le champ est tracé au-dessus d'un réseau unidimensionnel en TiO_2 pour trois hauteurs de calcul. Le motif est un ruban de profil rectangulaire de largeur 100 nm et de hauteur 50 nm. La période est $L = 250$ nm. Le champ incident a une longueur d'onde de $\lambda = 850$ nm et fait un angle $\theta = 60^\circ$ avec la normale à l'interface. Il est de plus en incidence perpendiculaire par rapport aux lignes ($\varphi = 0^\circ$). Ces figures montrent clairement que l'allure du champ évolue considérablement avec la hauteur. En effet, le spectre est très structuré juste à la surface du réseau, comme le montrent les pics étroits apparaissant sur les flancs du motif. Cependant, dès que la hauteur d'observation augmente, ces contributions de très courte portée disparaissent, pour laisser rapidement place à un champ d'allure quasi sinusoïdale. Nous pouvons également remarquer que le contraste du champ diminue avec la hauteur. En effet, la portée de l'ordre 0 est dans cet exemple plus grande que celle des autres ordres de Fourier.

³De plus, d'un point de vue expérimental, les ondes propageantes dans le milieu 3 sont défavorables car le temps d'interaction avec les atomes est très grand, ce qui implique une émission spontanée importante.

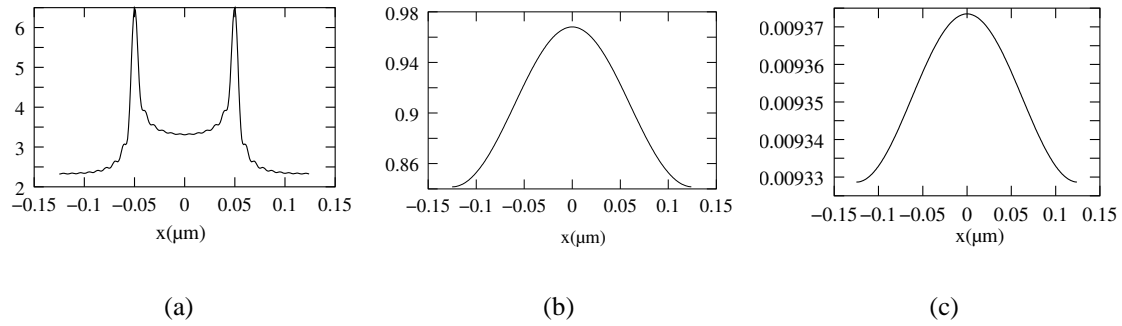


FIG. 2.3 – Intensité relative du champ électrique calculée au-dessus d’un réseau unidimensionnel en fonction de la hauteur : (a) 0 nm, (b) 100 nm, (c) 500 nm. En (b) et (c), le potentiel est quasi-sinusoïdal et les contrastes sont respectivement de 7% et 0,2%.

De plus, κ_v dépend non seulement de θ mais aussi de φ , ce qui diffère du cas de l’onde évanescente stationnaire. Ainsi, pour des ordres de Fourier équivalents (par exemple $\pm m$ pour un réseau unidimensionnel, mais également $(0, \pm m)$ et $(\pm m, 0)$ pour le réseau bidimensionnel), le poids respectif des différentes harmoniques va dépendre de l’orientation du plan d’incidence de la lumière par rapport au réseau.

Sur la figure 2.4 est représentée l’intensité du champ électrique à 50 nm et 200 nm au-

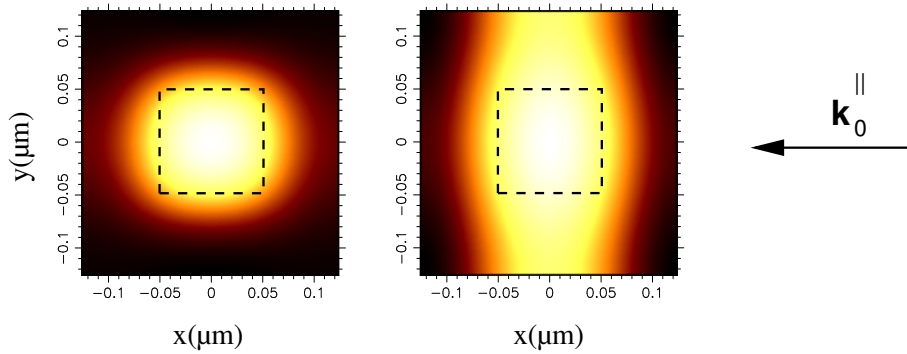


FIG. 2.4 – Intensité relative du champ électrique calculée au-dessus d’un réseau bidimensionnel à $z = 50$ nm (gauche) et $z = 200$ nm (droite). Plus la couleur est claire, plus l’intensité relative est intense. Elle varie de 1,0 à 1,5 pour $z = 50$ nm, et de 0,175 à 0,183 à $z = 200$ nm.

dessus d’un plot parallélépipédique appartenant à un réseau bidimensionnel de maille carrée, de période 250 nm. Dans le premier cas, près du plot, le champ est bien contrasté dans les deux directions. Dans le deuxième, à plus grande distance, le contraste est beaucoup plus faible dans la direction y . Nous verrons dans la suite que cela provient d’un filtrage plus fort de la composante $(1,0)$ que de la composante $(0,1)$.

Ainsi, l’évolution du champ électromagnétique dans l’espace est déterminée de deux manières :

- tout d’abord le spectre du champ électrique. En plus de sa dépendance en longueur d’onde, il contient toute l’information sur la nature du réseau diffractant : indice, périodicité, mais également forme du motif et hauteur du réseau. Cet aspect sera étudié dans le deuxième chapitre d’un point de vue numérique ;

- ensuite, l'évolution selon z du champ électromagnétique est dominée par la décroissance exponentielle de l'amplitude des harmoniques d'ordre ν . Plus la hauteur d'observation augmente, plus le spectre du champ s'appauvrit en détails fins. C'est pour cette raison que l'on considère la hauteur d'observation comme l'équivalent d'un filtre passe-bas.

Nous allons maintenant étudier plus exhaustivement le comportement des portées en fonction de divers paramètres.

2.3 Étude des portées des différentes harmoniques

La portée d'un ordre de Fourier ν dépend, comme nous l'avons vu, de la longueur d'onde λ du champ incident, des angles θ et φ ainsi que de la période $L_{x/y}$. Nous allons considérer par la suite que les paramètres caractéristiques du champ incident λ et θ sont fixés. Afin de mieux voir l'influence des deux paramètres restant, caractérisant la nanostructure, il est possible d'introduire une représentation graphique simple de la relation de dispersion 2.4 .

Réseau 1D. Considérons dans un premier temps le cas d'un réseau unidimensionnel. La figure 2.5-a illustre graphiquement la relation de dispersion dans l'espace réciproque. Le réseau y est représenté par un ensemble de points sur l'axe x ayant pour abscisse $m2\pi/L$. Nous allons noter ces points A_m , l'origine du repère étant A_0 . Les vecteurs réciproques du réseau sont ainsi $\mathbf{Q}_m = \overrightarrow{A_0A_m}$.

La projection du vecteur d'onde sur le plan $0xy$ est représentée par le vecteur $\overrightarrow{AA_0} = n_1 \mathbf{k}_0^{\parallel}$. Lorsque l'angle polaire φ varie, le point A, représentatif de l'onde incidente, décrit un cercle autour de A_0 . Les vecteurs d'onde \mathbf{k}_m correspondent donc aux vecteurs $n_1 \mathbf{k}_0^{\parallel} + \mathbf{Q}_m = \overrightarrow{AA_0} + \overrightarrow{A_0A_m} = \overrightarrow{AA_m}$.

Rappelons la relation de dispersion :

$$\gamma_m^2 + \mathbf{k}_m^2 = \mathbf{k}_0^2 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{k}_m^2 = \mathbf{k}_0^2 + \kappa_m^2 \quad \text{avec} \quad \kappa_m = \gamma_m/i$$

Traçons autour de chaque point A_m un cercle de rayon k_0 et introduisons H_m , point de contact entre le cercle de centre A_m et sa tangente passant par A. Dans le cas qui nous intéresse, le réseau est de période très inférieure à la longueur d'onde ($2\pi/L > k_0$) et les différents disques ne s'interpénètrent pas. La relation de dispersion n'est alors rien d'autre que le théorème de Pythagore écrit dans le triangle rectangle AA_mH_m . Le coefficient de décroissance de chaque harmonique κ_m correspond donc à la distance AH_m .

Cette représentation a l'avantage de montrer de quelle manière évoluent les différentes portées de chaque harmoniques en fonction de φ et L . Les valeurs de m pour lesquelles les longueurs AH_m sont les plus courtes correspondent aux ordres dominant à grande distance : ce sont ceux qui interviendront majoritairement dans le processus de diffraction.

Quelques remarques :

- la figure 2.5-a est tracée pour des paramètres typiques d'angle d'incidence et de période. Lorsque φ varie de 0 à 2π , le point A décrit un cercle ne traversant jamais un des disques de rayon k_0 : tous les ordres de Fourier sont donc évanescents. Les

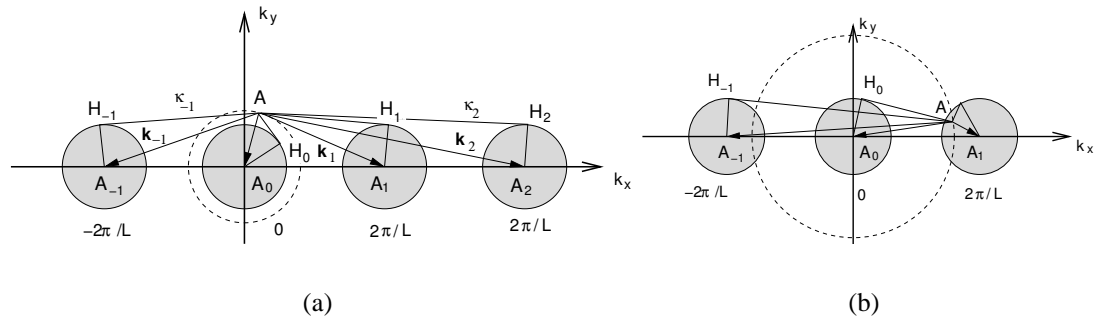


FIG. 2.5 – (a) Représentation graphique de la relation de dispersion 2.4 pour un système à une dimension. Le tracé a été effectué pour les paramètres typiques : $\varphi = 60^\circ$, $\lambda = 850$ nm, $n_1 = 1,46$ et $L = 250$ nm. (b) En augmentant la période L ou l'angle d'incidence θ (angle plus rasant), les paramètres d'illumination peuvent être tels que l'ordre 1 devient radiatif : A_1 se trouve alors dans le cercle grisé de centre A_1 , le point H_1 n'est donc pas défini.

ordres dominant à longue distance seront toujours +1 et -1. Dans le cas particulier où $\varphi = \pi/2$, A se trouve sur l'axe Ok_y , et les portées des ordres m et $-m$ sont dégénérées par symétrie ;

- considérons maintenant la figure 2.5-b. Dans ce cas, A se trouve dans le cercle de centre A_1 , ce qui signifie que l'ordre +1 de diffraction est radiatif. Ceci illustre le fait qu'une onde incidente sur une surface à un angle supérieur à l'angle de réflexion totale interne peut être transmise si elle interagit avec un réseau de période suffisamment grande : la composante parallèle du vecteur d'onde incident nécessaire pour satisfaire la relation de dispersion est fournie par le réseau. La valeur minimale de la période pour retrouver la transmission se calcule facilement :

$$L_t = \frac{\lambda}{n_1 \sin \theta + 1}$$

Pour $\theta = 60^\circ$, $L_t = 375,7$ nm : L sera ultérieurement fixée à 250 nm, ce qui assure donc que tous les ordres diffractés sont évanescents.

Réseau 2D. Cette méthode graphique s'étend simplement à deux dimensions. Considérons pour cela le réseau réciproque associé, de périodicité $2\pi/L_x$ et $2\pi/L_y$, ainsi que les disques de rayon k_0 centrés autour de chacun des points $A_{m,n}$. La figure 2.6 est tracée pour les mêmes paramètres que ceux utilisés dans la figure 2.5-a, en considérant un réseau à maille carrée.

Du fait de la symétrie du réseau par rapport aux deux axes Ox et Oy , il suffit d'étudier l'évolution du champ électromagnétique pour les valeurs de φ comprises entre 0 et $\pi/2$.

Au sens strict, les deux harmoniques dominants à grande distance correspondent alors aux ordres $(0, \pm 1)$ et $(1, 0)$. Cependant, la proximité des points $A_{1, \pm 1}$ complique la situation. À des distances intermédiaires correspondant aux hauteurs de rebroussement atomiques, il est possible que ces ordres ne soient pas suffisamment éteints pour ne pas en tenir compte dans l'expression du champ, comme nous allons le voir par la suite.

Ainsi, pour comprendre la structure du champ diffracté par un réseau 1D ou 2D à une distance suffisamment grande de la surface, il suffit de connaître les amplitudes des

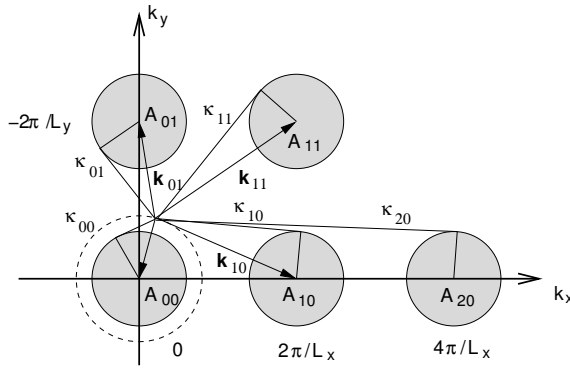


FIG. 2.6 – Représentation graphique de la relation de dispersion 2.4 pour un réseau bidimensionnel. Le tracé a été effectué pour les paramètres suivant : $\varphi = 60^\circ$, $\lambda = 850$ nm, $n_1 = 1,46$ et $L_x = L_y = 250$ nm.

composantes spectrales de portée la plus longue. Nous verrons par la suite que ces seuls harmoniques suffisent à décrire la diffraction atomique dans les cas expérimentalement accessibles. Tout le problème est de savoir à quels ordres se limiter. Avant d'étudier ce problème dans deux cas spécifiques, nous allons calculer la forme du champ à grande distance.

2.3.1 Expression de l'intensité à grande distance

Nous verrons par la suite que le potentiel d'interaction de l'atome avec le champ optique est, dans le cas d'un atome à deux niveaux, proportionnel à l'éclairement $|\mathbf{E}|^2$. En ne tenant compte que des harmoniques de plus longue portée, labellés par v' , le champ électrique s'écrit :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{in_1 \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_0 z} + \sum_{v'} \mathbf{E}_{v'} e^{i(n_1 \mathbf{k}_0 + \mathbf{Q}_{v'}) \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_{v'} z} + \dots \quad (2.8)$$

Nous nous plaçons dans la situation où la portée la plus longue est celle de l'ordre 0. Les ordres diffractés décroissent donc plus rapidement en amplitude que l'onde évanescente non modulée. Nous pouvons ainsi supposer qu'ils sont suffisamment filtrés à la hauteur z pour considérer que leur amplitude est faible devant celle de l'ordre 0. Effectuons alors un développement limité de l'éclairement à l'ordre 1 par rapport $|\mathbf{E}|_{v'} \exp(-\kappa_{v'} z)$:

$$|\mathbf{E}|^2(\mathbf{r}) = |\mathbf{E}_0|^2 e^{-2\kappa_0 z} + \sum_{v'} \left\{ \mathbf{E}_{v'} \cdot \mathbf{E}_0^* e^{i\mathbf{Q}_{v'} \cdot \mathbf{l}} e^{-(\kappa_0 + \kappa_{v'})z} + C.C. \right\} + \dots \quad (2.9)$$

où $C.C.$ indique le complexe conjugué de la quantité précédente. Introduisons la notation $2\mathbf{E}_{v'} \cdot \mathbf{E}_0^* / \mathbf{E}_0^2 = \tilde{\epsilon}_{v'} \exp i\phi_{v'}$. Le calcul numérique montre que, pour la gamme de paramètres explorée, la phase de ce nombre complexe est toujours négligeable. Nous la considérerons nulle par la suite. La formule 2.9 s'écrit alors :

$$|\mathbf{E}|^2(\mathbf{r}) \approx |\mathbf{E}_0|^2 e^{-2\kappa_0 z} \left\{ 1 + \sum_{v'} \tilde{\epsilon}_{v'}(z) \cos(\mathbf{Q}_{v'} \cdot \mathbf{l}) \right\} \quad (2.10)$$

où :

$$\tilde{\varepsilon}_{v'}(z) = \varepsilon_{v'} e^{(\kappa_0 - \kappa_{v'})z} \quad (2.11)$$

Cette expression généralise celle du potentiel évanescent stationnaire 1.10. Outre le fait que plusieurs harmoniques sont pris en compte, nous voyons que le contraste $\tilde{\varepsilon}_{v'}$ de l'harmonique v' est une fonction exponentielle de la distance z . Pour les paramètres de la figure 2.6, on aura toujours $\kappa_0 \geq \kappa_{v'}$, donc $\tilde{\varepsilon}_{v'}$ est une fonction décroissante.

2.3.2 Deux exemples

Nous allons maintenant introduire les deux géométries unidimensionnelles et bidimensionnelles qui nous serviront dans ce mémoire à étudier la diffraction atomique par un potentiel optique nanostructuré.

2.3.2.1 Réseau unidimensionnel

La géométrie que nous introduisons dans ce paragraphe est choisie de telle manière que le champ évanescent à grande distance puisse s'identifier au potentiel évanescent stationnaire pour une valeur donnée de φ . Il sera alors possible par la suite de faire une comparaison quantitative de leurs caractéristiques spécifiques.

Forme du champ à grande distance. Considérons un réseau unidimensionnel tel que représenté dans l'espace réciproque sur la figure 2.7. Quel que soit l'angle d'incidence φ du laser sur le réseau, les ordres ± 1 dominent à grande distance par rapport aux ordres plus élevés. Compte tenu de la symétrie par rapport à l'axe $0y$, il suffit d'étudier la forme du champ pour $\varphi \in [0, \pi/2]$. En particulier, les deux ordres ± 1 sont dégénérés pour $\varphi = \pi/2$. Si l'on néglige la contribution des harmoniques de portée plus courte, on a :

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \mathbf{E}_0 e^{in_1 \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_0 z} + \mathbf{E}_{+1} e^{i(n_1 \mathbf{k}_0 + \frac{2\pi}{L} \mathbf{e}_x) \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_{+1} z} + \mathbf{E}_{-1} e^{i(n_1 \mathbf{k}_0 - \frac{2\pi}{L} \mathbf{e}_x) \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_{-1} z}$$

et

$$V(x, y, z) = V_0 e^{-2\kappa_0 z} \left\{ 1 + \tilde{\varepsilon}_{+1}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) + \tilde{\varepsilon}_{-1}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right\} \quad (2.12)$$

avec

$$\tilde{\varepsilon}_{+1}(z) = \varepsilon_{+1} e^{(\kappa_0 - \kappa_{+1})z} \quad \text{et} \quad \tilde{\varepsilon}_{-1}(z) = \varepsilon_{-1} e^{(\kappa_0 - \kappa_{-1})z} \quad (2.13)$$

Pour que la dépendance en z du potentiel soit identique à celle de l'onde évanescente stationnaire (équation 1.10), le contraste doit être indépendant de la hauteur. Cela signifie que la portée de l'ordre 1 doit être identique à celle de l'ordre 0. C'est en effet le cas si le point A représentant l'origine du vecteur $n_1 \mathbf{k}_0$ se trouve sur la médiatrice M du segment $[A_0 A_1]$. Pour que cette situation puisse se produire, la périodicité du réseau doit vérifier $\pi/L < n_1 k_0$. De plus, une deuxième contrainte provient du fait que l'ordre 1 ne doit pas être radiatif, ce qui impose l'inégalité : $|2\pi/L - n_1 k_0| \geq k_0$. Pour un angle d'incidence $\theta = 60^\circ$ et un indice $n_1 = 1,46$, les deux valeurs extrêmes de la période L sont 346 nm et

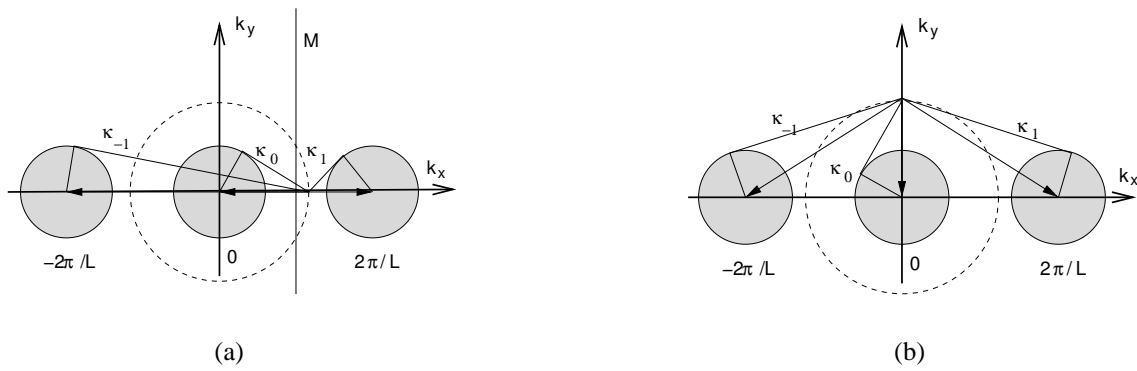


FIG. 2.7 – (a) Au point d’intersection entre M et le cercle de centre A_0 et de diamètre $n_1 k_0^{\parallel}$, la portée de l’ordre zéro est égale à celle de l’ordre 1. (b) Pour $\varphi = \pi/2$, les portées des ordres ± 1 sont égales.

381 nm.

Dans le cas où $L < \pi/n_1 k_0^{\parallel}$, la portée de l’ordre 1 est strictement supérieure à celle de l’ordre 0. L’expression 2.12 montre que le contraste associé croît exponentiellement, au moins à courte distance. Cette situation est défavorable pour la diffraction atomique, car un trop fort contraste implique une diffraction dans des ordres trop élevés : la population incidente est alors répartie dans un grand nombre de directions, ce qui n’a aucun intérêt en pratique, étant donné le faible peuplement de chaque ordre.

Nous allons donc fixer la période de la nanostructure à la valeur $L_{ref} = \pi/n_1 k_0^{\parallel}$ de l’onde évanescente stationnaire pour le même angle d’incidence θ . Dans ce cas, pour $\varphi = 0$, la portée du contraste de l’ordre un est infinie, et le potentiel s’identifie à grande distance au potentiel évanescent stationnaire.

Filtrage du champ avec la hauteur z . La figure 2.8 représente, en échelle logarithmique décimale, les facteurs $\exp(-\kappa_m z_0)$ pour une hauteur z_0 de 200 nm, en fonction de l’angle φ et pour les deux périodicités $L = L_{ref} = 336$ nm (trait plein) et $L = 250$ nm (trait pointillé). L’altitude z_0 correspond typiquement à la hauteur de rebroussement classique de l’atome dans l’onde non modulée. L’angle d’incidence θ est fixé à 60° . Pour les deux valeurs de L , on retrouve la dégénérescence des ordres $\pm m$ à $\varphi = \pi/2$. En revanche, une particularité supplémentaire dans le cas $L = L_{ref}$ est la dégénérescence des ordres m et $1 - m$ lorsque φ vaut 0. Il apparaît que l’ordre -1 est toujours négligeable devant l’ordre +1 sauf quand φ dépasse $\pi/3$. L’ordre 2 de diffraction sera vraisemblablement toujours négligeable.

Ainsi, même si nous ne connaissons pas la forme exacte du spectre du champ diffracté, il est très probable que pour des hauteurs supérieures à 200 nm, les seuls ordres 0 et ± 1 dominent la structure du champ. Avant de compléter cette étude, dans le chapitre suivant, par le calcul des coefficients de Fourier en fonction de différents paramètres, intéressons nous à un réseau de diffraction 2D.

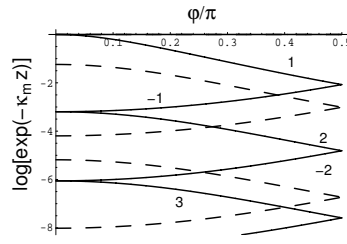


FIG. 2.8 – Tracé en échelle logarithmique décimale des facteurs $\exp(-\kappa_m z_0)$, à l'altitude $z_0 = 200$ nm, pour $L = L_{ref}$ (trait plein), et pour $L = 250$ nm (trait pointillé).

2.3.2.2 Réseau bidimensionnel

Le réseau étudié ici est à maille carrée, de période $L_x = L_y = 250$ nm. Il est éclairé sous réflexion totale, avec $\theta = 60^\circ$.

Le champ s'écrit, à grande distance et en ne tenant compte que des harmoniques $(0, \pm 1)$ et $(1, 0)$:

$$V(x, y, z) = V_0 e^{-2\kappa_0 z} \left\{ 1 + \tilde{\epsilon}_{1,0}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{L}x + \phi_{1,0}\right) + \tilde{\epsilon}_{0,-1}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{L}y + \phi_{0,-1}\right) + \tilde{\epsilon}_{0,1}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{L}y + \phi_{0,1}\right) \right\} \quad (2.14)$$

avec

$$\begin{cases} \tilde{\epsilon}_{1,0}(z) &= \epsilon_{1,0} e^{(\kappa_0 - \kappa_{1,0})z} \\ \tilde{\epsilon}_{0,-1}(z) &= \epsilon_{0,-1} e^{(\kappa_0 - \kappa_{0,-1})z} \\ \tilde{\epsilon}_{0,1}(z) &= \epsilon_{0,1} e^{(\kappa_0 - \kappa_{0,1})z} \end{cases} \quad (2.15)$$

Sur la figure 2.9 sont représentés deux exemples d'orientation du champ incident, correspondant à une illumination parallèle ($\phi = 0$) à l'axe Ox ou une illumination "diagonale" ($\phi = \pi/4$). Dans le cas parallèle, l'ordre de Fourier non nul dont la portée est la plus



FIG. 2.9 – Deux exemples d'illumination d'un réseau bidimensionnel : (a) incidence parallèle à Ox ; (b) incidence diagonale.

longue est $\mathbf{v} = (0, 1)$. Ainsi, à grande distance, le champ sera composé essentiellement du mode fondamental, non modulé, et du premier harmonique selon l'axe x : on s'attend à ce que le champ soit *uni-dimensionnel*, périodique selon x de période L , bien que le réseau

matériel sous-jacent soit bidimensionnel. Dans le cas diagonal, la symétrie de l'éclairement par rapport à l'axe $x = y$ impose au contraire deux ordres dégénérés dominant à longue portée, à savoir les harmoniques $(0,1)$ et $(1,0)$, qui ne dépendent respectivement que de x et de y . En conséquence, le champ conserve son caractère bidimensionnel même à grande distance.

Sur les figures 2.10-a et 2.10-b sont indiqués en échelle logarithmique décimale les différents facteurs $\exp[(\kappa_0 - \kappa_v)z]$ pour une hauteur de 200 nm (trait plein) et 300 nm (trait pointillé) en fonction de l'angle φ . Ces diagrammes, plus complexes que les pré-

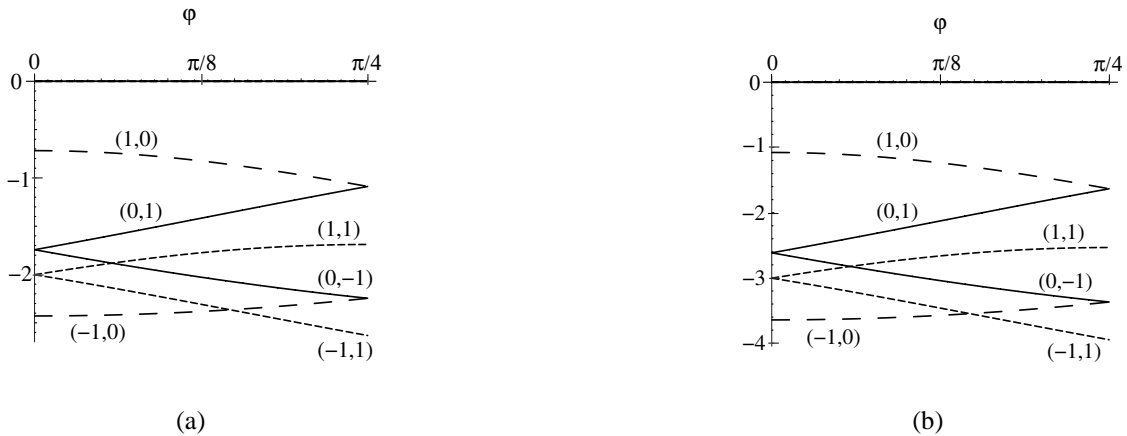


FIG. 2.10 – Évolution des facteurs $\log[\exp(\kappa_0 - \kappa_{m,n})z_0]$ en fonction de φ pour : (a) $z_0 = 200$ nm, (b) $z_0 = 300$ nm.

cédents, montrent que la prise en compte des seules composantes $(0,1)$ et $(1,0)$ n'est pas toujours suffisante. Pour un atome dont le point de rebroussement se trouve vers 300 nm, cette approximation paraît correcte vers $\varphi = \pi/4$ puisque les autres contributions sont plus atténuées d'un facteur 10. Pour $\varphi < \pi/8$, cette séparation semble plus délicate : en particulier pour $\varphi = 0$, les ordres $(\pm 1, 0)$ sont difficilement séparables des ordres $(\pm 1, 1)$. Dans le cas d'atomes plus rapides - dont le point de rebroussement se situe vers 200 nm - cette approximation est discutable quel que soit φ .

À ce niveau de description, la seule discussion des portées des différents harmoniques ne suffit pas à donner une description correcte du champ. Nous verrons dans la partie suivante une méthode numérique permettant de calculer les amplitudes de Fourier de manière exacte à la surface de la nanostructure et donc dans tout l'espace.

2.4 Conclusion

Ce chapitre avait tout d'abord pour objectif d'introduire les différentes expressions des champs électrique et magnétique dans les milieux d'entrée et de sortie du réseau. Nous avons vu qu'ils sont complètement évanescents dans le vide pour les paramètres typiques utilisés dans ce mémoire. Le champ diffracté s'écrit comme une superposition d'ondes planes de vecteur d'onde surfacique quantifié. Plus la fréquence spatiale de l'onde est grande, plus sa longueur de décroissance en z est courte : les hautes fréquences du champ sont donc filtrées avec la hauteur.

Ainsi, le comportement de la lumière à grande distance est dominé par les ordres de Fourier de plus grande portée, laquelle dépend de la période mais également de l'orientation du plan d'incidence par rapport au réseau. La prise en compte de ces seuls harmoniques permet de calculer une expression asymptotique du potentiel d'interaction de l'atome avec le champ optique.

Nous avons finalement introduit deux réseaux particuliers. Le premier est unidimensionnel : le champ diffracté à grande distance s'identifie à celui obtenu par la simple superposition de deux ondes évanescentes contrapropageantes. Cette coïncidence ne se produit que si le plan d'incidence de la lumière est perpendiculaire aux lignes du réseau. La portée du contraste du potentiel est alors infinie. Lorsque l'incidence n'est plus perpendiculaire, cette quantité est finie et la modulation reste localisée au voisinage des nanostructures. L'étude du deuxième, bidimensionnel, a permis d'étudier l'effet du filtrage du champ en fonction de l'angle polaire φ du vecteur d'onde incident. Ces deux exemples illustrent le découplage entre le miroir et le réseau.

Dans le chapitre suivant, nous allons exposer la méthode de calcul exacte du champ diffracté par un réseau périodique uni- ou bidimensionnel.

Chapitre 3

Théorie différentielle des réseaux

Le calcul exact du champ électromagnétique diffracté par le réseau passe par la résolution des équations de Maxwell dans tout l'espace. La méthode utilisée dans cette première partie est nommée Théorie Différentielle des Réseaux (ou *Differential Theory of Gratings*, désignée dans la suite par DTG). Il s'agit d'une théorie exacte ne nécessitant aucune approximation. Dans le cadre de l'optique de champ proche, elle a été développée par R. Petit, M. Nevière, P. Vincent et D. Maystre dans les années 1980 [82, 83]. Un exposé très complet de cette méthode est présenté dans la thèse de Jean-Claude Weeber [84].

L'expression générale des champs dans les demi-espaces homogènes 1 et 3 a été établie dans le chapitre précédent. Nous avons vu qu'ils s'écrivent sous la forme d'un développement de Rayleigh. Ainsi, la connaissance des coefficients de Fourier à la surface du réseau suffit à pouvoir évaluer les champs électrique et magnétique en tout point du milieu de sortie. La méthode DTG permet de calculer numériquement ces coefficients. Le principe est d'établir un système d'équations différentielles valables dans la zone modulée, et d'intégrer ce système entre les côtes $z = 0$ et $z = h$. Cependant, la difficulté réside dans l'existence en $z = h$ d'un champ d'expression inconnue réfléchi par le réseau dans le milieu d'entrée. L'intégration directe de ce système à travers la zone modulée à partir de l'expression du seul champ incident est donc impossible.

L'alternative est de raisonner en sens contraire. On suppose d'abord en $z = h$ l'existence d'un champ électrique ou magnétique ne comportant qu'une seule composante de Fourier spatiale. L'intégration numérique rétrograde du précédent système permet alors de déduire les amplitudes des champs incident et réfléchi dans le milieu d'entrée correspondant spécifiquement à ce champ harmonique de sortie. Par inversion, on déduit les matrices de transmission et de réflexion du réseau de diffraction.

Sur la figure 3.1 sont rappelées les notations déjà introduites dans la première partie. La polarisation du champ devant être prise en compte, on introduit un troisième angle δ qui repère l'orientation du vecteur de polarisation du champ électrique par rapport au plan $(0xy)$. Dans le cas particulier de la polarisation TE, l'angle δ est nul ; il vaut $\pi/2$ en polarisation TM. Les coordonnées cartésiennes du champ incident sur le plan $z = h$ sont alors :

$$\begin{cases} E_{x,0} &= E_0 (\sin \varphi \cos \delta - \cos \theta \cos \varphi \sin \delta) \\ E_{y,0} &= E_0 (-\cos \theta \sin \varphi \sin \delta - \cos \varphi \cos \delta) \\ E_{z,0} &= E_0 \sin \theta \sin \delta \end{cases} \quad (3.1)$$

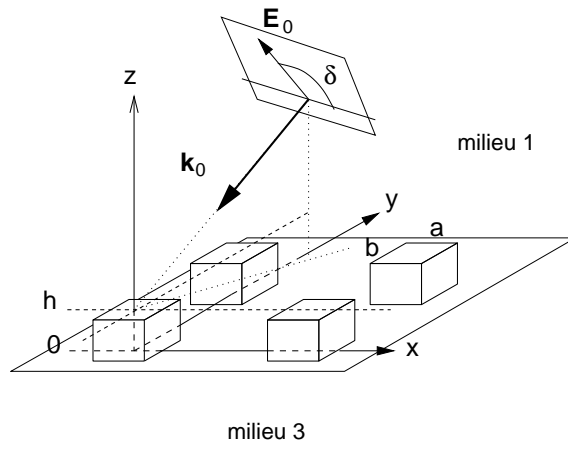


FIG. 3.1 – Principaux paramètres du champ incident et du réseau.

On obtient les composantes du champ magnétique en utilisant l'équation de Maxwell-Ampère $\nabla \times \mathbf{E} = -i\omega\mu_0\mathbf{H}$:

$$\begin{cases} H_{x,0} = E_0 (n_1 k_{y,0} E_{z,0} + n_1 k_{z,0} E_{y,0}) / (k_0 Z_0) \\ H_{y,0} = E_0 (-n_1 k_{z,0} E_{x,0} - n_1 k_{x,0} E_{z,0}) / (k_0 Z_0) \\ H_{z,0} = E_0 (n_1 k_{x,0} E_{y,0} - n_1 k_{y,0} E_{x,0}) / (k_0 Z_0) \end{cases} \quad (3.2)$$

où $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ représente l'impédance du vide.

3.1 Expression du champ dans tout l'espace

Commençons par rappeler l'expression des champs \mathbf{E} et \mathbf{H} dans les demi-espaces homogènes 1 et 3. Nous avons vu dans la précédente partie qu'ils obéissent au développement en série de Fourier :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^{(1)}(x, y, z) &= \mathbf{F}_0 e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{(1,u)}(\mathbf{v}) e^{i\gamma_{\mathbf{v}}^{(1)} z} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{l}} \\ \mathbf{F}^{(3)}(x, y, z) &= \sum_{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{(3,d)}(\mathbf{v}) e^{-i\gamma_{\mathbf{v}}^{(3)} z} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{l}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{\mathbf{v}} &= n_1 \mathbf{k}_0^{\parallel} + \mathbf{Q}_{\mathbf{v}} \\ n_r^2 k_0^2 &= \gamma_{\mathbf{v}}^{(r)2} + \mathbf{k}_{\mathbf{v}}^2, \quad r = 1, 2 \end{aligned}$$

Chaque champ est donc la superposition d'ondes progressives ou évanescentes vers les $z > 0$ ou $z < 0$. Cette distinction n'est possible que dans des espaces homogènes, puisque ce sont les vecteurs propres de l'équation de Poisson. Dans la zone modulée, on ne peut pas séparer ondes montantes et descendantes, mais le champ électromagnétique peut néanmoins être développé en série de Fourier suivant x et y selon :

$$\mathbf{F}^{(2)}(x, y, z) = \sum_{\mathbf{v}} \mathbf{F}^{(2)}(\mathbf{v}, z) e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{l}}$$

Les coefficients de Fourier dépendent donc toujours de z .

Composantes principales. Dans les demi-espaces homogènes 1 et 3, nous allons montrer que les coefficients de Fourier de \mathbf{E} ou \mathbf{H} peuvent être exprimés en fonction uniquement de deux composantes, appelées composantes principales. Considérons en effet les équations de Maxwell :

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mu_0 \mathbf{H} \quad (3.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega \varepsilon_0 n^2 \mathbf{E} \quad (3.5)$$

Si la constante diélectrique est indépendante de la position, nous pouvons appliquer l'opérateur rotationnel à ces deux relations et en déduire par projection sur la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$:

$$-n^2 k_0^2 E_x - \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} = i\omega \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x \partial y} \quad (3.6)$$

$$-n^2 k_0^2 H_x - \frac{\partial^2 H_x}{\partial y^2} = -i\omega \varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial^2 H_y}{\partial x \partial y} \quad (3.7)$$

$$E_z = \frac{i}{\omega \varepsilon} \left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right] \quad (3.8)$$

$$H_z = \frac{-i}{\omega \mu_0} \left[\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right] \quad (3.9)$$

En injectant les développements de Fourier 3.3 dans ce système, il est possible d'exprimer les composantes F_x et F_z uniquement en fonction des F_y . Les composantes principales sont dans ce cas E_y et H_y . Pour chaque ordre de Fourier nous avons dans le milieu de sortie :

$$E_x^{(3)}(\nu) = \frac{-k_0 Z_0 \kappa_\nu^{(3)} H_y^{(3)}(\nu) - k_{x,\nu}^{(3)} k_{y,\nu}^{(3)} E_y^{(3)}(\nu)}{n_3^2 k_0^2 - k_{y,\nu}^{(3)}} \quad (3.10)$$

$$H_x^{(3)}(\nu) = \frac{-k_0 / Z_0 n_3^2 \kappa_\nu^{(3)} E_y^{(3)}(\nu) - k_{x,\nu}^{(3)} k_{y,\nu}^{(3)} H_y^{(3)}(\nu)}{n_3^2 k_0^2 - k_{y,\nu}^{(3)}} \quad (3.11)$$

On obtiendrait des expressions semblables pour $E_z(\nu)$ et $H_z(\nu)$ à partir de 3.8 et 3.9. De même les composantes x et z du champ réfléchi dans le verre sont obtenues en changeant 3 en 1 et $\kappa_\nu^{(3)}$ en $-\kappa_\nu^{(1)}$.

Ainsi, le champ électromagnétique dans les milieux d'entrée et de sortie sera uniquement décrit par les coefficients de Fourier $E_y(\nu)$ et $H_y(\nu)$. Le principe de la méthode différentielle des réseaux est d'établir une relation linéaire entre les composantes principales du champ en entrée et en sortie du réseau. Pour cela nous devons établir un système d'équations différentielles décrivant l'évolution du champ dans la zone modulée.

3.2 Équations de propagation dans la zone modulée

Le calcul du champ repose donc sur les deux équations de Maxwell vectorielles :

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mu_0 \mathbf{H} \quad (3.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega \varepsilon(\mathbf{l}, z) \mathbf{E} \quad (3.13)$$

En éliminant de ce système les composantes z du champ électromagnétique, on montre que les composantes parallèles des champs obéissent aux équations différentielles couplées :

$$\begin{cases} \frac{\partial E_x}{\partial z} = i\omega\mu_0 H_y + \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) / (-i\omega\epsilon_0 n^2) \right] \\ \frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) / (-i\omega\epsilon_0 n^2) \right] \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} = -i\omega\epsilon_0 n^2 E_y + \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) / (-i\omega\mu_0) \right] \\ \frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\epsilon_0 n^2 E_x + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) / (-i\omega\mu_0) \right] \end{cases}$$

Pour expliciter le système d'équations, nous devons également développer la constante diélectrique en série de Fourier. Réécrivons-la dans un premier temps sous la forme :

$$n^2(\mathbf{l}, z) = n_{2b}^2 + (n_2^2 - n_{2b}^2)P(\mathbf{l}, z)$$

où n_{2b} représente l'indice entre les plots, et P est la fonction indicatrice des plots définie par :

$$P(\mathbf{l}, z) = \begin{cases} 1 & \text{si } (\mathbf{l}, z) \in V \\ 0 & \text{si } (\mathbf{l}, z) \notin V \end{cases} \quad (3.14)$$

Elle peut être développée en série de Fourier :

$$P(\mathbf{l}, z) = \sum_{\mathbf{v}} \tilde{P}(\mathbf{v}, z) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{l}} \quad (3.15)$$

La fonction P dépend en général de z , excepté dans le cas où le motif du réseau est à flancs raides, comme dans ce mémoire de thèse. Ainsi, le réseau étant composé de plots parallélépipédiques de dimensions a selon x et b selon y , on a :

$$\tilde{P}(m, n) = \text{sinc} \left(\frac{m\pi a}{L_x} \right) \text{sinc} \left(\frac{n\pi b}{L_y} \right) \quad (3.16)$$

Après introduction du développement 3.16 dans 3.14, on obtient le système d'équations différentielles couplées suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dE_x^{(2)}(m, n, z)}{dz} = \left(ik_0 Z_0 + \frac{Z_0 k_{x,m}^2}{ik_0 n_{2b}^2} \right) H_y^{(2)}(m, n, z) - \frac{Z_0 k_{x,m} k_{y,n}}{ik_0 n_{2b}^2} H_x^{(2)}(m, n, z) \\ \quad + \frac{Z_0 k_{x,m}}{ik_0} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_{2b}^2} \right) \sum_{p,q} \tilde{P}(m-p, n-q, z) \left(k_{x,p} H_y^{(2)}(p, q, z) - k_{y,q} H_x^{(2)}(p, q, z) \right) \\ \frac{dE_y^{(2)}(m, n, z)}{dz} = \left(-ik_0 Z_0 - \frac{Z_0 k_{y,m}^2}{ik_0 n_{2b}^2} \right) H_x^{(2)}(m, n, z) + \frac{Z_0 k_{x,m} k_{y,n}}{ik_0 n_{2b}^2} H_y^{(2)}(m, n, z) \\ \quad + \frac{Z_0 k_{y,m}}{ik_0} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_{2b}^2} \right) \sum_{p,q} \tilde{P}(m-p, n-q, z) \left(k_{x,p} H_y^{(2)}(p, q, z) - k_{y,q} H_x^{(2)}(p, q, z) \right) \\ \frac{dH_x^{(2)}(m, n, z)}{dz} = \left(-\frac{k_{x,m}}{ik_0 Z_0} - \frac{ik_0 n_{2b}^2}{Z_0} \right) E_y^{(2)}(m, n, z) + \frac{k_{x,m} k_{y,n}}{ik_0 Z_0} E_x^{(2)}(m, n, z) \\ \quad - \frac{ik_0}{Z_0} (n_2^2 - n_{2b}^2) \sum_{p,q} \tilde{P}(m-p, n-q, z) E_y^{(2)}(p, q, z) \\ \frac{dH_y^{(2)}(m, n, z)}{dz} = \left(\frac{k_{y,m}}{ik_0 Z_0} + \frac{ik_0 n_{2b}^2}{Z_0} \right) E_x^{(2)}(m, n, z) - \frac{k_{x,m} k_{y,n}}{ik_0 Z_0} E_y^{(2)}(m, n, z) \\ \quad + \frac{ik_0}{Z_0} (n_2^2 - n_{2b}^2) \sum_{p,q} \tilde{P}(m-p, n-q, z) E_x^{(2)}(p, q, z) \end{array} \right. \quad (3.17)$$

Tous les ordres de Fourier des champs sont couplés par le produit $n^2 \mathbf{F}$ qui intervient dans les équations de propagation. Ce système est intégré entre les plans de côte $z = 0$ (sortie) et $z = h$ (entrée). Cependant, pour relier les champs dans les zones 1 et 3 à ceux de la zone

modulée, nous avons besoin de relations de passage.

Conditions aux interfaces. En $z = 0$ la continuité des champs suffit à calculer les composantes tangeantielles de \mathbf{E} et \mathbf{H} dans la zone 2. Il faut auparavant relier $E_x^{(1)}$ et $H_x^{(1)}$ aux composantes principales au moyen des équations 3.10 et 3.11.

En entrée du prisme, il faut exprimer, à partir des composantes de Fourier tangeantielles de $\mathbf{E}^{(2)}(h)$ et $\mathbf{H}^{(2)}(h)$ et de leur dérivée en z , les composantes principales montantes et descendantes du champ dans le demi-espace 1. Or $E_y^{(1)}$ et $H_y^{(1)}$ s'écrivent en $z = h$:

$$\begin{aligned} E_y^{(1)}(m, n, h) &= E_y^{(2)}(m, n, h) = \\ E_y^{(1,u)}(m, n) e^{i\gamma_{m,n}^{(1)}h} &+ E_y^{(1,d)}(m, n) e^{-i\gamma_{m,n}^{(1)}h} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} H_y^{(1)}(m, n, h) &= H_y^{(2)}(m, n, h) = \\ H_y^{(1,u)}(m, n) e^{i\gamma_{m,n}^{(1)}h} &+ H_y^{(1,d)}(m, n) e^{-i\gamma_{m,n}^{(1)}h} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Les expressions 3.17 sont également valables dans le prisme, à condition de remplacer n_2 par n_{2b} (ce qui annule la sommation sur les ordres (p, q)) et n_{2b} par n_1 . La continuité des composantes tangeantielles des champs permet alors de connaître la valeur de la dérivée verticale des composantes principales en $z = h$ dans le milieu 1. On notera qu'elles n'ont aucune raison d'être continues. Nous avons alors :

$$\frac{dE_y^{(1)}}{dz}(m, n, h) = i\gamma_{m,n}^{(1)} \left[E_y^{(1,u)}(m, n) e^{i\gamma_{m,n}^{(1)}h} - E_y^{(1,d)}(m, n) e^{-i\gamma_{m,n}^{(1)}h} \right] \quad (3.20)$$

$$\frac{dH_y^{(1)}}{dz}(m, n, h) = i\gamma_{m,n}^{(1)} \left[H_y^{(1,u)}(m, n) e^{i\gamma_{m,n}^{(1)}h} - H_y^{(1,d)}(m, n) e^{-i\gamma_{m,n}^{(1)}h} \right] \quad (3.21)$$

d'où l'on déduit par combinaison avec 3.19 la valeur des composantes principales incidentes et réfléchies :

$$E_y^{(1,d)}(m, n) = \frac{1}{2} \left(E_y^{(2)}(m, n, h) + \frac{i}{\gamma_{m,n}^{(1)}} \frac{dE_y^{(1)}}{dz}(m, n, h) \right) \quad (3.22)$$

$$E_y^{(1,u)}(m, n) = \frac{1}{2} \left(E_y^{(2)}(m, n, h) - \frac{i}{\gamma_{m,n}^{(1)}} \frac{dE_y^{(1)}}{dz}(m, n, h) \right) \quad (3.23)$$

Nous allons maintenant décrire l'algorithme de calcul du champ diffracté.

3.3 Les différentes étapes de la méthode DTG

Nous avons désormais tous les outils pour calculer les champs réfléchis et transmis par le réseau de diffraction. Le calcul ne pouvant être effectué pour un nombre infini d'harmoniques, les développements en série de Fourier sont tronqués à l'ordre M en k_x et

à l'ordre N en k_y . Considérons les vecteurs contenant les harmoniques de E_y et H_y :

$$\mathbf{F}_y = \begin{bmatrix} \vdots \\ E_y(m, n) \\ \vdots \\ H_y(m, n) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

Il comporte $2MN$ composantes. La base dans laquelle s'exprime \mathbf{F}_y correspond à MN excitations électriques et MN excitations magnétiques de fréquence spatiale déterminée (μ, ν) . L'algorithme est alors divisé en trois parties :

- ▶ on impose dans le milieu 3 une excitation correspondant à chacun de ces vecteurs de base. Il y a donc $2MN$ conditions initiales différentes. Les conditions aux limites en $z = 0$ permettent de calculer les $2MN$ composantes F_x associées dans la zone modulée, ce qui donne les conditions initiales permettant l'intégration de 3.17 ;
- ▶ ce champ est propagé au travers de la zone source de $z=0$ à $z=h$ par intégration des équations 3.17. Celle-ci est effectuée en utilisant une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 ;
- ▶ en $z = h$, les composantes descendantes et montantes du champ dans le milieu 1 sont calculées à partir des équations 3.23. Pour chacune des excitations de base, on déduit donc deux vecteurs $F_y^{(1,u)}$ et $F_y^{(1,d)}$. Au final, l'ensemble de ces vecteurs se présente sous la forme de deux matrices $2MN \times 2MN$ définies par :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(1,u)} \\ \mathbf{H}_y^{(1,u)} \end{bmatrix} = \mathbf{M}^{(u,d)} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(3,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(3,d)} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(1,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(1,d)} \end{bmatrix} = \mathbf{M}^{(d,d)} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(3,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(3,d)} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Nous avons indiqué par l'exposant (d) que les excitations élémentaires dans le milieu 3 correspondent à des champs se propageant vers les z négatifs.

Matrices $\mathbf{R}^{(d)}$ et $\mathbf{T}^{(d)}$. Au niveau de l'interface entre le prisme et les nanostructures, on peut introduire les matrices de réflexion $\mathbf{R}^{(d)}$ et de transmission $\mathbf{T}^{(d)}$, définies par :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(1,u)} \\ \mathbf{H}_y^{(1,u)} \end{bmatrix} = \mathbf{R}^{(d)} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(1,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(1,d)} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(3,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(3,d)} \end{bmatrix} = \mathbf{T}^{(d)} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(1,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(1,d)} \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

En comparant ces relations avec les expressions 3.25, il apparaît que $\mathbf{T}^{(d)}$ est directement l'inverse de $\mathbf{M}^{(d,d)}$, tandis que $\mathbf{T}^{(d)}$ est un produit matriciel :

$$\mathbf{T}^{(d)} = \left(\mathbf{M}^{(d,d)} \right)^{-1} \quad (3.27)$$

$$\mathbf{R}^{(d)} = \mathbf{M}^{(u,d)} \cdot \left(\mathbf{M}^{(d,d)} \right)^{-1} = \mathbf{M}^{(u,d)} \cdot \mathbf{T}^{(d)} \quad (3.28)$$

Nous pouvons ainsi calculer les champs transmis et réfléchis par le réseau pour n'importe quelle polarisation du champ incident.

Matrices $\mathbf{R}^{(u)}$ et $\mathbf{T}^{(u)}$. Dans la suite, nous allons également avoir besoin des matrices de réflexion et de transmission d'un champ provenant des $z < 0$, c'est-à-dire se propageant

du vide vers le réseau. Il est donc transmis dans le milieu 1 et réfléchi dans le milieu 3. Ce calcul pourrait se faire de manière semblable à la méthode qui vient d'être exposée, mais en inversant le rôle des milieux d'entrée et de sortie. Cependant, il est possible de généraliser la méthode précédente de manière à inclure ce cas.

Réécrivons l'expression générale du champ $\mathbf{E}^{(3)}$ du chapitre 2 sans tenir compte des conditions aux limites. Il s'écrit :

$$\mathbf{E}^{(3)}(x,y,z) = \sum_{\mathbf{v}} \left[\mathbf{E}^{(3,u)}(\mathbf{v}) e^{i\gamma_{\mathbf{v}}^{(3)} z} + \mathbf{E}^{(3,d)}(\mathbf{v}) e^{-i\gamma_{\mathbf{v}}^{(3)} z} \right] e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{l}} \quad (3.29)$$

Nous pouvons donc compléter la base des excitations (d) utilisée pour le calcul de $\mathbf{R}^{(d)}$ et $\mathbf{T}^{(d)}$ par $2MN$ excitations (u). Ainsi, les composantes principales de $\mathbf{E}^{(3)}$ sont décrites dans l'espace de Fourier par le supervecteur à $4MN$ composantes :

$$\mathbf{F}_y^{(3)} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_y^{(3,u)} \\ \mathbf{H}_y^{(3,u)} \\ \mathbf{E}_y^{(3,d)} \\ \mathbf{H}_y^{(3,d)} \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

Pour chacune de ces nouvelles excitations $E^{(u)}$ ou $H^{(u)}$ élémentaires, on peut à nouveau calculer par intégration à travers la zone modulée les champs montant et descendant dans le milieu 1. Ainsi, le supervecteur des composantes principales du champ $\mathbf{E}^{(1)}$ est relié linéairement au champ d'excitation par :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_y^{(1,u)} \\ \mathbf{F}_y^{(1,d)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}^{(u,u)} & \mathbf{M}^{(u,d)} \\ \mathbf{M}^{(d,u)} & \mathbf{M}^{(d,d)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{F}_y^{(3,u)} \\ \mathbf{F}_y^{(3,d)} \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

où $\mathbf{M}^{(u,d)}$ et $\mathbf{M}^{(d,d)}$ sont les matrices calculées précédemment. Lors du calcul des nouvelles matrices $\mathbf{M}^{(u,u)}$ et $\mathbf{M}^{(d,u)}$, il faut toutefois faire attention à adapter les conditions aux limites à l'interface $z = h$ en effectuant le changement $\gamma_{m,n}^{(3)} \rightarrow -\gamma_{m,n}^{(3)}$.

On déduit alors l'expression des matrices de réflexion $\mathbf{R}^{(u)}$ et de transmission $\mathbf{T}^{(u)}$ en imposant la condition à l'infini $\mathbf{F}_y^{(1,d)} = \mathbf{0}$, qui traduit l'absence de champ provenant de $z = +\infty$ dans le milieu 1 lorsque l'illumination se fait à partir du milieu 3 :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_y^{(1,u)} &= \mathbf{M}^{(u,u)} \mathbf{F}_y^{(3,u)} + \mathbf{M}^{(u,d)} \mathbf{F}_y^{(3,d)} \\ 0 &= \mathbf{M}^{(d,u)} \mathbf{F}_y^{(3,u)} + \mathbf{M}^{(d,d)} \mathbf{F}_y^{(3,d)} \end{aligned}$$

d'où on déduit :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_y^{(3,d)} &= \mathbf{R}^{(d)} \mathbf{F}_y^{(3,u)} \rightarrow \mathbf{R}^{(d)} = - \left(\mathbf{M}^{(d,d)} \right)^{-1} \mathbf{M}^{(d,u)} \\ \mathbf{F}_y^{(3,u)} &= \mathbf{T}^{(d)} \mathbf{F}_y^{(3,u)} \rightarrow \mathbf{T}^{(d)} = \mathbf{M}^{(u,u)} - \mathbf{M}^{(u,d)} \left(\mathbf{M}^{(d,d)} \right)^{-1} \mathbf{M}^{(d,u)} \end{aligned}$$

3.4 La méthode des réflexions multiples

Domaine d'applicabilité de l'algorithme. De nombreuses études ont été effectuées de manière à préciser le domaine de validité de la méthode que nous venons de décrire. Différents paramètres interviennent : nature du matériau, polarisation, hauteur et période vis à vis de la longueur d'onde. Cette méthode est en particulier inapte à traiter la diffraction par des réseaux métalliques en polarisation TM [85]. En général, la convergence est bonne dans le cas de réseaux de faible hauteur devant la longueur d'onde et devant la période. Les instabilités numériques qui apparaissent lorsque l'on sort de cette gamme de paramètres proviennent de la présence de composantes anti-évanescents (dont l'amplitude augmente exponentiellement avec la distance) dans la zone modulée. L'intégration de ces contributions pour des ordres de Fourier élevés conduit à une divergence de leur amplitude d'autant plus importante que la période est faible et la hauteur importante. L'inversion des matrices mal conditionnées ainsi obtenues est instable numériquement. Afin de pouvoir augmenter suffisamment le nombre d'harmoniques pour atteindre la convergence, il est nécessaire d'adapter l'algorithme.

Un certain nombre de méthodes alternatives ont été proposées afin de calculer le champ pour des hauteurs et des périodes arbitraires. M. Nevière et F. Montiel ont développé en 1994 une procédure qui permet de traiter des réseaux dont le rapport h/d est supérieur à l'unité [86]. Nous avons choisi d'implémenter une méthode simplifiée utilisant le même principe, dite des réflexions multiples [87].

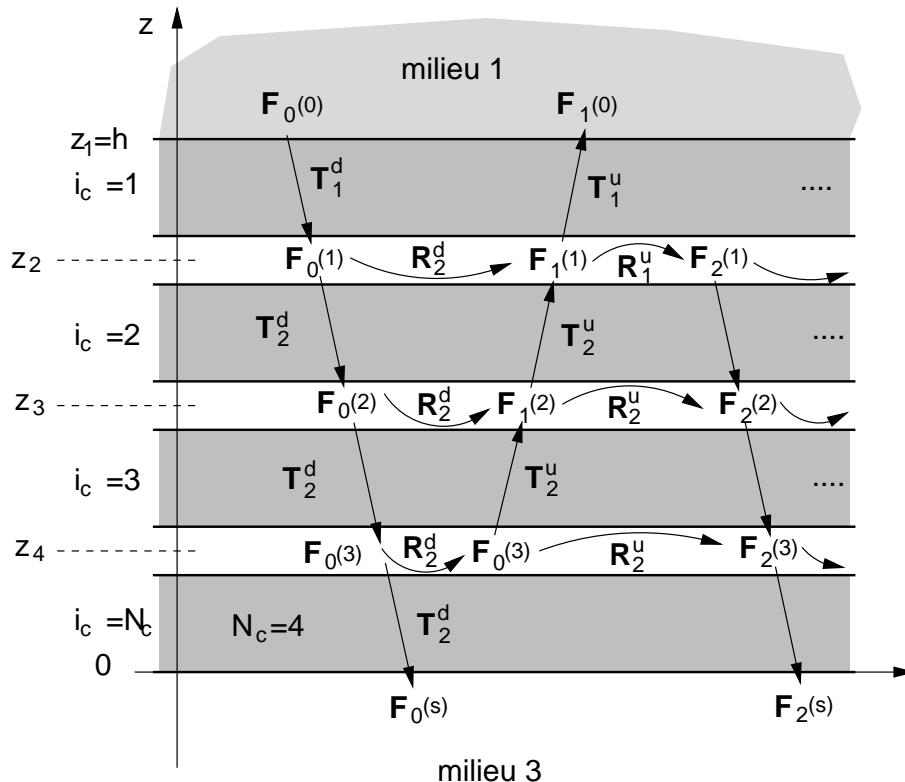


FIG. 3.2 – Méthode des réflexions multiples.

Le principe est de subdiviser la zone modulée en N_c tranches de même épaisseur (voir figure 3.2). Nous introduisons artificiellement une couche intermédiaire infiniment fine, d'indice égal à l'indice du milieu de sortie. Son épaisseur étant nulle, elle n'a aucune

incidence sur le résultat final. Nous noterons z_{i_c} la côte de la $i_c^{\text{ième}}$ couche intermédiaire entre les tranches $i_c - 1$ et i_c , la côte z_1 correspondant à $z = 0$.

Le champ transmis est obtenu en sommant les champs émergeant de la zone modulée après avoir subi $1, \dots, N_R$ réflexions entre les tranches. Un exemple est donné sur la figure 3.2 pour $N_c = 4$. La première tranche est caractérisée par les matrices $\mathbf{T}_1^u, \mathbf{T}_1^d, \mathbf{R}_1^u$ et \mathbf{R}_1^d , et les $N_c - 1$ suivantes par $\mathbf{T}_2^u, \mathbf{T}_2^d, \mathbf{R}_2^u$ et \mathbf{R}_2^d , dont le calcul se fait par la théorie différentielle des réseaux en remplaçant n_1 par n_3 .

Description de l'algorithme. Considérons le supervecteur $\mathbf{F}_0(1) = \mathbf{T}_1^d \mathbf{F}_0(0)$ ne comportant que les composantes principales du champ incident dans le verre sur le réseau. Les valeurs du champ transmis directement à travers les tranches suivantes sans avoir subi de réflexion sont données par la relation de récurrence $\mathbf{F}_0(i_c + 1) = \mathbf{T}_2^d \mathbf{F}_0(i_c)$. Le champ correspondant en sortie du réseau est donc $\mathbf{F}_0(s) = [\mathbf{T}_2^d]^{N_c-1} \mathbf{T}_1^d \mathbf{F}_0(1)$. C'est l'initialisation du calcul.

La première itération consiste à calculer en chaque z_{i_c} l'amplitude du champ après une seule réflexion. En particulier, $\mathbf{F}_0(N_c)$ se réfléchit sur la dernière couche, donc $\mathbf{F}_1(N_c) = \mathbf{R}_2^d \mathbf{F}_0(N_c)$. Les contributions aux côtes z_{i_c} , $i_c = N_c - 1, \dots, 2$ vont se déduire de la relation de récurrence $\mathbf{F}_1(i_c) = \mathbf{R}_2^d \mathbf{F}_0(i_c) + \mathbf{T}_2^u \mathbf{F}_0(i_c + 1)$. Nous remarquons que ce champ se propage vers les z croissants. Ils vont apporter une contribution au champ réfléchi dans le milieu 1 : $\mathbf{F}_1(1) = \mathbf{T}_1^u \mathbf{F}_1(2)$.

Le deuxième pas s'effectue de manière semblable. Le champ $\mathbf{F}_1(2)$ se réfléchit sur la première couche : $\mathbf{F}_2(2) = \mathbf{R}_1^u \mathbf{F}_1(2)$; le calcul des contributions à la sortie des couches $i_c = 3, \dots, N_c$ se fait à nouveau par récurrence : $\mathbf{F}_2(i_c) = \mathbf{R}_2^u \mathbf{F}_1(i_c) + \mathbf{T}_2^d \mathbf{F}_2(i_c - 1)$. Ces champs ajoutent une contribution à la composante transmise : $\mathbf{F}_2(s) = \mathbf{T}_2^d \mathbf{F}_2(N_c)$.

Ainsi, la méthode de calcul est la suivante :

- initialisation du champ en chacune des côtes z_{i_c} :

$$\mathbf{F}_0(1) = \begin{bmatrix} \vdots \\ E_y^{(1,d)}(m,n) \\ \vdots \\ H_y^{(1,d)}(m,n) \\ \vdots \end{bmatrix}, \quad \begin{cases} \mathbf{F}_0(2) = \mathbf{T}_1^d \mathbf{F}_0(1) \\ \mathbf{F}_0(i_c) = \mathbf{T}_2^d \mathbf{F}_0(i_c - 1), \quad i_c = 1, \dots, N_c, s \end{cases}$$

Dans notre cas, la seule composante de Fourier du champ incident sera l'ordre 0.

- puis $N_R/2$ itérations du schéma suivant :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{2p-1}(N_c) &= \mathbf{R}_2^d \mathbf{F}_{2p-2}(N_c) \\ \mathbf{F}_{2p-1}(i_c) &= \mathbf{R}_2^d \mathbf{F}_{2p-2}(i_c) + \mathbf{T}_2^u \mathbf{F}_{2p-2}(i_c + 1), \quad i_c = N_c - 1, \dots, 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{2p}(2) &= \mathbf{R}_1^u \mathbf{F}_{2p-1}(2) \\ \mathbf{F}_{2p}(i_c) &= \mathbf{R}_2^u \mathbf{F}_{2p-1}(i_c) + \mathbf{T}_2^d \mathbf{F}_{2p-1}(i_c - 1), \quad i_c = 3, \dots, N_c \end{aligned}$$

$$\mathbf{F}_{2p}(s) = \mathbf{T}_2^d \mathbf{F}_{2p}(N_c)$$

► au final, le champ total transmis est $\mathbf{F}^{(3)} = \mathbf{F}_0(s) + \mathbf{F}_2(s) + \dots + \mathbf{F}_{N_R-2}(s) + \mathbf{F}_{N_R}(s)$.

Convergence de l'algorithme. Le calcul doit donc être optimisé en fonction de plusieurs paramètres. Le premier est le nombre d'harmoniques. La convergence n'est pas atteinte en même temps pour tous les ordres, les basses fréquences convergeant en premier. Dans le problème spécifique auquel nous nous intéressons, celui de la diffraction d'atomes, nous n'avons pas besoin de connaître la forme exacte du champ pour toute valeur de z , puisque l'atome rebondit à une distance typique de 200 nm au-dessus des plots, ce qui sélectionne un faible nombre de coefficients de Fourier. Seule la convergence des premiers ordres de diffraction, ceux de plus grande portée, nous intéresse.

En une dimension, il est possible de prendre en compte un grand nombre d'harmoniques, ce qui permet d'avoir un champ très bien convergé même en $z=0$. Ceci est cependant impossible en deux dimensions, le nombre d'harmoniques augmentant comme M^2 : nous nous sommes donc limités aux ordres $(1, 0)$ et $(0, 1)$. Les valeurs $M = N = 31$ suffisent pour les paramètres géométriques précisés dans le chapitre précédent. Nous avons pris $M = 61$ pour le réseau unidimensionnel. La convergence en fonction du nombre de réflexion N_R est très rapide, de même que celle de N_c . Nous avons choisi $N_c = N_R = 30$. Le temps de calcul en 1D est de l'ordre de la minute, en revanche il atteint rapidement plusieurs heures (environ 3 pour les paramètres choisis) en 2D.

Ainsi, l'implémentation de cette méthode a permis d'étendre le calcul du champ à des hauteurs de plots de 50 nm, ce qui correspond au cinquième de la périodicité. Au-delà, des problèmes de divergence subsistent.

3.5 Composantes normales du champ électromagnétique

La dernière étape du calcul est un changement de base. Dans le cas général, la description de l'interaction de l'atome à plusieurs niveaux avec le champ électromagnétique fait intervenir les composantes normales de \mathbf{E} . Dans ce paragraphe, nous établissons leur expression en fonction des composantes cartésiennes du champ électrique.

L'axe de quantification choisi est le vecteur unitaire de polarisation TE, perpendiculaire au plan d'incidence. Cette composante joue en effet un rôle privilégié puisque qu'elle n'est pas présente dans l'onde évanescente non perturbée par le réseau. Nous verrons que son intensité dans le champ diffracté est toujours beaucoup plus faible que l'intensité totale. Les vecteurs de polarisation \mathbf{e}_- , \mathbf{e}_+ et \mathbf{e}_0 sont définis par :

$$\mathbf{e}_0 = \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{e}_z \quad (3.32)$$

$$\mathbf{e}_\pm = \mp (\hat{\mathbf{k}} \pm i\mathbf{e}_z) / \sqrt{2} \quad (3.33)$$

où $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}_0^\parallel / k_0^\parallel$ est le vecteur unitaire de même sens que le vecteur d'onde de surface. La matrice de passage \mathbf{P}_n de la base $(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{e}_z, \mathbf{e}_0)$ à la base $(\mathbf{e}_-, \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_+)$ est donc :

$$\mathbf{P}_n = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

De même, le passage de la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ à la base $(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{e}_z, \mathbf{e}_0)$ se fait par une matrice de

rotation \mathbf{P}_r :

$$\mathbf{P}_r = \begin{bmatrix} -\cos \varphi & 0 & -\sin \varphi \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

Alors la matrice de passage entre $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ et $(\mathbf{e}_-, \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_+)$ est $\mathbf{P}_r \cdot \mathbf{P}_n$, et les composantes normales du champ s'expriment en fonction des composantes cartésiennes comme :

$$\begin{bmatrix} E_m \\ E_0 \\ E_p \end{bmatrix} = (\mathbf{P}_r \cdot \mathbf{P}_n)^{-1} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} iE_z - [E_x \cos \varphi + E_y \sin \varphi] \\ \sqrt{2}(E_y \cos \varphi - E_x \sin \varphi) \\ iE_z + E_x \cos \varphi + E_y \sin \varphi \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

3.6 Résultats numériques

Nous allons présenter des résultats concernant, dans un premier temps, le champ diffracté par une structure unidimensionnelle et, dans un deuxième temps, par une structure bidimensionnelle.

3.6.1 Étude de l'intensité diffractée par un réseau 1D.

Ces résultats ont été obtenus avec un réseau de période L_{ref} , sous incidence $\theta = 60^\circ$. Le motif a une largeur de 100 nm, et une hauteur de 50 nm. Sur la figure 3.3 est tracée, en échelle logarithmique décimale, l'intensité de chacun des coefficients de Fourier à $z = 0$. La courbe est symétrique pour $\varphi = \pi/2$. Lorsque φ diminue, les composantes d'ordre positif sont plus intenses, mais globalement l'allure du spectre évolue peu. Nous pouvons observer que l'enveloppe est proche de celle d'un sinus cardinal. On peut en effet montrer dans l'approximation de Born (voir annexe A), c'est-à-dire pour les faibles hauteurs h par rapport à la longueur d'onde, que le spectre est modulé par la transformée de Fourier en x, y du profil d'indice.

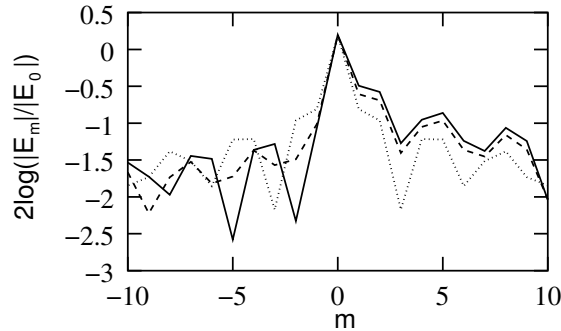


FIG. 3.3 – Intensité diffractée sur chaque composante de Fourier en échelle logarithmique. Trait plein : $\varphi = 0$, trait interrompu : $\varphi = \pi/4$, trait pointillé : $\varphi = \pi/2$.

Il est également intéressant de comparer les contributions des composantes normales du champ. Sur la figure 3.4-a ont été tracées les valeurs $e_p(m) = 2|E_{0,p}^* E_p(m)|/|\mathbf{E}_0|^2$ où $p = \pm$ et $m = \pm 1$. Cette grandeur, lorsqu'elle est faible devant 1, s'identifie avec le contraste de la composante p du coefficient d'ordre m de Fourier. Nous pouvons constater que $e_+(+1)$ se démarque nettement des autres contributions. En effet, quand φ tend vers

0, sa valeur tend vers 1,7, ce qui correspond à un contraste de 98%. Nous reviendrons sur ce point important lors de l'étude de la diffraction atomique par le réseau 1D.

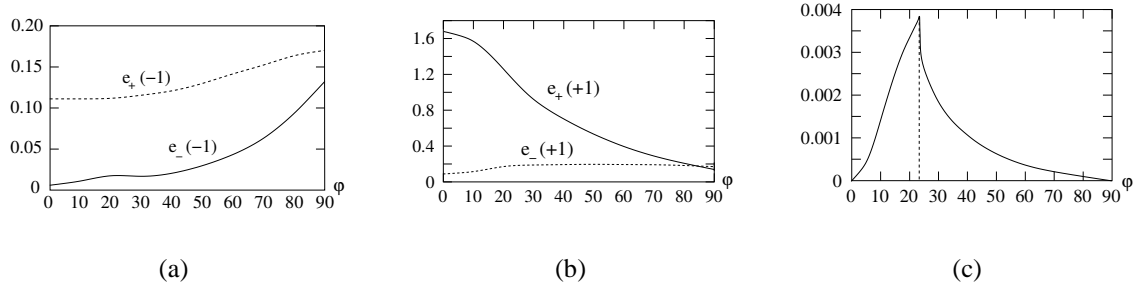


FIG. 3.4 – (a) Contraste pour l'ordre -1 : le trait plein représente la composante -, le trait interrompu la composante +. (b) Idem pour l'ordre +1. (c) Évolution de l'intensité relative de la composante E_0 en fonction de l'angle φ à $z = 200$ nm.

Enfin, le tracé de la figure 3.4-c montre l'évolution de $|E_0|^2$ avec φ . Rappelons que c'est elle qui régit le transfert de population entre les deux états fondamentaux lorsque l'on prend en compte la structure fine. Cette composante, totalement absente du champ incident, est créée uniquement par la diffraction. Sa valeur reste donc en général faible devant l'intensité des composantes + et -. Nous pouvons cependant voir qu'elle passe par un maximum pour $\varphi \approx 23^\circ$ où elle atteint environ 0,004, ce qui correspond à 2% de l'intensité totale. Nous verrons dans la partie suivante quelle en est la conséquence sur le transfert de population. Ce phénomène illustre de manière générale qu'il y a création de composantes de polarisation dans le champ proche.

3.6.2 Quelques résultats en deux dimensions

Pour un réseau bidimensionnel, nous avons vu que les principales contributions à l'intensité proviennent des ordres $(0, 1)$ et $(1, 0)$ de Fourier. Le champ à grande distance est une superposition de ces deux ondes, donnant lieu à un potentiel modulé dans les deux directions x et y . À nouveau nous étudions l'évolution des différentes caractéristiques de l'intensité en fonction de l'angle φ . Tous les calculs ont été effectués pour une périodicité identique en x et en y de $L_x = L_y = 250$ nm. L'angle d'incidence du faisceau est $\theta = 60^\circ$, les plots sont à base carrée de côté $a = 100$ nm et de hauteur $h = 50$ nm.

La figure 3.5 présente plusieurs cartes de l'intensité et montre son évolution en fonction de l'angle polaire φ et de l'altitude z . La première hauteur est proche de la surface des plots diélectriques, la seconde correspond à une hauteur de rebroussement typique de l'atome. Les effets dus à la différence de coefficients de décroissance entre les deux ordres sont ici aisément identifiables. Quel que soit l'angle, le champ est bien localisé au-dessus du plot à 50 nm. Les valeurs minimales ($\approx 1, 0$) et maximales ($\approx 1, 4$) de l'intensité relative dépendent peu de l'angle polaire φ . En revanche, le comportement est très différent à 200 nm. En effet, pour $\varphi = 0^\circ$, le champ est beaucoup plus contrasté dans la direction y que dans la direction x , ce qui est une conséquence de la décroissance plus rapide de l'ordre $(1, 0)$ par rapport à l'ordre $(0, 1)$ (voir chapitre précédent). Le champ devient progressivement unidimensionnel quand z augmente, la modulation étant dans la direction de la composante parallèle du vecteur d'onde incident. Quand φ augmente progressivement,

TAB. 3.1 – Évolution de l'intensité moyenne à 200 nm en fonction de φ pour les trois composantes normales E_- , E_0 et E_+ .

	$\varphi = 0^\circ$	$\varphi = 22^\circ$	$\varphi = 45^\circ$
-	0,17	0,17	0,17
0	$0,8 \cdot 10^{-6}$	$0,18 \cdot 10^{-4}$	$0,17 \cdot 10^{-4}$
+	$0,85 \cdot 10^{-2}$	$0,85 \cdot 10^{-2}$	$0,85 \cdot 10^{-2}$

cette différence de contraste s'atténue. À 45° , le champ est parfaitement symétrique par rapport à l'axe $y = x$: cela correspond à l'égalité des coefficients $\kappa_{0,1}$ et $\kappa_{1,0}$.

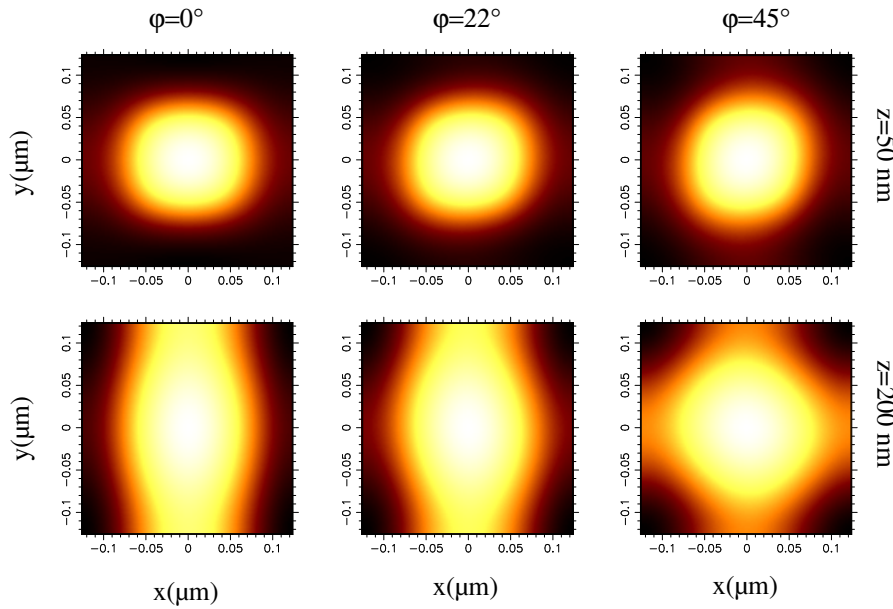


FIG. 3.5 – Évolution de l'intensité relative du champ en fonction de l'angle φ à 50 et 200 nm.

La table 3.1 montre l'évolution de l'intensité moyenne des trois composantes normales à 200 nm en fonction de φ . En plus du peu d'évolution de $|E_-|^2$ et $|E_+|^2$, elle montre clairement que la composante E_0 créée par le processus de diffraction du champ incident reste négligeable par rapport à l'intensité moyenne totale. En effet, elle ne dépasse pas 0,1%. Cette valeur est 20 fois plus faible que celle obtenue avec un réseau unidimensionnel. On peut attribuer cet écart à la différence de quantité de matière entre les deux objets diélectriques, sachant que la création de composantes de polarisation est d'autant plus efficace que le volume du réseau est important. Ainsi, nous nous attendons à ce que le transfert de population entre les deux niveaux fondamentaux soit encore moins important dans la diffraction par un réseau 2D.

Enfin, l'évolution du contraste en x et y pour chacune des composantes + et - du champ est indiquée en fonction de φ dans les tables 3.2 et 3.3. Il apparaît qu'entre 0° et 45° , le contraste de la composante - reste de l'ordre de 0,1% dans les deux directions, tandis que celui de la composante + évolue beaucoup plus fortement. Selon x , il passe de 25% à 5%

TAB. 3.2 – Évolution du contraste selon l'axe x à 200 nm en fonction de φ pour les deux composantes E_- et E_+ .

ε_x	$\varphi = 0^\circ$	$\varphi = 22^\circ$	$\varphi = 45^\circ$
-	0,3%	0,7%	0,8%
+	25%	16 %	5 %

TAB. 3.3 – Évolution du contraste selon l'axe y à 200 nm en fonction de φ pour les deux composantes E_- et E_+ .

ε_y	$\varphi = 0^\circ$	$\varphi = 22^\circ$	$\varphi = 45^\circ$
-	0,3%	0,5%	0,8%
+	0,33%	1,2 %	5 %

et selon y , il est de l'ordre du %.

Le comportement du contraste entre $\varphi = 45^\circ$ et $\varphi = 90^\circ$ se déduit des valeurs précédentes en changeant φ en $90^\circ - \varphi$ et en échangeant le rôle de x et y . Ainsi, quels que soient l'angle d'incidence et la direction, le contraste de la composante E_- ne dépasse jamais 1% et celui de E_+ passe de 0,3% à 25%. De même que pour le cas unidimensionnel, on s'attend à un changement important du comportement de la diffraction suivant le sous-niveau Zeeman de l'atome incident sur le réseau de diffraction.

3.7 Conclusion

Les points essentiels à retenir de cette étude de l'intensité diffractée par un réseau uni- ou bidimensionnel peuvent être regroupés en deux catégories :

- ▶ d'abord l'effet de filtrage des hautes fréquences spatiales du champ avec la hauteur. Il est relié uniquement à la géométrie du réseau (périodicité) et à l'orientation du faisceau incident par rapport à la surface et au réseau (angle azimutal θ et angle polaire φ). Nous rappelons qu'il provient de la dépendance, via la relation de dispersion du champ dans le vide, de la composante parallèle du vecteur d'onde de la composante de Fourier diffractée et de sa portée en z . Nous avons vu que plus l'ordre augmente, plus l'amplitude de l'onde décroît rapidement. Cet effet détermine la forme du champ à grande distance, dans lequel ne dominant qu'un ou deux des harmoniques de plus longue portée. Dans le cas du réseau unidimensionnel, le champ est bien décrit par les ordres ± 1 . Une étude des coefficients de décroissance pour le réseau bidimensionnel en fonction de l'angle polaire φ a montré que pour $\varphi = 0$, l'ordre dominant est $(0, 1)$ et la modulation est la plus importante dans la direction du vecteur d'onde du champ incident. Pour $\varphi = \pi/4$, les portées des deux ordres $(0, 1)$ et $(1, 0)$ sont dégénérées et le champ reste parfaitement bidimensionnel quelle que soit la hauteur.
- ▶ ensuite, les points concernant le spectre de Fourier de chacune des composantes normales du champ. Globalement, le poids des différentes composantes diffractées respecte celui du champ initial : quel que soit φ , le poids de la composante - est su-

périeur à celui de la composante $+$. La composante 0 , totalement absente du champ initial, provient entièrement de la diffraction de l'onde incidente, et sa contribution reste faible. La création de composantes de polarisation est donc limitée. En conséquence, lors du processus de diffraction atomique, le transfert de population entre les deux sous-niveaux Zeeman doit rester faible. Ce qui ressort également de l'étude numérique du champ est que le contraste de chacune des composantes normales du champ électrique varie de manière très différente avec φ . Dans les deux cas, 1D et 2D, le contraste de la composante $+$ est plus important que celui de la composante $-$, et ce quel que soit l'angle d'incidence. Pour le réseau unidimensionnel, il est maximal quand le champ est en incidence perpendiculaire au réseau. Dans le cas bidimensionnel, il est maximal quand le vecteur d'onde est parallèle à l'axe Ox ou à l'axe Oy . Les atomes préparés dans des sous-niveaux Zeeman distincts vont donc voir des potentiels très différents. Ainsi, nous pouvons déjà prévoir que la diffraction va dépendre de manière importante du nombre quantique m_s .

Puisque le champ optique est désormais bien caractérisé, nous pouvons aborder l'étude théorique et numérique de la propagation d'un atome froid de Césium dans un champ évanescent nanostructuré. Nous verrons quelle est la signature des différents points évoqués sur les populations diffractées dans les différents ordres.

Deuxième partie

Évolution d'atomes dans un champ optique

Chapitre 4

L'interaction atome-champ

Le problème de l'interaction d'un atome avec la lumière ne peut être traité complètement que dans le cadre de l'électrodynamique quantique. Dans cette description, le rayonnement lui-même est une composante du système étudié. Cependant, contrairement à l'atome qui peut être décrit la plupart du temps par un nombre limité d'états internes, le champ électromagnétique peut en comprendre un nombre très grand : ceci rend la résolution exacte délicate. Deux régimes limites sont envisageables [88]. Dans un premier, le nombre de degrés de liberté du rayonnement est très grand, et le temps caractéristique des fluctuations est très petit devant le temps d'évolution des particules. On peut alors faire l'hypothèse raisonnable que le rayonnement se comporte comme un réservoir, c'est-à-dire que son état n'est pas modifié par l'interaction avec la matière. L'évolution du système matériel est décrite par une "équation pilote" spécifique à ce régime. Dans ce cas, l'objet d'étude n'est pas la fonction d'onde mais l'opérateur densité qui permet une description macroscopique de l'évolution d'une population d'atomes. C'est notamment dans ce cadre qu'est décrit le phénomène d'émission spontanée, résultat du couplage de l'atome avec les modes du vide électromagnétique.

Dans le problème qui nous intéresse, l'atome est couplé non seulement avec le vide, mais également avec un champ électromagnétique de faible largeur spectrale, dont le temps de cohérence est très grand devant les temps caractéristiques associés au système atomique. Le traitement complet au moyen de l'équation pilote n'est donc pas possible. On peut cependant étudier le couplage de l'atome avec le rayonnement cohérent au moyen de l'équation de Schrödinger, mais sans prendre en compte l'émission spontanée. C'est dans ce cadre qu'est utilisé le formalisme des équations de Bloch optiques. Il s'agit de traiter chaque couplage indépendamment l'un de l'autre, et d'ajouter les deux contributions aux équations d'évolution de la matrice densité. Ce vaste domaine est expliqué de manière détaillée dans de nombreux ouvrages [88, 89]. Il permet de traiter un large spectre de phénomènes physiques, de la manipulation d'atomes par forces dipolaires aux méthodes de refroidissement doppler et sub-doppler.

En 1979, R.J. Cook a exposé un calcul des forces agissant sur un atome se déplaçant dans un champ optique fondé sur le théorème d'Erhenfest et les équations de Bloch optiques [90]. Le formalisme exposé ici est très similaire à cette approche. Il s'inspire d'un cours beaucoup plus général de Claude Cohen-Tannoudji donné lors d'un congrès à l'École de Physique des Houches en 1990 [91].

Nous allons nous limiter à une description semi-classique de l'atome. Cela signifie qu'il sera bien localisé à la fois dans l'espace des positions et dans l'espace des impulsions. Cette double localisation ne respecte l'inégalité d'Heisenberg que si la relation de

compatibilité suivante est remplie :

$$\frac{\hbar k_0^2}{M} \ll \Gamma$$

Dans le cas de l'atome de Césium ($M \approx 132 \text{ uma}$, $\lambda(6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}) \approx 852 \text{ nm}$), le premier terme est de l'ordre de 2 MHz, et le taux d'émission spontanée de 30 MHz.

Nous allons de plus supposer que l'atome est suffisamment lent pour pouvoir considérer que ses variables internes sont dans leur état stationnaire. Le temps caractéristique du régime transitoire étant $1/\Gamma$, la distance parcourue pendant cette durée doit être faible devant la longueur d'onde. Cette condition s'écrit : $v_0/\Gamma \ll \lambda$, où v_0 est la vitesse de la particule. Pour $v_0 \approx 20 \text{ cm/s}$, le membre de gauche est de l'ordre du nanomètre : cette inégalité est par conséquent bien vérifiée.

Dans un premier temps, nous allons présenter un modèle d'atome à deux niveaux, dans lequel la nature vectorielle de la lumière ne sera pas prise en compte. Cet aspect sera étudié dans une deuxième section avec un modèle plus complet mettant en jeu la structure fine de l'atome.

4.1 Le modèle de l'atome à deux niveaux

Dans un premier temps nous étudions l'interaction d'un atome à deux niveaux de masse M avec un champ optique monochromatique. Le niveau fondamental, non dégénéré et d'énergie nulle, est noté $|f\rangle$ et le niveau excité, d'énergie $\hbar\omega_0$, est noté $|e\rangle$. Nous sommes dans le cas d'une excitation quasi-résonante, pour laquelle $(\omega - \omega_0) \ll \omega_0$.

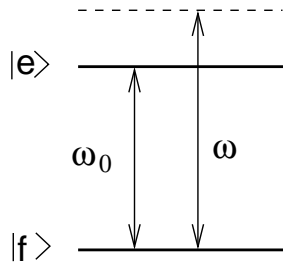


FIG. 4.1 – La fréquence de transition entre le niveau fondamental $|f\rangle$ et le niveau excité $|e\rangle$ est ω_0 . La fréquence du champ incident est ω .

4.1.1 Expression de l'hamiltonien

L'atome isolé est décrit par la somme d'un hamiltonien interne, ne faisant intervenir que les degrés internes de liberté, et d'une contribution externe, composée de l'énergie cinétique du centre de gravité de l'atome :

$$\hat{H}_0 = \hat{H}^{ext} + \hat{H}^{int} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \hbar\omega_0|e\rangle\langle e| \quad (4.1)$$

Le champ électromagnétique de pulsation ω s'écrit :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^*(\mathbf{r})e^{i\omega t} \quad (4.2)$$

Le vecteur $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ peut lui-même être décomposé en :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}(\mathbf{r})\mathbf{e}(\mathbf{r})e^{i\Phi(\mathbf{r})}$$

$\mathcal{E}(\mathbf{r})$ désignant l'amplitude réelle du champ, $\Phi(\mathbf{r})$ sa phase et $\mathbf{e}(\mathbf{r})$ le vecteur unitaire de polarisation. Dans la limite où la taille de l'atome est faible devant l'échelle de variation spatiale du champ électromagnétique, l'interaction atome-champ proche est décrite par l'hamiltonien dipolaire électrique [92] :

$$\hat{V}_{DE} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (4.3)$$

où $\hat{\mathbf{d}}$ est l'opérateur moment dipolaire. Il s'écrit dans la base $\{|e\rangle, |f\rangle\}$:

$$\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{d}_{fe} [|f\rangle\langle e| + |e\rangle\langle f|] \quad (4.4)$$

où nous avons introduit le moment de transition \mathbf{d}_{fe} , supposé réel, entre les états $|f\rangle$ et $|e\rangle$. En introduisant la fréquence de Rabi $\Omega(\mathbf{r})$ définie par $\Omega(\mathbf{r})e^{i\Phi(\mathbf{r})} = -\mathcal{E}(\mathbf{r})\mathbf{e}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{d}_{fe}/\hbar$, l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \hbar\omega_0|e\rangle\langle e| + \hbar\Omega(\mathbf{r}) \left[e^{i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))} + e^{-i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))} \right] [|f\rangle\langle e| + |e\rangle\langle f|] \quad (4.5)$$

Fréquence de Rabi et rôle de la polarisation. Dans la définition de la fréquence de Rabi intervient le produit scalaire $\mathbf{e}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{d}_{fe}$ entre le vecteur unitaire de polarisation du champ électrique et l'élément de matrice réduit de l'opérateur moment dipolaire. Nous allons fixer ce terme à 1, car l'étude de l'effet de la polarisation sur la diffraction atomique sera effectuée avec un modèle plus complet de la structure interne de l'atome prenant en compte la structure fine. Nous verrons par la suite que cette approximation est rigoureuse si l'on considère une transition $S \rightarrow P$. La fréquence de Rabi est donc proportionnelle à l'amplitude du champ électrique.

Approximation de l'onde tournante. L'approximation de l'onde tournante consiste à négliger les termes anti-résonants dans l'hamiltonien 4.5. Considérons en effet l'opérateur dipolaire électrique :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{DE} = & \hbar\Omega(\mathbf{r})e^{i(\Phi(\mathbf{r})-\omega t)}|e\rangle\langle f| + \hbar\Omega(\mathbf{r})e^{-i(\Phi(\mathbf{r})-\omega t)}|f\rangle\langle e| \\ & + \hbar\Omega(\mathbf{r})e^{i(\Phi(\mathbf{r})-\omega t)}|f\rangle\langle e| + \hbar\Omega(\mathbf{r})e^{-i(\Phi(\mathbf{r})-\omega t)}|e\rangle\langle f| \end{aligned} \quad (4.6)$$

Les quatre termes $e^{\pm i\omega t}|a\rangle\langle b|$ peuvent être réécrits en représentation d'interaction dans la base des états internes de l'atome. Introduisons pour cela l'opérateur d'évolution temporelle :

$$\mathbf{U}_I(\Delta t) = \exp(-i\hat{H}_{int}\Delta t) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0\Delta t} \end{bmatrix}$$

En appliquant le changement de représentation $\hat{W}_I = (\mathbf{U}_I)^\dagger \hat{W} \mathbf{U}_I$, les différents termes de couplage se réécrivent :

$$\begin{aligned} e^{-i\omega t}|e\rangle\langle f| & \rightarrow e^{i(\omega_0-\omega)t}|e\rangle\langle f|, & e^{i\omega t}|f\rangle\langle e| & \rightarrow e^{i(\omega-\omega_0)t}|f\rangle\langle e| \\ e^{i\omega t}|e\rangle\langle f| & \rightarrow e^{i(\omega_0+\omega)t}|e\rangle\langle f|, & e^{-i\omega t}|f\rangle\langle e| & \rightarrow e^{-i(\omega+\omega_0)t}|f\rangle\langle e| \end{aligned}$$

Les deux premiers oscillent à la fréquence $\omega - \omega_0$, les deux derniers à la fréquence $\omega_0 + \omega \approx 2\omega_0$. L'approximation de l'onde tournante consiste à négliger la contribution non-résonante des termes de fréquence double de celle de la transition atomique, qui oscillent beaucoup plus vite que les temps caractéristiques atomiques. Le terme d'interaction se simplifie donc pour donner :

$$\hat{V}_{DE} = \frac{\hbar\Omega(\mathbf{r})}{2} \left[e^{i(\Phi(\mathbf{r})-\omega t)} |e\rangle\langle f| + e^{-i(\Phi(\mathbf{r})-\omega t)} |f\rangle\langle e| \right] \quad (4.7)$$

4.1.2 Équations de Bloch optiques.

Nous allons maintenant établir les équations de Bloch auxquelles obéissent les composantes de l'opérateur densité $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$. Dans le cas d'un atome à deux niveaux, σ est représenté par une matrice 2×2 dans la base des états internes :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{ff} & \sigma_{fe} \\ \sigma_{ef} & \sigma_{ee} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

où $\sigma_{ab} = \langle a|\sigma|b\rangle$. Les éléments diagonaux σ_{ff} et σ_{ee} sont les populations de l'état fondamental et de l'état excité. Les éléments hors-diagonaux sont appelés cohérences. Nous verrons dans la suite qu'ils sont reliés en particulier à la valeur moyenne de la force exercée par le champ sur l'atome.

4.1.2.1 Équations de Bloch pour l'atome à deux niveaux

Pour trouver l'équation d'évolution de σ , considérons les opérateurs Π_{ab} définis par $\Pi_{ab} = |a\rangle\langle b|$. Leur valeur moyenne est directement reliée aux éléments de la matrice densité par $\langle \Pi_{ab} \rangle = \langle \phi|a\rangle\langle b|\phi\rangle = \sigma_{ba}$ ¹, et leur évolution temporelle est régie par l'équation :

$$i\hbar \frac{d\langle \Pi_{ab} \rangle}{dt} = \langle [\Pi_{ab}, H] \rangle = \langle [\Pi_{ab}, H_0 + V_{AL}] \rangle \quad (4.9)$$

car les opérateurs Π_{ab} commutent avec $\mathbf{P}^2/2M$.

Comme précisé dans l'introduction, ces équations ne prennent en compte que le couplage de l'atome avec le champ incident. Nous allons maintenant ajouter l'effet du couplage avec les modes du vide, calculé avec le formalisme plus général de l'équation pilote en considérant le vide comme un réservoir :

$$i\hbar \frac{d\langle \Pi_{ab} \rangle}{dt} = \langle [\Pi_{ab}, H] \rangle = \langle [\Pi_{ab}, H_0 + V_{AL}] \rangle + i\hbar \left(\frac{d\langle \Pi_{ab} \rangle}{dt} \right)_{sp} \quad (4.10)$$

Le calcul complet des termes supplémentaires dus à l'émission spontanée dépasse le cadre de ce mémoire. Il est exposé en détail dans la référence [88]. Il est cependant possible d'en donner une justification partielle en rappelant que la désexcitation de l'atome par émission spontanée d'un photon est un processus aléatoire. On comprend alors intuitivement qu'en l'absence de champ extérieur, la population de l'état excité doit décroître exponen-

¹On rappelle que la valeur moyenne d'un opérateur O est $\langle O \rangle = \text{Tr} \rho O$.

tiellement avec le temps jusqu'à s'annuler, ce que traduit le terme :

$$\left(\frac{d\sigma_{ee}}{dt}\right)_{sp} = -\Gamma\sigma_{ee}$$

Il y a donc un transfert de population de l'état excité vers l'état fondamental, ce qui se traduit par un peuplement de l'état fondamental à la même vitesse :

$$\left(\frac{d\sigma_{ff}}{dt}\right)_{sp} = \Gamma\sigma_{ee}$$

De plus, l'émission spontanée est responsable d'une décorrélation des états $|e\rangle$ et $|f\rangle$. Elles obéissent donc également à une loi de décroissance exponentielle :

$$\left(\frac{d\sigma_{ef}}{dt}\right)_{sp} = -\frac{\Gamma}{2}\sigma_{ef}$$

La justification du taux de variation en $\Gamma/2$ est plus délicate, nous nous contenterons donc de l'admettre [88]. Nous obtenons alors le système d'équations différentielles :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{ff} = i\Omega e^{-i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}\sigma_{fe} - i\Omega e^{i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}\sigma_{ef} + \Gamma\sigma_{ee} \\ \dot{\sigma}_{ee} = -i\Omega e^{-i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}\sigma_{fe} + i\Omega e^{i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}\sigma_{ef} - \Gamma\sigma_{ee} \\ \dot{\sigma}_{fe} = i\omega_0\sigma_{fe} - i\Omega e^{i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}[\sigma_{ee} - \sigma_{ff}] - \frac{\Gamma}{2}\sigma_{fe} \\ \dot{\sigma}_{ef} = -i\omega_0\sigma_{ef} + i\Omega e^{-i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}[\sigma_{ee} - \sigma_{ff}] - \frac{\Gamma}{2}\sigma_{ef} \end{cases} \quad (4.11)$$

Si l'on effectue maintenant le changement de variable :

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{fe} &= e^{-i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}\sigma_{fe} \\ \hat{\sigma}_{ef} &= e^{i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))}\sigma_{ef} \\ \hat{\sigma}_{ee} &= \sigma_{ee} \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_{ff} = \sigma_{ff} \end{aligned}$$

le système d'équations précédent devient :

$$\begin{cases} \dot{\hat{\sigma}}_{ff} = i\Omega\hat{\sigma}_{fe} - i\Omega\hat{\sigma}_{ef} + \Gamma\hat{\sigma}_{ee} \\ \dot{\hat{\sigma}}_{ee} = -i\Omega\hat{\sigma}_{fe} + i\Omega\hat{\sigma}_{ef} - \Gamma\hat{\sigma}_{ee} \\ \dot{\hat{\sigma}}_{fe} = -i(\delta_L - \dot{\Phi}(\mathbf{r}))\hat{\sigma}_{fe} - i\Omega[\hat{\sigma}_{ee} - \hat{\sigma}_{ff}] - \frac{\Gamma}{2}\hat{\sigma}_{fe} \\ \dot{\hat{\sigma}}_{ef} = i(\delta - \dot{\Phi}(\mathbf{r}))\hat{\sigma}_{ef} + \Omega[\hat{\sigma}_{ee} - \hat{\sigma}_{ff}] - \frac{\Gamma}{2}\hat{\sigma}_{ef} \end{cases} \quad (4.12)$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord entre la pulsation du faisceau incident et celle de la transition atomique. Nous introduisons maintenant les composantes du vecteur de Bloch définies par :

$$\begin{cases} u = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{fe} + \hat{\sigma}_{ef}) \\ v = \frac{1}{2i}(\hat{\sigma}_{fe} - \hat{\sigma}_{ef}) \\ w = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{ee} - \hat{\sigma}_{ff}) \end{cases} \quad (4.13)$$

Notons que les populations des états fondamentaux et excités sont reliées par l'équation $\hat{\sigma}_{ee} + \hat{\sigma}_{ff} = 1$. Les termes u et v représentent respectivement les parties réelle et imaginaire de la cohérence entre les niveaux fondamentaux et excités, tandis que w est simplement

la demi-différence entre les populations. Ces composantes obéissent aux équations :

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \\ \dot{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma/2 & \delta - \dot{\Phi} & 0 \\ -(\delta - \dot{\Phi}) & -\Gamma/2 & -2\Omega \\ 0 & 2\Omega & -\Gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Gamma/2 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

avec $\dot{\Phi} = \partial\Phi/\partial t + (\mathbf{v}_0 \cdot \nabla)\Phi = (\mathbf{v}_0 \cdot \nabla)\Phi$ car, l'onde étant cohérente, la phase est indépendante du temps. Ce terme, responsable de l'effet Doppler, sera négligé par la suite car les atomes sont lents : leur vitesse typique ($v_0 \approx 20$ cm/s) conduit à un décalage Doppler de l'ordre du MHz à la longueur d'onde de 850 nm, ce qui est très faible comparé au désaccord $\delta \approx 10$ GHz.

Comme nous l'avons précisé en introduction, nous supposons que l'atome évolue suffisamment lentement dans le champ proche pour que l'on puisse le considérer à l'état stationnaire à tout instant de son évolution. Les valeurs de u , v et w sont alors :

$$u_{st} = \frac{\delta}{2\Omega} \frac{s}{1+s} \quad (4.15)$$

$$v_{st} = \frac{\Gamma}{4\Omega} \frac{s}{1+s} \quad (4.16)$$

$$w_{st} = -\frac{1}{2(1+s)} \quad (4.17)$$

où s est le paramètre de saturation :

$$s = \frac{2\Omega^2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \quad (4.18)$$

Lorsque s devient très grand, w_{st} tend vers 0 : les populations des états $|e\rangle$ et $|f\rangle$ tendent toutes les deux vers 1/2. La plupart des expériences de diffraction atomique est en fait effectuée dans le régime inverse, de faible saturation, correspondant à un grand désaccord devant la pulsation de Rabi. On peut alors négliger l'émission spontanée, ainsi que la population de l'état excité devant celle de l'état fondamental.

À partir de maintenant, nous allons nous placer dans cette approximation. Plus précisément, nous supposerons $\delta \gg \Omega, \Gamma$.

4.1.2.2 Expression de la force et du potentiel

Réponses dissipative et réactive. Pour donner un sens physique à u_{st} et v_{st} , calculons la valeur moyenne de l'opérateur moment dipolaire à l'état stationnaire. Elle s'exprime comme :

$$\langle \mathbf{d} \rangle_{st} = \mathbf{d}_{ef} \langle \Pi_{ef} + \Pi_{fe} \rangle_{st} = 2\mathbf{d}_{ef} \text{Re} \left[\sigma_{ef}^{st} \right] \quad (4.19)$$

Or :

$$u_{st} + iv_{st} = \sigma_{ef}^{st} e^{-i(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))} \Rightarrow \text{Re} \left[\sigma_{ef}^{st} \right] = u_{st} \cos(\omega t - \Phi(\mathbf{r})) - v_{st} \sin(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))$$

donc :

$$\langle \mathbf{d} \rangle_{st} = 2\mathbf{d}_{ef} [u_{st} \cos(\omega t - \Phi(\mathbf{r})) - v_{st} \sin(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))]$$

Ainsi, il apparaît que la composante en phase avec le champ incident est proportionnelle à u_{st} , tandis que la partie en quadrature est proportionnelle à v_{st} . Cette dernière entraîne donc un retard de phase entre le moment dipolaire et le champ et, par là, une dissipation d'énergie : c'est la réponse dissipative. La première composante est la réponse réactive.

L'opérateur force exercée sur l'atome se calcule à partir du potentiel d'interaction dipolaire ². Son gradient s'écrit, en l'absence d'émission spontanée, :

$$\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}) = -\hbar|e\rangle\langle f|e^{-i\omega_0 t}\nabla\left[\Omega(\mathbf{r})e^{i\Phi(\mathbf{r})}\right] + h.c.$$

La force totale est la valeur moyenne de cet opérateur, et s'exprime comme :

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \langle\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})\rangle = -2\hbar\Omega(\mathbf{r})[u(t)\alpha(\mathbf{r}) + v(t)\beta(\mathbf{r})] \quad (4.20)$$

avec :

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{r}) &= \frac{\nabla\Omega(\mathbf{r})}{\Omega(\mathbf{r})} \\ \beta(\mathbf{r}) &= \nabla\Phi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Par extension des résultats obtenus sur l'opérateur moment dipolaire, on appelle force dissipative (à l'origine de la pression de radiation) la composante proportionnelle à v_{st} :

$$\mathbf{F}_{diss}(\mathbf{r}) = -2\hbar\Omega(\mathbf{r})v_{st}\beta(\mathbf{r}) \quad (4.21)$$

$$= -\frac{\Gamma}{2}\frac{s}{1+s}\hbar\beta(\mathbf{r}) \quad (4.22)$$

Elle est proportionnelle au taux d'émission spontanée Γ . À forte saturation, la force dissipative tend vers la valeur maximale $-\Gamma/2\hbar\beta(\mathbf{r})$, d'où le nom de "paramètre de saturation" donné à s . En revanche, à faible saturation :

$$\mathbf{F}_{diss}(\mathbf{r}) = -\frac{\Gamma}{2}s\hbar\beta(\mathbf{r}) = -\hbar\Gamma\frac{\Omega^2}{\delta^2}\beta(\mathbf{r}) \quad (4.23)$$

Elle varie donc comme $I(\mathbf{r})/\delta^2$, où $I(\mathbf{r})$ est l'intensité du champ électromagnétique en \mathbf{r} . L'action de cette force doit être minimisée dans les expériences de diffraction puisqu'elle est à l'origine d'une perte de cohérence : on travaille donc à faible saturation.

La composante réactive est la partie proportionnelle à u_{st} . Elle s'écrit :

$$\mathbf{F}_{reac}(\mathbf{r}) = -2\hbar\Omega(\mathbf{r})u_{st}\alpha(\mathbf{r}) \quad (4.24)$$

$$= -\hbar\delta\frac{\nabla\Omega^2}{\delta^2 + 2\Omega^2 + \Gamma^2/4} \quad (4.25)$$

Elle est proportionnelle au désaccord δ , donc la direction de la force va dépendre de la valeur de la fréquence du champ incident par rapport à celle de la transition. Cette force,

²À l'interaction de l'atome avec le vide correspond également un opérateur de force. On peut cependant montrer que sa valeur moyenne est nulle en raison de l'isotropie de l'émission spontanée.

au contraire de la précédente, dérive d'un potentiel scalaire $U(\mathbf{r})$:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{\hbar\delta}{2} \ln[1 + s(\mathbf{r})] \quad (4.26)$$

Dans la limite des faibles saturations, le potentiel et la force deviennent :

$$U(\mathbf{r}) \approx \frac{\hbar\delta}{2} s(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{\delta} \Omega^2(\mathbf{r}) \quad (4.27)$$

$$\mathbf{F}_{reac}(\mathbf{r}) \approx -\frac{\hbar}{\delta} \nabla \Omega^2 \propto -\frac{\nabla I}{\delta} \quad (4.28)$$

On se place donc expérimentalement à faible saturation en prenant une intensité importante pour maximiser \mathbf{F}_{reac} et en augmentant le désaccord pour réduire l'émission spontanée à un niveau acceptable.

La direction de la force dépend du signe du désaccord. Les zones de champ intense seront attractives si le désaccord est négatif, et répulsives dans le cas contraire. Dans notre situation, la fréquence du laser doit être supérieure à celle de la transition atomique pour que les atomes soient focalisés dans les zones de champ faible, ce qui réduit d'autant l'émission spontanée.

Hamiltonien effectif. Ce calcul nous a donc permis d'établir une expression approchée du potentiel vu par un atome à deux niveaux interagissant avec un champ optique. L'expression 4.27 est valable dans le cas d'un atome suffisamment lent pour pouvoir négliger l'effet Doppler et considérer que l'état interne de l'atome en un point de sa trajectoire est identique à celui d'un atome au repos au même point. De plus, le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$ doit être grand devant la fréquence de Rabi et le taux d'émission spontanée, de manière à négliger la population de l'état excitée devant celle de l'état fondamental ainsi que la perte de cohérence par émission spontanée. Ces approximations permettent de remplacer l'hamiltonien de départ 4.5 par un hamiltonien effectif ne dépendant que des degrés de liberté externes de l'atome, à savoir les opérateurs position et impulsion :

$$H_{eff}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\hbar}{\delta} \Omega^2(\mathbf{r}) \quad (4.29)$$

Ce modèle est souvent appelé modèle de l'atome à un niveau, car il s'agit d'une description scalaire de l'interaction dans laquelle l'atome reste dans son unique état fondamental. Nous utiliserons ce modèle dans le chapitre 4 portant sur une approche analytique de la diffraction.

Il est cependant insuffisant pour traiter l'effet de la polarisation du champ. Nous allons donc introduire dans la prochaine section un modèle plus complexe mettant en jeu la structure fine de l'atome.

4.2 Prise en compte de la structure fine

Nous avons vu précédemment que la polarisation du champ incident subissait des changements importants dans la zone de champ proche, notamment en fonction de l'orientation du plan d'incidence par rapport au réseau. En mode d'illumination TM, l'onde incidente est principalement polarisée σ_- , avec une composante σ_+ plus faible. Rappelons

que l'axe de quantification est le vecteur normal au plan d'incidence, comme indiqué sur la figure 4.2-b. Si l'interaction avec le réseau diélectrique ne modifie pas sensiblement ces proportions, le contraste évolue de manière plus importante pour la polarisation E_+ que pour la polarisation E_- . De plus, nous avons mis en évidence la création d'une composante de polarisation TE, inexistante dans le champ initial, et de faible intensité par rapport aux autres contributions, mais de l'ordre de 1% dans certains cas.

Afin de mettre en évidence le rôle de la polarisation du champ dans la diffraction atomique, nous allons étudier une transition $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$. Sur la figure 4.2-a sont indiqués les différents sous-niveaux de structure fine de l'atome dans la zone asymptotique, ainsi que les modules des coefficients de Clebsch-Gordan pour chaque transition.

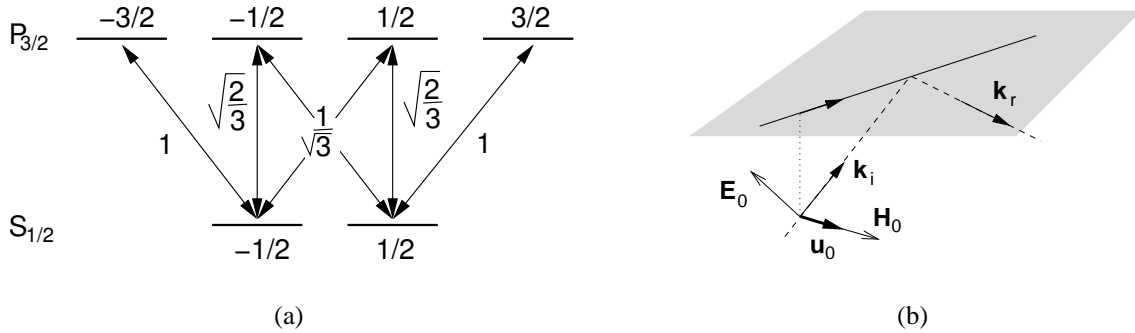


FIG. 4.2 – (a) Structure de la transition $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$. (b) L'axe de quantification \mathbf{u}_0 est perpendiculaire au plan d'incidence.

Le but de cette section est de calculer l'expression du potentiel effectif auquel est soumis l'atome. De même que dans le modèle précédent, l'intensité du champ sera supposée suffisamment faible pour pouvoir négliger la population des états excités. Il est alors possible de procéder à une élimination adiabatique des niveaux $P_{3/2}$, permettant l'expression du potentiel d'interaction sous la forme d'une matrice 2×2 s'appliquant uniquement aux niveaux fondamentaux. Nous proposons une version simplifiée du calcul exposé dans le cours de C. Cohen-Tannoudji [91], dans laquelle, à la lumière du paragraphe précédent, nous négligeons directement l'émission spontanée.

Équations de Bloch. Notons $|J, m_j\rangle$ les états internes de l'atome. Ces notations seront simplifiées en $|m_f\rangle$ pour les états fondamentaux et $|m_e\rangle$ pour les états excités quand il n'y aura pas d'ambiguïté. On définit les projecteurs sur les sous-espaces $J_f = 1/2$ et $J_e = 3/2$ respectivement par :

$$P_f = \sum_{m_f=-1/2}^{1/2} |m_f\rangle\langle m_f|$$

$$P_e = \sum_{m_e=-3/2}^{3/2} |m_e\rangle\langle m_e|$$

L'opérateur densité s'écrit alors :

$$\sigma = |\psi\rangle\langle\psi| = \sigma_{ff} + \sigma_{fe} + \sigma_{ef} + \sigma_{ee}$$

avec $\sigma_{ab} = P_a \sigma P_b$, et $a, b = f, e$. Les σ_{ab} ne sont plus des scalaires mais, comme σ , des opérateurs. Ils sont représentés dans la base des états internes par des matrices $(2J_a + 1) \times (2J_b + 1)$. L'opérateur densité se présente dans la même base sous la forme d'une matrice $2(J_f + J_e + 1) \times 2(J_f + J_e + 1)$:

$$\sigma = \left[\begin{array}{c|c} \sigma_{ff} & \sigma_{fe} \\ \hline \sigma_{ef} & \sigma_{ee} \end{array} \right] \quad (4.30)$$

De même l'opérateur moment dipolaire s'écrit $\mathbf{d} = \mathbf{d}_+ + \mathbf{d}_-$ où :

$$\mathbf{d}_+ = P_e \mathbf{d} P_f \quad \mathbf{d}_- = P_f \mathbf{d} P_e \quad (4.31)$$

Les quantités \mathbf{d}_+ et \mathbf{d}_- sont donc respectivement des opérateurs de "montée" et de "descente" : par exemple, \mathbf{d}_+ décrit le passage de l'atome d'un niveau $|m_f\rangle$ à un niveau $|m_e\rangle$.

Le champ électrique s'écrit $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}^+(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^-(\mathbf{r})e^{i\omega t}$, avec $\mathbf{E}^- = [\mathbf{E}^+]^*$. En utilisant l'approximation de l'onde tournante, c'est-à-dire en négligeant les termes anti-résonants dans le potentiel dipolaire électrique $V = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, on obtient :

$$V = -\mathbf{d}_+ \cdot \mathbf{E}^+(\mathbf{r})e^{-i\omega t} - \mathbf{d}_- \cdot \mathbf{E}^-(\mathbf{r})e^{i\omega t} \quad (4.32)$$

Les opérateurs correspondant à la fréquence de Rabi dans le modèle à un niveau sont :

$$\hbar G^\pm(\mathbf{r}) = \mathbf{d}^\pm \cdot \mathbf{E}^\pm(\mathbf{r}) \quad (4.33)$$

Les équations régissant l'évolution de ρ_{ab} au cours du temps s'écrivent alors :

$$i\hbar \dot{\sigma}_{ab} = P_a [\hbar\omega_0 P_e + V, \sigma] P_b - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{d}{dt} \sigma_{ab} \right)_{sp} \quad (4.34)$$

L'émission spontanée doit être décrite de manière plus complexe afin de tenir compte de la multiplicité des niveaux atomiques. En effet, si la probabilité de désexcitation est la même pour tous les niveaux (qui émettent dans le vide), celle de retomber dans un état fondamental donné dépend du recouvrement entre les états initiaux et finaux. Ce terme n'est pas développé dans ce mémoire, étant donné que nous allons négliger l'émission spontanée dans la suite. Il suffit de savoir que $(d\sigma_{ff}/dt)_{sp}$ est proportionnel au taux d'émission spontanée Γ . Pour chacune des composantes de l'opérateur densité, le développement de 4.34 donne :

$$\dot{\sigma}_{ee} = -\Gamma \sigma_{ee} + i[G^+(\mathbf{r})\tilde{\sigma}_{fe} - \tilde{\sigma}_{ef}G^-(\mathbf{r})] \quad (4.35)$$

$$\dot{\tilde{\sigma}}_{ef} = -(\Gamma/2 - i\delta)\tilde{\sigma}_{ef} + i[G^+(\mathbf{r})\sigma_{ff} - \sigma_{ee}G^+(\mathbf{r})] \quad (4.36)$$

$$\dot{\sigma}_{ff} = \left(\frac{d}{dt} \sigma_{ff} \right)_{sp} + i[G^-(\mathbf{r})\tilde{\sigma}_{ef} - \tilde{\sigma}_{fe}G^+(\mathbf{r})] \quad (4.37)$$

où on a posé $\tilde{\sigma}_{ef} = \exp(i\omega t)\sigma_{ef}$ et $\tilde{\sigma}_{fe} = \exp(-i\omega t)\sigma_{fe}$.

Élimination adiabatique des états excités. Dans la limite de faible saturation, le temps caractéristique d'évolution de l'état fondamental est beaucoup plus long que celui de l'état

excité. De ce fait, les cohérences vont suivre instantanément les variations de σ_{ff} . Ceci permet de négliger $\dot{\tilde{\sigma}}_{ef}$ et $\dot{\tilde{\sigma}}_{ee}$ devant $\Gamma\tilde{\sigma}_{ef}$ et $\Gamma\tilde{\sigma}_{ee}$ dans 4.36 et 4.35. On peut alors extraire des équations de Bloch les expressions des cohérences et des populations de l'état excité :

$$\tilde{\sigma}_{ef} = -\frac{1}{\delta + i\frac{\Gamma}{2}} G^+(\mathbf{r}) \sigma_{gg} \quad (4.38)$$

$$\tilde{\sigma}_{fe} = -\frac{1}{\delta - i\frac{\Gamma}{2}} \sigma_{gg} G^-(\mathbf{r}) \quad (4.39)$$

$$\sigma_{ee} = \frac{1}{\delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} G^+(\mathbf{r}) \sigma_{ff} G^-(\mathbf{r}) \quad (4.40)$$

Cette dernière équation montre que les états excités sont en moyenne plus faiblement peuplés que l'état fondamental d'un rapport de l'ordre de $[\Omega(\mathbf{r})/\delta]^2$. Ainsi, quand le désaccord devient grand devant la pulsation de Rabi et le taux d'émission spontanée, c'est-à-dire à faible saturation, les atomes restent majoritairement dans l'état fondamental. Considérant maintenant cette limite, nous pouvons effectuer $\Gamma = 0$ dans les expressions des cohérences et négliger le terme d'émission spontanée dans 4.37. La population de l'état fondamental obéit alors à l'expression suivante :

$$i\hbar\dot{\sigma}_{ff} = \frac{\hbar}{\delta} [G^+(\mathbf{r}) G^-(\mathbf{r}), \sigma_{ff}] \quad (4.41)$$

Par comparaison avec l'équation d'évolution 4.34, cette dernière relation décrit l'évolution temporelle de la matrice densité réduite aux deux seuls états fondamentaux : nous avons éliminé adiabatiquement les états excités. Tout se passe donc comme si l'atome était décrit par les deux états $|S_{1/2}, \pm 1/2\rangle$, tout en étant soumis au potentiel effectif :

$$V_{eff} = \frac{\hbar}{\delta} G^+(\mathbf{r}) G^-(\mathbf{r}) \quad (4.42)$$

Cet opérateur est une matrice 2×2 . L'atome sera donc décrit par le spineur à deux composantes :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{bmatrix} \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

qui obéit à l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) + \mathbf{V}_{eff} \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.44)$$

Nous allons maintenant calculer explicitement V_{eff} en fonction des composantes normales du champ pour la transition $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$.

Calcul explicite de V_{eff} . Le potentiel effectif s'écrit matriciellement :

$$\mathbf{V}_{eff}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar\delta} \begin{bmatrix} V_{-1/2, -1/2}(\mathbf{r}) & V_{-1/2, 1/2}(\mathbf{r}) \\ V_{1/2, -1/2}(\mathbf{r}) & V_{-1/2, -1/2}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

avec :

$$V_{m_f, m'_f} = \sum_{m_e=-3/2}^{3/2} \langle m_f | \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}^{+*} | m_e \rangle \langle m_e | \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}^+ | m'_f \rangle \quad (4.46)$$

Ces composantes se développent en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan :

$$V_{m_f, m'_f} = \frac{d^2}{\hbar \delta} \sum_{m_e, q, q'} E_{q'}^+(\mathbf{r}) [E_q^+(\mathbf{r})]^* \langle 1/2, m_f; 1, q | 3/2, m_e \rangle \langle 3/2, m_e | 1/2, m_f; 1, q' \rangle$$

où d est le moment réduit de la transition $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$. Le potentiel effectif s'exprime après calcul comme ³ :

$$\mathbf{V}_{eff}(\mathbf{r}) = \frac{d_{sp}^2}{\hbar \delta} \begin{bmatrix} \frac{3|E_-(\mathbf{r})|^2 + 2|E_0(\mathbf{r})|^2 + |E_+(\mathbf{r})|^2}{3} & \frac{\sqrt{2}}{3} \{E_- E_0^* + E_+^* E_0\} \\ \frac{\sqrt{2}}{3} \{E_+ E_0^* + E_-^* E_0\} & \frac{|E_-(\mathbf{r})|^2 + 2|E_0(\mathbf{r})|^2 + 3|E_+(\mathbf{r})|^2}{3} \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

Puisque les différentes composantes normales du champ sont pondérées par les coefficients de Clebsch-Gordan, lesquels dépendent du sous-niveau Zeemann, les éléments diagonaux ne sont pas identiques pour $m_s = -1/2$ et $m_s = +1/2$, mais sont cependant symétriques par échange de E_+ en E_- . En particulier, le rapport entre les deux coefficients des composantes + et - est trois. On comprend donc que la diffraction va être très sensible au nombre quantique m_s si les composantes E_+ et E_- sont très différentes, comme nous le verrons dans le traitement numérique de la diffraction.

De plus, la composante E_0 intervient dans les éléments hors-diagonaux de \mathbf{V}_{eff} : c'est elle qui induit le transfert de population entre les deux niveaux fondamentaux, comme prévu par les règles de sélection usuelles (c'est le principe du pompage optique).

4.3 Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre deux modèles de structure interne atomique. Dans le premier, dit de l'atome à un niveau, nous aboutissons à une description scalaire de l'interaction, le potentiel étant simplement proportionnel à l'intensité du champ électrique. Nous utiliserons ce résultat lors du prochain chapitre dans une étude analytique de la diffraction. Ce modèle simplifié ne permettant pas la prise en compte de l'évolution de la polarisation dans le champ proche, nous avons ensuite introduit un niveau de complexité supplémentaire en considérant une transition entre les deux niveaux de structure fine $S_{1/2}$ et $P_{3/2}$. L'élimination adiabatique des états excités conduit à une description de l'atome par un spineur à deux composantes, soumis à un potentiel effectif matriciel ne couplant que les deux sous-niveaux Zeeman de l'état fondamental. Ce modèle sera utilisé dans le sixième chapitre dans lequel nous calculerons numériquement les probabilités de diffraction.

Nous allons maintenant voir deux méthodes d'approximation permettant d'étudier analytiquement la diffraction atomique.

³Si l'on ne prend pas en compte la structure fine en ne considérant qu'une transition $S \rightarrow P$, le potentiel effectif est un scalaire. De plus, tous les coefficients de Clebsch-Gordan valent 1 : il est alors facile de montrer que la somme sur les composantes normales se réduit à l'intensité du champ électrique. On retrouve ainsi le terme d'interaction calculé avec le modèle de l'atome à un niveau.

Chapitre 5

Traitement analytique

Il existe peu de méthodes strictement analytiques permettant l'étude de la diffraction atomique par des réseaux optiques. Pour les réseaux en transmission, l'approximation de Raman-Nath est applicable tant que l'énergie cinétique transversale de l'atome est faible devant le potentiel ainsi que son énergie cinétique verticale [93, 22, 21]. Cette approche ne permet pas de décrire la diffraction en réflexion puisque la composante perpendiculaire de la vitesse s'annule au point de rebroussement. Ainsi, la méthode standard décrit le phénomène de diffraction au moyen du formalisme des états habillés [26, 94, 27]. Cependant, si elle en permet une bonne description qualitative, une évaluation précise des amplitudes de diffraction passe par le calcul numérique. Nous présentons ici deux méthodes approchées permettant d'avoir une expression analytique de ces populations dans le cas où le potentiel est faiblement modulé.

La première est une application directe de l'approximation de Born en mécanique quantique. À partir de l'expression exacte des états propres de l'onde évanescente non modulée [95, 96], on calcule le taux de transition dans les premiers ordres de diffraction. Elle est cependant limitée à la description des ordres ± 1 .

Un moyen d'étendre le domaine de validité s'inspire des intégrales de chemin de Feynman [97]. Cette approche est très similaire à celle employée pour décrire la diffraction d'une onde électromagnétique par un réseau de phase mince, comme dans le cas d'une onde acoustique [98]. En effet, toujours en considérant la modulation de l'onde comme une perturbation, il est possible d'assimiler la trajectoire classique de l'atome à sa trajectoire dans l'onde évanescente non perturbée. Celui-ci accumule alors une phase dépendante de sa position latérale initiale, ce qui entraîne une modulation du front d'onde et donc le processus de diffraction.

Dans deux articles parus en 1994 [99, 100], C. Henkel *et al.* ont appliqué ces deux méthodes à l'étude de la diffraction par un réseau périodique obtenu en superposant deux ondes évanescentes contrapropageantes [24]. Nous allons dans ce chapitre étendre les résultats obtenus au cas du potentiel diffractant nanostructuré. Rappelons que la différence réside dans le découplage miroir/réseau provenant essentiellement du fait que les nanostructures fixent à la fois la périodicité et l'orientation du réseau. Nous avons alors un degré supplémentaire de liberté dans l'orientation du plan d'incidence par rapport aux nanostructures, qui agit sur la hauteur de localisation de la modulation du potentiel.

Dans un premier temps nous allons exposer la théorie perturbative fondée sur l'approximation de Born. Appliquée d'une part au potentiel évanescent stationnaire, et d'autre part au potentiel nanostructuré, elle nous permettra de dégager un ensemble de paramètres

sans dimension décrivant les principales propriétés de la diffraction indépendamment des paramètres expérimentaux. Son domaine de validité ne permettant de décrire que les ordres ± 1 , nous étendrons dans un deuxième temps ces résultats au moyen de l'approximation du réseau de phase mince, ce qui nous permettra d'étudier la diffraction dans des ordres plus élevés.

Dans ces deux méthodes, on considère la partie modulante du potentiel comme une perturbation.

5.1 Potentiel perturbatif

Un atome à un niveau évoluant près de la surface est soumis à l'action d'un potentiel optique scalaire composé de deux termes :

- une partie purement répulsive formée de l'onde évanescente non modulée : $V_0 e^{-2\kappa_0 z}$. C'est elle qui joue le rôle de miroir (voir chapitre 1). Rappelons que, dans une description classique de l'interaction, les atomes sont réfléchis à la hauteur de rebroussement classique z_r :

$$z_r = \frac{1}{2\kappa_0} \ln \left(\frac{V_0}{E_c^{z,i}} \right)$$

où $E_c^{z,i}$ est l'énergie cinétique selon la direction perpendiculaire à la surface.

- la partie diffractive formée de la modulation du potentiel. Nous avons vu qu'elle était d'amplitude plus faible que la partie répulsive d'un facteur égal au contraste de l'onde à la hauteur z . Elle s'exprime dans le cas général et au premier ordre en fonction du contraste par :

$$V_1(x, z) \approx e^{-2\kappa_0 z} \sum_{v'} \tilde{\epsilon}_{v'}(z) \cos(\mathbf{Q}_{v'} \cdot \mathbf{l} + \phi_{v'}) \quad \text{avec} \quad \tilde{\epsilon}_{v'}(z) = \epsilon_{v'} e^{-(\kappa_{v'} - \kappa_0)z}$$

Cette expression est générale pour les potentiels optiques périodiques de surface, et permet aussi bien de décrire le potentiel évanescent stationnaire que le potentiel nanostructuré.

Dans le cas de l'onde évanescente stationnaire, il prend la forme simple :

$$V_1(x, z) = \epsilon e^{-2\kappa_0 z} \cos(n_1 k_0 \sin \theta x)$$

Ainsi, quelque soit l'altitude z , le contraste a toujours la même valeur ϵ : on peut donc dire qu'il a une portée infinie.

La situation est plus complexe pour le potentiel nanostructuré. Dans le cas où celui-ci est bien approximé par la prise en compte du seul harmonique +1 (voir chapitre 2), il s'écrit simplement :

$$V_1(x, z) = \tilde{\epsilon}(z) e^{-2\kappa_0 z} \cos\left(\frac{2\pi}{L} x\right) \quad \text{avec} \quad \epsilon(z) = \epsilon_1 e^{(\kappa_0 - \kappa_1)z}$$

Le contraste est une fonction exponentiellement décroissante avec l'altitude z , de longueur de décroissance $1/(\kappa_1 - \kappa_0)$. À la hauteur de rebroussement classique, il prend la valeur particulière :

$$\epsilon(z_r) = \epsilon \left[\frac{V_0}{E_c^{z,i}} \right]^{(\kappa_0 - \kappa_1)/2}$$

Il dépend donc du rapport de l'énergie cinétique et de la valeur maximale du potentiel par une loi de puissance. Nous allons voir dans la suite qu'il joue un rôle important dans le processus de diffraction atomique par un réseau nanostructuré.

Le potentiel total est donc la somme de ces deux termes. L'hamiltonien de la particule se met sous la forme :

$$H = H_0 + V_1 \quad \text{avec} \quad H_0 = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_0 e^{-2\kappa_0 z}$$

La base des deux méthodes présentées dans ce chapitre est un traitement perturbatif de V_1 .

5.2 Diffraction dans l'approximation de Born

La méthode présentée dans ce paragraphe repose sur une résolution de l'équation de Schrödinger utilisant le formalisme des fonctions de Green. Les détails de cette théorie ne seront pas développés dans ce mémoire, mais l'exposé complet se trouve dans la thèse de C. Henkel [101]. Dans l'approximation de Born, la diffraction est décrite comme une transition entre deux états propres du potentiel évanescent non-modulé, que nous explicitons dans le paragraphe suivant.

5.2.1 États propres du potentiel non modulé et paramètres sans dimension

Les états propres d'un atome dans une onde évanescence non modulée ont été calculés analytiquement par J.M. Jackson et N.F. Mott [96] en 1932. G. Armand et J.R. Manson ont ensuite utilisé ces résultats afin d'étudier la diffraction d'atomes neutres par le potentiel évanescent structuré régnant à la surface d'un cristal [95].

En l'absence de modulation, le potentiel ne dépend pas des coordonnées transverses, par conséquent la composante parallèle à la surface du vecteur d'onde atomique incident \mathbf{k}_a^i est conservée. Les fonctions et énergies propres de H_0 sont donc labellés uniquement par la composante verticale $k_{a,z}^i$:

$$\begin{aligned} E_{k_{a,z}^i} &= \frac{\hbar^2 k_{a,z}^i{}^2}{2m} \\ \phi_{k_{a,z}^i}(z) &= \sqrt{\frac{k_{a,z}^i \sinh(\pi k_{a,z}^i / \kappa_0)}{\pi}} K_{ik_{a,z}^i / \kappa_0}(Y) \\ Y &= \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar \kappa_0} e^{-\kappa_0 z} \end{aligned} \quad (5.1)$$

où K_{ix} est la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce et d'ordre imaginaire. La normalisation des fonctions $\phi_{k_{a,z}^i}(\mathbf{l}, z)$ est :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz \phi_{k_1}(z) [\phi_{k_2}(z)]^* = \pi \delta(k_1 - k_2) \quad (5.2)$$

Lois d'échelle. Dans ces expressions, $k_{a,z}^i$ apparaît uniquement dans le rapport $k_{a,z}^i/\kappa_0$. Il est donc possible d'introduire un premier paramètre sans dimension $P = p_{a,z}^i/\hbar\kappa_0 = k_{a,z}^i/\kappa_0$, appelé par la suite impulsion réduite. Il permet de mettre en évidence le rôle particulier de la quantité $\hbar\kappa_0$, homogène à une impulsion. Son interprétation n'est pas immédiate et nous reviendrons dessus plus loin.

Toutefois, l'impulsion réduite est aussi, à 2π près, le quotient de la portée de l'onde évanescente et de la longueur d'onde de de Broglie atomique. Elle démarque ainsi la limite entre le régime semi-classique et le régime quantique. Nous avons déjà vu dans la partie précédente que le régime semi-classique correspond au cas où l'échelle caractéristique de la fonction d'onde atomique est faible devant l'échelle de variation spatiale du potentiel, ici $1/\kappa_0$. Cela se traduit par l'inégalité $\lambda_{dB}\kappa_0 = 1/P_i \ll 1$.

Un ordre de grandeur de l'impulsion réduite P peut être estimé pour des paramètres typiques correspondant à une hauteur de chute de 3 mm au-dessus de la surface et un angle d'incidence de l'onde électromagnétique de $\theta = 60^\circ$. On trouve alors $P \approx 90 \gg 1$. Nous sommes donc bien dans le régime semi-classique.

Un deuxième paramètre sans dimension apparaît dans l'argument Y de la fonction de Bessel, $\eta = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar\kappa_0}$. Il exprime à nouveau le rapport de deux quantités de mouvement, respectivement associées à la variation verticale de l'onde évanescente et à l'intensité maximale du potentiel. L'énergie cinétique perpendiculaire incidente de l'atome ne pouvant être supérieure à la hauteur V_0 du potentiel réfléchissant, $\sqrt{2mV_0}$ est l'impulsion maximale que peut avoir l'atome : au-delà, il adhère à la surface. Par conséquent, η est l'impulsion relative maximale de l'atome¹. Ici encore, nous renvoyons à la suite pour l'interprétation de $\hbar\kappa_0$.

Nous pouvons à nouveau faire une estimation numérique de η : en supposant que l'intensité du laser est de 800 mW/mm^2 et le désaccord de 10 GHz, on trouve $\eta \approx 460$.

En tenant compte de ces deux paramètres, la fonction d'onde se réécrit :

$$\phi_P(\mathbf{l}, z) = \sqrt{\frac{\kappa_0 P \sinh(\pi P)}{\pi}} K_{iP}(\eta e^{-\kappa_0 z}) \quad (5.3)$$

Nous allons maintenant calculer la probabilité de transition entre un état initial de moment P_i et un état final de moment P_f .

5.2.2 Amplitude diffractée

On montre dans le cadre de l'approximation de Born que la probabilité de transition entre deux états d'impulsion réduite P_i et P_f est donnée par l'expression [101] :

$$\mathcal{P} = \varepsilon^2 \frac{\eta^4}{P_i P_f} |\langle \phi_{P_f} | \frac{V_1(x, z)}{V_0} | \phi_{P_i} \rangle|^2 \quad (5.4)$$

Elle est naturellement proportionnelle au carré de l'élément de matrice du potentiel pris entre les deux fonctions d'ondes initiale et finale. Puisque l'approximation de Born est

¹Il s'agit bien entendu d'un paramètre non réaliste car les interactions de van der Waals ne sont pas prises en compte. Dans le cas contraire, cette quantité maximale est plus faible d'une part parce que la hauteur de la barrière de potentiel est abaissée à une valeur $V_m < V_0$, et d'autre part car l'atome peut passer par effet tunnel à travers l'onde évanescente dès que son énergie cinétique avoisine V_m [78, 79].

valable dans le seul cas où l'état atomique de départ est peu modifié par l'interaction avec le champ, l'expression 5.4 n'est applicable qu'à $m = \pm 1$. Nous verrons en effet dans la deuxième partie de ce chapitre que l'ordre deux n'est peuplé significativement que si la probabilité de transition dans les ordres ± 1 atteint plusieurs dizaines de %.

Nous allons maintenant comparer les deux cas du potentiel évanescant stationnaire et nanostructuré.

5.2.2.1 Onde évanescante stationnaire

Considérons d'abord le potentiel évanescant stationnaire. Le terme perturbateur a la forme simple suivante :

$$V_1(x, z) = \epsilon V_0 e^{-2\kappa_0 z} \cos(2qx)$$

avec $q = n_1 k_0^{\parallel}$.

La probabilité de transition est proportionnelle au carré de l'élément de matrice du potentiel, qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \phi_{P_f} | V_1(x, z) | \phi_{P_i} \rangle &= \frac{\kappa_0}{\pi} \int dz \sqrt{P_i \sinh(\pi P_i)} \sqrt{P_f \sinh(\pi P_f)} K_{iP_i}(Y(z)) K_{-iP_f}(Y(z)) e^{-2\kappa_0 z} \\ Y(z) &= \eta e^{-\kappa_0 z} \end{aligned}$$

Le calcul se fait dans un premier temps en effectuant le changement de variable $x = \eta e^{-\kappa_0 z}$. La dépendance particulière du potentiel diffractant en $(x/\eta)^2$ permet d'éliminer le paramètre η , qui apparaît à la fois en facteur de l'élément de matrice dans 5.4 et à l'intérieur de l'intégrale. La nouvelle intégrale s'évalue alors au moyen des formules [102] :

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dx K_{\mu}(x) K_{\nu}(x) x^{-\lambda} &= \frac{2^{-2-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)} \Gamma\left(\frac{1-\lambda+\mu+\nu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1-\lambda+\mu-\nu}{2}\right) \times \\ &\quad \Gamma\left(\frac{1-\lambda-\mu-\nu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1-\lambda-\mu+\nu}{2}\right) \quad (5.5) \\ \Gamma(1+iy)\Gamma(1-iy) &= \frac{\pi y}{\sinh(\pi y)} \end{aligned}$$

où $\Gamma(z)$ est la fonction gamma d'Euler, dont une expression intégrale est :

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$$

Finalement, les populations diffractées dans les ordres ± 1 ont pour expression :

$$P_{\pm 1}^{oes} = \frac{\epsilon^2 \pi^2}{64} \sinh(\pi P_i) \sinh(\pi P_f) \left[\frac{(P_i + P_f)(P_i - P_f)}{\sinh(\frac{\pi}{2}(P_i + P_f)) \sinh(\frac{\pi}{2}(P_i - P_f))} \right]^2 \quad (5.6)$$

où "oes" désigne l'onde évanescante stationnaire.

Limite semi-classique. Étant donné que les atomes sont lâchés à une hauteur importante, leur longueur d'onde de de Broglie, de l'ordre de quelques nanomètres, est petite devant l'extension verticale du potentiel. Nous sommes donc dans le régime semi-

classique, où P_i et P_f sont grandes devant l'unité^{2,3}. Il est alors possible de remplacer les sinus hyperboliques par des exponentielles, pour obtenir après simplification :

$$\mathcal{P}_{\pm 1}^{oes} = \frac{\varepsilon^2}{16} (P_i + P_f)^2 \beta_{oes}^2 \left(\frac{P_f - P_i}{2} \right)$$

$$\beta_{oes}(x) = \frac{\pi x}{\sinh(\pi x)}$$

Nous pouvons faire les commentaires suivant :

- ▶ la probabilité varie comme le carré du contraste, et augmente approximativement avec le carré de l'impulsion incidente ;
- ▶ elle est modulée par un terme décroissant, la fonction β_{oes} , représentée sur la figure 5.1. Par sa dépendance en sinus hyperbolique, elle tend exponentiellement vers 0 pour les grandes valeurs de x . De plus, elle intervient au carré dans l'expression de $\mathcal{P}_{\pm 1}^{oes}$, il est donc intéressant de noter que la demi-largeur de β_{oes}^2 est d'environ 1/2. L'argument de cette fonction est la demi-différence des impulsions réduites finale

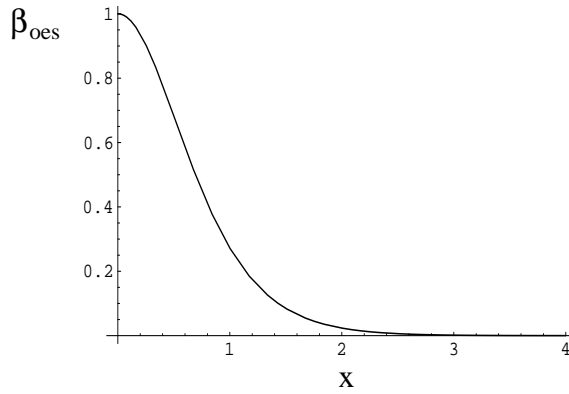


FIG. 5.1 – Fonction $\beta_{oes}(x) = \frac{\pi x}{\sinh(\pi x)}$.

et initiale. La figure 5.2 montre l'augmentation de cette quantité avec l'inclinaison du vecteur d'onde atomique incident, caractérisé par l'angle d'incidence atomique θ_a . Ainsi, β_{oes} est un "facteur d'obliquité", qui traduit le fait que la diffraction est moins efficace pour les grandes valeurs de θ_a . Du point de vue du potentiel diffractant, cela provient du fait que les transferts horizontaux et verticaux d'impulsions ne sont pas assurés par la même quantité. En effet, si l'atome reçoit une impulsion de surface $\hbar q$ de la part du réseau, la conservation de l'énergie cinétique de l'atome implique également une modification de son impulsion en z (figure 5.2). Or, le spectre vertical du potentiel est une lorentzienne de largeur finie $\hbar \kappa_0$: l'onde ne peut donc pas fournir d'impulsion supérieure à quelques $\hbar \kappa_0$ dans la direction perpendiculaire. Par conséquent, un grand angle d'incidence impliquant une grande modification de P_i , la diffraction sera d'autant moins efficace que θ_a est important. Ceci est donc une première interprétation de $\hbar \kappa_0$.

²Il s'agit de la composante verticale de l'impulsion réduite initiale. Pour les paramètres considérés, elle reste importante sauf pour les angles rasants, auquel cas elle peut s'approcher de l'unité. La valeur critique de l'angle d'incidence pour $|\mathbf{k}^i|/\kappa_0 = 90$, définie par $P_i = 1$, est $0,3^\circ$.

³Étant donné que l'angle de diffraction en incidence normale est de l'ordre du degré, la composante verticale de l'impulsion réduite reste toujours sensiblement la même dans les états initiaux et finaux, sauf en incidence rasante.

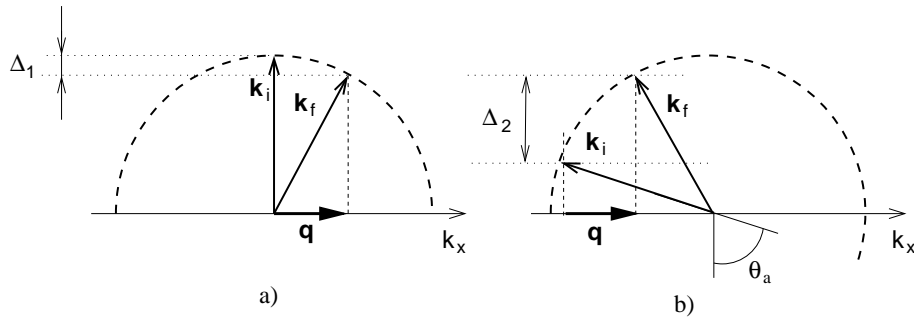


FIG. 5.2 – (a) $\hbar\Delta_1$ est la variation d’impulsion verticale en incidence normale. (b) $\hbar\Delta_2$ représente la même quantité en incidence rasante, où θ_a représente l’angle d’incidence atomique sur le réseau. On a $\hbar\Delta_2 > \hbar\Delta_1$.

- enfin, nous avons remarqué que la population diffractée ne dépend pas de l’intensité du champ. Cette propriété est spécifique au potentiel évanescent stationnaire. Techniquement, la dépendance en η disparaît dans le calcul de la probabilité avec le changement de variable $x = \eta \exp(-\kappa_0 z)$. Physiquement, cela provient de la dépendance verticale du potentiel total en $\exp(-2\kappa_0 z)$. Elle implique qu’une modification de l’intensité ne fait que déplacer le point de rebroussement classique. Étant donné qu’il n’y a pas d’évolution de la modulation avec z_r (ε est constant), la probabilité de diffraction n’est pas changée.

Cas de l’incidence non-rasante. Pour les angles d’incidence que nous allons considérer, c’est-à-dire au plus quelques dizaines de degrés, nous pouvons négliger la variation d’impulsion verticale au cours de la transition. Un développement limité de l’impulsion réduite finale est : $P_f \approx P_i \pm 2q \tan \theta_a / \kappa_0$. Par conséquent, tant que $2q \tan \theta_a / \kappa_0 \ll P_i$ on peut effectuer les approximations $P_f + P_i \pm \approx 2P_i$ et $P_f - P_i = \pm 2q \tan \theta_a / \kappa_0$. La probabilité de diffraction peut donc être réécrite :

$$P_{\pm 1}^{oes} = \left[\frac{\varepsilon}{2} P_i \beta_{oes}(\Psi) \right]^2 \quad (5.7)$$

Un nouveau paramètre sans dimension a été introduit : Ψ . Il s’écrit $\Psi = QX$, où $Q = 2q$ est le vecteur d’onde du potentiel, et $X = v_{i,x} \tau = \tan \theta_a / 2\kappa_0$ est la distance horizontale parcourue par la particule pendant la durée d’interaction (voir figure 5.3). Ainsi, Ψ est la variation de phase du potentiel vue par l’atome pendant son trajet dans l’onde évanescente. Quand $\Psi \approx \pi$, la diffraction s’annule.

La demi-largeur de β_{oes}^2 est, rappelons-le, $\Psi_{1/2} \approx 1/2$. En effectuant l’approximation des petits angles d’incidence θ_a pour l’atome, on trouve la valeur correspondante $\theta_a^{1/2} = \kappa_0 / 2q$, valant, pour une longueur d’onde de 850 nm et un angle d’incidence du faisceau laser incident de 60° , 16° environ. Ainsi, plus le potentiel est dur, c’est-à-dire localisé près de la surface, et plus la période est grande, plus l’acceptance angulaire $\theta_a^{1/2}$ du réseau sera importante.

Ce premier paragraphe nous a permis tout d’abord d’introduire et d’interpréter les paramètres sans dimension pertinents pour décrire la diffraction par une onde évanescente stationnaire, à savoir P , ε et Ψ . Nous avons aussi dégagé la loi de variation des ampli-

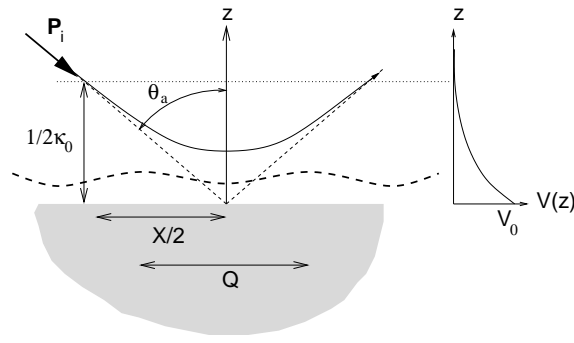


FIG. 5.3 – L'argument Ψ de β_{oes} est le produit du vecteur d'onde du potentiel $Q = 2q$ et de la distance horizontale typique parcourue par l'atome pendant la durée du rebond 2τ .

tudes de diffraction ($\propto (\epsilon P)^2$) et de l'acceptance angulaire ($\theta_a^{1/2} \approx \kappa_0/2q$). Nous allons maintenant comparer ces résultats à ceux du potentiel 1D nanostructuré.

5.2.2.2 Potentiel évanescent nanostructuré

Il s'agit d'étudier dans cette partie l'effet d'une différence de portée entre le potentiel évanescent et le potentiel modulant. Cette différence dépend de l'angle polaire φ du vecteur d'onde incident, que l'on peut choisir librement sans modifier la période du potentiel : cela illustre le découplage entre les fonctions "miroir" et "réseau". On rappelle que la période du réseau de nanostructures est choisie égale à celle de l'onde stationnaire, c'est-à-dire telle que $L = L_{ref}$. Ce choix facilite la comparaison avec le cas précédent, puisque le potentiel nanostructuré s'identifie au potentiel évanescent stationnaire quand le plan d'incidence de la lumière est perpendiculaire aux lignes du réseau. Le potentiel nanostructuré et le contraste ont la forme (voir paragraphe 5.1) :

$$V_1 = V_0 e^{-2\kappa_0 z} \tilde{\epsilon}(z) \cos(2qx) \quad \tilde{\epsilon}(z) = \epsilon e^{(\kappa_0 - \kappa_1)z} \quad (5.8)$$

Le contraste est constant pour $\varphi = 0$ ($\kappa_1 = \kappa_0$) et décroît exponentiellement avec la distance pour $\varphi > 0$ ($\kappa_1 > \kappa_0$).

L'élément de matrice du potentiel perturbateur s'exprime maintenant comme :

$$\langle \phi_{P_f} | V_1 | \phi_{P_i} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \sqrt{\frac{P_i \sinh(\pi P_i)}{\pi}} \sqrt{\frac{P_f \sinh(\pi P_f)}{\pi}} K_{iP_i}(Y(z)) K_{-iP_f}(Y(z)) e^{-(\kappa_0 + \kappa_1)z}$$

Nous pouvons à nouveau calculer ce terme de manière exacte en utilisant la formule 5.5 pour trouver une expression un peu plus compliquée :

$$P_{\pm 1}^{nano} = \frac{\epsilon^2}{16\pi^2} \Gamma^2(1 + \alpha) \sinh(\pi P_i) \sinh(\pi P_f) \eta^{2(1-\alpha)} 4^\alpha |B(Y_\Delta, Y_\Delta^*)|^4 |B(Y_\Sigma, Y_\Sigma^*)|^4 \quad (5.9)$$

avec :

$$\alpha = \frac{\kappa_1}{\kappa_0}$$

$$Y_{\Delta} = \frac{\alpha + 1 + i(P_f - P_i)}{2}$$

$$Y_{\Sigma} = \frac{\alpha + 1 + i(P_f + P_i)}{2}$$

Dans cette équation apparaît B , la fonction beta d'Euler définie par ⁴ :

$$B(z_1, z_2) = \frac{\Gamma(z_1)\Gamma(z_2)}{\Gamma(z_1 + z_2)}$$

Nous avons introduit le nouveau paramètre sans dimension α , qui exprime le rapport entre la portée de l'ordre 0 et celle de l'ordre 1. Les variations de α sur l'intervalle $[0, \pi/2]$ sont indiquées sur la figure 5.4.

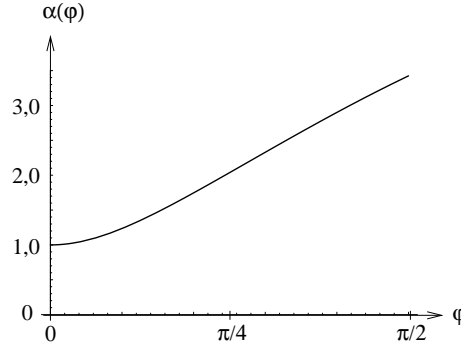


FIG. 5.4 – Variations de α en fonction de φ pour $L = L_{ref}$ et $\theta = 60^\circ$.

Cette formule 5.9 généralise celle obtenue avec l'onde évanescente stationnaire. On pourra vérifier que l'expression 5.6 se retrouve à partir de 5.9 en considérant la limite $\varphi = 0 \Rightarrow \alpha = 1$ et en utilisant la relation $B(1 + ix, 1 - ix) = \pi x / \sinh(\pi x)$ [102].

Expression des populations. Comme précédemment, nous pouvons passer à la limite semi-classique et nous limiter à des angles non rasants pour obtenir :

$$P_{\pm 1}^{nano} = \left[\frac{\varepsilon_1(z_r)}{2} P \tilde{B}(\alpha, \Psi) \right]^2 \quad (5.10)$$

avec :

$$\tilde{B}(\alpha, \Psi) = 2^{\alpha-1} B\left(\frac{\alpha+1}{2} + i\Psi, \frac{\alpha+1}{2} - i\Psi\right)$$

$$\Psi = 2q \tan \theta_a / 2\kappa_0$$

$$\tilde{\varepsilon}(z_r) = \varepsilon \left[\frac{P}{\eta} \right]^{\alpha-1}$$

L'expression 5.10 de la population diffractée par un potentiel nanostructuré a maintenant une forme tout à fait comparable à celle obtenue pour une onde évanescente stationnaire 5.7, qu'elle généralise. Nous pouvons donc l'étudier plus en détails.

⁴En utilisant la propriété $\Gamma(z^*) = \Gamma^*(z)$, nous voyons que la fonction d'Euler B a, dans ce cadre, la forme particulière $B(z, z^*) = |\Gamma(z)|^2 / \Gamma(2\Re(z))$: il s'agit donc bien d'une fonction réelle.

Influence du contraste. C'est le contraste au niveau du point de rebroussement classique qui joue un rôle dans la diffraction. Il s'agit du contraste ε en $z = 0$ diminué de la quantité $(P/\eta)^{\alpha-1}$ qui traduit le fait que la modulation a une portée plus faible que le potentiel réfléchissant. On retrouve d'ailleurs la situation de l'onde évanescente stationnaire, dans lequel ils ont la même portée, avec $\alpha = 1$ ($\varphi = 0$).

Dans le cas général où le plan d'incidence de la lumière a une orientation quelconque, la modulation est confinée au voisinage de la surface. Ainsi, pour une impulsion trop faible, le point de rebroussement sera trop élevé et l'atome ne sera pas diffracté.

Facteur d'obliquité. Le facteur β_{oes} , qui ne dépendait que du transfert d'impulsion vertical, est généralisé par la fonction \tilde{B} , qui dépend du rapport α et de la variation de phase transversale du potentiel Ψ vue par l'atome pendant l'interaction. Sur la figure 5.5 sont représentées les variations de \tilde{B} en fonction de Ψ pour différentes valeurs de α . La courbe en trait plein correspond à $\alpha = 1$, elle coïncide donc avec β_{oes} .

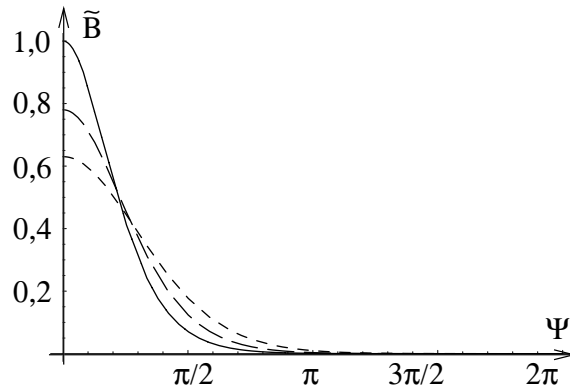


FIG. 5.5 – Tracé de la fonction \tilde{B} en fonction de Ψ pour : $\varphi = 0$ (trait plein), $\varphi = \pi/4$ (trait pointillé long) et $\varphi = \pi/2$ (trait pointillé court).

On peut distinguer deux zones en fonction de la phase Ψ . Pour $\Psi \leq \pi/4$, le facteur d'obliquité décroît quand φ augmente. Au contraire, pour $\Psi \geq \pi/4$, sa valeur augmente. Pour donner un sens physique à ce résultat, nous allons comparer quantitativement les populations diffractées avec les deux potentiels en incidence normale ainsi qu'en incidence oblique. Cette comparaison va être effectuée à contraste égal au point de rebroussement classique⁵.

► en incidence normale, le rapport des deux populations diffractées est :

$$\mathcal{P}_{\pm 1}^{nano} / \mathcal{P}_{\pm 1}^{oes} = A(\alpha)^2$$

avec

$$A(\alpha) = 2^{\alpha-1} \frac{\Gamma^2(\frac{\alpha+1}{2})}{\Gamma(\alpha+1)}$$

La fonction $A(\alpha)$ est représentée en fonction de l'angle polaire φ sur la figure 5.6-a. Il a été tracé pour $L = L_{ref}$ (courbe pleine) et $L = 250$ nm (courbe interrompue). Ce facteur est toujours inférieur à 1 pour $\varphi > 0$. Cela signifie que, à contraste égal

⁵Nous avons en effet vu dans la première partie que les contrastes calculés autour d'une valeur typique de point de rebroussement étaient de l'ordre de ceux utilisés pour faire diffracter des atomes avec un réseau évanescent stationnaire. Cela provient du très fort effet de confinement du champ au voisinage des nanostructures, qui implique des contrastes importants (quelques 10% en $z = 0$).

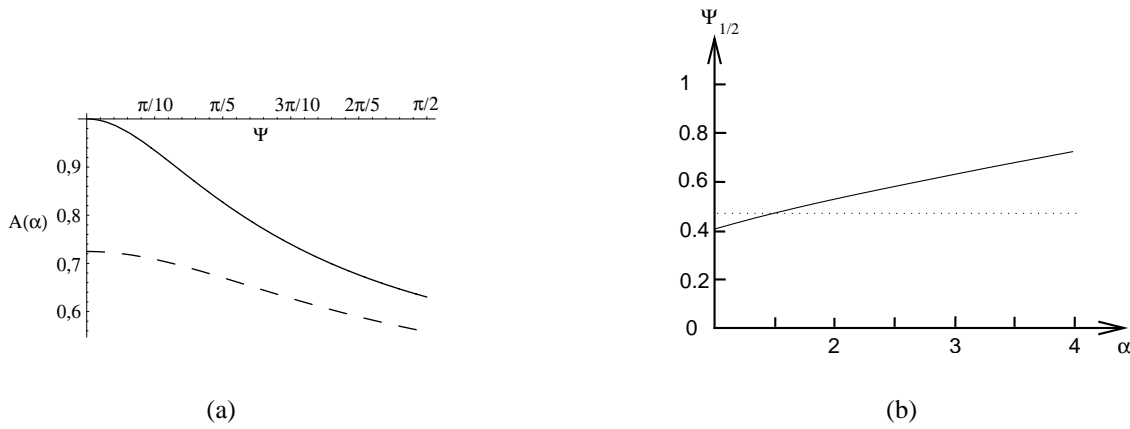


FIG. 5.6 – (a) Facteur de $A(\alpha) = 2^{\alpha-1} \Gamma^2(\frac{\alpha+1}{2}) / \Gamma(\alpha+1)$ tracé en fonction de l'angle polaire ϕ , pour un angle d'incidence de $\theta = 60^\circ$. La courbe en trait plein est tracée pour $L = \pi/n_1 k_0 \sin \theta$, celle en trait interrompu pour $L = 250$ nm. (b) Courbe représentative de $\Psi_{1/2}(\alpha)$ (trait plein) et demi-largeur de β_{oes} (en pointillés).

à z_r , la population diffractée par le potentiel nanostructuré est moins importante que celle diffractée par le potentiel stationnaire. D'où l'interprétation suivante : le contraste diminue d'autant plus avec la distance que α est grand. Dans une image semi-classique, la modulation de la phase accumulée par l'atome est moins grande, ce qui diminue la population dans les ordres ± 1 .

- lorsque l'angle d'incidence des atomes augmente, les facteurs d'obliquité diminuent l'efficacité de la diffraction. Sur la figure 5.6-b est représentée la demi-largeur $\Psi_{1/2}$ de \tilde{B}^2 en fonction de α . Cette quantité augmente de manière quasi-linéaire avec α , et elle est supérieure à celle de \mathcal{P}^{oes} . Ceci provient à nouveau de la faiblesse de la portée du potentiel modulant par rapport à celle du potentiel non perturbée. En effet, comme indiqué dans [103], c'est la largeur spectrale du potentiel modulant qui va déterminer la valeur maximale du transfert d'impulsion vertical. Dans le cas de l'onde évanescente stationnaire, celle-ci est de l'ordre $2\hbar\kappa_0$, mais ici elle vaut $\hbar(\kappa_0 + \kappa_1) > 2\hbar\kappa_0$. Par conséquent, la partie réfléchissante du potentiel peut transférer à l'atome une impulsion verticale plus importante. La diffraction reste donc efficace pour un angle d'incidence plus grand. En conséquence, l'acceptance angulaire d'un réseau de diffraction fondé sur l'interaction d'une onde évanescente avec une nanostructure périodique est plus grande que celle des réseaux classiques utilisant une onde rétrodifféchi.

Ces deux facteurs permettent d'expliquer les deux régimes observés sur la figure 5.5. Si $\Psi \leq \pi/4$, la diminution de l'accumulation de phase due à la décroissance plus rapide du contraste diminue l'effet de diffraction. Mais si $\Psi \geq \pi/4$, cet effet est compensé par la capacité qu'a le potentiel de transférer des impulsions verticales plus importantes qu'un potentiel évanescent stationnaire.

Conclusion

Cette première approche analytique de la propagation d'atomes dans un champ optique périodique nous a permis de dégager les paramètres sans dimension pertinents pour

décrire le processus de diffraction. La principale conclusion de ce paragraphe est que, si la diffraction par un réseau nanostructuré est moins efficace en incidence normale, toutes choses égales par ailleurs, elle autorise toutefois des angles d'incidence atomiques plus importants par rapport à la normale à la surface.

L'approximation de Born n'est valable que pour les faibles populations diffractées dans les ordres ± 1 . La méthode que nous allons maintenant voir permet d'étendre les résultats précédents aux phases accumulées plus importantes et de décrire des ordres de diffraction supérieurs à 1.

5.3 Approximation du réseau de phase mince

Nous allons faire un raisonnement analogue à l'optique, en considérant la trajectoire de l'atome comme un rayon lumineux. On peut supposer que le rayon est faiblement dévié par la modulation du potentiel : la diffraction provient alors d'une accumulation de phase le long de la trajectoire dépendante de la position initiale de la particule.

Formellement, cette méthode est dérivée des intégrales de chemin de Feynman [97, 104]. Elle a été appliquée au potentiel stationnaire par C. Henkel, J.Y. Courtois et A. Aspect [100]. C'est une approche semi-classique, qui s'applique donc à un atome dont la longueur d'onde de de Broglie est suffisamment petite pour "échantillonner" précisément le potentiel diffractant ($P_i \gg 1$). Dans cette limite, il est possible de décrire la fonction d'onde de l'atome comme une superposition d'ondes planes dont la phase est l'action calculée sur la trajectoire *classique* de la particule. La description classique du mouvement de l'atome se fait au moyen de la mécanique lagrangienne. Le lagrangien de la particule est :

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = T - V$$

où T est l'énergie cinétique de la particule, et V l'énergie potentielle. La résolution des équations de Lagrange permet de trouver les équations du mouvement $\{\mathbf{r}(t), \dot{\mathbf{r}}(t)\}$. La fonction d'onde dans le formalisme WKB s'écrit alors :

$$\Psi(\mathbf{r}_f, t_f) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}_f, t_f | \mathbf{p}_i, t_i) \right] \quad (5.11)$$

$$S(\mathbf{r}_f, t_f | \mathbf{p}_i, t_i) = \mathbf{p}_i \mathbf{r}_i + \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}(\mathbf{r}_{cl}, \dot{\mathbf{r}}_{cl}, t) \quad (5.12)$$

Le principal inconvénient de cette méthode par rapport à la diffraction d'atomes est que la trajectoire classique dans le potentiel complet n'est pas connue analytiquement. Le calcul de la fonction d'onde par la méthode WKB n'est donc applicable que par intégration numérique des équations de Lagrange. Pour résoudre ce problème, on approxime la trajectoire réelle par la trajectoire de la particule dans l'onde évanescente non modulée, connue analytiquement. Nous reprenons brièvement l'article sus-cité et son application au potentiel évanescent stationnaire.

5.3.1 Présentation de l'approximation du réseau de phase mince

À nouveau, le terme modulant est traité perturbativement. Sa contribution dans le lagrangien est isolée de manière à écrire :

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \mathcal{L}_0(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) - V_1(\mathbf{r})$$

Notons $\{\mathbf{r}_0(t), \dot{\mathbf{r}}_0(t)\}$ la trajectoire de l'atome dans le potentiel non perturbé. Nous allons approximer l'expression 5.11 en calculant l'action non pas sur la trajectoire exacte mais sur celle parcourue par l'atome dans le champ non modulé.

Pour effectuer perturbativement le calcul, on développe la phase et l'action en fonction du paramètre perturbatif ε , ici le contraste de l'intensité :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \varepsilon \mathbf{r}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{r}_2 + \dots \quad (5.13)$$

$$S = S_0 + \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 S_2 + \dots \quad (5.14)$$

En injectant le développement de \mathbf{r} en ε dans l'action S , nous pouvons calculer S_0 , S_1 et S_2 :

$$S_0 = \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_0 + \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}_0(\mathbf{r}_0(t), \dot{\mathbf{r}}_0(t)) \quad (5.15)$$

$$S_1 = - \int_{t_i}^{t_f} dt V_1(\mathbf{r}_0(t)) \quad (5.16)$$

$$S_2 = -\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \mathbf{r}_1 \cdot \nabla V_1(\mathbf{r}_0(t)) \quad (5.17)$$

Le premier terme S_0 représente l'action de la particule dans l'onde évanescente non modulée. Le terme S_1 est responsable de la diffraction au premier ordre, et représente simplement l'intégrale du potentiel perturbateur sur la trajectoire de référence. Pour que l'approximation soit valable, il faut que le terme d'ordre deux soit négligeable devant \hbar .

Domaine de validité. Cette condition s'exprime comme :

$$\frac{1}{2} \varepsilon^2 \left| \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{r}_1 \cdot \nabla V_1 \right| \ll \hbar \quad (5.18)$$

Un majorant de cette expression peut être estimé en observant que $\varepsilon \int dt \nabla V_1$ correspond au transfert d'impulsion lors de l'interaction, tandis que $|\varepsilon \mathbf{r}_1|$ est majoré par l'écart maximal entre les deux trajectoires en sortie de la zone d'interaction. On a donc :

$$\frac{1}{2} \Delta p_{max} \Delta r_{max} \ll \hbar$$

Ainsi, pour décrire la diffraction jusqu'à l'ordre n_{max} , il faudra que l'écart entre les trajectoires réelle et non perturbée vérifie : $\Delta r_{max} \ll 2L/n_{max}$, où L est la période du potentiel. Il est plus facile de transposer cette inégalité dans le domaine des impulsions en faisant intervenir le temps d'interaction $\tau = m/p_i 2\kappa_0$ et en remarquant que $\Delta r_{max} \approx \Delta p_{max} \tau$. Nous obtenons alors :

$$\frac{\Delta p_{max}^2}{4\kappa_0 p_i} \ll \hbar$$

En tenant compte de $\Delta p_{max} \approx \hbar 2\pi/L$, et avec $p_i = 2\pi/\lambda$, ce critère s'écrit :

$$n_{max}^2 \frac{\pi \lambda_{dB}}{\kappa_0 L^2} \ll 1$$

Une estimation de ce paramètre donne 0,1 pour le membre de gauche. Ainsi, la méthode semble limitée à un ou deux ordres de diffraction. Cependant, la comparaison avec la

simulation numérique montrera qu'elle est valable au-delà de cette limite. Ceci provient du fait que ce critère est un majorant de l'erreur.

Expression des amplitudes de diffraction. On montre que la composante de la fonction d'onde diffractée sur l'état de moment $\mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{p}^{(i)} + n\hbar 2\pi/L \mathbf{e}_x$ est simplement la transformée de Fourier de l'état final. La probabilité de transition est alors le carré de cette composante :

$$p_n = |a_n|^2 \text{ avec } a_n = \frac{1}{L} \int_0^L dx_f \Psi(\mathbf{r}_f) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}^{(n)} \cdot \mathbf{r}_f} \quad (5.19)$$

Nous allons maintenant appliquer ce formalisme aux potentiels évanescents stationnaires et nanostructurés.

5.3.2 Calcul des amplitudes de diffraction

Les trajectoires non perturbées sont les solutions des équations de Lagrange pour le lagrangien $\mathcal{L}_0 = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - V_0 e^{-2\kappa_0 z}$. Elles s'écrivent :

$$\begin{cases} x_0(t) = x_i + \frac{p_{i,x}}{m} t \\ z_0(t) = -\frac{1}{2\kappa_0} \ln \left[\frac{p_{i,z}^2}{2mV_0} \operatorname{sech}^2(t/2\tau) \right] = -\frac{1}{\kappa_0} \ln \left[\frac{p}{\eta} \operatorname{sech}(t/2\tau) \right] \end{cases} \quad (5.20)$$

Le paramètre $\tau = m/2\kappa_0 p_{i,z}$ représente l'ordre de grandeur du temps que l'atome passe dans l'onde.

Dans un premier temps, nous rappellerons de nouveau les résultats établis par C. Henkel *et al.* sur le potentiel évanescents stationnaire. Puis nous examinerons comment s'applique l'approximation de phase mince à l'atome évoluant dans le potentiel nanostructuré, en ne considérant dans un premier temps qu'un seul ordre modulant.

5.3.2.1 Onde évanescents stationnaire

Le terme d'ordre un de l'action s'écrit :

$$\begin{aligned} S_1 &= -V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-2\kappa_0 z_0(t)} \cos(2qx_0(t)) \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \cos(2q[x_i + \frac{p_{i,x}}{m} t]) \frac{p_{i,z}^2}{2m} \operatorname{sech}^2(t/2\tau) \end{aligned}$$

La fonction sécante hyperbolique étant paire, cette expression, en développant le cosinus, se simplifie en :

$$S_1 = -\frac{p_{i,z}^2}{m} \cos(2qx_i) \int_0^{+\infty} \frac{\cos(2q\frac{p_{i,x}}{m} t)}{\cosh^2(t/2\tau)} dt \quad (5.21)$$

Cette intégrale se calcule en utilisant les formules [105] :

$$\int_0^{+\infty} \frac{\cos(ax) dx}{\cosh^\nu(\beta x)} = \frac{2^{\nu-2}}{\beta \Gamma(\nu)} \Gamma\left(\frac{\nu}{2} + \frac{ia}{2\beta}\right) \Gamma\left(\frac{\nu}{2} - \frac{ia}{2\beta}\right) \quad (5.22)$$

$$\Gamma[1 + iy]\Gamma[1 - iy] = \frac{\pi y}{\sinh(\pi y)}$$

ce qui permet d'obtenir l'expression du premier ordre de l'action :

$$S_1 = -\beta_{oes}(\tan \theta q/\kappa_0) \frac{P_{i,z}}{\kappa_0} \cos(2qx_i) \quad (5.23)$$

où β_{oes} est la fonction d'obliquité précédemment définie. Par transformation de Fourier en x_i , nous arrivons finalement à l'expression des amplitudes de diffraction dans les différents ordres n :

$$P_n = J_n^2 \left(\varepsilon \beta_{oes}(\tan \theta q/\kappa_0) \frac{P_{i,z}}{\kappa_0} \right) \quad (5.24)$$

où J_n est la fonction de Bessel d'ordre n . Ces fonctions sont représentées sur la figure 5.7-a pour les 5 premiers ordres⁶. Ces formes de courbes de diffraction sont bien connues en optique. Elles décrivent par l'exemple la diffraction d'une onde plane par une onde acoustique [98]. En fonction des paramètres réduits P et Ψ , la probabilité de transition vers le niveau n se réécrit :

$$P_n = J_n^2(\varepsilon P \beta_{oes}(\Psi)) \quad (5.25)$$

L'argument dépend linéairement de P et de ε . Une propriété classique des fonctions de Bessel est que le premier maximum de $J_m(y)$ est atteint pour $y \approx m$. Par conséquent, pour un atome en incidence normale sur le réseau, ayant une impulsion réduite $P_i = 100$, l'ordre 1 de diffraction sera peuplé au maximum pour un contraste de 0,01. Ceci montre bien que le potentiel modulant n'a pas besoin d'être très contrasté pour produire des effets de diffraction notables. Un contraste 10 fois supérieur disperserait les atomes dans 20 ordres (10 dans chaque direction), ce qui est inutilisable si l'on veut fabriquer une séparatrice atomique. En revanche, pour des paramètres bien choisis, la population diffractée peut être maximale dans les ordres ± 1 et atteindre environ 60%, c'est-à-dire plus de la moitié de la population initiale.

Sur la figure 5.7-b sont représentés les premiers ordres de diffraction pour différentes valeurs de la phase Ψ . Nous avons supposé que l'angle d'incidence du laser dans le quartz ($n_1 = 1,46$) était de 60° . La portée de l'onde évanescente est alors de 176 nm, celle du potentiel de 88 nm. Les atomes sont supposés être lâchés à 3 mm de la surface, ce qui correspond à une longueur d'onde de de Broglie de 12,5 nm en arrivant au niveau de la zone d'interaction. Leur impulsion réduite moyenne est de $P_i \approx 88$. Le temps d'interaction τ est de $0,36 \mu s$. L'intensité du laser est de 800 mW/mm^2 , le contraste de $\varepsilon = 0,05$. La hauteur de rebroussement est de $z_r = 290 \text{ nm}$, l'impulsion réduite maximale est de $\eta = 463$. Cette figure montre qu'en incidence normale de nombreux canaux de diffractions sont ouverts, le paquet d'ondes est donc diffracté dans de nombreuses directions. Lorsque l'on augmente l'angle d'incidence des atomes, de telle manière que la phase Ψ varie de 0 à $\pi/2$, les différents ordres se dépeuplent jusqu'à ce que la réflexion soit quasiment spéculaire.

⁶Il est facilement vérifiable que les expressions des populations diffractées dans l'ordre 1 calculées avec la méthode perturbative sont retrouvées à partir de 5.24 en effectuant le développement limité au premier ordre $J_{\pm 1}^2(y) \sim y^2/4$.

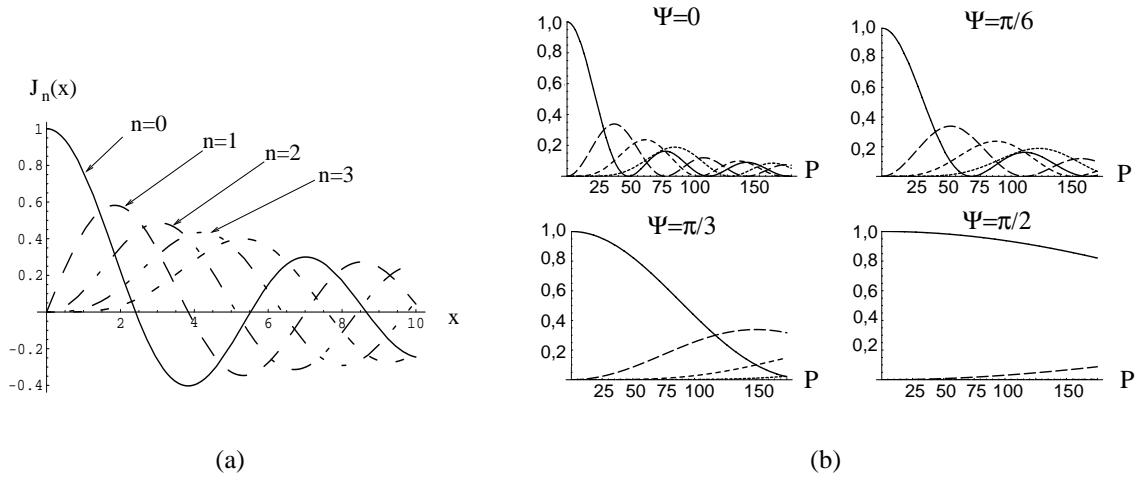


FIG. 5.7 – (a) Fonctions de Bessel d’ordre 0 à 4. (b) Population diffractée dans les ordres 0 à 3 par une onde évanescente stationnaire, en fonction de l’impulsion, pour un contraste de 0,05 et pour différentes valeurs de la phase transversale Ψ .

Ainsi, le seul changement important par rapport à l’approximation de Born est que la population diffractée dans l’ordre n est maintenant proportionnelle au carré de la fonction de Bessel J_n . Nous allons maintenant appliquer la théorie du réseau de phase mince au potentiel nanostructuré.

5.3.2.2 Potentiel nanostructuré

Le terme d’ordre un de l’action est :

$$\begin{aligned} S_1 &= -V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[e^{-2\kappa_0 z_0(t)} \right]^{(\alpha+1)/2} \cos(2qx_0(t)) \\ &= -V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \cos\left(2q\left[x_i + \frac{p_{i,x}}{m}t\right]\right) \left[\frac{P}{\eta} \operatorname{sech}(t/2\tau) \right]^{\alpha+1} \end{aligned}$$

En utilisant à nouveau la relation 5.22, on trouve, en fonction des paramètres réduits :

$$S_1 = -\hbar \left[\frac{P}{\eta} \right]^{\alpha-1} P 2^{\alpha-1} B \left[\frac{\alpha+1}{2} + i\Psi, \frac{\alpha+1}{2} - i\Psi \right] \cos(2qx_i)$$

Et après transformation de Fourier en x_i :

$$p_n = J_n^2(\varepsilon_1(z_r) P \tilde{B}(\alpha, \Psi)) \quad (5.26)$$

où ⁷ :

$$\tilde{B}(\alpha, \Psi) = 2^{\alpha-1} B \left[\frac{\alpha+1}{2} + i\Psi, \frac{\alpha+1}{2} - i\Psi \right] \quad \text{et} \quad \varepsilon_1(z_r) = \varepsilon_1 \left[\frac{P}{\eta} \right]^{\alpha-1}$$

⁷On vérifiera de nouveau la coïncidence de ce résultat avec la population prédite par la méthode perturbative dans la limite $P_{\pm 1} \rightarrow 0$.

Dépendance en η . Nous avons déjà montré que le terme $(P/\eta)^{\alpha-1}$ intervenait dans l'expression du contraste du potentiel à la hauteur du point de rebroussement. Mais nous pouvons également considérer globalement la dépendance en impulsion, qui est implicitement une dépendance en énergie. Examinons le comportement de la diffraction vis-à-vis de l'énergie cinétique incidente. Pour les faibles valeurs de E_c , nous pouvons effectuer un développement à l'ordre deux de l'ordre 0 :

$$J_0(x) \stackrel{0}{\sim} 1 - \frac{1}{2}A^2E_c^\alpha$$

où A est une constante de proportionnalité. La dérivée de la probabilité est proportionnelle à $E_c^{\alpha-1}$, elle diverge donc pour $\alpha = 1$, c'est-à-dire quand la portée du contraste est infinie. Ainsi, pour le potentiel évanescents stationnaire, la diffraction se produit dès que l'énergie incidente est non nulle, puisque l'atome voit tout de suite la modulation de l'onde. Dans le cas du potentiel nanostructuré, le contraste est nul à l'infini, par conséquent une faible énergie incidente ne suffit pas à faire diffracter l'atome. Il doit approcher la surface de moins de quelques $1/(\kappa_1 - \kappa_0)$ pour percevoir la modulation du potentiel.

Facteur d'obliquité. Contrairement à ce que nous avons vu dans l'approximation de Born, la fonction d'obliquité n'agit pas directement sur la population diffractée mais uniquement sur la phase accumulée par l'atome tout au long de sa trajectoire. Quand l'angle d'incidence de l'atome sur le potentiel augmente, les facteurs β_{oes} et \tilde{B} diminuent la phase accumulée et annulent progressivement la probabilité de diffraction. Ces fonctions sont représentées figure 5.5.

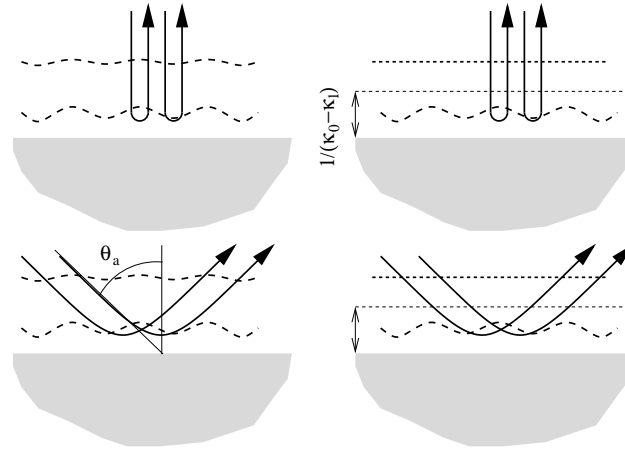


FIG. 5.8 – Interprétation de la disparition de la diffraction à grand angle d'incidence atomique θ_a dans l'approximation du réseau de phase mince.

L'explication donnée dans le cadre de l'approche perturbative peut être transposée au modèle présent. Considérons deux trajectoires atomiques de points de départ différents, comme indiqué sur la figure 5.8. En incidence normale, chacune des trajectoires voit un champ exponentiel d'amplitude différente à cause de l'ondulation du potentiel dans la direction x et ainsi accumule une phase différente : le front d'onde est modulé, signe d'une superposition d'ondes planes émergentes de directions de propagation distinctes. Pour un angle d'incidence plus grand, les atomes vont voir en plus une variation sinusoïdale en x . Si l'angle d'incidence θ_a est suffisamment faible pour que chacune des deux trajectoires ne voit qu'une petite partie de la modulation, la phase accumulée sera encore différente.

Mais à partir du moment où elles traversent plusieurs périodes, la modulation est moyennée à une valeur identique pour les deux particules. Dans ce cas, la phase accumulée est indépendante de la trajectoire atomique et la diffraction ne se produit plus. Cet effet, bien connu en diffraction atomique et observé expérimentalement, est responsable de la disparition de la diffraction en incidence rasante.

La différence avec le potentiel stationnaire est qu'ici le contraste est nul au-dessus de quelques $1/(\kappa_1 - \kappa_0)$. Si l'effet de moyenne se produit dans les deux cas, il a lieu sur une portion plus faible de la trajectoire dans le cas nanostructuré étant donné que le contraste est localisé plus près de la surface. Par conséquent, la disparition de la diffraction se produira pour un angle plus élevé. On retrouve donc le fait que l'acceptance angulaire est augmentée avec un contraste de portée finie.

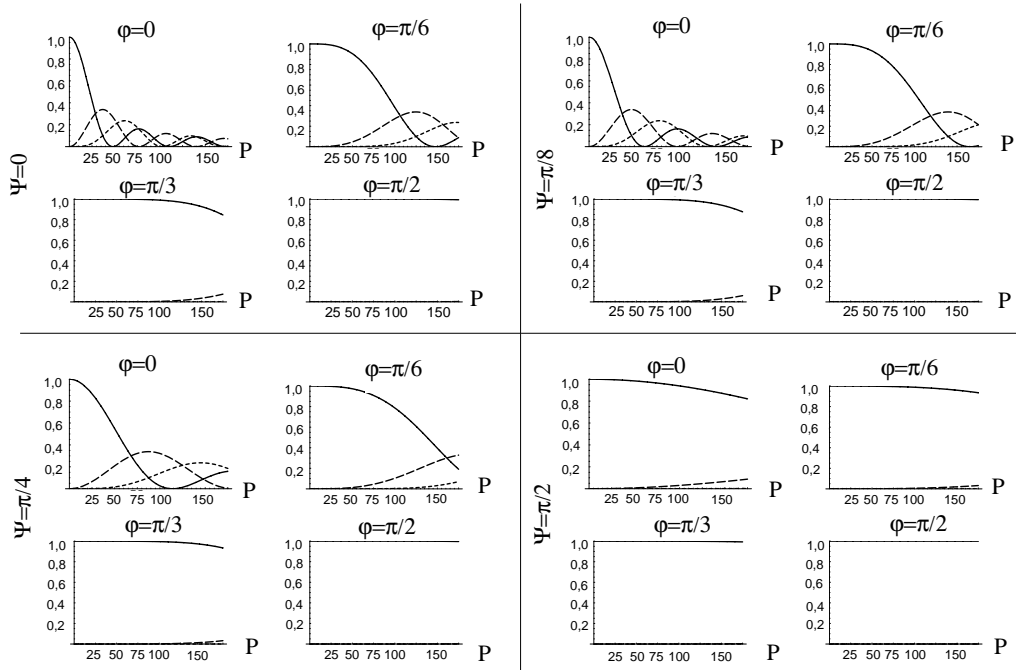


FIG. 5.9 – Tracés des ordres zéro à deux de diffraction, en fonction de l'angle d'incidence φ de l'onde sur le réseau, et de la variation de phase Ψ .

Courbes de diffraction. Sur la figure 5.9 sont représentés les premiers ordres de diffraction en fonction de l'angle polaire φ du champ incident, pour les mêmes paramètres que précédemment. La périodicité choisie est $L = L_{ref}$. On retrouve les courbes du potentiel stationnaire pour $\varphi = 0$. Quand l'angle polaire φ varie, l'allure des courbes de diffraction change énormément. En particulier, pour un éclairage parallèle, et pour l'impulsion moyenne $P \approx 90$, la réflexion est quasi spéculaire. Entre ces deux valeurs, il est possible de maximiser la population diffractée dans l'ordre 1, ce qui est à peu près le cas pour $\varphi = \pi/6$, en incidence normale.

Lorsque l'on augmente l'angle d'incidence, ce qui revient à augmenter la phase Ψ , la diffraction disparaît peu à peu, à cause de l'effet de moyenne décrit plus haut. Pour $\Psi = \pi/2$, ce qui correspond à peu près à $\theta_a = 44^\circ$, la réflexion est spéculaire quel que soit α .

Nous avons vu que, outre le degré de liberté supplémentaire φ , les réseaux nanostructurés permettent une plus grande souplesse sur le dessin du motif. On peut se demander en particulier comment ces résultats s'étendent-ils à un réseau bidimensionnel ?

5.3.3 Extension à deux dimensions

Considérons le potentiel obtenu par interaction d'un faisceau incident avec un réseau de nanostructures bidimensionnel. Nous avons vu dans la première partie que pour $\varphi \in [0, \pi/2]$, les deux ordres de plus longue portée sont (1,0) et (0,1). Bien que la description du champ électrique par ces uniques harmoniques soit très approximative, nous verrons que la description de la diffraction qui en résulte est en bon accord avec les courbes obtenues par simulation numérique. En ne considérant que ces deux contributions, le potentiel modulant s'écrit :

$$V_1(x, y, z) = V_0 e^{-2\kappa_0 z} [\tilde{\epsilon}_{1,0}(z) \cos(2qx) + \tilde{\epsilon}_{0,1}(z) \cos(2qy)] \quad (5.27)$$

avec :

$$\tilde{\epsilon}_{1,0}(z) = \epsilon_{1,0} e^{(\kappa_0 - \kappa_{1,0})z} \quad \text{et} \quad \tilde{\epsilon}_{0,1}(z) = \epsilon_{0,1} e^{(\kappa_0 - \kappa_{0,1})z} \quad (5.28)$$

La linéarité de l'action par rapport au potentiel conduit immédiatement à :

$$S_1 = -\hbar P \left\{ \epsilon_{1,0}(z_r) \tilde{B}[\alpha_{1,0}, \Psi_x] \cos(2qx_i) + \epsilon_{0,1}(z_r) \tilde{B}[\alpha_{0,1}, \Psi_y] \cos(2qy_i) \right\} \quad (5.29)$$

avec $\Psi_x = qp_i^x/p_i^z \kappa_0$ et $\Psi_y = qp_i^y/p_i^z \kappa_0$. La fonction d'onde émergente se factorise en un produit de deux exponentielles de x_i et y_i . Les populations diffractées sont donc données par le produit des populations diffractées indépendamment dans chaque direction :

$$P_{m,n} = J_{|m|}^2(\epsilon_{1,0}(z_r) P \tilde{B}[\alpha_{1,0}, \Psi_x]) J_{|n|}^2(\epsilon_{0,1}(z_r) P \tilde{B}[\alpha_{0,1}, \Psi_y]) \quad (5.30)$$

Il n'y a donc pas de nouveauté qualitative par rapport à ce que nous avons étudié en une dimension.

5.4 Conclusion

Nous avons présenté deux méthodes d'approximation pour traiter la diffraction atomique par un miroir atomique modulé localisé près d'une surface. La première méthode fondée sur le traitement de l'équation de Schrödinger dans l'approximation de Born ne permet que de décrire les populations des ordres ± 1 . Cependant, ce premier modèle nous a donné l'occasion de mettre en évidence les paramètres pertinents intervenant dans le processus de diffraction, à savoir :

- ▶ le contraste à la hauteur de rebroussement $\tilde{\epsilon}(z_r)$,
- ▶ l'impulsion réduite P exprimant le rapport entre la quantité de mouvement initiale de l'atome et l'impulsion associée à la décroissance exponentielle du potentiel non-modulé. Pour notre gamme de paramètres, $P \gg 1$: nous sommes dans un régime semi-classique. Quand P augmente, l'atome pénètre plus profondément dans le potentiel et la phase accumulée augmente, par conséquent les ordres de diffraction plus élevés sont plus peuplés,

- ▶ la variation de phase Ψ du potentiel vue par l'atome pendant la durée du rebond. Elle intervient dans le facteur d'obliquité qui traduit la disparition de la diffraction quand l'angle d'incidence atomique augmente. En incidence normale $\Psi = 0$. Plus cette phase est grande, moins la diffraction est efficace,
- ▶ le rapport α des coefficients de décroissance des ordres 0 et 1 de l'onde de surface. Plus ce paramètre augmente, plus la modulation a une portée courte et plus l'acceptance angulaire est importante.

L'intérêt de la méthode de diffraction atomique par un réseau optique nanostructuré qui est proposée dans ce mémoire repose sur trois points complémentaires. Tout d'abord l'existence d'un "réservoir de contraste" au niveau de la surface : le confinement du champ par les nanostructures induit une modulation importante de l'intensité au voisinage de la surface. Ainsi, même si le contraste décroît exponentiellement avec la distance, sa valeur au niveau du point de rebroussement reste largement suffisante pour que la diffraction existe. Ensuite le découplage miroir/réseau, traduisant le fait que période et orientation du réseau sont fixés indépendamment des paramètres du champ incident. Le paramètre α peut être alors réglé de manière à maximiser la population diffractée dans un ordre. De plus, la portée plus courte de la modulation permet de transférer plus d'impulsion verticale à l'atome et ainsi d'augmenter l'acceptance angulaire du dispositif.

Enfin, la souplesse sur la réalisation du motif rend possible la création de réseaux de diffraction bidimensionnels.

Cependant, le modèle de l'atome à un niveau sous-jacent à ces calculs ne permet pas de prendre en compte les effets dûs spécifiquement à la polarisation de la lumière. Leur importance a été clairement mise en évidence par plusieurs expériences : si le modèle à un niveau prédit une disparition de la diffraction pour des angles d'incidence atomique dépassant 50° , il est incapable d'expliquer les résultats obtenus à Villetaneuse [106], à Orsay [107] et à Bonn [108] démontrant expérimentalement l'existence de la diffraction en incidence rasante. Des études théoriques ont montré la nécessité de prendre en compte une structure atomique interne comportant plusieurs niveaux fondamentaux pour expliquer ce résultat [109, 27].

La partie suivante n'a pas pour objectif de compléter ces études très raffinées. Toutefois, en regard de ce problème lié à la structure interne des atomes et des cartes détaillées des champs que nous avons obtenues dans la première partie, nous nous sommes intéressés à une description plus réaliste des expériences accessibles dans notre laboratoire. Cette étude est abordée par la simulation numérique.

Chapitre 6

Traitement numérique

Le principe est de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps en propageant, au moyen d'un opérateur d'évolution temporelle, une fonction d'onde initiale. Cette méthode a déjà été utilisée par C. M. Savage, D. Gordon et T.C. Ralph [110] afin de retrouver les résonances Doppler observées par Stenlake *et al.* en 1994 [74]. L'excellent accord avec les résultats expérimentaux avait été obtenu sans paramètre libre, ce qui démontrait la fiabilité de la méthode. D'autres techniques de calcul sont détaillées dans les références [111] et [112].

Nous commencerons par présenter la méthode de calcul numérique des amplitudes de diffractions, puis nous exposerons les résultats des simulations numériques [113], comparés ensuite avec les calculs analytiques détaillés dans la partie précédente.

6.1 Méthode de calcul

Rappelons dans un premier temps que l'on étudie la diffraction d'un atome de Césium entre deux états de structure fine $S_{1/2}$ et $P_{3/2}$. À faible paramètre de saturation il est possible d'éliminer adiabatiquement les états excités, et de ne plus considérer que l'évolution des composantes de l'atome sur les deux états fondamentaux $m_s = \pm 1/2$. Le potentiel effectif correspondant s'écrit :

$$\mathbf{V}_{eff}(\mathbf{r}) = \frac{d^2}{\hbar\delta} \left[\begin{array}{c} \frac{3|E_-(\mathbf{r})|^2 + 2|E_0(\mathbf{r})|^2 + |E_+(\mathbf{r})|^2}{3} \\ \frac{\sqrt{2}}{3} \{ E_+(\mathbf{r})E_0^*(\mathbf{r}) + E_-(\mathbf{r})E_0(\mathbf{r}) \} \end{array} \quad \frac{\sqrt{2}}{3} \left\{ \begin{array}{c} E_-(\mathbf{r})E_0^*(\mathbf{r}) + E_+(\mathbf{r})E_0(\mathbf{r}) \\ \frac{|E_-(\mathbf{r})|^2 + 2|E_0(\mathbf{r})|^2 + 3|E_+(\mathbf{r})|^2}{3} \end{array} \right\} \right] \quad (6.1)$$

La méthode utilisée est basée sur une résolution directe de l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} \begin{bmatrix} \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} + \mathbf{V}_{eff} \cdot \begin{bmatrix} \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \quad (6.2)$$

Le potentiel diffractant étudié décroît exponentiellement avec la distance, il est donc localisé au voisinage de la surface dans une couche dont l'épaisseur est de l'ordre de quelques $1/\kappa_0$. Cette région sera appelée "zone d'interaction". Au delà, nous pouvons considérer que le potentiel est nul et que l'atome évolue librement dans la "zone asymptotique" (figure 6.1).

Le principe est de propager à travers la zone d'interaction une fonction d'onde initiale, se trouvant au départ dans la zone asymptotique. Cette propagation se fait au moyen d'un opérateur d'évolution temporelle approché : l'opérateur symétriquement partagé.

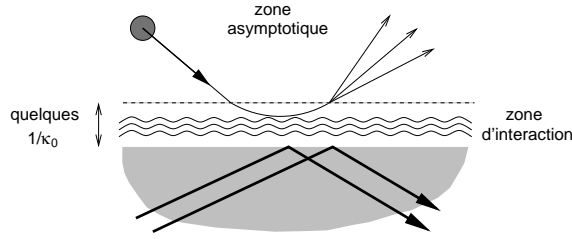


FIG. 6.1 – La décroissance exponentielle du potentiel permet la séparation de l'espace en une zone d'interaction et une zone asymptotique.

L'opérateur symétriquement partagé. Le spineur de l'état final peut être exprimé en fonction du spineur de l'état initial au moyen d'un opérateur d'évolution temporelle \mathbf{U} : $\Psi(t_f) = \mathbf{U}(t_f, t_i)\Psi(t_i)$. Pour un hamiltonien \mathbf{H} indépendant du temps, son expression est connue. Il s'écrit :

$$\mathbf{U}(t, t_0) = e^{-i\mathbf{H}(t-t_0)/\hbar} = e^{-i[\mathbf{T} + \mathbf{V}_{eff}](t-t_0)/\hbar} \quad (6.3)$$

Cependant, cet opérateur est difficile à évaluer car les composantes d'énergie cinétique et potentielle ne commutent pas. Pour une application à la simulation numérique, il est indispensable de le remplacer par un autre opérateur $\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0)$ plus facilement calculable. Ce ne sera bien entendu qu'une approximation de 6.3, d'autant plus précise que $|t - t_0|$ sera petit. Le principe est alors d'appliquer N fois $\tilde{\mathbf{U}}$ à la fonction d'onde de départ pour un pas de temps Δt donné :

$$\Psi(N\Delta t) = \underbrace{\tilde{\mathbf{U}}(\Delta t) \times \cdots \times \tilde{\mathbf{U}}(\Delta t)}_{N \text{ fois}} \Psi(0) \quad (6.4)$$

Que prendre comme approximation de \mathbf{U} ? Une première idée serait d'écrire $\mathbf{U}(t_0 + \Delta t, t_0) \approx e^{-i\mathbf{T}\Delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{V}_{eff}\Delta t/\hbar}$. Ces deux opérateurs sont identiques jusqu'au premier ordre en Δt . L'inconvénient en est que le membre de droite n'est pas hermitique : un algorithme utilisant cet opérateur ne conserverait pas la norme de la fonction d'onde.

A.D. Bandrauk et H. Shen [114] ont montré que l'opérateur d'évolution 6.3 pouvait être décomposé en un produit séparé d'exponentielles en \mathbf{T} et \mathbf{V}_{eff} , et ce, à n'importe quel ordre en Δt . Cette décomposition se fait à l'ordre n selon le schéma récursif suivant :

$$e^{\lambda(\mathbf{A} + \mathbf{B})} = \mathbf{S}_{2n+1}(\lambda) + O(\lambda^{2n+1}),$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{2n+1}(\lambda) &= \mathbf{S}_{2n-1}[\lambda s_{2n+1}] \mathbf{S}_{2n-1}[\lambda(1 - 2s_{2n+1})] \mathbf{S}_{2n-1}[\lambda s_{2n+1}], \\ &2(s_{2n+1})^{2n-1} + (1 - 2s_{2n+1})^{2n-1} = 0 \\ \mathbf{S}_3(\lambda) &= e^{\lambda\mathbf{A}/2} e^{\lambda\mathbf{B}} e^{\lambda\mathbf{A}/2} \end{aligned}$$

L'avantage de cette décomposition est que, cette fois, l'opérateur approché \mathbf{S}_{2n+1} est unitaire, c'est-à-dire qu'il vérifie $\mathbf{S}_{2n+1}(\mathbf{S}_{2n+1})^\dagger = \mathbf{1}$. Dans le cas présent, nous adopterons comme propagateur le premier terme de la série :

$$\mathbf{S}_3(\Delta t) = e^{-i\mathbf{T}\Delta t/2\hbar} e^{-i\mathbf{V}\Delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{T}\Delta t/2\hbar}$$

qui s'identifie avec 6.3 jusqu'à l'ordre 2 en Δt . C'est l'opérateur partagé, bien connu en physique moléculaire, optique et physique atomique.

L'avantage de cette forme, outre sa précision, vient du fait que l'on peut traiter la propagation uniquement par des multiplications d'exponentielles calculables de manière exacte. L'évaluation de $e^{-i\mathbf{V}\Delta t/\hbar}$ ne pose en effet aucun problème dans l'espace direct, tandis que celle de $e^{-i\mathbf{T}\Delta t/2\hbar}$ se fait dans l'espace de Fourier¹. Le schéma 6.4 devient :

$$\Psi(N\Delta t) = e^{-i\mathbf{T}\Delta t/2\hbar} \times e^{-i\mathbf{V}\Delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{T}\Delta t/\hbar} \times \dots \times e^{-i\mathbf{T}\Delta t/\hbar} \times e^{-i\mathbf{V}\Delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{T}\Delta t/2\hbar} \Psi(0) \quad (6.5)$$

Entre deux multiplications, la fonction d'onde subit une transformée de Fourier directe ou inverse. La figure 6.2 résume les différentes opérations se déroulant pendant le calcul.

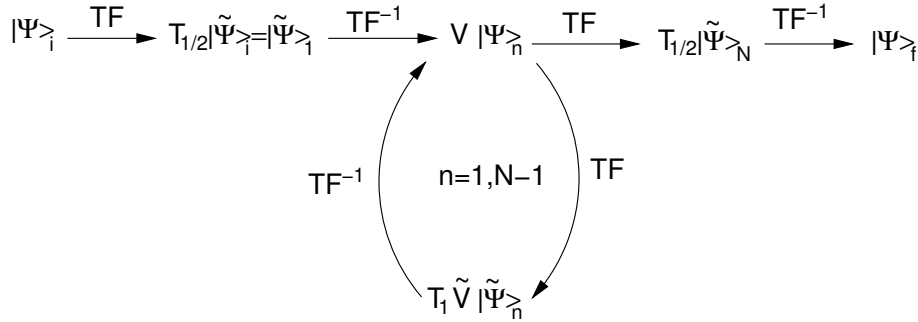


FIG. 6.2 – Schéma de principe de l'algorithme de propagation basé sur l'opérateur partagé, avec $\mathbf{T}_{1/2} = e^{-i\mathbf{T}\Delta t/2\hbar}$, $\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_{1/2}^2$ et $V_{1/2} = e^{-i\mathbf{V}\Delta t/\hbar}$. La propagation se fait en N pas de temps.

Paquet d'ondes initial. La fonction d'onde initiale est parfaitement uniforme dans les direction x et y , et gaussienne dans la direction z , de largeur w_z . C'est donc une superposition d'ondes monochromatiques, que l'on pourra séparer à la fin du calcul par transformation de Fourier. De plus, elle est animée d'un mouvement de translation uniforme selon le vecteur d'onde $\mathbf{k}_a^i = \mathbf{p}_{inc}/\hbar$. La direction de ce vecteur sera repérée par l'angle d'incidence θ_a et l'angle polaire φ_a , analogues des angles θ et φ décrivant le vecteur d'onde du champ lumineux incident sur le réseau matériel de diffraction. Les composantes de \mathbf{k}_a^i s'expriment comme :

$$\begin{cases} k_{a,x}^i &= k_a^i \sin \theta_a \cos \varphi_a \\ k_{a,y}^i &= k_a^i \sin \theta_a \sin \varphi_a \\ k_{a,z}^i &= k_a^i \cos \theta_a \end{cases} \quad (6.6)$$

¹Le potentiel effectif étant non diagonal, le calcul de l'exponentielle passe au préalable par sa diagonalisation. L'opérateur \mathbf{T} est déjà diagonal dans l'espace de Fourier.

Le paquet d'ondes incident est donc :

$$\Psi(\mathbf{R}, t_0) = \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{bmatrix} A \exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{w_z^2}\right) \exp(-i(k_{a,x}^i x + k_{a,y}^i y + k_{a,z}^i z)) \\ B \exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{w_z^2}\right) \exp(-i(k_{a,x}^i x + k_{a,y}^i y + k_{a,z}^i z)) \end{bmatrix} \quad (6.7)$$

où \mathcal{N} est la constante de normalisation, et A, B sont les amplitudes associées à chacun des états fondamentaux. Dans les calculs, nous allons considérer successivement les deux couples $(A, B) = (1, 0)$ et $(A, B) = (0, 1)$. L'équation de Schrödinger étant linéaire par rapport à Ψ , on obtiendra l'état final d'une combinaison linéaire des deux sous-niveaux Zeemann par la même combinaison linéaire de ces deux états finaux.

Calcul des amplitudes de diffraction. La dernière opération est la projection de la fonction d'onde sur les ondes planes de vecteur d'onde $(\mathbf{k}_a^{i,\parallel} + \mathbf{Q}_v, -k_{a,z}^i)$, puis le calcul de la probabilité de transition. Le module carré de l'amplitude de l'état final dans l'ordre v pour une énergie \mathcal{E} est [115] :

$$|b_{v,m_s}|^2 = \frac{1}{k_{a,z}^v} \left| \int e^{-i[k_{a,z}^v z + (\mathbf{k}_a + \mathbf{Q}_v) \cdot \mathbf{l}]} \Psi_{m_s}^f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \quad (6.8)$$

La composante verticale $k_{a,z}^v$ du vecteur d'onde diffracté dans l'ordre v est donnée par la relation de conservation de l'énergie :

$$\hbar k_{a,z}^v = \sqrt{2M\mathcal{E} - \hbar^2(\mathbf{k}_a^i + \mathbf{Q}_v)^2} \quad (6.9)$$

La probabilité de diffraction dans l'ordre v est alors exprimée en fonction de l'énergie par :

$$\mathcal{P}(v, \mathcal{E}) = \frac{|b_{v,-1/2}|^2 + |b_{v,+1/2}|^2}{\sum_{m_s, v'} |b_{v', m_s}|^2} \quad (6.10)$$

Discrétisation. Le calcul de propagation est effectué dans un volume parallélépipédique de dimensions $L_x \times L_y \times H$. Il ne contient donc qu'une seule période du potentiel. La hauteur H de calcul est suffisamment grande pour contenir la zone d'interaction, de hauteur quelques $1/\kappa_0$, et la zone asymptotique. Le volume est discrétisé en $n_i \times n_j \times n_k$ points suivant les directions x, y et z . Cette grille étant décomposée en série de Fourier, la cellule élémentaire est naturellement répliquée périodiquement dans les trois dimensions. Cela implique que le paquet d'onde ne doit pas sortir de la grille dans la direction Oz , auquel cas il revient à l'intérieur par le côté opposé.

Le nombre de points de discrétisation dépend de la dimensionnalité du problème et de la mémoire de la machine utilisée. Ces contraintes vont bien entendu influencer la gamme des paramètres accessibles. En particulier, le calcul est bien plus facile dans le cas unidimensionnel. La grille contient alors $n_i \times n_k$ points, ce qui autorise des tailles importantes et des discrétisations fines. En revanche, dans le cas bidimensionnel, la grille contient n_j fois plus de points, ce qui rend la simulation plus délicate, car nous sommes alors confrontés à un problème de temps de calcul et de taille mémoire.

Les points de discrétisation de l'espace réciproque ont pour coordonnées :

$$\begin{aligned} k_{m_x}^x &= k_{at}^x + m_x \frac{2\pi}{L_x}, \quad \text{pour } m_x = -\frac{n_i}{2} + 1, \dots, \frac{n_i}{2} \\ k_{m_y}^y &= k_{at}^y + m_y \frac{2\pi}{L_y}, \quad \text{pour } m_y = -\frac{n_j}{2} + 1, \dots, \frac{n_j}{2} \\ k_{m_z}^z &= m_z \frac{2\pi}{H}, \quad \text{pour } m_z = -\frac{n_k}{2} + 1, \dots, \frac{n_k}{2} \end{aligned}$$

On a donc accès à $n_i/j/2$ ordres de diffraction positifs et $n_i/j/2$ ordres négatifs par dimension. Le spineur du paquet d'ondes initial a la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Psi(p, q, r) &= \frac{1}{n_i n_j n_k} \sum_{m_x = -\frac{n_i}{2} + 1}^{n_i/2} \sum_{m_y = -\frac{n_j}{2} + 1}^{n_j/2} \sum_{m_z = -\frac{n_k}{2} + 1}^{n_k/2} \tilde{\Psi}(m_x, m_y, m_z) \\ &\times \exp \left[-2\pi i \left(\frac{m_x p \delta x}{L_x} + \frac{m_y q \delta y}{L_y} + \frac{r \delta z}{H} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.11)$$

avec $\delta x = L_x/n_i$, $\delta y = L_y/n_j$ et $\delta z = H/n_k$ et où les coefficients de Fourier du spineur Ψ sont donnés par l'expression :

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(m_x, m_y, m_z) &= \sum_{p=1}^{n_i} \sum_{q=1}^{n_j} \sum_{r=1}^{n_k} \Psi(p, q, r) \\ &\times \exp \left[2\pi i \left(\frac{m_x p \delta x}{L_x} + \frac{m_y q \delta y}{L_y} + \frac{m_z r \delta z}{H} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.12)$$

Ordre de grandeur des paramètres de discrétisation. Plusieurs paramètres sont à ajuster lors de la simulation :

- ▶ tout d'abord, la largeur w_z de l'onde incidente. Elle détermine la fenêtre d'énergie à laquelle la simulation donne accès. Il ne s'agit pas de la largeur réelle du paquet d'ondes, mais d'une largeur uniquement mathématique permettant en un seul calcul d'avoir accès aux populations diffractées pour un large spectre d'énergie incidente. Ici, nous nous sommes limités à une impulsion maximale de 200, ce qui correspond à une largeur d'environ 5 nm pour une hauteur de chute de 10 mm. Cette hauteur n'est pas la hauteur de chute réelle mais une hauteur permettant de centrer le spectre dans l'intervalle d'impulsions choisi ;
- ▶ puis, le pas vertical δz : il détermine la largeur de la fenêtre d'énergie que l'on peut analyser. L'énergie cinétique initiale du paquet d'ondes ne doit pas être supérieure à $\hbar^2 4\pi^2 / 2m\delta z^2$. La valeur choisie est $\delta z = 2$ nm ;
- ▶ ensuite, les pas horizontaux δx et δy . Ils déterminent les ordres maximaux auxquels nous avons accès numériquement. Plus précisément, pour un nombre n de points en x ou y , l'atome incident ne doit pas être diffracté dans des ordres supérieurs à $n/2$ ou inférieurs à $-n/2$, sinon il y a repliement du spectre de la fonction d'onde. Pour un contraste en $z = 0$ de 0,3 et une impulsion de 100, l'ordre peuplé le plus grand est, d'après l'approximation du réseau de phase mince, $0,3 \times 100 = 30$. Nous avons pris 64 points de discrétisations.

De plus, compte tenu de l'effet de moyenne en incidence non normale, il est inutile de prendre autant de points en x qu'en y quand $\theta_a \neq 0$, ce qui permet de réduire la

mémoire utilisée ;

- ▶ enfin, le pas de temps Δt . Un incrément de temps de $0,005 \mu\text{s}$ a donné une bonne convergence des résultats. Cela implique un nombre d'itérations $N \approx 1000$.

En résumé, le calcul de diffraction se fait en deux étapes :

- ▶ propagation du paquet d'ondes initial de la zone asymptotique à travers la zone d'interaction en appliquant N fois l'opérateur partagé,
- ▶ transformée de Fourier de la fonction d'onde finale et projection sur les états de diffraction.

Nous allons maintenant appliquer cette méthode au calcul 1D et 2D de la diffraction.

6.2 Résultats numériques

Nous allons présenter maintenant les résultats des simulations numériques concernant la diffraction d'atomes froids par un réseau optique uni- puis bidimensionnel. Les paramètres communs à ces deux géométries sont :

- ▶ l'angle d'incidence du laser sur les nanostructures, qui est ici fixé à $\theta = 60^\circ$. La portée de l'onde incidente est alors de 175 nm ;
- ▶ la puissance du laser incident, de 800 mW/mm^2 ;
- ▶ la hauteur de chute typique des atomes, dont l'ordre de grandeur est 3 mm . L'impulsion réduite correspondante de la particule est de 88 . La hauteur de rebroussement varie, selon la valeur de m_s , de 200 nm à 500 nm , ce qui est suffisamment haut pour ne pas avoir à tenir compte des interactions de van der Waals.

6.2.1 Diffraction par un réseau unidimensionnel

Afin d'interpréter les résultats des calculs de diffraction, il est nécessaire d'étudier l'allure du champ électrique et de ses différentes composantes normales à la hauteur de rebroussement des atomes.

Champ 1D et potentiel vu par l'atome. Sur la figure 6.3 sont tracés les carrés des amplitudes de E_l , pour $l = 0, \pm$, en fonction de l'angle polaire φ et à une hauteur moyenne de rebroussement $z_r = 200 \text{ nm}$. Ces courbes sont quasiment sinusoïdales, ce qui signifie que la majorité des harmoniques tels que $|m| > 1$ a été filtrée à cette distance.

- ▶ la composante perpendiculaire au plan d'incidence, absente de l'onde évanescente non couplée aux nanostructures, reste toujours de plusieurs ordres de grandeurs plus faible que les deux composantes E_+ et E_- . En particulier, lorsque le plan d'incidence est perpendiculaire aux lignes du réseau ($\varphi = \pi/2$), le système est invariant par translation parallèle au vecteur de polarisation \mathbf{s} . La composante TE du champ électrique incident est donc conservée et reste nulle dans le champ diffracté². Elle est la plus importante autour de $\varphi = \pi/4$; sa valeur moyenne vaut alors en amplitude $0,6 \%$ de celle de E_- ³ ;
- ▶ le contraste de la composante E_+ évolue de 2% à presque 100% quand φ varie de 0 à $\pi/2$. Comparativement, le contraste de la composante E_- évolue peu. Ainsi,

²La faible intensité résiduelle provient de la précision de l'ordinateur.

³Nous avons vu dans la première partie que l'amplitude de la composante E_0 était maximale pour $\varphi \approx 23^\circ$. Son intensité valait alors 2% de l'intensité totale.

les potentiels vus par des atomes dans l'état de structure fine $m_s = -1/2$ et $m_s = +1/2$ privilégiant respectivement les composantes -1 et $+1$ du champ électrique, une particule préparée dans l'état $+1/2$ devrait peupler un plus grand nombre d'ordres de diffraction qu'un atome initialement dans l'état $-1/2$.

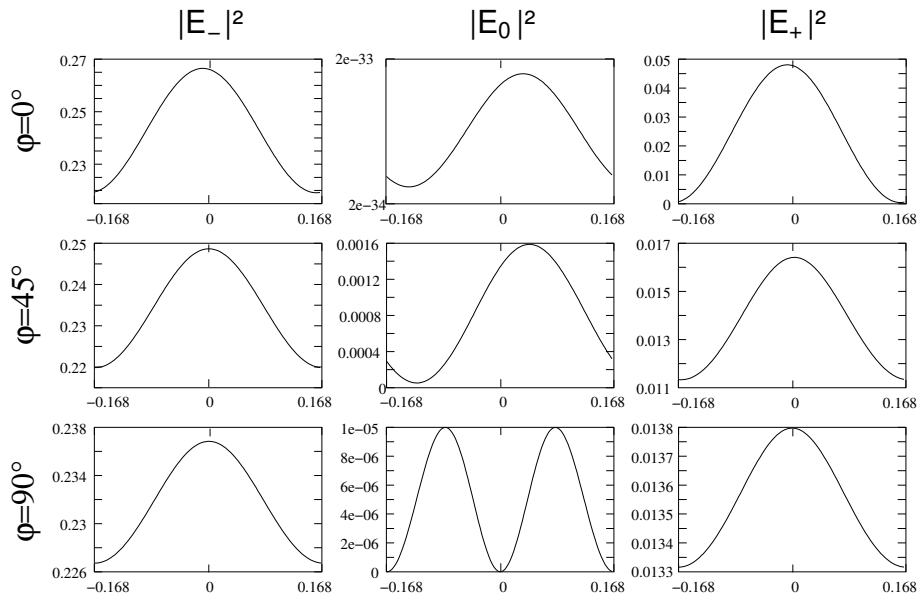


FIG. 6.3 – Composantes normales du champ en fonction de φ .

Sur la figure 6.4 sont représentés les éléments diagonaux de la matrice de potentiel effectif en fonction de l'angle polaire φ . Ils représentent les potentiels vus par chacun des niveaux en l'absence de la composante de couplage E_0 entre les deux niveaux fondamentaux. Les contrastes associés à chaque courbe apparaissent dans la table 6.1. Globalement, le contraste augmente quand φ croît. Il atteint de plus des valeurs qui ne sont plus négligeables devant 1 pour $\varphi = \pi/2$.

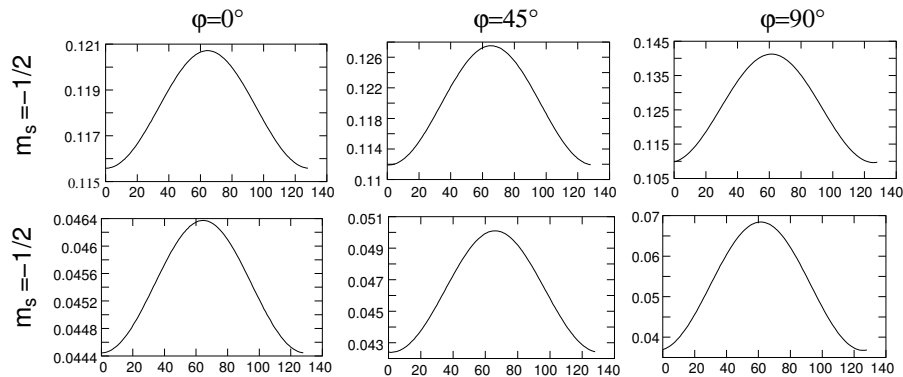


FIG. 6.4 – Éléments diagonaux de la matrice du potentiel en fonction de l'angle φ à $z = 200 \text{ nm}$: $V_-(x) = (3|E_-(x)|^2 + 2|E_0(x)|^2 + |E_+(x)|^2)/3$ et $V_+(x) = (|E_-(x)|^2 + 2|E_0(x)|^2 + 3|E_+(x)|^2)/3$.

Courbes de diffraction. Les probabilités de transitions dans les premiers ordres de diffraction ont été calculées numériquement pour chacun des trois angles polaires d'éclai-

TAB. 6.1 – Évolution du contraste à 200 nm en fonction de l'angle φ et de m_s .

	$m_s = -1/2$	$m_s = -1/2$
$\varphi = 0^\circ$	2.1 %	2.2 %
$\varphi = 45^\circ$	6.7 %	8. %
$\varphi = 90^\circ$	12 %	33 %

rage $\varphi = 0, \pi/4$ et $\pi/2$ et pour un atome se trouvant successivement dans chacun des états de structure fine $m_s = \pm 1/2$. Les particules tombent en incidence normale sur le réseau ($\theta_a = 0$).

Ces simulations ont montré que le transfert de population entre les deux états fondamentaux est négligeable. En particulier, un calcul à $\varphi = 23^\circ$ a permis d'estimer une valeur maximale de ce transfert, pour la configuration expérimentale étudiée, de l'ordre de 0,5% de la population totale.

Le potentiel utilisé pour le calcul des courbes de diffraction présentées sur la figure 6.5-a comprend tous les harmoniques du potentiel calculé. La partie bruitée correspondant aux impulsions réduites de 0 à 30 n'est pas numériquement convergée : elle est formée des composantes les plus lentes du paquet d'ondes, qui ne sont pas encore sorties de la zone d'interaction. Ces courbes sont comparées aux expressions analytiques obtenues dans l'approximation du réseau de phase mince au chapitre 5 (figure 6.5-b), dans lesquelles seul l'harmonique $m = 1$ a été utilisé⁴. Pour calculer l'argument des fonctions de Bessel, les contrastes et les amplitudes ont été estimés à partir des potentiels calculés à 200 nm : cette technique permet d'éviter de prendre en compte les harmoniques $|m| > 1$.

L'accord entre les populations simulées et analytiques est bon, et ce, jusqu'à un contraste de 0,12. En revanche, pour un atome dans l'état $m_s = +1/2$ tombant en incidence normale sur un réseau éclairé perpendiculairement aux lignes ($\varphi = \pi/2$), les courbes analytique et théorique sont nettement différentes (le contraste du potentiel pour $m_s = +1/2$ à 200 nm est alors de 33%). Le calcul effectué en utilisant l'approximation du réseau de phase mince n'est clairement plus valable. De plus, nous pouvons constater que le phénomène prédominant est un échange de population entre les niveaux 0 et ± 1 , la population de l'ordre 0 étant minimale quand la population de l'ordre 1 est maximale. Ce phénomène s'apparente aux oscillations de Stückelberg.

D'autres simulations ont également été réalisées en ne prenant en compte que les ordres de Fourier de plus longue portée du champ électrique, pour un angle polaire de $\varphi = 45^\circ$. Les figures 6.6-a et 6.6-b montrent que la diffraction est bien décrite par les deux harmoniques $m = \pm 1$ du champ électrique.

En effet l'erreur sur les populations reste faible lorsque l'on tient compte à la fois des ordres -1 et +1, et ce, sur toute la gamme d'impulsions réduites. Les pics "montant" correspondent aux annulations des fonctions de Bessel, pour lesquels la population diffractée est faible. En revanche l'écart est plus grand quand on ne prend en compte que l'ordre de plus grande portée +1. L'erreur peut atteindre 10% pour des impulsions ré-

⁴Dans le cas particulier où le plan d'incidence est parallèle aux lignes ($\varphi = \pi/2$), les deux ordres ± 1 sont dégénérés : ils ont donc le même contraste et la même portée. On en tient compte dans l'approximation du réseau de phase mince en multipliant le contraste de l'ordre 1 par deux.

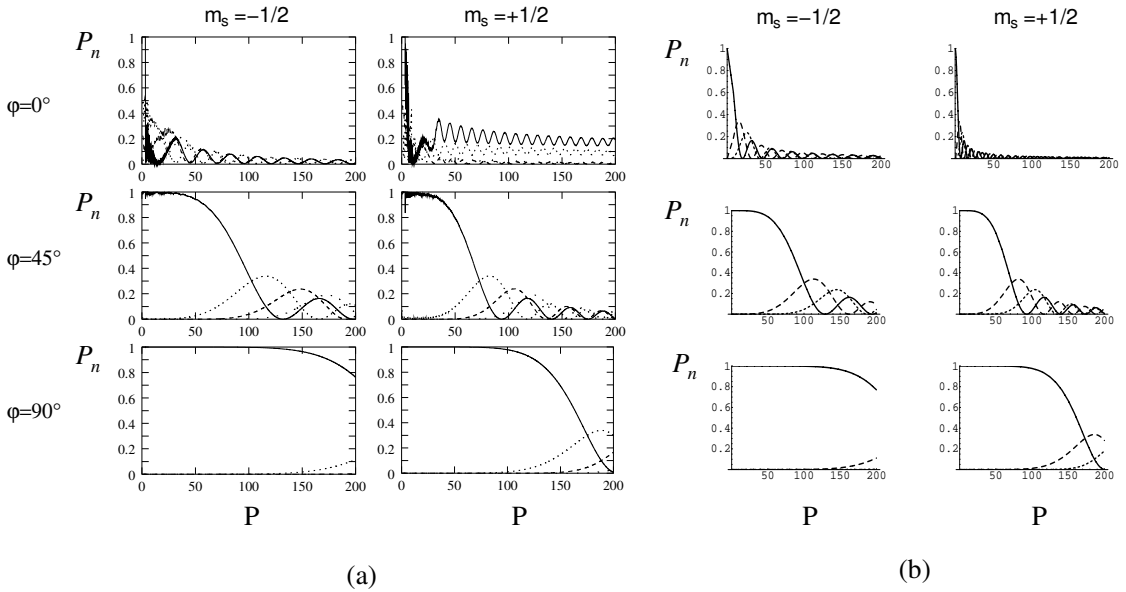


FIG. 6.5 – (a) Probabilités P_n dans les premiers ordres n issues de la simulation numérique, tracées en fonction de l’impulsion réduite P . (b) Courbes analytiques tracées dans l’approximation du réseau de phase mince.

duites supérieures à 150. Cela s’explique en observant que plus l’atome va vite, plus il entre profondément dans le potentiel, où l’ordre -1 n’est pas encore éteint.

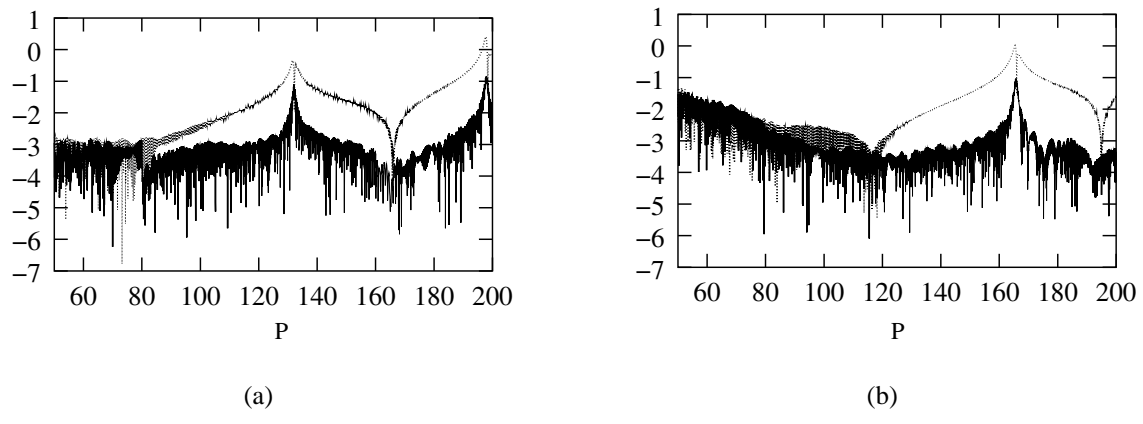


FIG. 6.6 – Pour un angle polaire $\varphi = 45^\circ$ est tracé, en fonction de l’impulsion réduite P , l’écart relatif entre la population calculée en prenant en compte tous les harmoniques du champ électrique et la population calculée en se limitant à : uniquement les ordres $m = \pm 1$ (courbe du bas), uniquement l’ordre $m = +1$ (courbe du haut) ; Les deux cadres correspondent à : (a) l’ordre 0 de diffraction ; (b) l’ordre 1 de diffraction.

Ces courbes permettent de confirmer que l’on peut maximiser la population diffractée dans les premiers ordres de diffraction pour une impulsion initiale donnée en ne modifiant que l’angle polaire du faisceau incident sur le réseau de diffraction. La figure 6.5-a montre que, pour une hauteur de chute de 5 mm environ ($P \approx 112$), l’angle polaire $\varphi = 45^\circ$ maximise la population diffractée dans les ordres ± 1 .

6.2.2 Diffraction par un réseau bidimensionnel

Dans cette partie, nous n'allons étudier que la diffraction d'un atome se trouvant dans l'état de structure fine $m_s = +1/2$. En effet, le potentiel vu dans le niveau $-1/2$ pour une intensité de 800 mW/mm^2 est beaucoup moins contrasté que celui créé par un réseau unidimensionnel, et les effets de diffraction ne se sont pas très significatifs.

Courbes de diffraction et contraste du potentiel. Les courbes de diffraction calculées pour un atome dans l'état $m_s = 1/2$ sont indiquées sur la figure 6.7. Les figures du haut indiquent les probabilités de diffraction parallèlement à Ox , et celles du bas les probabilités de diffraction parallèlement à Oy . Encore une fois, les valeurs des probabilités correspondant à $P \in [0, 50]$ ne sont pas numériquement convergées à cause de la faible vitesse de ces composantes. Ces courbes sont à comparer aux valeurs des contrastes de chacun des ordres de plus longue portée reportés dans la table 6.2. Notons que lorsque $\varphi = 0$, la dégénérescence respectivement des ordres $(0, \pm 1)$ et $(1, \pm 1)$ est prise en compte en multipliant les contrastes correspondant par un facteur 2.

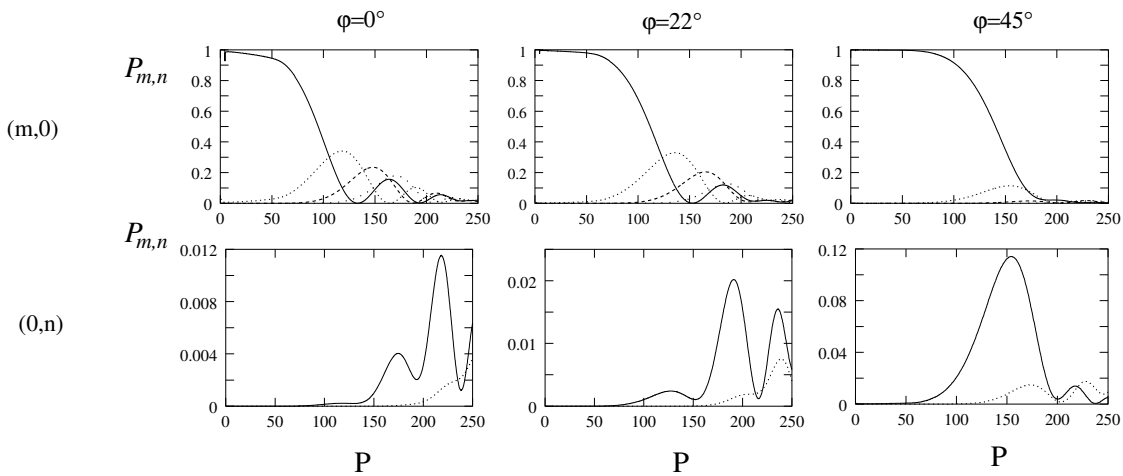


FIG. 6.7 – Probabilités de diffraction issues de la simulation numérique, tracées en fonction de l'impulsion réduite P pour un atome dans l'état $m_s = +1/2$. Les courbes du haut représentent la diffraction parallèlement à x dans les ordres $(0,0)$ (trait plein), $(1,0)$ (trait interrompu), $(2,0)$ (trait pointillé). Les courbes du bas correspondent à la direction y , pour les ordres $(0,1)$ et $(0,2)$.

Nous pouvons faire plusieurs observations :

- ▶ la diffraction est plus efficace dans la direction x que dans la direction y pour $\varphi = 0^\circ$ et $\varphi = 22^\circ$. Ceci s'explique naturellement par le fait que, pour ces deux valeurs de l'angle polaire φ , l'harmonique de plus longue portée du champ électrique est l'ordre $(1,0)$: le potentiel est donc plus contrasté dans la direction x que dans la direction y . La table 6.2 indique un facteur 10 à $z_0 = 200 \text{ nm}$ entre $\epsilon_{1,0}$ et $\epsilon_{0,1}$, $\epsilon_{1,1}$. Pour $\varphi = 45^\circ$, les harmoniques $(0,1)$ et $(1,0)$ sont dégénérés, et les populations diffractées en x et y sont identiques ;
- ▶ à impulsion réduite P fixée, l'effet de diffraction diminue dans tous les ordres $(0, m)$ parallèles à Ox quand φ augmente. Ceci se comprend aisément en examinant la table 6.2 : quand φ , augmente, le contraste de l'ordre dominant $(1,0)$ diminue, donc la probabilité de diffraction diminue également. Cet effet est amplifié par la diminution en parallèle de la portée de l'ordre $(1,0)$. On trouve un résultat contraire

TAB. 6.2 – Évolution du contraste à 200 nm du potentiel vu par un atome dans l'état $+1/2$, pour les ordres de Fourier de plus grande portée. Les facteurs multiplicatifs 2 à $\varphi = 0^\circ$ tiennent compte de la dégénérescence des ordres $(m, \pm n)$.

	(1,0)	(0,1)	(1,1)	$ E _{moy}^2$
$\varphi = 0^\circ$	3,8 %	$2 \times 0,23$ %	$2 \times 0,15$ %	$6,5 \cdot 10^{-2}$
$\varphi = 22^\circ$	0,3 %	0,6 %	0,28 %	$6,5 \cdot 10^{-2}$
$\varphi = 45^\circ$	1,5 %	1,5 %	0,36 %	$6,5 \cdot 10^{-2}$

dans la direction Oy , où la probabilité de diffraction augmente : ceci s'explique par l'augmentation simultanée du contraste et de la portée de l'harmonique $(0, 1)$ quand φ varie de 0 à $\pi/4$;

- la décroissance des probabilités de diffraction parallèle à Ox quand l'impulsion réduite augmente est plus rapide que celle obtenue avec un réseau unidimensionnel. Ceci est une conséquence de l'ouverture des canaux de diffraction perpendiculaires (c'est-à-dire suivant Oy) quand l'énergie incidente est plus grande : plus nombreux sont les canaux ouverts, plus la population est répartie dans un grand nombre de directions différentes. Ainsi, à $\varphi = 45^\circ$, les probabilités de diffraction dans les directions x et y étant identiques, la population est également répartie dans les ordres $(0,1)$ et $(1,0)$, où elle est de l'ordre de 10% de la population initiale. Cette valeur est inférieure à celle obtenue avec un réseau unidimensionnel, avec lequel on obtenait 30%.

Comparaisons avec les calculs analytiques. Nous comparons dans ce paragraphe les résultats de ces simulations numériques avec les expressions analytiques des probabilités calculées dans le cadre de l'approximation du réseau de phase mince.

Sur la figure 6.8 sont indiquées les courbes analytiques obtenues en ne prenant en compte que les ordres de plus longue portée $(1, 0)$ et $(0, 1)$. L'accord avec le calcul numérique est bon même si la diffraction est légèrement surestimée analytiquement. Les différences les plus flagrantes apparaissent pour les impulsions réduites élevées. En particulier, sur l'ordre $(1,0)$ de la figure 6.7, nous pouvons voir que la population ne s'annule jamais, contrairement à ce que prévoit le calcul analytique de la figure 6.8.

Sur la figure 6.9 sont tracées les populations $(0,0)$, $(1,0)$ et $(0,1)$ pour $\varphi = 0^\circ$. Elles ont été calculées numériquement dans deux cas : en prenant tous les harmoniques du champ électrique en compte (trait plein) et en sélectionnant artificiellement uniquement les harmoniques $(0,1)$ et $(1,0)$ (trait pointillé). Les courbes sont similaires excepté justement pour des impulsions réduites de l'ordre de 200 : si l'on ne prend en compte que les ordres $(0,1)$ et $(1,0)$, les probabilités de transition s'annulent pour des valeurs précises de l'impulsion réduite P . En revanche, on observe pour ces valeurs des décollements des courbes si l'on tient compte de tous les ordres de Fourier du champ électrique. Ces décollements traduisent donc un excès de population diffractée provenant de l'interaction des atomes avec l'harmonique $(1, 1)$ du champ électrique.

Incidence oblique. Sur la figure 6.10 sont tracées les populations diffractées dans les directions Ox et Oy pour un angle d'incidence atomique $\theta_a = 40^\circ$ et un angle polaire

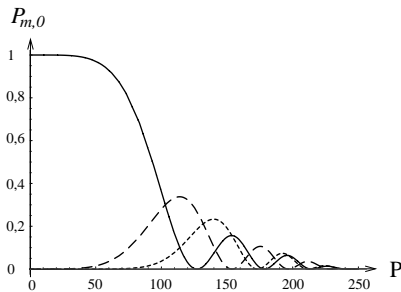


FIG. 6.8 – Courbes de diffraction dans la direction x calculées analytiquement pour $\varphi = 0^\circ$ à partir de l'approximation des réseaux de phase mince, en ne tenant compte que des harmoniques de plus longue portée $(1,0)$ et $(0,1)$ du champ électrique. L'ordre 0 est en trait plein, l'ordre 1 en trait interrompu, l'ordre 2 en trait pointillé.

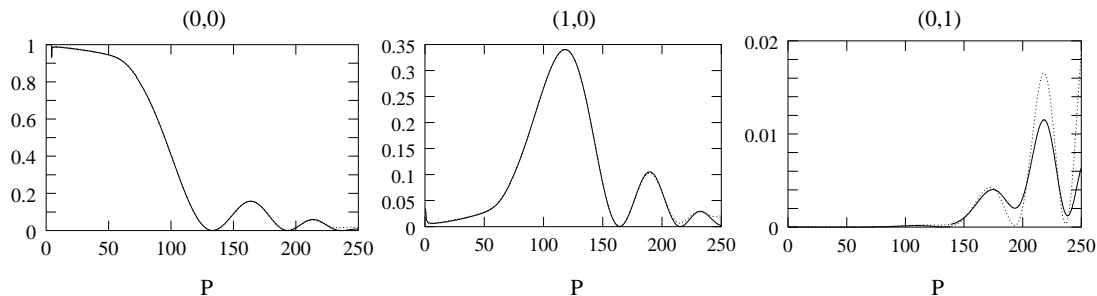


FIG. 6.9 – Comparaison à $\varphi = 0^\circ$, pour les ordres $(0,0)$, $(1,0)$ et $(0,1)$ de diffraction atomique, des populations calculées numériquement en prenant en compte tous les harmoniques du champ (trait plein) ou uniquement les harmoniques $(0, \pm 1)$ et $(\pm 1, 0)$.

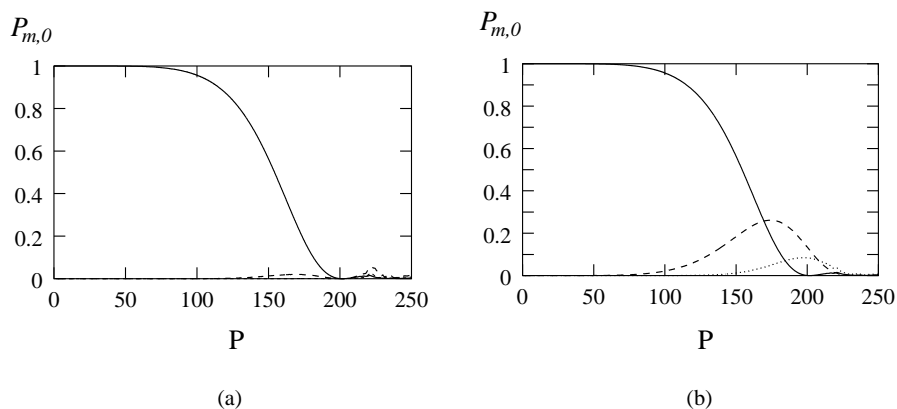


FIG. 6.10 – Courbes de diffraction calculées numériquement pour un angle polaire $\varphi = 45^\circ$ et pour un angle d'incidence atomique $\theta_a = 40^\circ$. L'ordre 0 est en trait plein, l'ordre 1 en trait interrompu, l'ordre 2 en trait pointillé. (a) Diffraction dans la direction Ox . (b) Diffraction dans la direction Oy .

de la lumière $\varphi = 45^\circ$. La diffraction est nettement asymétrique, en raison de l'effet de moyenne du potentiel décrit dans le chapitre 5.

Dans la direction de propagation des atomes, la population dans les ordres non spéculaires est très faible : elle vaut au maximum 2% dans l'ordre (1,0). En revanche, dans la direction Oy , la population diffractée dans l'ordre (0,1) atteint ici presque 30%. Elle est donc plus importante en incidence oblique qu'en incidence normale, où elle vaut au maximum 10%.

Cette dissymétrie s'interprète bien dans le cadre de l'approximation du réseau de phase mince. En effet, si le mouvement des atomes selon le plan Oxz est bien une trajectoire oblique, ce même mouvement vu en projection sur le plan Oyz est une trajectoire rectiligne. Ainsi, vis à vis de la modulation en y du potentiel, tout se passe comme si les atomes étaient en incidence normale : la diffraction y est donc très efficace.

Nous pouvons observer de plus que la population de l'ordre 0 (réflexion spéculaire) n'est presque pas modifiée par rapport à celle calculée à $\theta_a = 0$. Par conséquent, il y a eu un transfert de la population diffractée en x dans la direction orthogonale y : les atomes diffractent même en incidence oblique importante⁵. En particulier, si l'on choisit une impulsion réduite de $P \approx 175$ selon z , la norme de l'impulsion vectorielle est $|\mathbf{P}| = 175/\cos 40^\circ = 228$, ce qui correspond à une hauteur de chute de 20 mm dans notre modèle. La population diffractée dans les deux ordres (0, ± 1) est d'environ 60% au total. Ce taux important pourrait permettre de réaliser à partir de ce dispositif une séparatrice atomique de grand angle de diffraction, élément clé d'un interféromètre atomique.

6.3 Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre un algorithme de calcul des populations atomiques diffractées par un réseau optique. Cet algorithme est fondé sur une résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps au moyen d'un opérateur d'évolution temporelle approché : l'opérateur symétriquement partagé. La fonction d'onde initiale est propagée au travers de la zone d'interaction, puis projetée sur les états propres de diffraction.

Grâce à cette méthode, nous avons étudié numériquement la diffraction par deux réseaux 1D et 2D, sans approximation sur la forme du champ électrique, c'est-à-dire en considérant l'ensemble de son spectre. De plus, nous avons pu tenir compte d'un éventuel couplage entre les deux niveaux de structure fine $m_s = \pm 1/2$, induit par la composante TE de polarisation du champ électrique. Ces calculs ont permis de vérifier que des populations importantes (de l'ordre de 60 %) pouvaient être obtenues dans les premiers ordres de diffraction. L'avantage par rapport au réseau à onde évanescente stationnaire est que ces populations peuvent être ajustées en jouant sur l'orientation du plan d'incidence de la lumière par rapport au réseau.

En ce qui concerne le couplage entre les deux niveaux fondamentaux, nous avons vu que le transfert de population était inférieur à 1% de la population initiale dans tous les cas. Ainsi, le potentiel d'interaction entre l'atome et le champ est bien décrit par un modèle scalaire. Cependant, les populations diffractées sont très différentes suivant que l'on considère un atome dans l'un ou l'autre des états fondamentaux. Elle est, en générale, plus importante pour un atome dans l'état $m_s = +1/2$, car l'intensité moyenne du champ est plus faible (donc l'atome pénètre plus profondément dans le potentiel) et le contraste

⁵Cependant, plus on augmente l'angle d'incidence atomique θ_a , plus la projection de l'impulsion sur l'axe Oz est faible, ce qui diminue la diffraction, comme nous l'avons vu dans le chapitre 5.

plus fort.

La comparaison entre les courbes calculées numériquement et analytiquement dans l'approximation du réseau de phase mince a montré un bon accord entre les deux approches. Plus précisément, pour le réseau unidimensionnel, on n'observe pas de différence flagrante, quels que soient l'orientation du plan d'incidence de la lumière ou le sous-niveau Zeeman de l'atome, sauf dans la situation où le potentiel est le plus contrasté (dans le cas où $m_s = +1/2$ et $\varphi = 0^\circ$, le contraste à 200 nm est de 33%). Cet accord permet de vérifier d'une part l'applicabilité de l'approximation du réseau de phase mince au potentiel nanostructuré, dont le contraste évolue fortement avec la hauteur, et d'autre part, l'hypothèse selon laquelle la diffraction des atomes est bien décrite par l'harmonique de plus grande portée.

En revanche, les simulations effectuées sur le réseau bidimensionnel montrent un désaccord plus net pour les grandes impulsions réduites. Nous avons vu que, si la diffraction est bien rendue par la prise en compte uniquement des harmoniques (0,1) et (1,0) du champ électrique, de légères différences étaient introduites par l'harmonique (1,1). Ainsi, cette composante de Fourier du champ électrique ouvre un nouveau canal de diffraction dont la contribution s'ajoute aux précédentes.

Chapitre 7

Conclusion sur la diffraction atomique

Les deux premières parties visaient à étudier la diffraction en réflexion d'atomes froids par un champ optique diffractant. La réflexion des atomes est assurée par l'interaction avec une onde évanescente de Fresnel dont la fréquence est désaccordée vers le bleu de la transition atomique. La modulation du potentiel est obtenue par diffraction de cette onde évanescente avec un réseau sub-longueur d'onde de nanostructures diélectriques à haut indice de réfraction.

L'intérêt principal de cette méthode, par rapport aux réseaux de diffraction à onde évanescente partiellement stationnaire, est de découpler la fonction miroir de la fonction réseau. Ainsi, la période de la modulation, identique à celle de la nanostructure, est indépendante de la longueur d'onde : elle n'est donc plus liée à la fréquence de la transition atomique. De plus, l'orientation du réseau est indépendante de celle du plan d'incidence de la lumière : l'angle polaire du faisceau incident devient un paramètre de réglage de l'évolution verticale du champ électrique. Un autre intérêt réside dans la possibilité de graver des réseaux de motif arbitraire, aussi bien unidimensionnels que bidimensionnels.

Dans l'espace des vecteurs d'ondes, cette double diffraction lumière/nanostructure et atome/onde nanostructurée fait intervenir trois quantités : $k_0 = 2\pi/\lambda$, vecteur d'onde du champ électrique, $Q = 2\pi/L$, vecteur d'onde du réseau de nanostructures, et $k_a = 2\pi/\lambda_{dB}$, vecteur d'onde de l'atome incident sur le réseau de diffraction, caractérisé par sa longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} . Elles vérifient l'inégalité : $k_0 < Q \ll k_a$ et permettent d'expliquer la cinématique de la diffraction, c'est-à-dire le changement en impulsion de l'objet diffracté.

Dans un premier temps, nous avons étudié la diffraction du champ électrique incident par le réseau de nanostructures. Le réseau de diffraction étant très sub-longueur d'onde ($k_0 < Q$), le changement d'impulsion du photon ne permet que de créer des composantes diffractées évanescentes : tout le potentiel optique est localisé dans une région proche de la surface dont l'extension verticale est de quelques portées de l'onde incidente. Nous avons également vu que, plus la fréquence spatiale du photon diffracté est grande, plus il est localisé près de la surface. En conséquence, à des distances de l'ordre de quelques centaines de nanomètres, typiques de la hauteur de rebroussement des atomes, le champ diffracté est bien décrit par la prise en compte des seules composantes spectrales de plus grande fréquence spatiale. Pour le réseau unidimensionnel, cela se traduit par la prise en compte de l'onde non modulée et de l'harmonique 1 du champ (avec éventuellement l'harmonique -1); dans le cas du réseau bidimensionnel, ce sont les deux harmoniques

(1,0) et (0,1) qui entrent principalement en compte (complétés éventuellement de l'harmonique (1,1)). L'angle polaire φ , en modifiant les rapports κ_v/κ_0 , permet une plus ou moins grande localisation de la modulation.

La dynamique de la diffraction de la lumière dépend non seulement des paramètres d'illumination mais également de la période du réseau et de la forme, de l'indice et de la hauteur du motif. Cet aspect a été étudié d'un point de vue numérique, en utilisant un algorithme fondé sur la théorie différentielle des réseaux. Nous avons vu en particulier que le contraste du potentiel, bien qu'atténué exponentiellement avec la distance, gardait des valeurs non-négligeables à des hauteurs de quelques centaines de nanomètres. De plus, la polarisation initiale du champ incident (TM) est modifiée par l'interaction avec les nanostructures. En particulier une petite composante de polarisation TE est créée.

Dans la deuxième partie, nous avons étudié la diffraction atomique par le potentiel optique nanostructuré à des angles non rasants. D'un point de vue cinématique, nous sommes dans le cas opposé à celui étudié dans la première partie : le vecteur d'onde de l'atome est peu modifié par l'interaction avec le réseau. Cependant, le fait que les atomes sont supposés froids conduit à un angle de diffraction important de l'ordre du degré.

La dynamique de la diffraction a été étudiée dans un premier temps analytiquement, puis numériquement. Nous avons vu que la probabilité de diffraction dans chacun des ordres est décrite d'une part par le contraste (c'est-à-dire la dynamique de la diffraction de la lumière) au voisinage de la hauteur de rebroussement classique mais également par les portées des harmoniques dominants à grande distance (c'est-à-dire la cinématique). La modification de l'orientation du plan d'incidence par rapport au réseau permet de régler le rapport des portées, et ainsi de localiser plus ou moins la modulation. Nous avons vu que cela se traduisait d'abord par une grande plage de variations des probabilités de diffraction, mais également par une augmentation de l'acceptance angulaire du réseau. La prise en compte de tout le spectre du champ diffracté ainsi que d'un modèle interne de l'atome incluant la structure fine a montré que les écarts par rapport au modèle analytique étaient faibles, la diffraction étant donc bien décrite par un modèle scalaire. De plus, nous avons montré que, pour une impulsion réduite fixée par les paramètres expérimentaux, la diffraction pouvait être maximisée dans les premiers ordres, aussi bien en incidence normale (réseau 1D ou 2D), qu'en incidence oblique (réseau 2D).

Ainsi, la réalisation expérimentale d'un tel dispositif de diffraction d'atomes froids devrait conduire à des résultats observables. Cependant, cette étude, qui ne portait que sur un réseau parfaitement périodique et exempt de défaut, devra être complétée par une étude de l'incertitude expérimentale liée à la fabrication des nanostructures, essentiellement sur la dispersion en forme des motifs et la non régularité de la période. La conséquence principale de l'introduction d'un défaut localisé est la création de composantes radiatives : celles-ci doivent être de faible intensité afin de ne pas perturber de manière importante la diffraction.

Troisième partie

Champ proche diffracté par des nanostructures localisées : application au guidage

Dans le cadre de la création de nanostructures de forme arbitraire déposées sur une surface, nous nous sommes intéressés à la possibilité de concentrer de manière contrôlée un nombre restreint d'atomes dans un petit volume de l'espace. L'élément clé du système envisagé est un entonnoir atomique, champ proche optique obtenu par interaction d'un faisceau laser avec des nanostructures spécifiques et structuré de manière à créer une lentille convergente. Concrètement, le dispositif pourrait être intégré sur le bras de levier d'un microscope à force atomique, comme indiqué sur la figure 7.1-a. Les atomes, refroidis au voisinage du système, sont concentrés par interaction dipolaire avec l'entonnoir de champ. Afin d'obtenir un effet maximal, il est important d'avoir de forts gradients d'intensité parallèle à la surface, puisque c'est la composante parallèle de la force qui concentre le faisceau atomique.

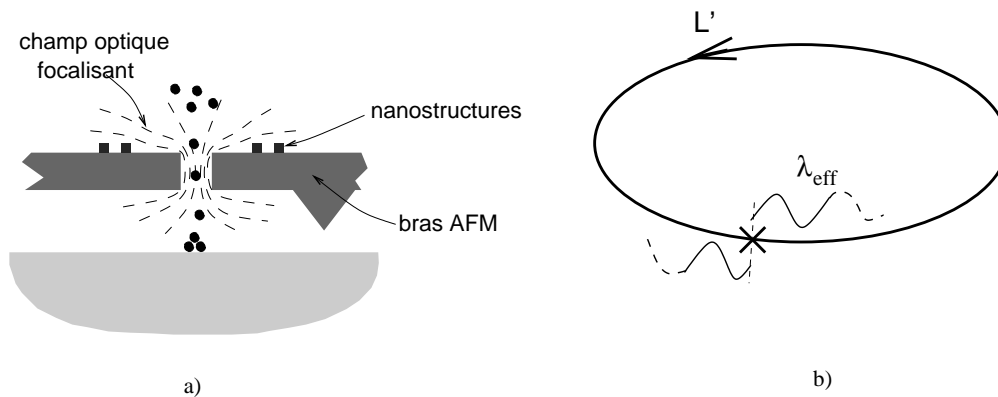


FIG. 7.1 – a) Principe de l'entonnoir atomique. b) Trajet de longueur L' d'une onde de longueur d'onde λ dans un résonateur.

Comment créer le champ focalisant ? Le principe repose sur les propriétés de résonance d'une cavité circulaire guidante. De comportement similaire à celui d'une cavité Fabry-Pérot, elle ne guide que les ondes dont la longueur d'onde obéit à une condition de résonance spécifique. Si l'on considère l'exemple unidimensionnel d'une onde de longueur d'onde λ se réfléchissant entre deux miroirs parfaitement métalliques distants de L , la condition de résonance sera $m\lambda = 2nL$, $m \in \mathbf{N}$, n étant l'indice du guide. De manière plus générale, une onde effectuant un trajet fermé de longueur L' ne pourra exister que si elle garde la même phase en un point après un tour, c'est-à-dire $n\lambda_{eff} = L'$, où λ_{eff} est sa longueur d'onde *effective* dans le guide (voir figure 7.1-b). À la résonance, le champ électromagnétique est amplifié d'un coefficient dépendant du facteur de qualité, mais pouvant atteindre plusieurs milliers. On a donc une augmentation de l'intensité et de son gradient. Par conséquent, nous avons choisi d'étudier le champ émergent d'un anneau résonant, mais également d'assemblages de plusieurs structures semblables, de manière à envisager plusieurs géométries de potentiel. La physique du problème est alors enrichie par le fait que les résonances individuelles de ces systèmes sont remplacées par des résonances d'ensemble, à des longueurs d'onde différentes.

Les anneaux résonants de dimensions micrométriques sont étudiés depuis une dizaine d'années notamment pour leurs nombreuses applications dans le domaine des télécommunications. Le principal intérêt de ces objets réside dans leur taille, qui permet d'optimiser considérablement des paramètres importants en traitement du signal tels que la finesse et le facteur de qualité des résonateurs. Ainsi, l'écart fréquentiel entre deux modes successifs, ou intervalle spectral libre, ne peut être augmenté qu'en raccourcissant le trajet L'

parcouru par l'onde dans la cavité. L'obstacle majeur dans le guidage par des structures annulaires sont les pertes radiatives dues à la courbure [116]. Ces pertes, qui proviennent du fait que l'on cherche à infléchir le trajet d'une onde plane dont la trajectoire naturelle est la ligne droite, deviennent rapidement importantes quand on réduit le diamètre d'une cavité de faible confinement (c'est-à-dire de faible contraste d'indice). Elles limitent alors le diamètre à quelques millimètres pour les matériaux usuels, conduisant à des fenêtres de filtrages trop faibles pour les signaux optiques utilisés dans le transport de l'information. En revanche, elles deviennent négligeables lorsque le confinement est fort (c'est le cas par exemple des matériaux diélectriques d'indice optique élevé comme le dioxyde de titane TiO_2), et il est alors possible de créer des anneaux résonants dont le diamètre atteint le micromètre, ce qui permet d'avoir des intervalles spectraux libres de l'ordre de 10 THz. D'autres sources de pertes sur lesquelles nous reviendrons par la suite limitent alors les performances de ces résonateurs.

En 1982, H.J. Shaw *et al.* [117] ont mis en évidence les propriétés de résonance d'une cavité formée d'une boucle de fibre optique monomodale (la longueur de la cavité était de trois mètres !). Le champ après un tour était réinjecté au point de départ au moyen d'un coupleur unidirectionnel. Il était également proposé de décrire le couplage des champs au niveau de la jonction par un modèle matriciel. Celui-ci a souvent été repris par la suite pour étudier théoriquement la mise en association de plusieurs guides d'ondes [118, 119, 120]. Il s'agit d'une description spatiale de l'interaction des modes, qui s'oppose à une méthode introduite plus tard par B.E. Little *et al.* [65, 121] et qui se place dans le domaine temporel. Ces deux méthodes ont permis l'étude du couplage de plusieurs résonateurs, dans le but de créer des filtres appliqués au traitement de signaux aux fréquences optiques. La comparaison de ces modèles analytiques avec des simulations numériques de différences finies a permis d'en valider les résultats, tout en montrant que les études préliminaires à la synthèse de filtres pouvait être réalisées avec des moyens de calcul limités.

Cependant, le traitement numérique de ces structures est rendu complexe par le fait que les guides sont tridimensionnels. Les méthodes utilisant les différences finies sont, la plupart du temps, lourdes à mettre en place en trois dimensions, il est donc souvent supposé que les systèmes sont invariants dans une direction de l'espace (guides cylindriques). Une méthode alternative a été proposée en 1998 par M.K. Chin et S.T. Ho [116], dans laquelle la troisième dimension est traitée de manière approximative, et permet de rendre compte de phénomènes spécifiques comme les pertes radiatives dans le substrat.

Dans notre cas, il est indispensable de connaître la forme tridimensionnelle précise du champ électromagnétique dans tout l'espace afin d'être en mesure de simuler la trajectoire des atomes. Nous allons donc utiliser une méthode *ab-initio*, qui permet de résoudre de manière précise les équations de Maxwell pour calculer le champ diffracté par une structure complexe. Cette méthode est fondée sur les fonctions de Green dyadiques associées au champ électromagnétique et a déjà été appliquée à l'étude de résonateurs métalliques dans le domaine micro-ondes par P. Gay-Balmaz et O.J.F. Martin [122]. Elle sera décrite en détails dans le premier chapitre de cette partie. De plus, afin d'orienter nos calculs, nous avons besoin d'une théorie capable de décrire le comportement modal d'ensembles de résonateurs annulaires couplés. Nous présenterons donc dans une deuxième partie un modèle simplifié, utilisant le formalisme du couplage spatial des modes introduit par H.J. Shaw *et al.* Les résultats seront alors comparés à la simulation numérique du champ.

Nous allons tout d'abord exposer la méthode des fonctions de Green et l'algorithme de calcul du champ proche optique.

Chapitre 8

Formalisme des fonctions de Green

Nous présentons dans ce chapitre une méthode classique du calcul de champ proche optique. Elle permet la description d'une large classe de phénomènes optiques, de la simulation des images SNOM ou PSTM à l'étude de l'interaction matière-rayonnement, telle que la fluorescence d'une molécule en champ confiné [50, 52, 51]. Le traitement numérique du champ proche se heurte à la difficulté qu'aucune approximation n'est vraiment valable pour aborder des systèmes dont la taille est inférieure à la longueur d'onde. Il est donc nécessaire de résoudre de la manière la plus exacte possible les équations de Maxwell afin de s'adapter à la géométrie complexe des systèmes étudiés.

Cette méthode utilise les fonctions de Green dyadiques. Ce sont des tenseurs de rang deux, qui tiennent compte de la nature vectorielle du champ électromagnétique. Le formalisme est semblable à celui utilisé en physique quantique [123]. Le principe est de considérer la matière illuminée par le champ incident comme un ensemble d'éléments polarisables en interaction. Dans cette approche, chaque cellule de matière est sous l'influence non seulement du champ incident mais également du champ rayonné par l'ensemble des autres cellules de la structure. Il s'agit donc d'un problème auto-cohérent. L'intérêt de la méthode réside dans le fait que seule la matière diffractante est discrétisée (au contraire des méthodes utilisant par exemple les éléments finis), et qu'il n'y a pas à résoudre de problème de conditions aux limites.

Dans un premier temps nous décrivons le formalisme des fonctions de Green dyadiques et des équations intervenant dans la procédure de calcul. L'implémentation numérique sera exposée dans une deuxième partie. Nous achèverons le chapitre par un certain nombre d'exemples empruntés au domaine de l'optique intégrée.

8.1 Fonctions de Green en électromagnétisme

Cette partie est inspirée d'un cours extrait du livre de D. Courjon et C. Bainier [36].

Nous décrivons des milieux linéaires par rapport au champ électromagnétique. On peut donc se placer dans l'espace de Fourier pour la variable temporelle et considérer toutes les grandeurs physiques comme des fonctions harmoniques de t . Par conséquent la représentation complexe des fonctions scalaires et vectorielles sera adoptée, chacune de ces grandeurs étant par convention de la forme : $\mathbf{W}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}(\mathbf{r}, \omega)e^{-i\omega t}$.

Nous allons tout d'abord introduire la notion de fonction de Green associée à une équation aux dérivées partielles.

8.1.1 Notion de fonction de Green

Considérons une équation aux dérivées partielles linéaire inhomogène du type :

$$O f(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) \quad (8.1)$$

où O est un opérateur différentiel linéaire et g un terme source, fonction connue de la variable d'espace \mathbf{r} . La solution f dépend naturellement de g . L'intérêt de la fonction de Green est qu'elle donne une relation explicite entre ces deux fonctions. Elle est définie par l'équation différentielle :

$$O \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (8.2)$$

l'opérateur O agissant sur \mathbf{r} . Il s'agit donc de la réponse du système à une excitation élémentaire localisée en \mathbf{r}' ¹.

Décomposons alors le terme source g en une somme pondérée de sources élémentaires :

$$g(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') \quad (8.3)$$

L'opérateur O étant linéaire, la réponse à la somme de plusieurs termes sources est simplement la somme des réponses à chaque source considérée indépendamment. Une solution particulière de l'équation 8.1 s'écrit alors :

$$h(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') \quad (8.4)$$

Pour le vérifier, il suffit d'appliquer l'opérateur O à la fonction h :

$$\begin{aligned} O h(\mathbf{r}) &= O \int d\mathbf{r}' \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') \\ &= \int d\mathbf{r}' (O \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) g(\mathbf{r}') \\ &= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') \\ &= g(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (8.5)$$

Ainsi, la fonction h est bien une solution particulière de l'équation différentielle 8.1.

Un point délicat de ce calcul est la permutation de l'opérateur O avec l'intégrale. Cette opération ne peut être effectuée que si l'intégrand est convergent, et peut entraîner dans le cas contraire l'apparition de termes supplémentaires, comme nous le verrons dans la suite.

La notion de fonction de Green peut être généralisée aux deux cas suivants :

- si les fonctions considérées sont vectorielles, l'équation différentielle à résoudre est de la forme $\mathbf{O} \cdot \mathbf{W}(\mathbf{r}) = \mathbf{V}(\mathbf{r})$ où \mathbf{O} est un opérateur différentiel tensoriel, et $\mathbf{W}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ des vecteurs fonctions de la variable \mathbf{r} . La fonction de Green associée est alors elle-même tensorielle. Elle est dite "dyadique" lorsque qu'elle se présente sous la forme d'un opérateur tensoriel de rang deux.

¹Remarquons qu'il n'y a pas unicité de la fonction de Green. En particulier, pour \mathcal{G} donnée, toute fonction du type $\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ vérifie également 8.2 si $O H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$.

- le terme source peut dépendre lui-même de la grandeur f recherchée : cela revient à remplacer dans 8.1 la fonction g par la relation de composition $g \circ f(\mathbf{r})$. La nouvelle équation différentielle est donc $\Delta f(\mathbf{r}) = g \circ f(\mathbf{r})$. La solution h définie par 8.3 est alors toujours valable, à condition de remplacer g par le nouveau terme source : $h(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (g \circ h)(\mathbf{r}')$. Cependant, h est donnée cette fois de manière implicite par une équation auto-cohérente.

Exemple en électrostatique : l'équation de Poisson. Considérons tout d'abord une distribution de charges indépendante du temps $\rho(\mathbf{r})$. Le potentiel $\phi(\mathbf{r})$ électrostatique qu'elle crée dans tout l'espace vérifie l'équation de Poisson :

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (8.6)$$

où ϵ_0 est la constante diélectrique du vide. La fonction de Green associée est la solution de l'équation différentielle :

$$\Delta\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (8.7)$$

dont une forme est :

$$\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (8.8)$$

La solution $\phi(\mathbf{r})$ ainsi obtenue est l'expression classique du potentiel électrostatique créé dans tout l'espace par une distribution de charges :

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (8.9)$$

Cas dépendant du temps : l'équation d'Helmholtz. Une onde scalaire ou vectorielle se propageant dans un milieu homogène en présence de sources obéit à l'équation :

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi(\mathbf{r}, t) = -4\pi f(\mathbf{r}, t) \quad (8.10)$$

où c est la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu. En électromagnétisme, $\psi(\mathbf{r}, t)$ peut représenter le potentiel scalaire du champ électromagnétique. Le terme source $f(\mathbf{r})$ est alors proportionnel à la densité de charge en \mathbf{r} .

Cette équation étant linéaire, nous pouvons décomposer $\psi(\mathbf{r}, t)$ et $f(\mathbf{r}, t)$ par transformation de Fourier sur t en une somme de composantes monochromatiques de fréquence ω' :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\mathbf{r}, \omega') e^{-i\omega' t} d\omega' \quad f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\mathbf{r}, \omega') e^{-i\omega' t} d\omega'$$

En injectant ces développements dans l'équation 8.10, puis en la projetant sur la fonction $\exp(-i\omega t)$, l'équation de propagation prend alors la forme d'une équation d'Helmholtz inhomogène :

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}, \omega) = -4\pi f(\mathbf{r}, \omega), \quad \text{avec } k = \omega/c \quad (8.11)$$

Deux fonctions de Green sont [124] :

$$\mathcal{G}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (8.12)$$

Avec la convention $e^{-i\omega t}$ choisie pour la dépendance temporelle, $\mathcal{G}^{(+)}$ s'appelle la fonction de Green "retardée", tandis que $\mathcal{G}^{(-)}$ est la fonction de Green "avancée". Ces fonctions permettent d'obtenir les expressions des potentiels retardés ou avancés en électromagnétisme [124].

Le choix de l'une ou de l'autre peut être délicat et dépend des conditions aux limites temporelles du problème considéré. Dans nombre de cas, on considère que les sources sont "allumées" à $t \rightarrow -\infty$, en particulier quand on ne s'intéresse pas aux régimes transitoires. On comprend intuitivement que c'est la fonction de Green retardée $\mathcal{G}^{(+)}$ qui est alors adaptée au problème. Cette fonction scalaire est directement reliée à la fonction de Green dyadique utilisée en optique du champ proche, comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant.

8.1.2 Fonction de Green dyadique pour un milieu diélectrique linéaire, homogène et isotrope

Nous allons maintenant calculer l'expression de la fonction de Green dyadique d'un milieu linéaire, homogène, isotrope et non magnétique. Celui-ci, appelé dans la suite milieu de référence, sera caractérisé par sa permittivité absolue fréquentielle $\varepsilon(\omega)$ et sa densité de polarisation $\mathbf{P}_0 = \varepsilon(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$.

Afin de donner un sens physique à cette fonction de Green, nous devons introduire une source de champ électromagnétique. Celle-ci est représentée par un objet de forme quelconque, caractérisé par une densité de polarisation de composante de Fourier $\mathbf{P}_1(\mathbf{r}, \omega)$ et une permittivité absolue $\varepsilon_1(\mathbf{r}, \omega)$. Nous introduisons également le volume \mathcal{V} occupé par l'objet. À l'extérieur de \mathcal{V} la fonction \mathbf{P}_1 est nulle.

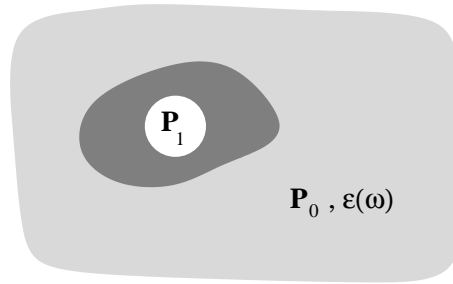


FIG. 8.1 – Objet source plongé dans un milieu diélectrique de permittivité absolue $\varepsilon(\omega)$.

L'évolution du champ électromagnétique en fonction de t et \mathbf{r} est décrit dans ce milieu matériel par les quatre équations de Maxwell :

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (8.14)$$

$$\varepsilon(\omega)\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \rho(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.15)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega\varepsilon(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.16)$$

avec $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega)/\mu_0$. Les termes de sources dans ces équations prennent la forme des quantités ρ et \mathbf{j} associées respectivement aux excès de charges liées et de densité de courant liés par rapport au milieu de référence. Un développement multipolaire de ces grandeurs donne au premier ordre :

$$\rho(\mathbf{r}, \omega) = -\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.17)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.18)$$

Ici, \mathbf{P} représente l'écart entre la polarisation de l'objet et du milieu de référence. Cette fonction est définie par :

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{r} \notin \mathcal{V} \\ \mathbf{P}_1(\mathbf{r}, \omega) - \mathbf{P}_0(\mathbf{r}, \omega) = \chi(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) & \text{si } \mathbf{r} \in \mathcal{V} \end{cases} \quad (8.19)$$

avec $\chi(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_1(\mathbf{r}, \omega) - \varepsilon(\omega)$. C'est donc une fonction implicitement dépendante du champ électrique. On peut réécrire les équations de Maxwell en faisant apparaître \mathbf{P} :

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (8.21)$$

$$\varepsilon(\omega)\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.22)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega\varepsilon(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.23)$$

Ainsi, dans le volume \mathcal{V} , tout se passe comme dans le milieu de référence, avec les termes sources supplémentaires $-i\omega\mathbf{P}$ et $-\nabla \cdot \mathbf{P}$.

Équation de propagation du champ électrique. En appliquant l'opérateur rotationnel à l'équation de Maxwell-Faraday 8.20 on aboutit à l'équation d'onde :

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)) &= i\omega\mu_0 [-i\omega\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega\varepsilon(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)] \\ \varepsilon_0\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)) - \varepsilon(\omega)k_0^2\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= k_0^2\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \end{aligned} \quad (8.24)$$

avec $k_0 = \omega/c$. Si maintenant nous introduisons l'opérateur différentiel, visiblement linéaire :

$$\mathcal{O} = \varepsilon_0\nabla \times (\nabla \times \cdot) - \varepsilon(\omega)k_0^2 \quad (8.25)$$

l'équation 8.24 peut être mise sous la forme :

$$\mathcal{O}\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = k_0^2\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.26)$$

Fonction de Green dyadique du milieu de référence. Il est alors possible de définir une fonction de Green dyadique \mathbf{S}_0 agissant sur le vecteur champ électrique par :

$$\mathcal{O}\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = k_0^2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathbf{1} \quad \text{avec} \quad \mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (8.27)$$

où l'opérateur \mathcal{O} agit sur la variable \mathbf{r} . Considérons le champ défini par :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{r}' \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{P}(\mathbf{r}', \omega) \quad (8.28)$$

Par un calcul similaire à 8.5, on vérifiera aisément que la fonction 8.28 est bien une solution particulière de l'équation de propagation du champ électrique. La solution générale de 8.24 est donc :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \int d\mathbf{r}' \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{P}(\mathbf{r}', \omega) \quad (8.29)$$

où $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega)$ est la solution générale de l'équation homogène. Un autre point de vue est de considérer $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega)$ comme le champ incident, et $\int d\mathbf{r}' \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{P}(\mathbf{r}', \omega)$ comme le champ diffracté par la structure.

Cette expression est exacte dans le cas où le champ électrique est évalué en un point *extérieure* à l'objet diffractant. On a alors le droit de permuter fonction de Green et intégrale dans le calcul 8.5. Nous allons revenir dans la suite de l'exposé au cas où $\mathbf{r} \in \mathcal{V}$.

La signification physique du tenseur de Green est illustrée sur la figure 8.2. Considérons un dipôle élémentaire \mathbf{p}_0 placé en \mathbf{r}_0 , oscillant à la fréquence $\omega/2\pi$. Alors le terme de polarisation est une fonction de Dirac centrée en \mathbf{r}_0 , et le dipôle crée en un point \mathbf{r} de l'espace un champ égal à :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) \cdot \mathbf{p}_0$$

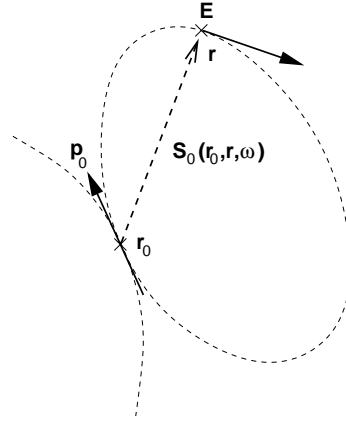


FIG. 8.2 – Signification physique du tenseur de Green, dans le cas d'un milieu homogène.

Le tenseur \mathbf{S}_0 traduit donc la propagation du champ dans le vide, directement de la position \mathbf{r}_0 à la position \mathbf{r} . Cet exemple nous montre de plus que $\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega)$ n'est rien d'autre que le champ rayonné en \mathbf{r} par un dipôle placé en \mathbf{r}_0 . Nous allons maintenant calculer explicitement \mathbf{S}_0 .

Relation entre $\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ et la fonction de Green scalaire $\mathcal{G}^{(+)}$. Une méthode très simple de calcul de ce tenseur est détaillée dans la référence [125]. Nous repartons de l'équation définissant le tenseur de Green :

$$\varepsilon_0 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)) - \varepsilon(\omega) k_0^2 \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = k_0^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1} \quad (8.30)$$

Puisque la divergence d'un rotationnel est nulle, le produit scalaire de l'opérateur ∇ avec les deux membres de l'équation précédente donne :

$$-\varepsilon(\omega)\nabla \cdot \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1} \quad (8.31)$$

De plus, en utilisant l'identité $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{W}) = \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{W}) - \Delta \mathbf{W}$, nous pouvons mettre l'équation 8.30 sous une deuxième forme :

$$\nabla \cdot \nabla \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \left(\Delta + \frac{1}{\varepsilon_0} k_0^2 \varepsilon(\omega) \right) \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{\varepsilon_0} k_0^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1} \quad (8.32)$$

En combinant les deux relations 8.31 et 8.32, on trouve l'identité :

$$\left(\Delta + \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} k_0^2 \right) \mathbf{S}_0 = - \left(\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \nabla \nabla + \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1} \quad (8.33)$$

Dans cette expression, $\nabla \nabla$ représente l'opérateur différentiel tensoriel défini par :

$$\nabla \nabla = \begin{bmatrix} \partial^2 / \partial x^2 & \partial^2 / \partial x \partial y & \partial^2 / \partial x \partial z \\ \partial^2 / \partial y \partial x & \partial^2 / \partial y^2 & \partial^2 / \partial y \partial z \\ \partial^2 / \partial z \partial x & \partial^2 / \partial z \partial y & \partial^2 / \partial z^2 \end{bmatrix}$$

Rappelons maintenant la définition de la fonction de Green scalaire de l'équation de Helmholtz :

$$\left(\Delta + \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} k_0^2 \right) \mathcal{G}^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (8.34)$$

Nous pouvons alors remplacer la fonction de Dirac par son expression en fonction de $\mathcal{G}^{(+)}$. En combinant cette expression avec l'expression 8.34, on obtient :

$$\left(\Delta + \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} k_0^2 \right) \left[\frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \nabla \nabla + \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \mathbf{1} \right\} \mathcal{G}^{(+)} - \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] = 0 \quad (8.35)$$

Une expression possible de la fonction de Green \mathbf{S}_0 est donc :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \frac{1}{4\pi} \left[\frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \mathbf{1} + \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \nabla \cdot \nabla \right] \mathcal{G}^{(+)} \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[\frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \mathbf{1} + \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \nabla \nabla \right] \frac{e^{ik(\omega)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (8.36)$$

où $k(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)/\varepsilon_0} k_0$ est le vecteur d'onde dans le milieu de référence.

Expression analytique. Le développement de 8.36 fait apparaître trois tenseurs \mathbf{T}_1 , \mathbf{T}_2 et \mathbf{T}_3 , fonctions de la différence $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Ils décrivent les effets de champ proche (\mathbf{T}_2 et \mathbf{T}_3) et de champ lointain (\mathbf{T}_1) :

$$\mathbf{S}_0(\mathbf{R}, \omega) = \left[-k^2(\omega) \mathbf{T}_1(\mathbf{R}) - ik(\omega) \mathbf{T}_2(\mathbf{R}) + \mathbf{T}_3(\mathbf{R}) \right] \cdot \frac{e^{ik(\omega)R}}{4\pi \varepsilon(\omega)} \quad (8.37)$$

avec :

$$\mathbf{T}_1(\mathbf{R}) = \frac{\mathbf{R}\mathbf{R} - I\mathbf{R}^2}{R^3} \quad (8.38)$$

$$\mathbf{T}_2(\mathbf{R}) = \frac{3\mathbf{R}\mathbf{R} - I\mathbf{R}^2}{R^4} \quad (8.39)$$

$$\mathbf{T}_3(\mathbf{R}) = \frac{3\mathbf{R}\mathbf{R} - I\mathbf{R}^2}{R^5} \quad (8.40)$$

Ainsi que nous l'avons fait remarquer dans la première partie, ces tenseurs sont de portées différentes. En champ lointain, seul \mathbf{T}_1 , qui décroît comme $1/R$, subsiste. Dans la limite des faibles distances devant la longueur d'onde, c'est-à-dire la limite électrostatique, le terme dominant est \mathbf{T}_3 . Comme cela a été dit plus haut, on reconnaît le champ rayonné par un dipôle électrostatique et sa dépendance en $1/R^3$. Entre ces deux régimes extrêmes apparaît un terme supplémentaire, de décroissance intermédiaire en $1/R^2$, qui avec \mathbf{T}_3 décrit la zone de champ proche.

Terme de dépolarisation. Les trois tenseurs \mathbf{T}_1 , \mathbf{T}_2 et \mathbf{T}_3 sont singuliers en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$. Ceci ne pose aucun problème lorsque le champ est calculé en dehors de la zone source. Cependant, une difficulté déjà signalée survient lorsque le point d'évaluation se trouve à l'intérieur de \mathcal{V} . Notamment, la version discrétisée de l'équation 8.29 devient, dans une cellule en $\mathbf{r}_j \in \mathcal{V}$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_j, \omega) + \sum_{i \neq j} v_i \mathbf{S}_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega) \mathbf{P}(\mathbf{r}_i, \omega) + v_j \mathbf{S}_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j, \omega) \mathbf{P}(\mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.41)$$

où v_i est le volume de la i -ème cellule de discrétisation. Le deuxième terme de la somme dans le membre de droite converge, mais pas le troisième, car il comporte $\mathbf{S}_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j, \omega)$. Plus généralement ce problème est lié à la divergence de l'intégrand dans l'équation de Lippmann-Schwinger, qui rend délicate la permutation de l'intégrale et de l'opérateur \mathcal{O} . Une procédure de renormalisation est alors nécessaire.

Cette opération s'explique simplement à partir du calcul du champ de dépolarisation régnant au centre d'un élément volumique uniformément polarisé. Considérons un volume sphérique entourant le point \mathbf{r}_j . Nous pouvons supposer légitimement celui-ci suffisamment faible pour pouvoir y négliger les variations de $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega)$. Le potentiel à l'intérieur de la sphère est alors :

$$V(\mathbf{r}) \approx \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j| < R} d\mathbf{r}' \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{4\pi\epsilon(\omega)|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)}{3\epsilon(\omega)}$$

Le calcul de cette intégrale est détaillé dans [124]. Le champ est donné par le gradient de cette expression :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_j) = -\nabla V(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j} = -\frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}_j)}{3\epsilon(\omega)}$$

Si l'on effectue le calcul de \mathbf{E} en permutant l'intégrale et le gradient, le résultat diverge. Le champ électrique régnant dans la sphère s'appelle le champ de dépolarisation.

Dans le cas présent, le volume de discrétisation est de forme parallélépipédique. Or le champ de dépolarisation dépend fortement de la forme de cette cellule, mais il sera en général de la forme $\mathbf{L}/\epsilon(\omega)$ où \mathbf{L} est une matrice 3×3 à coefficients constants. On

peut montrer en particulier que pour une cellule cubique, on retrouve le même terme $\mathbf{L} = (1/3)\mathbf{1}$ que pour un volume sphérique. On trouvera plus de précisions sur ce point dans la référence [126].

Ainsi, dans l'expression 8.41, il faut remplacer le terme divergent par le champ de dépolarisation. Elle se réécrit donc :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_j, \omega) + \sum_{i \neq j} v_i \mathbf{S}_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega) \mathbf{P}(\mathbf{r}_i, \omega) - \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}_j)}{3\epsilon(\omega)}$$

Nous pouvons inclure directement ce résultat dans l'expression du tenseur de Green en ajoutant un terme supplémentaire :

$$\mathbf{S}_0(\mathbf{R}, \omega) = \left[-k(\omega)^2 \mathbf{T}_1(\mathbf{R}) - ik(\omega) \mathbf{T}_2(\mathbf{R}) + \mathbf{T}_3(\mathbf{R}) \right] \cdot \frac{e^{ik(\omega)R}}{4\pi\epsilon(\omega)} - \frac{\delta(\mathbf{R})}{3\epsilon(\omega)} \quad (8.42)$$

8.1.3 Équation de Lippmann-Schwinger

Nous avons mentionné dans la section précédente que la polarisation volumique est proportionnelle au champ électrique macroscopique. En remplaçant \mathbf{P} par son expression 8.19 en fonction de \mathbf{E} dans l'équation 8.29 on trouve :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \int_{\mathcal{V}'} d\mathbf{r}' \mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \chi(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.43)$$

Cette expression porte le nom d'équation de Lippmann-Schwinger. Elle est auto-cohérente, le champ inconnu apparaissant à la fois dans les membres de gauche et de droite. Elle peut être vue comme une généralisation du principe de Huygens-Fresnel, puisque le champ en un point \mathbf{r} est la superposition de tous les champs dipolaires émis par les cellules élémentaires constituant l'objet, eux-mêmes soumis à l'influence du champ électrique macroscopique (le lecteur intéressé par la généralisation du principe de Huygens-Fresnel dans le champ proche optique pourra consulter la référence [127]).

L'autre point important est que, la susceptibilité étant nulle à l'extérieur de \mathcal{V}' , l'intégrale porte sur un volume fini. Il suffit donc de connaître le champ à l'intérieur de l'objet pour pouvoir le calculer partout dans l'espace.

Qu'en est-il des expérimentations généralement effectuées en optique de champ proche, et cette méthode est-elle adaptée ? L'échantillon étudié, que ce soit en configuration SNOM ou PSTM, est toujours déposé sur une surface (voir figure 8.3). Le champ d'illumination est de différents types. Il peut provenir, comme en mode PSTM, de la réflexion totale d'un champ incident sur l'interface verre-air. Il s'agit alors d'une onde évanescente, de décroissance exponentielle avec la hauteur.

Pour traiter ce problème avec la méthode des propagateurs, quelques aménagements doivent être effectués. En effet, dans le cas où le système diffractant est composé de l'objet et du demi-espace inférieur, le champ de référence étant l'onde plane incidente se propageant dans le prisme, il faudrait, en toute rigueur, discrétiser un demi-espace infini, ce qui n'est bien entendu pas envisageable.

Il est en fait plus judicieux de changer de système de référence, en cherchant la fonction de Green décrivant la réponse optique d'un demi-espace de matière. Nous allons donc introduire le propagateur de surface.

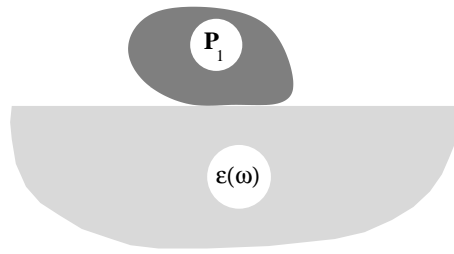


FIG. 8.3 – Système déposé sur la surface d'un prisme de permittivité absolue $\epsilon(\omega)$.

8.1.4 Tenseur de Green surfacique

Reprenons l'exemple introduit précédemment pour expliquer la signification du tenseur de susceptibilité d'un milieu homogène. Cette fois, le dipôle est placé dans le vide ($\epsilon(\omega) = \epsilon_0$) à une distance h de la surface d'un milieu de permittivité absolue ϵ_1 (figure 8.4). Le champ rayonné par la source peut emprunter deux trajets distincts pour aller de \mathbf{r}_0 à \mathbf{r} . Au champ rayonné par le dipôle empruntant le trajet 1, décrit par le tenseur $\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega)$, doit être ajoutée la contribution du champ réfléchi par la surface. Celle-ci nous donnera l'expression du propagateur de surface $\mathbf{S}_{surf}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega)$.

Bien que cette contribution \mathbf{S}_{surf} ne soit pas calculable analytiquement dans l'espace direct à cause des effets de retard, nous pouvons en donner une expression simple dans la limite électrostatique (pour une étude détaillée de l'influence du retard dans le propagateur de surface, voir la référence [128]). Pour calculer ce propagateur, nous évaluons le champ

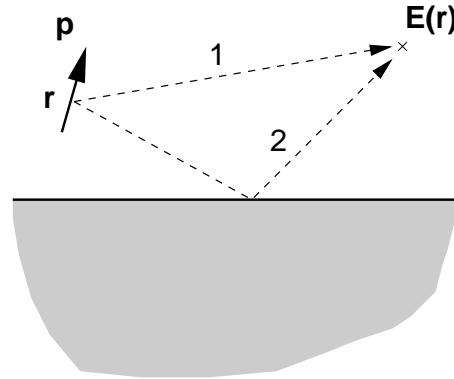


FIG. 8.4 – Champ électrique rayonné par un dipôle en présence d'une surface.

créé par \mathbf{p}_0 en un point $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Pour cela, nous devons supposer que le dipôle se trouve à une distance suffisamment faible devant la longueur d'onde pour pouvoir négliger le retard dû à la propagation du signal. On peut alors appliquer la théorie des images en électrostatique. Le champ réfléchi par la surface est créé par le dipôle image de \mathbf{p}_0 situé en $\mathbf{r}_{im} = (x, y, -z)$, défini par :

$$\mathbf{p}_{im}(\omega) = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_0}{\epsilon_1 + \epsilon_0} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{p}_0 \quad (8.44)$$

On propage alors ce terme au moyen de la contribution électrostatique \mathbf{T}_3 du tenseur du

vide jusqu'en \mathbf{r} :

$$\mathbf{E}_{surf}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{T}_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{im}, \omega) \frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{im}|}}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{\epsilon_1 - \epsilon_0}{\epsilon_1 + \epsilon_0} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{p}_0 \quad (8.45)$$

Par conséquent, le tenseur de Green de surface dans la limite électrostatique est :

$$\mathbf{S}_{surf}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) = \mathbf{T}_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{im}, \omega) \cdot \frac{\epsilon_1 - \epsilon_0}{\epsilon_1 + \epsilon_0} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{im}|}}{4\pi\epsilon_0} \quad (8.46)$$

L'équation de Lippmann-Schwinger 8.43 devient donc :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \int_{\mathcal{V}'} d\mathbf{r}' [\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \mathbf{S}_{surf}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)] \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) \quad (8.47)$$

Nous noterons $\mathbf{S} = \mathbf{S}_0 + \mathbf{S}_{surf}$. Dans cette dernière expression, le nouveau champ de référence \mathbf{E}_0 doit tenir compte de la surface : il s'agit donc de l'onde induite au-dessus de la surface du système de référence. Sa forme dépend de l'éclairage de l'échantillon. En particulier, si l'interface est illuminée par une onde plane, le champ \mathbf{E}_0 est l'onde évanescente de Fresnel déjà mentionnée dans le chapitre 1. Dans cette étude, nous allons utiliser un mode d'éclairage plus complexe, que nous détaillerons dans la suite.

Nous venons de voir comment un changement de système de référence modifie le tenseur de Green. En présence d'une surface plane, il faut ajouter un terme supplémentaire afin de vérifier les conditions aux limites à l'interface. Des propagateurs plus complexes ont été calculés par M. Paulus et O.J.F. Martin pour décrire des milieux de références stratifiés [129, 130].

De façon plus générale, il existe une relation entre les propagateurs de différents systèmes. Cette équation issue de la physique des milieux condensés est appelée équation de Dyson.

8.1.5 Changement de milieu de référence et équation de Dyson

Nous allons montrer dans ce paragraphe de quelle manière l'équation de Dyson peut être à la base d'un algorithme général pour le calcul des champs électromagnétiques.

Forme résolue de l'équation de Lippmann-Schwinger. Rappelons que l'équation de Lippmann-Schwinger est la forme intégrale associée à l'équation différentielle suivante :

$$\mathcal{O}\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \chi(\mathbf{r}, \omega)k_0^2\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (8.48)$$

C'est à partir d'une équation similaire que nous avons pu définir la fonction de Green dyadique \mathbf{S}_0 comme solution de $\mathcal{O}\mathbf{S}_0 = k_0^2\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{1}$. Nous pouvons changer de point de vue en considérant la solution générale 8.43, somme du champ "libre" se propageant dans le milieu de référence et du champ diffracté, comme la solution libre du système complet. Ainsi, à l'expression

$$[\mathcal{O} - k_0^2\chi(\mathbf{r}, \omega)] \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (8.49)$$

est associée la nouvelle fonction de Green $s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$, définie par :

$$[O - k_0^2 \chi(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{1}] s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = k_0^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1} \quad (8.50)$$

Considérons alors le champ :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \int d\mathbf{r}' s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', \omega) \quad (8.51)$$

Appliquons-lui l'opérateur $\mathcal{L} = O - k_0^2 \chi(\omega) \mathbf{1}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= \mathcal{L} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \mathcal{L} \int d\mathbf{r}' s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', \omega) \\ &= \mathcal{L} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \int d\mathbf{r}' \mathcal{L} s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', \omega) \\ &= \mathcal{L} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \int d\mathbf{r}' k_0^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', \omega) \\ &= [O - k_0^2 \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{1}] \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + k_0^2 \chi(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) \\ &= O \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) = 0 \end{aligned}$$

Ainsi, cette solution obéit également à l'équation d'onde. De plus, elle tend vers la même limite $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega)$, quand $\chi(\mathbf{r}, \omega) \rightarrow 0$, que la solution définie par 8.43, elle représente donc la même fonction. L'équation 8.51 a pour avantage de ne plus faire intervenir le champ inconnu dans le membre de droite : c'est une forme résolue en \mathbf{E} de l'équation de Lippmann-Schwinger. Il s'agit alors de calculer le tenseur de Green complet qui, lui, n'est plus connu explicitement. Ce calcul se fait au moyen de l'équation équivalente à celle de Lippmann-Schwinger pour les fonctions de Green, l'équation de Dyson.

Équation de Dyson. Les deux fonctions de Green précédemment définies obéissent aux équations :

$$O \mathbf{S} = k_0^2 \delta \quad (8.52)$$

$$[O - k_0^2 \chi \mathbf{1}] s = k_0^2 \delta \quad (8.53)$$

Nous pouvons donc exprimer la fonction de Green $\mathbf{S} = k_0^2 O^{-1} \delta$. En multipliant² 8.53 par \mathbf{S} , on déduit l'équation de Dyson :

$$s = \mathbf{S} + s \chi \mathbf{S} \quad (8.54)$$

ou encore, sous sa forme intégrale :

$$s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \int d\mathbf{r}'' s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) \chi(\mathbf{r}'', \omega) \mathbf{S}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega) \quad (8.55)$$

Cette expression établit la relation entre le propagateur du système de référence et celui du système complet, et elle relie de manière plus générale deux fonctions de Green de deux systèmes différant d'un terme de susceptibilité χ .

Le tenseur s est également utilisé pour exprimer la densité locale d'états du champ électromagnétique, proportionnelle à la partie imaginaire de la trace de s . C'est l'équi-

²Au sens où : $[\mathbf{A} \times \mathbf{B}](\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{r}'' \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \mathbf{B}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$.

valent électromagnétique de la densité locale d'états électroniques en physique du solide. Cette grandeur intervient notamment dans le taux de fluorescence d'une molécule placée dans le champ proche. Elle peut être imagée, sous certaines conditions expérimentales, lorsque l'on sonde le voisinage d'une structure en mode SNOM [44].

L'équation de Dyson constitue le pivot de la procédure numérique que nous allons détailler maintenant.

8.2 Implémentation numérique

L'équation de Lippmann-Schwinger sous sa forme discrétisée est :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \sum_j v_j S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j, \omega) \chi(\mathbf{r}_j, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.56)$$

Cette écriture suggère un calcul en deux étapes. Premièrement, évaluation du champ interne à l'objet, par inversion de l'équation auto-cohérente ainsi obtenue, puis projection du champ interne à l'extérieur au moyen de 8.56. Examinons cette première étape.

En un point \mathbf{r}_i de l'objet, le champ électrique est :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, \omega) + \sum_j v_j S(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) \chi(\mathbf{r}_j, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.57)$$

Pour calculer $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$, on fait intervenir la matrice \mathbf{M} définie par :

$$\begin{aligned} \sum_j [\delta_{ij} \mathbf{1} - v_j S(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) \chi(\mathbf{r}_j, \omega)] \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, \omega) \\ \sum_j \mathbf{M}_{ij} \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, \omega) \end{aligned} \quad (8.58)$$

Il faut donc inverser une matrice $3N \times 3N$, N étant le nombre de cellules de discrétisation. Elle a la forme suivante :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} - \chi(\mathbf{r}_1, \omega) S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \omega) & -\chi(\mathbf{r}_2, \omega) S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) & \cdots \\ -\chi(\mathbf{r}_1, \omega) S(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega) & \ddots & \\ \vdots & & \mathbf{1} - \chi(\mathbf{r}_N, \omega) S(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}_N, \omega) \end{bmatrix}$$

Pour s'adapter à des géométries complexes et effectuer un calcul numérique stable et précis, il est difficile d'inverser directement la matrice \mathbf{M} avec une garantie de bonne précision. En effet, l'ordre de grandeur du nombre de cellules varie de 3000 à 10000. Cela conduit à des matrices 30000×30000 qu'il faut traiter en mode "nombre complexe" avec l'option double précision.

Pour ce type de résolution, dès 1995, O.J.F. Martin, C. Girard et A. Dereux [68] ont proposé une méthode itérative reposant sur la résolution de l'équation de Dyson. Le but est de calculer le propagateur du système complet, d'en déduire le champ interne à la structure, puis de le propager à l'extérieur au moyen de l'équation de Lippmann-Schwinger 8.43.

Calcul du propagateur du système complet. Partant de l'expression connue du tenseur de Green associé à une surface, nous allons construire la structure cellule par cellule, en calculant itérativement le nouveau propagateur associé au moyen de l'équation de Dyson.

Supposons donc que le système soit celui représenté sur la figure 8.5. Il est discrétisé en N cellules de volume v_i . Nous cherchons à résoudre l'équation :

$$S(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) = \mathbf{S}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) + \sum_{k=1}^N v_k \mathbf{S}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k, \omega) \chi(\mathbf{r}_k, \omega) S(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.59)$$

Prenons pour hypothèse que le propagateur $\mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)$ est connu pour tous les couples de points $(i, j) \in [1, N]^2$. Nous introduisons la n -ième cellule en \mathbf{r}_n , et nous allons calculer le tenseur de Green à n cellules $\mathbf{S}^{(n)}$.

L'équation de Dyson reliant les deux propagateurs est :

$$\mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) = \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) + v_n \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_n, \omega) \chi(\mathbf{r}_n, \omega) \mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.60)$$

Il faut dans un premier temps calculer la "tête de colonne" $\mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega), \forall j \in [1, N]$:

$$\mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega) = \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega) + v_n \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_n, \omega) \chi(\mathbf{r}_n, \omega) \mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.61)$$

ce qui nécessite d'inverser une matrice 3×3 :

$$\mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega) = \left[\mathbf{1} - v_n \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_n, \omega) \chi(\mathbf{r}_n, \omega) \right]^{-1} \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_n, \omega) \quad (8.62)$$

en introduisant bien entendu le terme de dépolarisation dans $\mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \omega)$ en début de procédure. Une fois connus, les éléments $\mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_j, \omega)$ permettent le calcul de $\mathbf{S}^{(n)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)$ pour tout $i \in [1, N]$ par 8.55.

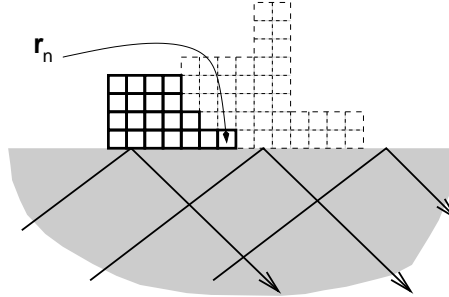


FIG. 8.5 –

On renouvelle cette opération jusqu'à connaître le propagateur $s = \mathbf{S}^{(N)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)$. Ainsi, l'inversion d'une matrice $3N \times 3N$, qui peut être instable lorsque la matrice est mal conditionnée, est remplacée par l'inversion de N matrices 3×3 .

Calcul du champ interne. Le champ interne se calcule directement à partir de l'équation de Lippmann-Schwinger résolue en \mathbf{E} :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, \omega) + \sum_j v_j \mathbf{S}^{(N)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) \chi(\mathbf{r}_j, \omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.63)$$

Calcul du champ dans tout l'espace. On obtient le champ en tout point de l'espace en propageant le champ interne au moyen du tenseur de Green de référence :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) + \sum_j v_j \mathbf{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j, \omega) \chi(\mathbf{r}_j, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \omega) \quad (8.64)$$

Le champ d'illumination peut être de plusieurs formes. Pour une expérience de type PSTM, \mathbf{E}_0 est approximé par une onde plane. Il s'agit donc d'une onde évanescente en z et propagative dans une direction parallèle à la surface. Cette onde évanescente est frustrée par la pointe sonde qui la transforme en lumière capable de se propager dans la direction Oz . L'utilisation d'un tel champ optique n'est pas envisageable pour adresser un guide de section sub-longueur d'onde. Une solution proposée par Jean-Claude Weeber (Laboratoire de Physique de l'Université de Bourgogne) consiste à utiliser un faisceau gaussien focalisé à la réflexion totale : il est évanescent dans les trois directions spatiales et permet la conversion de l'onde en modes propagatifs de la même manière que le fait la pointe du microscope optique avec l'onde évanescente classique. Nous allons maintenant donner les équations de ce champ optique particulier.

8.2.1 Faisceau gaussien focalisé.

Rappelons pour commencer l'expression de l'onde évanescente plane. Une onde électromagnétique, se propageant dans un milieu d'indice n_1 , incidente sur une interface avec le vide selon un angle θ avec la normale est totalement réfléchie si θ est supérieur à la valeur limite $\theta_l = \arcsin(1/n_1)$. Le vecteur d'onde du champ transmis possède alors une composante verticale complexe et s'écrit $\mathbf{k} = (n_1 \mathbf{k}_0^\parallel, i\kappa_0)$ avec $\kappa_0 = k_0 \sqrt{n_1^2 \sin^2(\theta) - 1}$.

En plus des degrés de liberté correspondant à l'orientation du faisceau par rapport à l'interface et à l'objet (θ et ϕ), la nature vectorielle du champ électrique nécessite de tenir compte de la polarisation de la lumière. On distingue alors les deux modes TE (champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence) et TM (champ magnétique perpendiculaire au plan d'incidence). Pour ces deux polarisations, l'onde évanescente correspondante s'écrit :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = E_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} T_{TE} e^{in_1 \mathbf{k}_0^\parallel \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_0 z} \quad \text{avec} \quad T_{TE} = \frac{2n_1 k_0 \cos \theta}{n_1 k_0 \cos \theta + i\kappa_0}$$

et

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = E_0 \begin{pmatrix} i\kappa_0 \\ 0 \\ n_1 \sin \theta \end{pmatrix} T_{TM} e^{in_1 \mathbf{k}_0^\parallel \cdot \mathbf{l}} e^{-\kappa_0 z} \quad \text{avec} \quad T_{TM} = \frac{2n_1 k_0 \cos \theta}{k_0 \cos \theta + in_1 \kappa_0}$$

Le calcul présenté dans le paragraphe suivant s'appuie sur les travaux de D. Van Labeke [131] et J.C. Weeber [132].

Faisceau gaussien focalisé. L'expression analytique des composantes de Fourier spatiales d'un faisceau monochromatique gaussien sont connues. Introduisons pour cela la base dont l'axe z' est parallèle à la direction de propagation du faisceau (voir figure 8.6) et dont l'axe x' est parallèle au plan d'incidence :

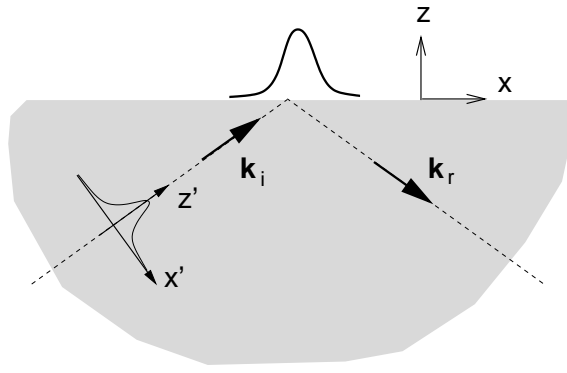


FIG. 8.6 – Faisceau focalisé gaussien incident sur une interface verre-vidé.

$$\mathbf{E}_0(x', y', z', \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dv \mathbf{A}(u, v) e^{i[ux' + vy' + wz']} \quad (8.65)$$

$$w = (n_1^2 k_0^2 - u^2 - v^2)^{1/2}$$

L'amplitude de chacune des composantes de Fourier est :

$$\begin{aligned} A_0(u, v) &= \pi a_0 e^{-a_0^2(u^2 + v^2)/4} \\ A_{x'} &= \alpha_{x'} A_0(u, v) \\ A_{y'} &= \alpha_{y'} A_0(u, v) \\ A_{z'} &= \frac{-1}{w} (u A_{x'} + v A_{y'}) \end{aligned}$$

Dans ces expressions, a_0^2 détermine l'aire de focalisation du faisceau incident (a_0 est le rayon de ceinture). Les paramètres $\alpha_{x'}$ et $\alpha_{y'}$ déterminent la polarisation³ du faisceau incident : ils valent respectivement 1 et 0 pour une polarisation TE et 1 et 0 pour la polarisation TM.

Le champ \mathbf{E}_0 est exprimé dans le repère initial après rotation des composantes $A_{x'}$ et $A_{z'}$ d'un angle $\pi/2 - \theta$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0(x, y, z, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dv \mathbf{A}(u, v) e^{i[k_x(x-x_0) + k_y(y-y_0) + k_z(z-z_0)]} \\ A_x &= \alpha_{x'} \left[\cos(\theta) - \frac{u}{w} \sin(\theta) \right] A_0(u, v) - \alpha_{y'} \frac{v}{w} \sin(\theta) A_0(u, v) \\ A_y &= \alpha_{y'} A_0(u, v) \\ A_z &= \frac{-1}{k_{1z}} (k_x A_x + k_y A_y) \\ k_x &= \cos(\theta)u + \sin(\theta)w, \quad k_y = v, \quad k_{1z} = (n_1^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2} \end{aligned}$$

Les coordonnées (x_0, y_0, z_0) définissent le point de focalisation du faisceau, qui est également le centre du repère (x, y, z) .

Nous allons maintenant calculer le champ transmis en décomposant chacune des com-

³En fait, le faisceau gaussien n'étant pas une onde transverse, la notion de polarisation ne peut pas lui être appliquée de manière rigoureuse. On peut tout de même définir une polarisation en ne tenant compte que des composantes $E_{x'}$ et $E_{y'}$ car la composante $E_{z'}$ reste faible.

posantes de Fourier de \mathbf{E}_0 en leurs contributions TE et TM de la manière suivante :

$$\mathbf{A}_{\parallel}(u, v) = \mathbf{A}_{TE} + \mathbf{A}_{TM} \quad (8.66)$$

$$\mathbf{A}_{TE} = \frac{1}{k_x^2 + k_y^2} (k_y A_x - k_x A_y) [k_y \mathbf{u}_x - k_x \mathbf{u}_y] \quad (8.67)$$

$$\mathbf{A}_{TM} = \frac{1}{k_x^2 + k_y^2} (k_y A_x + k_x A_y) [k_y \mathbf{u}_x + k_x \mathbf{u}_y] \quad (8.68)$$

Les composantes transmises sont alors :

$$\mathbf{A}_{\parallel}^T = \mathbf{A}_{TE}^T + \mathbf{A}_{TM}^T$$

$$\mathbf{A}_{TE}^T = T_{TE} \mathbf{A}_{TE}$$

$$\mathbf{A}_{TM}^T = T_{TM} \mathbf{A}_{TM}$$

Le champ transmis a donc la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\parallel}^T &= \frac{1}{k_x^2 + k_y^2} \begin{bmatrix} k_x^2 T_{TM} + k_y^2 T_{TE} & k_x k_y (T_{TM} - T_{TE}) \\ k_x k_y (T_{TM} + T_{TE}) & k_x^2 T_{TE} + k_y^2 T_{TM} \end{bmatrix} \mathbf{A}_0(u, v) \\ E_0^T(\mathbf{r}, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dv \mathbf{A}_{\parallel}^T(u, v) e^{i[k_x(x-x_0) + k_y(y-y_0) + k_{3z}(z-z_0)]} \\ k_{3z} &= (k_0^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2} \end{aligned}$$

On déduit la composante A_z de l'expression 8.66.

Pour pouvoir calculer numériquement ce champ, il est nécessaire d'effectuer une troncature des intégrales sur u et v , ce qui revient à limiter le nombre de composantes de Fourier dans le spectre du champ transmis. L'onde se déplaçant dans le sens des z croissant, nous pouvons éliminer les composantes telles que $|u|, |v| > n_1 k_0 \cos \theta$. L'expression finale du faisceau gaussien focalisé est donc :

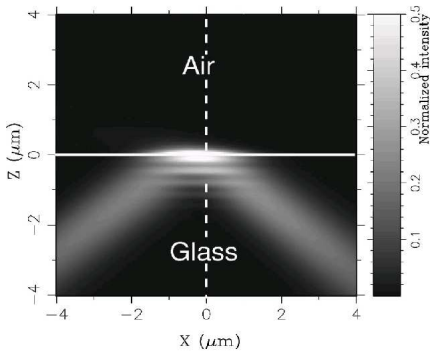
$$E_0^T(\mathbf{r}, \omega) = \int_{-n_1 k_0 \cos(\theta)}^{n_1 k_0 \cos(\theta)} du \int_{-n_1 k_0 \cos(\theta)}^{n_1 k_0 \cos(\theta)} dv \mathbf{A}_{\parallel}^T(u, v) e^{i[k_x(x-x_0) + k_y(y-y_0) + k_{3z}(z-z_0)]} \quad (8.69)$$

Sur la figure 8.7 est représentée la variation d'intensité électrique dans le plan d'incidence du faisceau. L'angle d'incidence θ vaut 50° , la longueur d'onde $\lambda = 633$ nm, la polarisation est TM. Le milieu inférieur est de la silice ($n_1 = 1,46$), le milieu supérieur le vide. Bien que le faisceau incident soit centré à l'origine du repère, le faisceau réfléchi émerge d'un point situé en aval. Ceci illustre l'effet Goos-Hänschen, provenant du fait que les coefficients de réflexion sont complexes. La phase de ces coefficients ajoute une hauteur effective ζ à l'interface, à laquelle le faisceau gaussien semble être réfléchi.

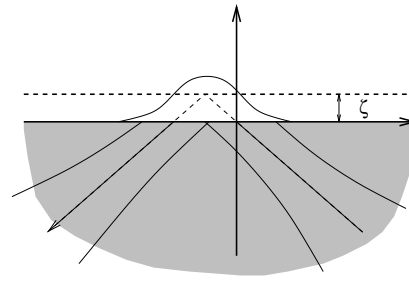
8.2.2 Moyens de calcul et exemples

Les simulations ont toutes été effectuées à l'aide des moyens aloués par le service CALcul en MIDI-Pyrénées (CALMIP), du Centre Interuniversitaire de Calcul de Toulouse. Ce centre héberge un super ordinateur "magellan", SGI Origin 2000, et fournit le nombre de processeurs et la mémoire nécessaire à ce type de calculs.

La mémoire demandée par ces simulations augmente rapidement avec la taille de l'objet. L'élément principal du programme étant la matrice de stockage du tenseur de Green,



(a)



(b)

FIG. 8.7 – (a) Faisceau gaussien focalisé en coupe verticale selon le plan d’incidence de la lumière. L’intensité est normalisée par rapport à l’intensité électrique au point focal (x_0, y_0, z_0) du faisceau. Cette figure est extraite de la référence [132] de J.C. Weeber *et al.* (b) Effet Goos-Hänschen.

elle est proportionnelle au carré du nombre de cellules de discrétisation.

Exemple : guidage de la lumière par un guide diélectrique linéaire. Voici tout d’abord l’exemple le plus simple de guide sub-longueur d’onde : le guide linéaire diélectrique. Celui présenté sur la figure 8.8 a une largeur de 200 nm, une hauteur de 150 nm et fait 5 microns de long. Ses dimensions transverses d’une fraction de longueur d’onde en font un guide monomode.

Le calcul a été effectué à 200 nanomètres de la surface, soit 50 nm au-dessus du guide, et pour une longueur d’onde de $\lambda = 633$ nm. Le guide est adressé à son extrémité gauche par un faisceau gaussien focalisé. La structure a été discrétisée en 1200 cellules de $50 \times 50 \times 50$ nm³ et le temps de calcul était de l’ordre de quelques minutes sur 4 processeurs CALmip. Nous pouvons observer des ondes stationnaires qui correspondent à l’interférence entre le mode incident et sa partie réfléchi en bout de guide. Un exemple

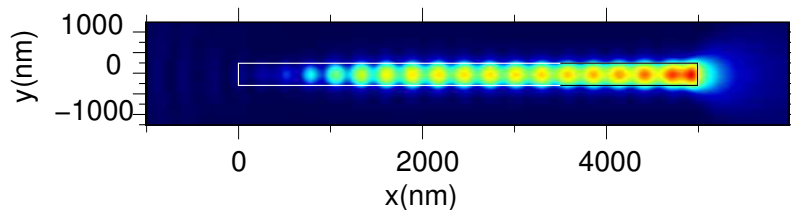


FIG. 8.8 – Intensité du champ électrique calculée 50 nm au-dessus d’un guide diélectrique en TiO₂ de 5 micromètres de longueur.

de réalisation expérimentale est donné figure 8.9. Le guide d’onde et la mesure du champ optique ont été effectués dans l’équipe d’optique submicronique de l’université de Bourgogne.

Adressage d’une structure diélectrique courbe. Les guides linéaires peuvent servir à conduire le champ électrique d’un point à un autre de la surface de manière à adresser une

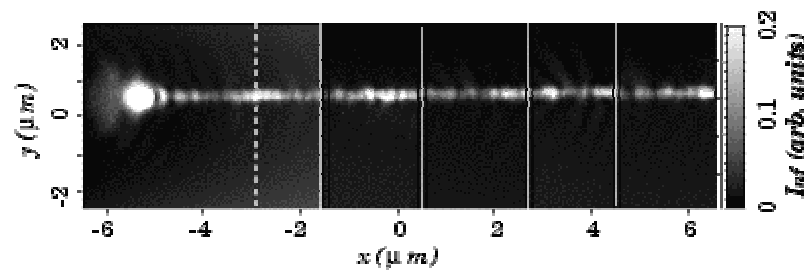


FIG. 8.9 – Intensité du champ électrique mesurée au-dessus d’un guide diélectrique en TiO_2 (résultat PSTM LPUB/CNRS Dijon).

seconde structure (qui peut être un autre guide, un résonateur, une molécule ...). Il peut être alors utile de courber la trajectoire de la lumière. Nous voyons sur cet exemple un dispositif coupleur dans lequel le champ, injecté à l’extrémité gauche du guide inférieur au moyen d’un faisceau gaussien focalisé, effectue un demi-tour grâce à la portion d’anneau couplée au guide d’entrée, et atteint l’extrémité gauche du guide supérieur. Pour simuler le champ de la figure 8.10, il a fallu discretiser le motif en 2175 cellules de $60 \times 60 \times 60 \text{ nm}^3$ et le temps de calcul était de 6h30 monoprocasseur. De telles structures permettant de

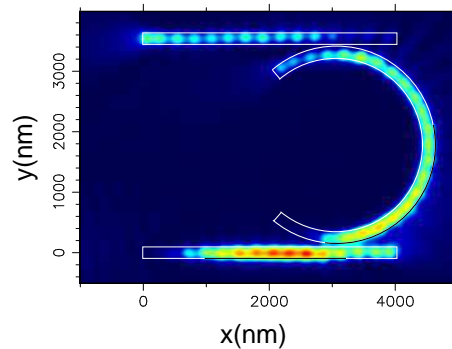


FIG. 8.10 – Deux guides d’ondes linéaires de dimensions $180 \times 4000 \times 180$ (en nanomètres) sont couplés à trois quarts de cercle. La longueur d’onde est de 620 nm, l’intensité électrique en sortie est 4 fois celle du faisceau d’entrée.

faire effectuer un virage à la lumière ont été réalisées expérimentalement dans le domaine micro-onde [133]. Un résultat similaire a été obtenu également à Dijon dans le domaine visible en utilisant les modes de galerie d’un microdisque diélectrique [134].

8.3 Conclusion

Nous avons présenté la théorie des fonctions de Green dyadiques en électromagnétisme. Celle-ci permet de développer un algorithme de calcul capable de décrire le champ diffracté par un ou plusieurs objets diélectriques. Cet algorithme repose sur l’équation de Dyson, reliant les fonctions de Green de deux systèmes différents. Elle permet la construction cellule par cellule de l’objet diffractant et parallèlement le calcul itératif du tenseur de Green. Le champ électrique est ensuite calculé dans tout l’espace au moyen de l’équation de Lippmann-Schwinger. Une autre application est le calcul des densités locales d’états photoniques, intervenant autant en observation (configuration SNOM), que pour des problèmes plus spécifiques comme le comportement d’une molécule fluorescente dans le

154

CHAPITRE 3. FORMALISME DES FONCTIONS DE GREEN

champ proche optique.

C'est actuellement, pour les objets localisés, la seule méthode exacte permettant de s'affranchir des problèmes de conditions aux limites, présents dans tout calcul de différences finies, et s'adaptant à n'importe quelle géométrie. Elle demande cependant une discrétisation en volume des objets diffractant, conduisant à une mémoire et un temps de calcul rapidement important.

Dans le chapitre suivant, nous allons appliquer cette méthode à l'étude de résonateurs diélectriques annulaires. Les résultats des simulations seront comparés à une méthode analytique simple d'étude d'ensemble de cavités couplées.

Chapitre 9

Étude d'un ensemble d'anneaux couplés

Nous étudions dans cette partie la propagation de la lumière dans un ensemble d'anneaux couplés. Pour cela, nous allons comparer les prédictions d'un modèle analytique, reposant sur une description simple de ces systèmes, avec les cartes de champ calculées par la méthode des fonctions de Green.

Dans le guidage de la lumière par un guide diélectrique circulaire, deux phénomènes physiques coexistent :

- ▶ le confinement latéral de la lumière induit une quantification des composantes transversales du vecteur d'onde. Ces objets présentent ainsi une infinité de modes transverses distincts. Les guides que nous allons étudier ont une largeur et une hauteur sub-longueur d'onde (voir figure 9.1), et pourront être considérés comme monomodes : c'est donc une onde approximativement gaussienne qui se propage dans l'anneau. Dans le modèle analytique, nous ne prendrons en compte que sa variation longitudinale. Pour décrire le point de contact entre deux guides, nous utiliserons le modèle du couplage spatial utilisé par H.J. Shaw *et al.* en 1982 [117].
- ▶ la résonance, due au fait que la lumière parcourt une trajectoire fermée dans le guide, de la même manière que dans un résonateur Fabry-Pérot. Pour qu'un mode puisse s'établir dans un anneau unique, il doit y avoir un nombre entier de longueurs d'onde effectives sur le périmètre. Celle-ci est égale à la longueur d'onde dans le vide divisée par un indice effectif, différent de celui du matériau. Dans un guide annulaire il dépend de la fréquence, mais également du rayon de la cavité : la courbure induit une dispersion. Il sera en général plus faible que sa valeur usuelle [116].

Le modèle analytique utilisé permet de comprendre d'une part comment les modes individuels d'un seul anneau se recombinent de manière à former un mode collectif et d'autre part d'interpréter les spectres calculés par simulation numérique. Il s'agit d'une approche cinématique : elle ne permet pas de prévoir l'intensité des résonances, qui est déterminée, entre autre, par les pertes, non prises en compte dans le modèle.

Celles-ci ont plusieurs origines. Les pertes d'absorption proviennent de la dissipation d'énergie dans le matériau, négligeable pour le TiO_2 aux fréquences optiques. En outre, nous avons déjà mentionné que les pertes dues à la courbure du guide sont négligeables pour les forts contrastes d'indice, et ce, jusqu'à des rayons très petits. Il existe également les pertes dues à la diffusion de la lumière par la rugosité du guide, a priori inexistante dans notre modèle, et les pertes de fuite dans le substrat. Ces dernières interviennent lorsque l'indice effectif du guide est inférieur à celui du support. Une partie du champ y

est alors réfractée. Dans la simulation numérique sont donc prises en compte les pertes de courbure et les pertes de fuite.

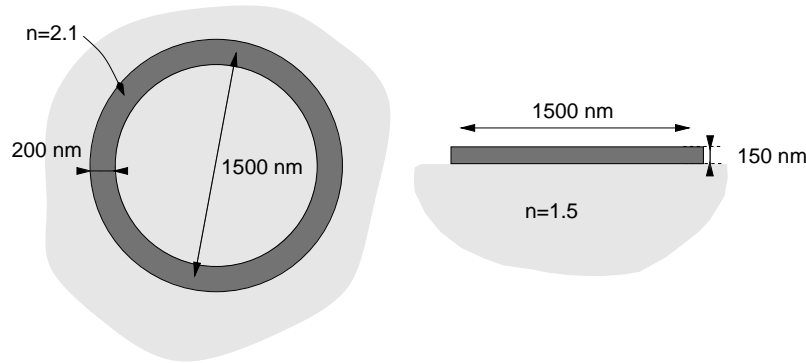


FIG. 9.1 – Paramètres géométriques et physiques du guide annulaire.

Nous allons nous intéresser successivement aux résonances de structures de complexité croissante, afin de mettre en évidence des phénomènes qualitativement nouveaux. Tout d'abord, nous rappellerons la quantification des modes longitudinaux pour un anneau seul. Ensuite, le couplage de deux anneaux entraîne, comme il est bien connu en physique moléculaire, un dédoublement des pics de résonance d'autant plus grand que le couplage est fort. Trois anneaux permettent l'obtention de structures non alignées que nous montrerons être semblables à la structure linéaire correspondante. En revanche, avec quatre anneaux apparaissent des structures isomères qualitativement différentes. En nous intéressant à un cas particulier, nous montrerons que les deux sens de rotation peuvent être couplés l'un avec l'autre, ce qui lève une dégénérescence. Nous donnons dans l'annexe C un programme écrit en langage Mathematica permettant de traiter n'importe quelle structure orientable. Commençons donc par étudier les modes d'un anneau isolé.

9.1 Fréquences propres d'un anneau

Nous retrouvons ici le résultat classique de la quantification des modes d'un anneau et présentons la méthode générale qui nous servira pour les structures plus complexes. Considérons un anneau diélectrique de rayon unité dans lequel se propage une onde progressive de longueur d'onde effective λ . Si on oriente l'anneau dans le sens trigonométrique, deux champs de vecteur d'onde $k = 2\pi/\lambda$ peuvent se propager : un champ E dans le sens direct et un champ F dans le sens indirect :

$$\begin{aligned} E(\theta) &= Ae^{i\theta k} \\ F(\theta) &= Be^{-i\theta k}, \quad k = 2\pi/\lambda \end{aligned}$$

où A et B sont deux amplitudes arbitraires des champs. Étudions le champ E et plaçons arbitrairement un point sur cet anneau. Nous notons E^e le champ entrant dans ce point et E^s le champ sortant. Ces deux ondes sont reliées par deux équations.

La première traduit le couplage entre la sortie et l'entrée et s'écrit :

$$E^s = C_0 E^e, \quad \text{avec } C_0 = 1$$

Dans le cas présent la matrice C_0 se réduit bien entendu à l'unité. Dans la suite, la dimension de cette matrice évoluera en fonction d'un nombre croissant de points de couplage.

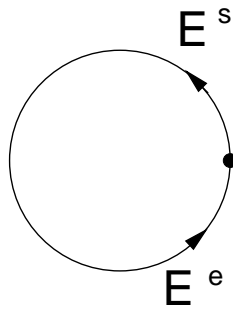
La deuxième équation est la relation de phase entre l'entrée et la sortie :

$$E^e = e^{i2\pi k} E^s = \mathcal{B}_0 E^s, \text{ avec } \mathcal{B}_0 = e^{i2\pi k}$$

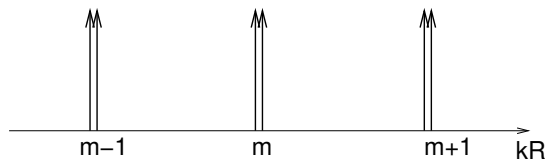
Dans la suite, nous poserons $X = e^{i2\pi k}$. Après élimination du champ d'entrée E^e , nous obtenons finalement :

$$E^s = C_0 \mathcal{B}_0 E^o \Leftrightarrow (1 - C_0 \mathcal{B}_0) E^s = 0$$

Cette équation n'a de solutions non nulles que si $\det(1 - C_0 \mathcal{B}_0) = 0$ soit $1 - X = 0$, c'est-à-dire $k = m$, $m \in \mathbf{N}$ (le vecteur d'onde k doit être positif car le sens de rotation de l'onde est fixé). Ainsi, pour qu'un mode puisse s'établir dans cet anneau, la phase accumulée pendant un tour doit être un multiple entier de 2π . Dans le cas contraire, le champ interfère destructivement avec lui-même après chaque tour.



Nous aurions pu faire un raisonnement identique pour F : pour chaque m , il y a donc deux modes dégénérés, correspondant à chacun des sens de rotation. Dans la suite, nous noterons symboliquement \circlearrowleft^m et \circlearrowright^m ces deux modes qui correspondent à la même longueur d'onde, en omettant le m quand il n'y aura pas d'ambiguïté. Voyons maintenant les



résultats obtenus par la simulation numérique.

Calcul numérique pour un anneau. La géométrie étudiée est celle de la figure 9.1. Nous avons envisagé deux modes d'adressage de ce système très simple. Le premier, indiqué sur la figure 9.2-a, se fait au moyen d'un guide linéaire intermédiaire reliant le faisceau gaussien à l'anneau. Ici, c'est le champ évanescent "débordant" des parois latérales du guide qui excite le résonateur. Ce système permettrait l'adressage simultané de plusieurs anneaux individuels. L'intérêt est également de prendre en considération le cas plus réaliste, dans le cadre de dispositifs optiques intégrés, où source et résonateur ne sont pas nécessairement placés au même endroit.

Cependant, pour réaliser une étude purement modale de ces structures, cet intermédiaire

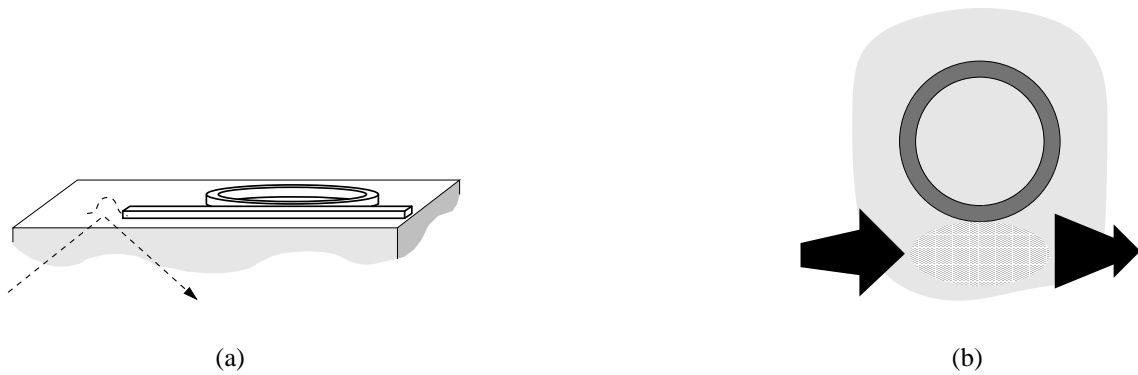


FIG. 9.2 – (a) Adressage d'un guide annulaire au moyen d'un guide linéaire. (b) Adressage direct d'un anneau par faisceau gaussien focalisé.

est inutile. Il est en effet tout à fait possible d'exciter l'anneau directement avec le faisceau gaussien focalisé, en utilisant sa partie latérale, où le vecteur d'onde s'aligne tangencialement avec le guide (voir figure 9.2-b).

Adressage par un guide linéaire. Toutes les intensités mentionnées dans la suite sont normalisées par rapport à l'intensité du faisceau gaussien au point focal (x_0, y_0, z_0) (voir paragraphe 8.2.1).

Sur la figure 9.3 est tracé le spectre de l'anneau adressé par le guide linéaire. Il apparaît deux résonances sur la gamme de longueurs d'onde explorée. Un examen du nombre de

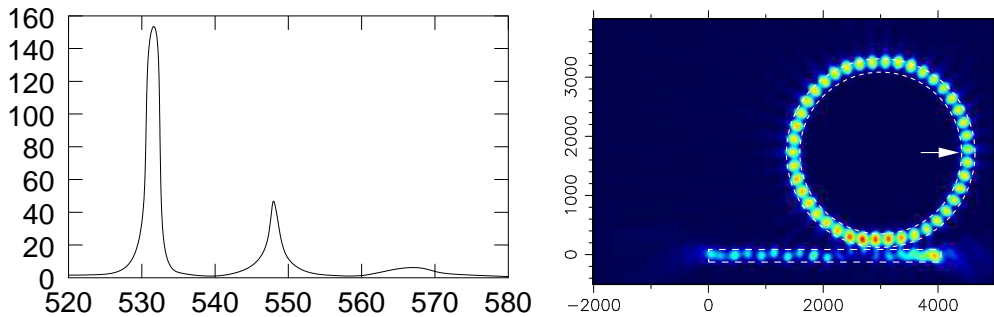


FIG. 9.3 – Spectre d'un anneau adressé par un guide linéaire et carte du champ à la longueur d'onde de résonance 532 nm. La flèche indique la position de la mesure de l'intensité pour le tracé du spectre.

ventres visibles sur la circonférence indique qu'à 532 nm, c'est le mode $n = 21$ qui est excité, tandis que le mode $n = 20$ apparaît à 548 nm. Nous pouvons alors calculer les longueurs d'ondes effectives pour ces deux modes, qui sont respectivement de 449 nm et de 471 nm.

Le dernier pic très élargi localisé autour de 568 nm correspond au dernier mode pouvant pénétrer dans le guide. Si l'on observe sa structure sur la figure 9.4, nous nous apercevons que l'onde ne fait pas un tour complet, les pertes radiatives étant alors trop importantes. Au-delà de 570 nm, le champ ne pénètre plus dans la structure.

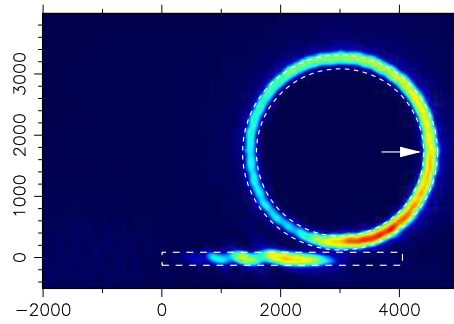


FIG. 9.4 – Excitation au voisinage du dernier mode du guide.

Adressage direct. Comparons maintenant les spectres des figures 9.3 et 9.5. On remarque tout d’abord que les pics sont très légèrement décalés vers les grandes longueurs d’onde dans le cas de l’adressage direct. Les amplitudes sont en moyenne plus élevées, ce qui s’explique par le fait que les seules pertes d’intensité dans ce cas sont radiatives : elles sont réparties sur toute la circonférence de l’anneau. Pour l’adressage par un guide linéaire, la lumière, après avoir fait un tour de cavité, peut ressortir à nouveau par couplage avec le guide d’adressage, pour être rayonnée à son extrémité, ce qui augmente donc les pertes radiatives et diminue l’intensité à la résonance.

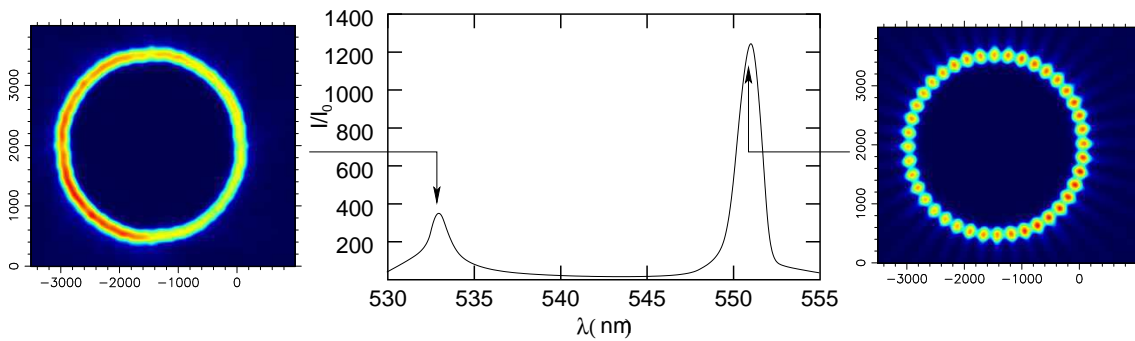


FIG. 9.5 – Spectre d’un anneau adressé directement.

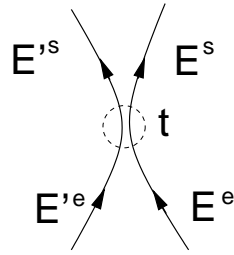
Les deux modes calculés par adressage direct ont des structures différentes. En effet, le second à 551 nm possède une forte modulation de son intensité (contraste de 30%), au contraire du premier à 533 nm. Cet effet n’est pour l’instant pas totalement expliqué. Il peut provenir du mode d’adressage par faisceau gaussien qui fait intervenir certaines composantes ayant des vecteurs d’onde orientés vers l’arrière du dispositif. Des études numériques complémentaires devront être effectuées pour clarifier ce point avec en complément une étude expérimentale d’adressage de résonateur annulaire par couplage direct.

Nous voyons donc que, sur cette structure simple, il y a une bonne adéquation entre les approches analytique et numérique. Nous allons voir maintenant comment la méthode présentée sur un cas élémentaire se généralise à un système plus complexe, en présentant dans un premier temps le modèle utilisé pour décrire le couplage entre deux anneaux.

9.2 Description du couplage - orientabilité

Tout d’abord, décrivons l’influence réciproque de deux anneaux rapprochés.

Matrice de couplage. Dans leur article de 1982, Shaw *et al.* décrivent le couplage à la jonction entre deux guides monomodes par une matrice 2×2 , où apparaissent r , le coefficient de "réflexion" sur le point de contact, qui relie champ transmis et champ incident dans une même branche, et t le coefficient de "transmission" à travers le point de contact, qui décrit le passage de l'onde d'une branche à l'autre. Les champs de sortie de



la jonction (E'^s , E^s) sont reliés linéairement aux champs d'entrée (E'^e , E^e) par l'équation matricielle :

$$\begin{pmatrix} E'^s \\ E^s \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} r & it \\ it & r \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E'^e \\ E^e \end{pmatrix} \quad (9.1)$$

Les deux coefficients vérifient $r^2 + t^2 = 1$, qui traduit la conservation de l'énergie au niveau d'une seule entrée ; le coefficient i provient de la conservation globale de l'énergie dans les deux branches.

Orientabilité d'un système. Le couplage est unidirectionnel et n'introduit pas de champ rétro-réfléchi dans une branche. On peut donc orienter simplement un système d'anneaux puisqu'un sens de propagation de la lumière dans la branche de gauche impose le sens de propagation opposé dans la branche de droite. Par exemple, pour le système composé de deux résonateurs présenté figure 9.6-a, le sens direct de rotation choisi dans le premier anneau conduit naturellement à choisir le sens indirect dans le deuxième anneau.

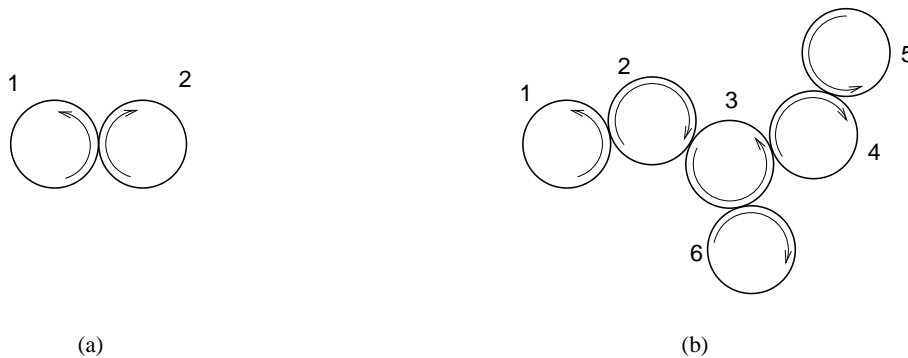


FIG. 9.6 – Système ramifié d'anneaux.

Une méthode similaire peut être utilisée afin d'orienter n'importe quel système ramifié ou linéaire. Le choix d'un sens de rotation du champ dans n'importe lequel de ces anneaux permet en effet d'orienter de proche en proche la chaîne entière, comme sur la figure 9.6-b.

De plus, le choix d'orientation dans l'ensemble de la chaîne étant subordonnée de manière univoque à celui d'un seul anneau, il existera, pour chaque mode propre, un mode dégénéré correspondant à l'orientation contraire. Il y a donc d'ores et déjà dans ce

type de système la même dégénérescence "d'orientation" que pour un anneau seul, chaque mode étant au minimum dégénéré deux fois.

Nous verrons plus loin comment traiter les cas d'ensembles d'anneaux formant des boucles, pour lesquels une telle orientation globale n'est pas toujours possible.

Méthode de résolution. Considérons un système de plusieurs anneaux comprenant N points de couplage. Puisque le système est orientable, nous aurons deux champs entrant et deux champs sortant par jonction, soit $4N$ inconnues. Cependant, chaque champ entrant dans une jonction provenant lui-même d'une autre jonction, ces derniers dépendent des champs sortant par des relations de phase. Il n'y a donc en fait que $2N$ inconnues. Dans la suite nous allons systématiquement regrouper les champs par jonctions, et écrire le vecteur des champs inconnus génériquement sous la forme :

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^s = \begin{pmatrix} E_1^s \\ E_1'^s \\ \vdots \\ E_N^s \\ E_N'^s \end{pmatrix}$$

Alors, la matrice de couplage est diagonale par blocs :

$$C_N = \underbrace{\begin{bmatrix} C & & & \\ & C & & \mathbf{0} \\ & & \ddots & \\ & \mathbf{0} & & C \\ & & & & C \end{bmatrix}}_{N \text{ fois}}, \text{ où } C = \begin{bmatrix} r & it \\ it & r \end{bmatrix} \quad (9.2)$$

et

$$\mathbf{E}^s = C_N \cdot \mathbf{E}^e \quad (9.3)$$

Des géométries distinctes vont se différencier par les relations de phase traduisant la propagation d'un champ sortant d'une jonction jusqu'à la jonction suivante. L'écriture de toutes ces relations forme ce que nous appellerons la matrice de bouclage, notée \mathcal{B}_N . Il vient alors :

$$\mathbf{E}^e = \mathcal{B}_N \cdot \mathbf{E}^s \quad (9.4)$$

L'élimination de \mathbf{E}^e entre les équations 9.3 et 9.4 conduit à : $(\mathbf{1}_{2N} - C_N \mathcal{B}_N) \cdot \mathbf{E}^s = 0$, où $\mathbf{1}_{2N}$ est la matrice identité de dimension $2N$. Cette équation n'a de solutions non-nulles que si :

$$\det(\mathbf{1}_{2N} - C_N \mathcal{B}_N) = 0 \quad (9.5)$$

Cette relation dépend du vecteur d'onde k par l'intermédiaire de \mathcal{B}_N et constitue l'équation aux vecteurs d'ondes propres du système. Pour chaque vecteur d'onde propre on trouvera le ou les modes propres qui représentent la distribution de champ dans chaque branche. Notons par ailleurs qu'il ne faut pas confondre les modes propres du système

d'anneaux avec les vecteurs propres de la matrice $C_N \mathcal{B}_N$. En effet, les modes *du système d'anneaux* sont uniquement constitués des vecteurs propres *de la matrice $C_N \mathcal{B}_N$* pour la valeur propre 1, à l'exclusion des autres.

Appliquons maintenant cette méthode générale dans le cas le plus simple afin d'étudier l'effet du couplage de deux anneaux identiques sur les modes d'un seul anneau.

9.3 Système de deux anneaux couplés

Considérons la paire d'anneaux orientés de la figure 9.7. Les champs de sortie sont reliés aux champs d'entrée par :

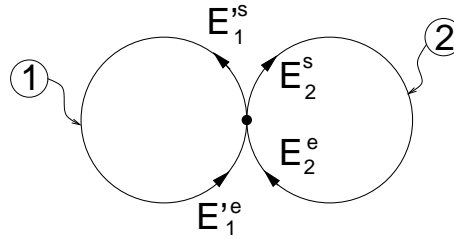


FIG. 9.7 – Structure à deux anneaux.

$$\begin{vmatrix} E_1^{s'} \\ E_2^s \end{vmatrix} = C_1 \cdot \begin{vmatrix} E_1^{e'} \\ E_2^e \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} r & it \\ it & r \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} E_1^{e'} \\ E_2^e \end{vmatrix} \quad (9.6)$$

L'équation de bouclage est :

$$\begin{vmatrix} E_1^{e'} \\ E_2^e \end{vmatrix} = \mathcal{B}_1 \cdot \begin{vmatrix} E_1^{s'} \\ E_2^s \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} e^{i2\pi k} & 0 \\ 0 & e^{i2\pi k} \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} E_1^{s'} \\ E_2^s \end{vmatrix} \quad (9.7)$$

En appliquant la méthode exposée dans le paragraphe précédent, nous trouvons l'équation aux valeurs propres suivante (voir équation 9.5) :

$$\det(\mathbf{1}_2 - C_1 \mathcal{B}_1) = 0 \Leftrightarrow X^2 - 2rX + 1 = 0, \text{ avec } X = e^{i2\pi k} \quad (9.8)$$

Comportement limite. Avant de résoudre cette équation, examinons les cas limites correspondant à $t = 0$ ($r = 1$) et $t = 1$ ($r = 0$).

- **limite $t=0$.** Les deux anneaux sont alors découplés. N'importe quelle combinaison linéaire des modes propres $\mathcal{O}^m / \mathcal{O}^m$ de chacun des deux anneaux est également mode propre du système complet.

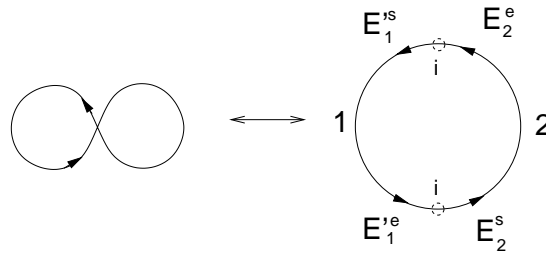
De plus, le système est invariant par l'inversion dont le centre est confondu avec le point de couplage, c'est-à-dire par la transformation $E_1^s \leftrightarrow E_2^s$, de représentation matricielle :

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Cela signifie que P commute avec $C_1 \mathcal{B}_1$: ces deux matrices sont donc diagonalisables dans une même base. Ainsi, les valeurs propres de P étant ± 1 ($P^2 = 1$), tout mode propre de la chaîne, qui est vecteur propre de $C_1 \mathcal{B}_1$ pour la valeur propre

1, pourra être choisi symétrique ou antisymétrique par P . On peut par exemple prendre pour base : $\odot_m^1 \pm \odot_m^2$.

- **limite $t=1$.** Il s'agit de la situation opposée dans laquelle le système d'anneaux est équivalent à une seule boucle, un peu particulière car l'onde subit un déphasage de $\pi/2$ à chaque traversée de la jonction. La phase totale accumulée par l'onde sur un



tour est alors : $2 \times \pi k R + 2 \times \pi/2$. Cette phase doit être un multiple entier de 2π , ce qui donne $k = \frac{1}{2}(m + \frac{1}{2})$, $m \in \mathbf{N}$. Il y a donc deux fois plus de valeurs propres que pour un anneau, elles sont déplacées de $1/4$ à cause du déphasage aux jonctions.

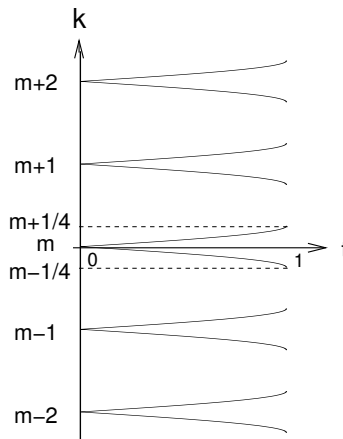


FIG. 9.8 – Spectre d'un système de deux anneaux couplés, en fonction du coefficient de couplage t .

Vecteurs d'ondes propres pour un couplage quelconque. Introduisons l'angle ϕ défini par $r = \cos \phi$, $t = \sin \phi$: la transmission est nulle quand $\phi = 0$, et totale quand $\phi = \pi/2$. On peut alors réécrire l'équation aux valeurs propres (équation 9.8) sous la forme : $X - 2 \cos(\phi) + 1/X = 0 \Leftrightarrow 2 \cos(2\pi k) - 2 \cos(\phi) = 0$

Les solutions sont donc :

$$k = \pm \frac{\phi}{2\pi} + m = \pm \frac{\sin^{-1}(t)}{2\pi} + m, \begin{cases} m \in \mathbf{N} \\ k > 0 \end{cases}$$

Les différents vecteurs d'ondes propres sont représentés en fonction de t sur la figure 9.8. Il y a donc une levée de dégénérescence des modes induite par le couplage des deux anneaux, d'autant plus grande que le couplage est fort. À la limite $t = 1$, les vecteurs d'onde propres sont $\frac{1}{2}(m + \frac{1}{2})$.

Nous avons effectué la simulation du champ optique guidé par un système de deux anneaux. Les deux guides circulaires sont accolés comme indiqué sur la figure 9.9-b. Le

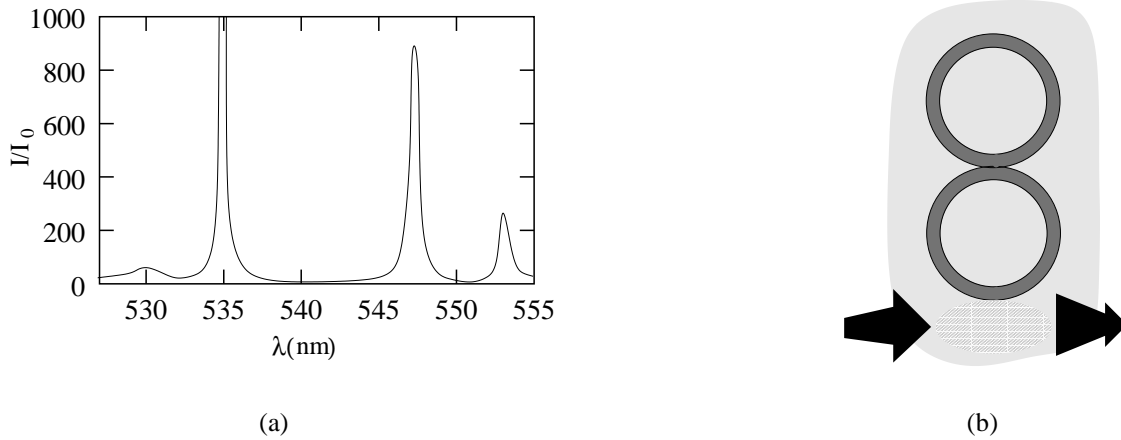


FIG. 9.9 – (a) Spectre simulé de deux anneaux couplés. (b) Les deux anneaux sont en contact, l'adressage est direct.

spectre de la figure 9.9-a est conforme aux prédictions du calcul analytique puisque chacun des pics $m = 20$ et $m = 21$ d'un seul anneau est scindé en deux. Le demi-écart entre les deux résonances de $m = 20$ rapporté à l'écart entre deux modes de l'anneau isolé est de 17%. Le modèle analytique permet d'estimer un couplage $t \approx 0,88$. Cette valeur élevée est naturelle étant donné que les anneaux sont en contact.

Modes propres associés. Il est facile de vérifier que pour chacune des valeurs propres \pm obtenues, le rapport d'amplitude E_1^o/E_2^o est :

$$E_1^o/E_2^o = \mp 1$$

Nous trouvons que les deux modes propres sont soit symétrique (pour la valeur propre "-", du plus bas vecteur d'onde, donc de plus basse énergie) soit antisymétrique (pour la valeur propre "+", associée au vecteur d'onde le plus élevé, donc d'énergie la plus haute), conformément aux résultats connus dans le cas de deux oscillateurs couplés, ou de l'étude du couplage des orbitales s de l'hydrogène dans la molécule de H_2 par la méthode de Hückel. Nous rappelons toutefois qu'il n'y a qu'une levée partielle de la dégénérescence puisque, comme mentionné précédemment, les deux modes propres correspondant à des sens de rotation opposés sont toujours confondus.

Les cartes d'intensité calculées aux longueurs d'onde 535 nm et 547,25 nm sont indiquées figure 9.10. Elles sont très similaires excepté dans la zone de contact entre les deux anneaux (autour de la ligne Δ). Les deux modes "s'attirent" à 535 nm et se repoussent au contraire à 547,25 nm. Ceci est la signature du caractère symétrique ou anti-symétrique de chacun des modes. En effet, pour celui de plus basse énergie, Δ est une droite de symétrie pour les deux anneaux, les champs émanant des deux structures y interfèrent donc constructivement. Au contraire, Δ est un axe d'antisymétrie pour l'autre mode, et le champ s'annule. Sur la figure 9.10 sont également tracées les coupes le long des lignes Σ ,

montrant l'évolution de l'intensité entre les deux résonateurs. On peut constater qu'il y a une annulation presque parfaite de celle-ci au niveau de la jonction.

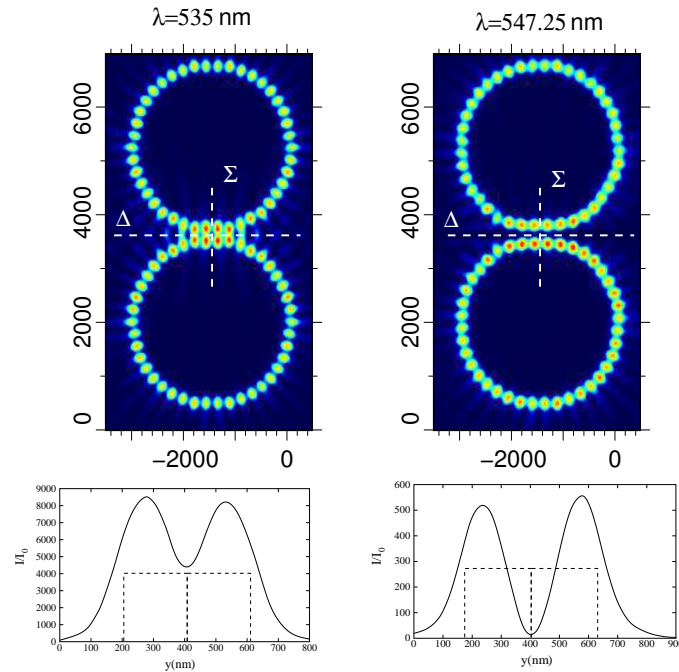


FIG. 9.10 – Modes de deux anneaux couplés calculés numériquement, et coupes suivant la ligne Σ . Le mode à $\lambda = 535$ nm est symétrique, celui à $\lambda = 547,25$ nm est antisymétrique.

Les résultats obtenus sur un ensemble de deux anneaux se prolongent naturellement à une chaîne de trois unités : les trois modes dégénérés de chaque résonateur vont se combiner pour former trois modes de vecteurs d'onde distincts. Il existe cependant différentes géométries possibles pour un tel assemblage : quelle en est la conséquence sur le spectre et les modes propres ?

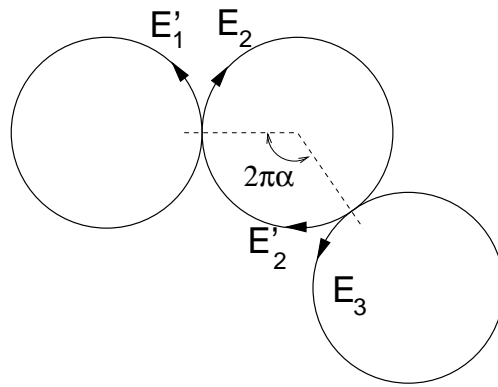
9.4 Trois anneaux couplés

Pour trois anneaux couplés, un degré de liberté supplémentaire est introduit par rapport au cas précédent puisqu'il est possible de choisir librement l'angle $2\pi\alpha$ entre les deux points de contact. Il y a maintenant deux jonctions et donc quatre champs inconnus. Par la suite, nous ne considérerons plus les entrées, et omettrons l'exposant s dans la notation des champs de sortie. Les inconnues et la matrice de bouclage \mathcal{B}_2 sont :

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E'_1 \\ E_2 \\ E'_2 \\ E_3 \end{bmatrix} \text{ et } \mathcal{B}_2 = \begin{bmatrix} e^{i2\pi k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i2\pi\alpha k} & 0 \\ 0 & e^{i2\pi(1-\alpha)k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i2\pi k} \end{bmatrix}$$

Étude des cas limites.

- pour $t = 0$, les trois anneaux sont découplés. À nouveau, les modes propres \mathcal{O}_m et \mathcal{O}'_m des anneaux individuels sont modes propres de la chaîne entière, mais n'en respectent pas les symétries. Plaçons-nous dans le cas particulier $\alpha = 1/2$. Nous



pouvons alors constater que la chaîne est invariante par l'inversion :

$$\begin{cases} E'_1 \leftrightarrow E_3 \\ E_2 \leftrightarrow E'_2 \end{cases} \quad \text{de matrice} \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Puisque $\mathbf{I}^2 = 1$, les modes que l'on cherche sont donc à nouveau soit symétriques, soit antisymétriques par \mathbf{I} .

Étudions une combinaison de modes correspondant à m pair. Dans ce cas, E_2 et E'_2 ont des signes identiques, et le vecteur du champ \mathbf{E} s'écrit de manière générale : (a, b, b, c) . Les modes symétriques sont nécessairement de la forme (a, b, b, a) ; ils décrivent donc un plan de base $\{\circ_1 + \circ_3, \circ_2\}$ ou encore $\{\circ_1 + \sqrt{2} \circ_2 + \circ_3, \circ_1 - \sqrt{2} \circ_2 + \circ_3\}$, qui est en fait, comme nous allons le voir, la limite pour $t = 0$ de la base calculée pour t quelconque. Tout mode antisymétrique est de la forme $(a, 0, 0, -a)$. Les modes antisymétriques décrivent donc une droite, de base $\circ_1 - \circ_3$.

Pour une valeur impaire de m , le champ dans l'anneau 2 change de signe au bout d'un demi-tour, et le vecteur s'écrit cette fois : $(a, b, -b, c)$. Les modes symétriques sont alors du type : $x(\circ_1 + \circ_3)$, et les modes antisymétriques du type : $x(\circ_1 + \sqrt{2} \circ_2 - \circ_3) + y(\circ_1 - \sqrt{2} \circ_2 - \circ_3)$.

- pour $t = 1$, la chaîne est équivalente à un anneau de périmètre trois fois plus grand, comportant quatre déphasages de $\pi/2$ (voir la figure 9.11). Dans ce cas, la condition de résonance est : $3 \times 2\pi k + 4 \times \pi/2 = m2\pi$, ce qui donne $k = m/3, m \in \mathbf{N}$.

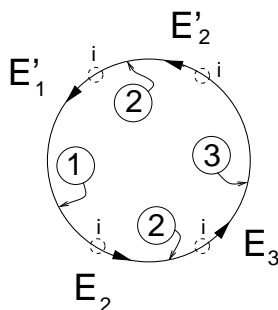


FIG. 9.11 – Système équivalent à trois anneaux couplés, dans la limite $t = 1$.

Valeurs propres pour un couplage quelconque. L'équation 9.5 aux valeurs propres s'écrit ici :

$$(X - 1)(1 + [t^2 - 2\sqrt{1-t^2}]X + X^2) = 0 \quad \text{avec} \quad X = e^{i2\pi k}$$

Nous remarquons que celle-ci ne dépend pas de l'angle $2\pi\alpha$ introduit précédemment ; il s'ensuit que les vecteurs d'onde propres sont également indépendants de α . Nous pouvons comprendre intuitivement ce résultat en remarquant qu'une onde partant d'un endroit quelconque de la chaîne va devoir parcourir dans sa totalité chacun des anneaux traversés avant de se retrouver à son point de départ. Ainsi, la phase accumulée après un tour sera toujours de 2π par anneau, valeur ne dépendant plus de α . Une chaîne coude n'est donc pas fondamentalement différente d'une chaîne linéaire.

On peut démontrer ce résultat (cf. annexe B) pour toute chaîne d'anneaux ne comportant pas de boucle. Plus précisément, il est possible de montrer que les matrices C B correspondant à des géométries différentes sont toutes semblables, de matrice de passage diagonale et unitaire. Cela signifie que non seulement le spectre, mais également la norme (l'intensité) des modes propres d'un ensemble d'anneaux sans boucle sont indépendants de la forme de la chaîne. Ce n'est bien entendu pas le cas pour les phases des champs.

L'équation aux vecteurs d'onde propres peut être réécrite en introduisant la phase ϕ définie précédemment. Nous avons alors :

$$(X - 1)(1 + 2[1 - 2\cos^4(\phi/2)]X + X^2) = 0$$

dont les solutions sont :

$$\begin{cases} k_{0,m} = m \\ k_{-1,m} = -\frac{\cos^{-1}(2[1-2\cos^4(\phi/2)])}{2\pi} + m \\ k_{+1,m} = \frac{\cos^{-1}(2[1-2\cos^4(\phi/2)])}{2\pi} + m \end{cases}, \quad \begin{cases} m \in \mathbf{N} \\ k > 0 \end{cases} \quad (9.9)$$

Sur la figure 9.12-a est représenté le spectre de la structure. Lorsque le couplage augmente, l'écart entre les vecteurs d'onde propres s'accroît jusqu'à ce que l'on retrouve le spectre limite calculé plus haut.

Le spectre obtenu par simulation numérique est tracé figure 9.12-b. Seule la levée de dégénérescence autour du mode à 551 nm de l'anneau isolé a été représentée. Nous trouvons bien trois résonances distinctes. La longueur d'onde du pic central, d'intensité très élevée ($\approx 10^4$), est légèrement décalée par rapport à la valeur attendue de 551nm. L'écart entre chaque mode est d'environ 5 nm. L'amplitude est encore une fois très différente d'une résonance à l'autre.

Sur la figure 9.13 sont représentées les valeurs du module et de la phase de chacun des champs pour différentes valeurs du coefficient de transmission t . Les modes sont tracés dans le cas $\alpha = 1/2$, pour m pair. Sur ces dessins, l'épaisseur du trait est proportionnelle à l'intensité dans la branche, tandis que la couleur représente la phase.

Pour les deux modes extrêmes, l'intensité reste égale à 1 dans les anneaux 1 et 3, tandis qu'elle passe de $\sqrt{2}$ à 1 dans l'anneau central. Pour le mode $(0, m)$, l'intensité est nulle dans l'anneau central pour $t = 0$ (mode antisymétrique), et augmente progressivement jusqu'à 1 pour $t = 1$.

Nous pouvons constater que la base limite quand $r = 0$ respecte bien les symétries de la chaîne.

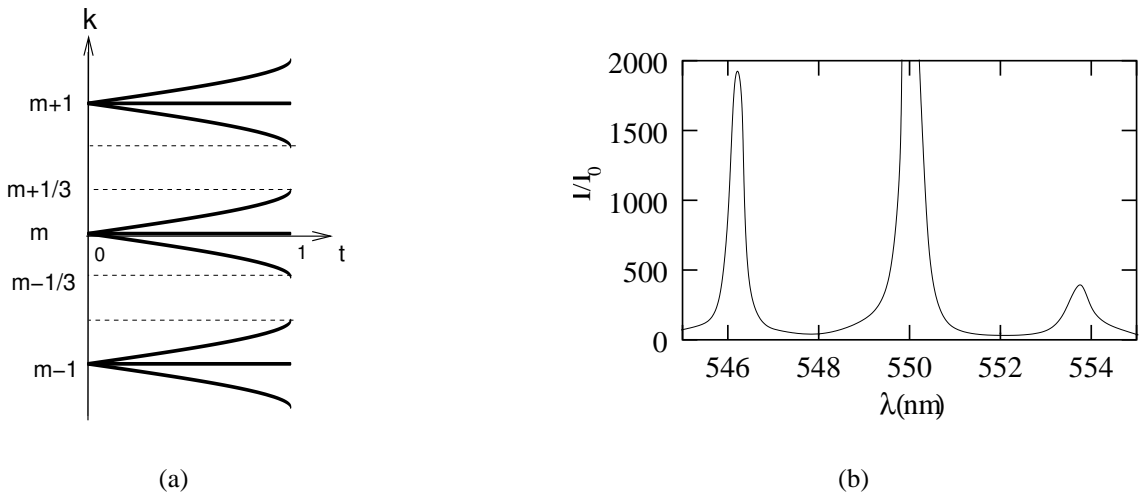


FIG. 9.12 – (a) Spectre d’une chaîne composée de trois anneaux. Les valeurs de k ne dépendent pas de l’angle entre les différents résonateurs. (b) Spectre calculé numériquement.

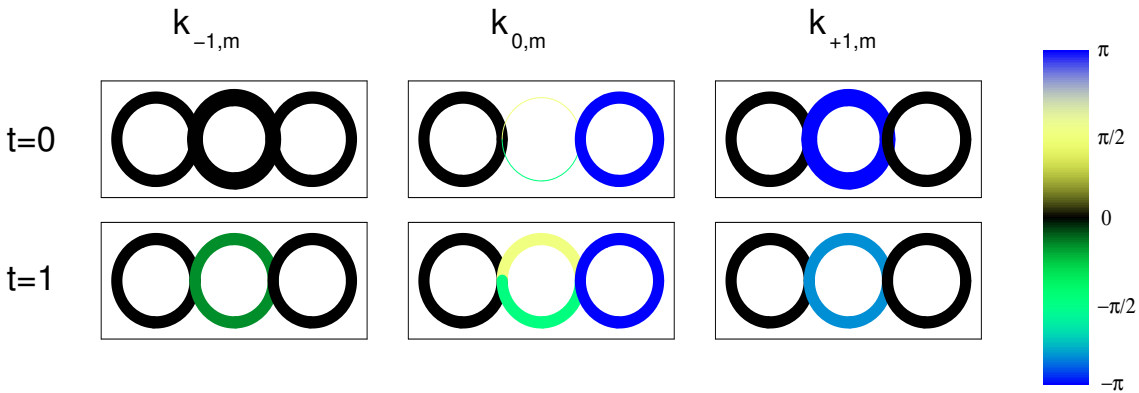


FIG. 9.13 – Amplitude et phase des différents modes propres, dans le cas $\alpha = 1/2$. Les modes sont classés par vecteur d’onde propre croissant, de gauche à droite.

L'accord de ces prédictions avec les modes effectivement obtenus numériquement est très bon. Les trois modes de la figure 9.14 présentent les mêmes caractéristiques que celles décrites par le modèle analytique, à savoir :

- ▶ une dissymétrie entre l'intensité de l'anneau central et celles des anneaux externes, flagrante pour le deuxième mode, l'intensité étant presque nulle dans le deuxième anneau ;
- ▶ les modes extrêmes se distinguent par la relation de phase entre les anneaux extérieurs et le mode de l'anneau central : pour la longueur d'onde la plus basse, donc l'énergie la plus haute, le mode est totalement symétrique. Au contraire, le mode de plus grande longueur d'onde est totalement antisymétrique, les modes individuels se repoussant au niveau de chaque ligne de contact.

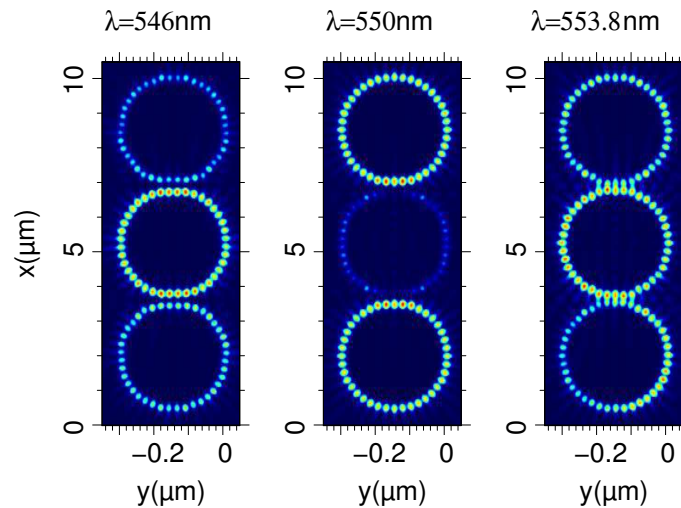


FIG. 9.14 – Modes calculés de trois anneaux alignés.

Ainsi, de même que pour un système de deux anneaux couplés, le couplage de trois anneaux donne également lieu à une levée de dégénérescence, bien que subsiste la dégénérescence d'orientation. Nous avons également vu que le spectre et l'intensité du champ dans les différentes branches ne dépendent pas de la géométrie de la chaîne, résultat qui peut être étendu à toute chaîne orientable sans boucle.

Lorsque l'on rajoute un quatrième anneau, un nouveau degré de liberté apparaît, puisqu'il existe, de la même manière qu'en chimie, des possibilités d'isoméries.

9.5 Quatre anneaux couplés : isométrie

Lorsque l'on considère un assemblage de quatre anneaux, plusieurs ensembles de géométries différentes peuvent être créés : a) linéaire (nous avons vu que les chaînes courbées diffèrent peu des chaînes droites), b) ramifiée et c) bouclée (voir figure 9.15).

Nous pouvons déjà dégager quelques similitudes et différences essentielles entre ces quatre systèmes :

- ▶ tous sont orientables, y compris le dernier comme on le voit sur la figure 9.15 ¹ ;
- ▶ les systèmes a) et b) ont le même nombre d'anneaux et de jonctions, ils auront donc le même spectre limite pour $t = 1$. En effet, la phase accumulée sera : $4 \times 2\pi k +$

¹Cela se généralise facilement à toute boucle comportant un nombre pair d'anneaux

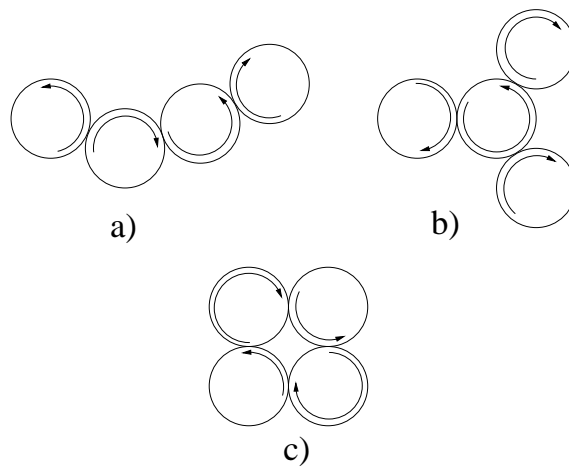


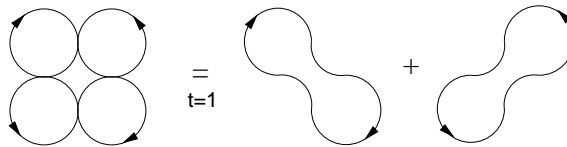
FIG. 9.15 – Trois isomères formés de quatre anneaux.

$$2 \times 3 \times \frac{\pi}{2} = m2\pi, \text{ d'où}$$

$$k = \frac{1}{4} \left(m - \frac{3}{2} \right), \text{ pour } \begin{cases} m \in \mathbf{N} \\ k > 0 \end{cases}$$

Les modes étant, dans les deux cas, tous dégénérés pour $t = 0$, nous nous attendons donc à ce qu'il n'y ait que peu de différences entre les deux spectres.

- le dernier système contient quatre jonctions et quatre anneaux. Il diffère donc des deux précédents au moins par le nombre de champs inconnus. Mais surtout, dans la limite $t = 1$, nous voyons qu'une onde partant d'un point donné de ce système ne parcourra pas tous les anneaux mais seulement la moitié, comme indiqué sur la figure suivante :



Par conséquent le spectre sera donné dans cette limite par $2 \times 2\pi kR + 4 \times \pi/2 = m2\pi$, d'où :

$$kR = \frac{m-1}{2}, \text{ pour } \begin{cases} m \in \mathbf{N} \\ k > 0 \end{cases}$$

Chaque mode sera dégénéré deux fois.

Nous allons voir ce que deviennent ces différentes propriétés pour un couplage quelconque. En particulier quelles sont les différences entre les isomères "trèfle" et "chaîne linéaire" ?

Comparaison de a) et b) . Dans ces deux cas, il y a six champs inconnus et les matrices de couplage sont du type \mathcal{C}_3 . Les notations des champs sont $\mathbf{E}_c = (E'_1, E_2, E'_2, E_3, E'_3, E_4)$ pour la chaîne et $\mathbf{E}_t = (E_1, E_4, E_2, E'_4, E_3, E''_4)$ pour le trèfle (figure 9.16). Les matrices de bouclage \mathcal{B} sont très différentes :

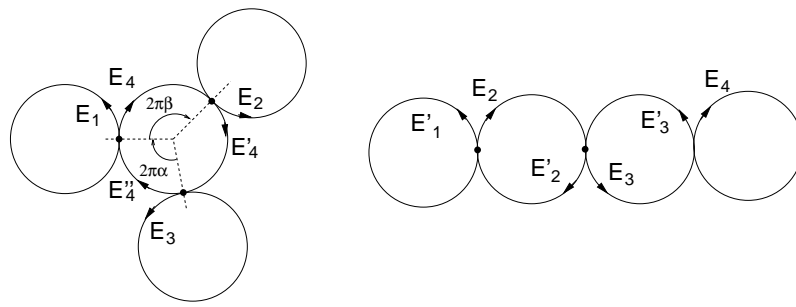


FIG. 9.16 – Notations des champs pour les isomères trèfle et chaîne.

$$B_C = \begin{bmatrix} e^{i2\pi kR} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi kR} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi kR} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\pi kR} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi kR} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i2\pi kR} \end{bmatrix} \quad (9.10)$$

et

$$B_T = \begin{bmatrix} e^{i2\pi kR} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i2\pi\alpha kR} \\ 0 & 0 & e^{i2\pi kR} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i2\pi\beta kR} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i2\pi kR} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i2\pi(1-(\alpha+\beta))kR} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Comparons maintenant les spectres des deux systèmes. Nous avons déjà dit que celui de la chaîne linéaire était indépendant de sa forme. Notons que dans le cas du trèfle, l'équation aux valeurs propres est $1 - r(r^2 + 3)X + 6r^2X^2 - r(r^2 + 3)X^3 + X^4 = 0$ et ne dépend également pas des angles α et β , pour une raison identique à celle invoquée pour la chaîne linéaire : si nous suivons la structure à partir d'un point quelconque, nous repasserons par le point de départ après avoir parcouru plusieurs anneaux *dans leur totalité*. Par conséquent, ni les longueurs d'ondes, ni les amplitudes des champs dans les différentes branches ne dépendront de la position relative des anneaux. Dans ces deux cas, les valeurs propres n'ont pas d'expression compacte simple. Elles sont représentées sur la figure 9.17. Nous pouvons constater comme prévu que les deux spectres sont très similaires. En revanche, les symétries des deux systèmes étant très différentes, les modes le sont également, comme nous le voyons sur les figures 9.18 et 9.19.

Dans la configuration chaîne linéaire, le champ dans les deux anneaux centraux n'est jamais nul, contrairement à ce que nous avons observé pour le système de trois anneaux. Cela s'explique par le fait que l'opération d'inversion interchange tous les anneaux, y compris les deux du centre. L'intensité vaut un sur les deux anneaux extrêmes et passe de $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$, ou $1/\varphi$, à 1 quand t augmente pour les deux anneaux centraux.

Au contraire, dans la configuration trèfle, seuls les modes totalement symétriques ont un champ non nul sur l'anneau central à $t = 0$. En revanche, le mode associé à la valeur propre $e^{i2\pi/3}$ de l'opérateur de rotation a alors une intensité nulle sur l'anneau central. L'intensité est partout égale à un quand la transmission est totale. Ces deux configurations n'apportent pas de réelle nouveauté par rapport aux deux cas précédents. Voyons donc ce

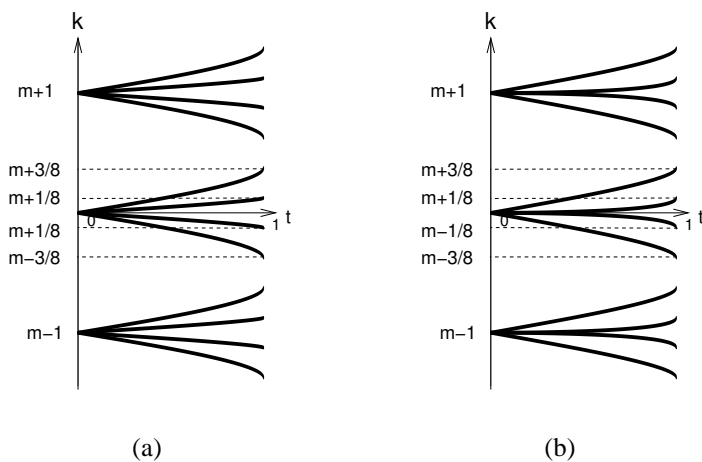


FIG. 9.17 – Spectre de la chaîne d’anneaux (a) et du trèfle (b).

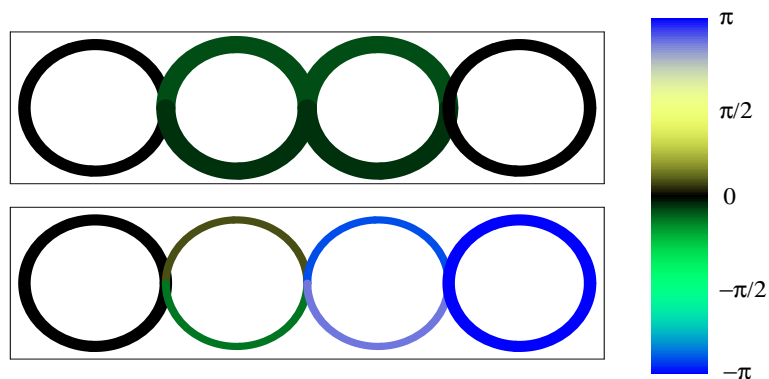


FIG. 9.18 – Premier et troisième modes de la chaîne pour $t = 0,5$. Les amplitudes des anneaux extérieurs valent 1, tandis que celles des anneaux intérieurs valent $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$ (haut) et $\frac{\sqrt{5}-1}{2}$ (bas) dans la limite $t = 0$.

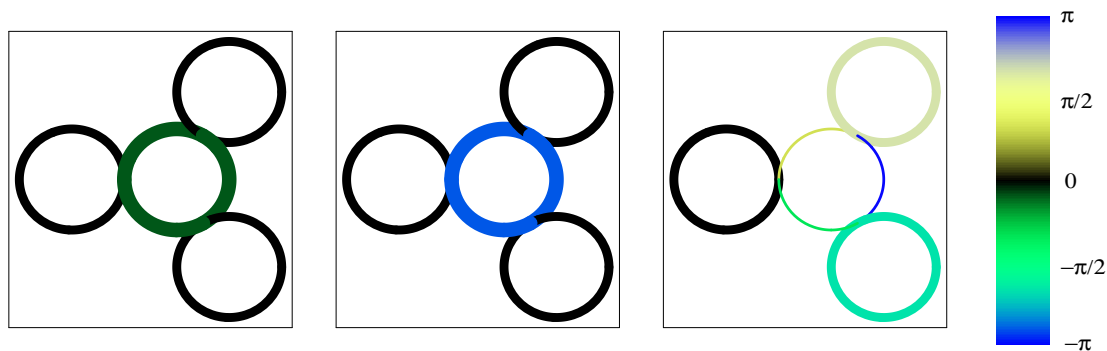


FIG. 9.19 – Spectre et modes du trèfle pour $t = 0,5$. Seuls les modes associés à la valeur propre 1 et le mode associé à la valeur propre $e^{i2\pi/3}$ de l’opérateur de rotation ont été représentés. Pour ce dernier mode, l’intensité du champ est nul dans l’anneau central pour $t = 0$, elle vaut $\sqrt{3}$ pour les deux autres.

qu'il en est pour la troisième configuration.

Étude de la boucle. Cette fois, il y a quatre jonctions, donc 8 champs inconnus. La matrice de couplage est du type C_4 et la matrice de bouclage s'écrit :

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E'_1 \\ E_2 \\ E'_2 \\ E_3 \\ E'_3 \\ E_4 \\ E'_4 \\ E_1 \end{pmatrix} \text{ et } \mathcal{B}_4 = \begin{bmatrix} 0 & & & \dots & & 0 & e^{i\pi k/2} \\ & 0 & e^{i\pi k/2} & & & & 0 \\ & e^{i3\pi k/2} & 0 & & & & \\ \vdots & & & 0 & e^{i3\pi k/2} & & \vdots \\ & & & e^{i\pi k/2} & 0 & & \\ & & & & & 0 & e^{i\pi k/2} \\ 0 & & & & & e^{i3\pi k/2} & 0 \\ e^{i3\pi k/2} & 0 & & \dots & & & 0 \end{bmatrix}$$

L'équation 9.5 aux valeurs propres devient :

$$(X - 1)^2(X^2 + 2(2t^2 - 1)X - 1) = 0$$

dont les solutions sont :

$$\begin{aligned} k_{0,m}/k'_{0,m} &= m \\ k_{-1,m} &= -\phi/\pi + m, \text{ avec } m \in \mathbf{N} \text{ et } k > 0 \\ k_{+1,m} &= \phi/\pi + m \end{aligned} \quad (9.11)$$

La nouveauté ici est l'existence de deux modes propres dégénérés, de vecteur d'onde entier. La structure des champs indique qu'ils correspondent à deux sous-ensembles du système de quatre anneaux que la lumière peut parcourir sans traverser la totalité de la structure. Ainsi, la propriété trouvée pour $t = 1$ montrant que la boucle était décomposable en deux systèmes disjoints est valable pour tout t . Le fait qu'il n'y ait pas lumière dans deux anneaux provient d'une interférence destructive entre les deux contributions de deux branches distinctes. Le deuxième mode dégénéré est obtenu par rotation de $\pi/2$ du premier.

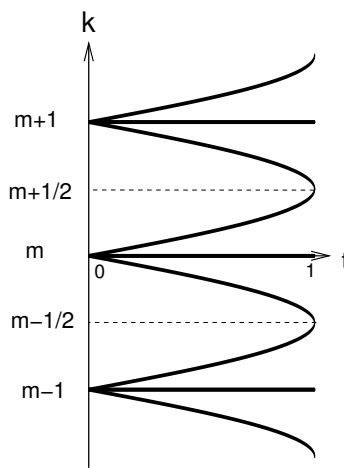


FIG. 9.20 – Valeurs propres des anneaux en boucle. Le mode $m \in \mathbf{N}$ est dégénéré deux fois.

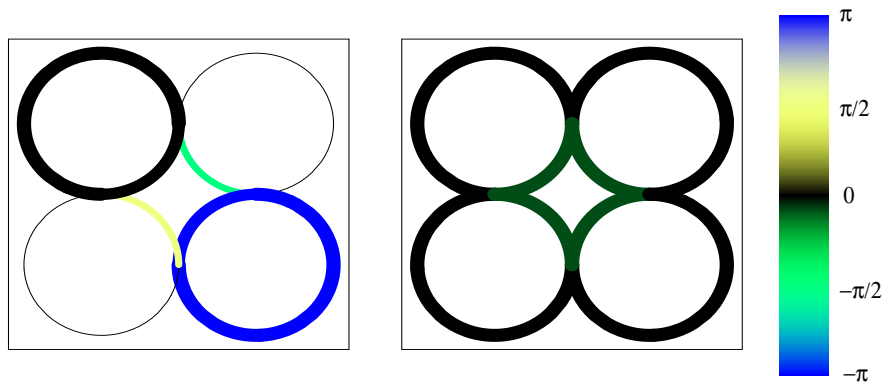


FIG. 9.21 – L'un des deux modes associés à $m \in \mathbb{N}$ est représenté à gauche ; le deuxième mode dégénéré est obtenu par rotation de $\pi/2$ du premier. À droite est dessiné le mode de plus bas vecteur d'onde. Quand le coefficient de transmission est nul, les anneaux sont entièrement découplés.

Nous pouvons remarquer pour finir que cet assemblage de quatre anneaux est un cas particulier de la configuration plus générale représentée sur la figure 9.22. Ce système est l'analogie pour la boucle de la chaîne courbée. La différence essentielle avec la boucle régulière est la perte de l'invariance par rotation de $\pi/2$. Dans le cas général, il va y avoir une levée de la dégénérescence des deux niveaux $k = m, m \in \mathbb{N}$ précédemment obtenus.

De plus, si l'on suit le parcours de l'onde indiqué sur la figure 9.22, la phase accumulée le long de cette trajectoire est : $4\pi(2\alpha + 1)k$, qui dépend de α car deux anneaux ne sont pas parcourus dans leur totalité. Nous perdons donc ici la propriété de symétrie évoquée précédemment : les valeurs propres et l'intensité dans les branches doivent dépendre de la géométrie des anneaux.

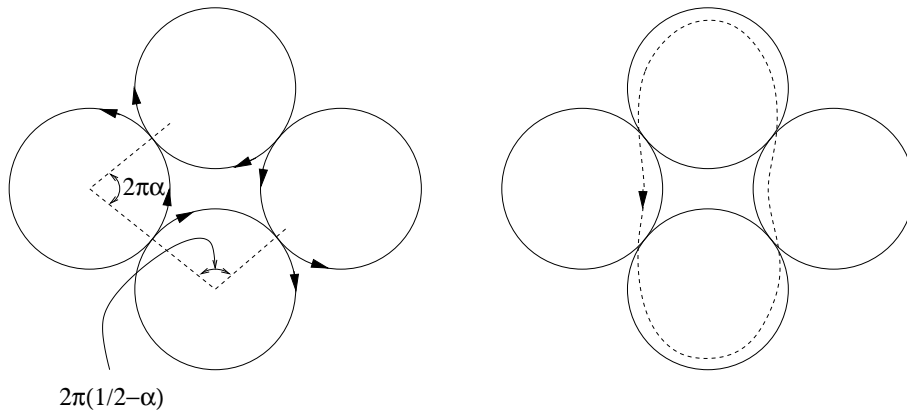


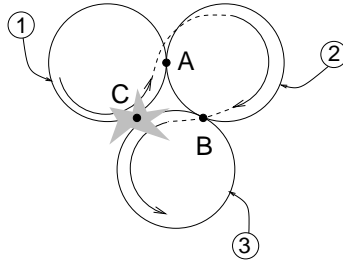
FIG. 9.22 – Structure générale pour une boucle de quatre anneaux.

Aucune simulation numérique n'a été effectuée étant donné la mémoire trop importante demandée pour traiter ces structures.

Nous venons d'étudier les propriétés de trois isomères d'un système de quatre anneaux couplés. Nous avons vu que celui qui se différenciait était la structure "bouclée", qui comporte un point de couplage supplémentaire par rapport aux deux premiers. Un système qui paraît plus simple dans cette classe de structure est la boucle à trois anneaux. Nous allons voir cependant que le fait qu'elle ne soit pas orientable simplement lui confère des propriétés plus complexes que le système précédent.

9.6 Trois anneaux couplés en boucle

Essayons dans un premier temps d'orienter le système suivant selon la méthode présentée plus haut. Si nous imposons le sens de rotation du champ dans un premier anneau choisi arbitrairement, et que nous orientons les suivants de proche en proche, une contradiction survient au niveau de la troisième jonction. En effet, le champ réinjecté dans le premier anneau tourne en sens inverse de la convention choisie au départ.



Ce problème peut être résolu en considérant que ce système est composé de deux chaînes linéaires de trois anneaux orientées en sens contraire. Nous sommes ainsi conduits à introduire en plus des champs "E" des paragraphes précédents les champs "F" tournant en sens opposé. Ces champs sont couplés comme indiqué sur la figure 9.23-a : comme dans les précédents cas, le champ E'_1 est couplé à E_2 en A, E'_2 à E_3 en B. Cependant, au point C, E'_3 n'est pas couplé à E_1 mais à F_1 . Au niveau du point A, F'_1 se couple à F_2 , F'_2 à F_3 en B, et F'_3 à E_1 en C. Ainsi cette figure est équivalente à six anneaux

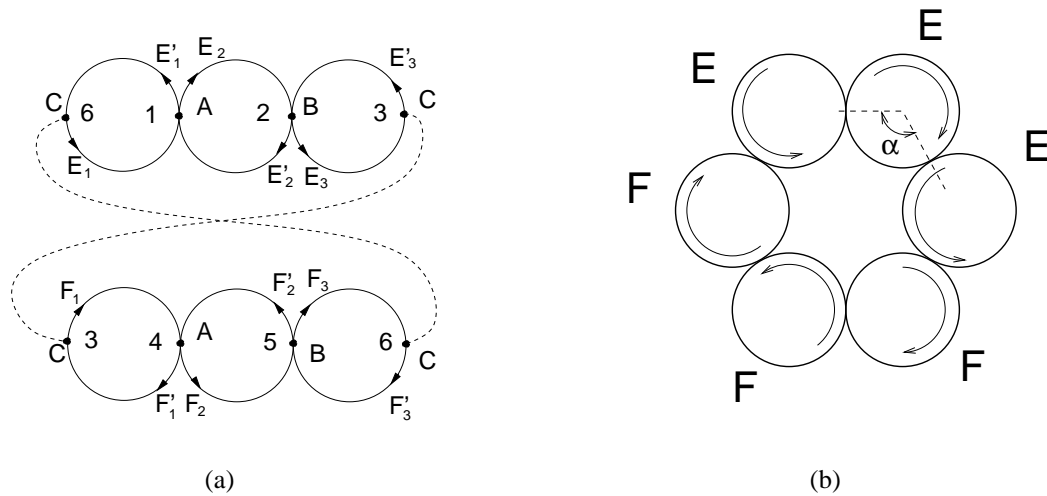


FIG. 9.23 – Schémas équivalents pour la boucle de trois anneaux.

couplés, en ne considérant qu'un seul sens de rotation (voir figure 9.23-b : de façon générale, à une boucle non-orientable à $2p + 1$ anneaux on peut associer formellement une boucle orientable à $4p + 2$ anneaux²). Les inconnues sont alors au nombre de 12 : $\mathbf{E} = (E'_1, E_2, E'_2, E_3, E'_3, F_1, F'_1, F_2, F'_2, F_3, F'_3, E_1)$.

²Remarquons toutefois qu'il faut prendre dans le cas présent $\alpha = \pi/3$ dans la matrice de bouclage et non pas $2\pi/3$ comme le suggère le dessin.

Matrice de bouclage. Elle s'écrit :

$$\mathcal{B} = \begin{bmatrix} 0 & & \dots & 0 & e^{i\frac{\pi k R}{3}} \\ & \tilde{\mathbf{B}} & & & 0 \\ & & \tilde{\mathbf{B}}^T & 0 & \\ \vdots & & & \tilde{\mathbf{B}} & \vdots \\ 0 & 0 & & & \tilde{\mathbf{B}} \\ e^{i\frac{5\pi k R}{3}} & 0 & \dots & & 0 \end{bmatrix}$$

où :

$$\tilde{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\frac{\pi k R}{3}} \\ e^{i\frac{5\pi k R}{3}} & 0 \end{bmatrix}$$

et l'exposant T désigne la transposition.

Dans la limite $t = 1$, nous retrouvons deux modes dégénérés, correspondant aux trajets indiqués sur la figure 9.24. Le spectre limite est alors $k = \frac{1}{3}p - \frac{1}{2}, p > 1$. Ces pics sont donc toujours deux fois dégénérés, un pour chaque sens de rotation.

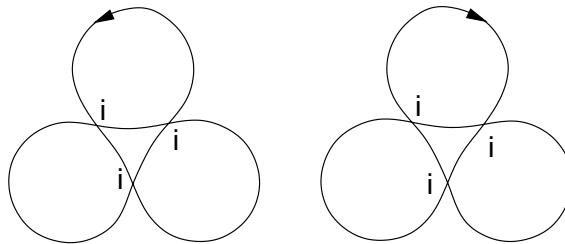


FIG. 9.24 – Pour $t = 1$, on retrouve deux modes dégénérés correspondant à deux sens de rotation.

Résolution pour un couplage quelconque. L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$0 = \frac{1}{4} (X - e^{i2\phi}) (X - e^{-i2\phi}) \underbrace{[2 - (3 + \cos(2\phi))X + 2X^2]}_{P_2}, \text{ avec } X = e^{2\pi i k}$$

Il existe donc deux valeurs de k dégénérées deux fois. L'équation $P_2(X) = 0$ peut s'écrire de la manière suivante :

$$3 + \cos^2(2\phi) = 4 \cos(2\pi k)$$

d'où les solutions :

$$P_2 = 0 \Leftrightarrow k = \pm \frac{1}{2\pi} \cos^{-1} \left[\frac{1 + \cos^2 \phi}{2} \right] + m, \quad m \in \mathbf{N} \quad (9.12)$$

Les vecteurs d'onde propres sont donc :

$$\begin{aligned}
 k_{1,m} &= -\frac{\phi}{\pi} + m \\
 k_{2,m}/k'_{2,m} &= -\frac{1}{2\pi} \cos^{-1} \left[\frac{1+\cos^2\phi}{2} \right] + m \\
 k_{3,m}/k'_{3,m} &= \frac{1}{2\pi} \cos^{-1} \left[\frac{1+\cos^2\phi}{2} \right] + m \\
 k_{4,m} &= \frac{\phi}{\pi} + m
 \end{aligned}
 , m \in \mathbf{N} \quad (9.13)$$

Leur comportement en fonction du coefficient de transmission est présenté sur la figure 9.25.

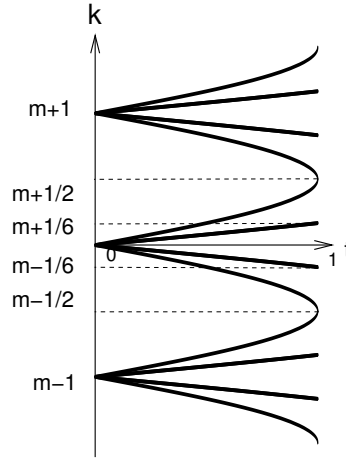


FIG. 9.25 – Spectre d'une boucle de trois anneaux. Il y a quatre modes, dont deux dégénérés deux fois. Quand $t = 1$, les valeurs propres de k sont $\frac{1}{3}p - \frac{1}{2}$, deux fois dégénérées.

Sur la figure 9.6 sont tracés les différents modes en fonction du coefficient de transmission. Les contributions E (ligne du haut) et F (ligne du bas) ont été séparées pour plus de clarté. Seuls les modes de $k_{2,m}$, $k_{3,m}$ et $k_{4,m}$ ont été représentés. Il apparaît que le troisième mode a une intensité constante dans toutes ses branches. En revanche, pour les deux premiers, la lumière ne parcourt pas toute la structure pour les couplages faibles, mais asymptotiquement, nous retrouvons les trajets correspondant à la figure 9.24. De plus, la rotation d'angle $2\pi/3$ est une symétrie du système, et nous pouvons vérifier (c'est plus facile pour $t = 1$, attention cependant au passage des champs E aux champs F ...) que le premier mode est associé à la valeur propre $e^{i2\pi/3}$, le deuxième à $e^{-i2\pi/3}$ et enfin le dernier à 1. De plus, il est à noter que l'opération $E \leftrightarrow F$ n'est pas une opération de symétrie de la boucle, il n'y a donc aucune raison pour que les modes soient symétriques ou antisymétriques dans cette opération.

Les six modes sont tracés sur la figure 9.27 dans la représentation équivalente à six anneaux et dans la limite $t = 0$. Il apparaît clairement que les deux couples de modes dégénérés sont constitués d'un mode et de son image par une rotation de " $\pi/3$ ".

La simulation numérique de cette structure est plus complexe. Trois modes sur quatre ont effectivement été trouvés. Le mode le plus symétrique ($\lambda=536$ nm) appartient à la levée de dégénérescence du mode $m = 21$ d'un seul anneau, les deux autres appartenant au mode $m = 20$. Le mode totalement antisymétrique n'a pas été trouvé.

Les deux modes appartenant aux deux niveaux dégénérés ont bien la même allure que celle prédite par le calcul analytique, à savoir que seuls deux anneaux sur trois sont

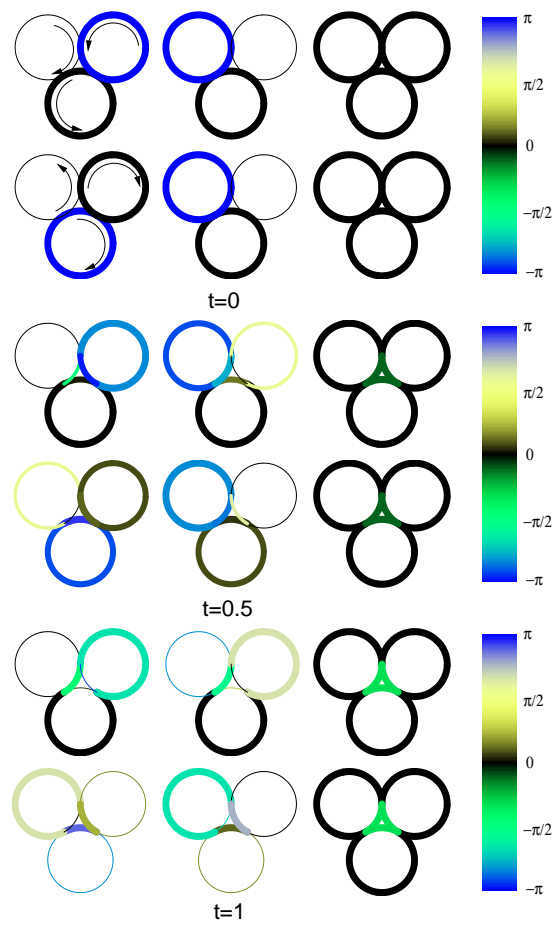


FIG. 9.26 – Les modes de trois anneaux.

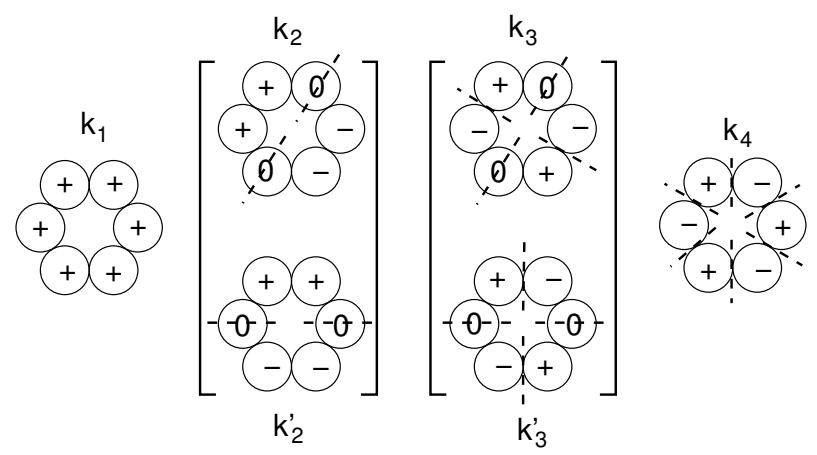


FIG. 9.27 – Représentation dépliée des modes de la boucle à trois anneaux dans la limite $t = 0$.

illuminés de manière importante. Cependant, il faut bien voir que si le mode numérique ressemble au mode analytique, c'est en fait une superposition des deux états de base dégénérés indiqués sur le figure 9.27

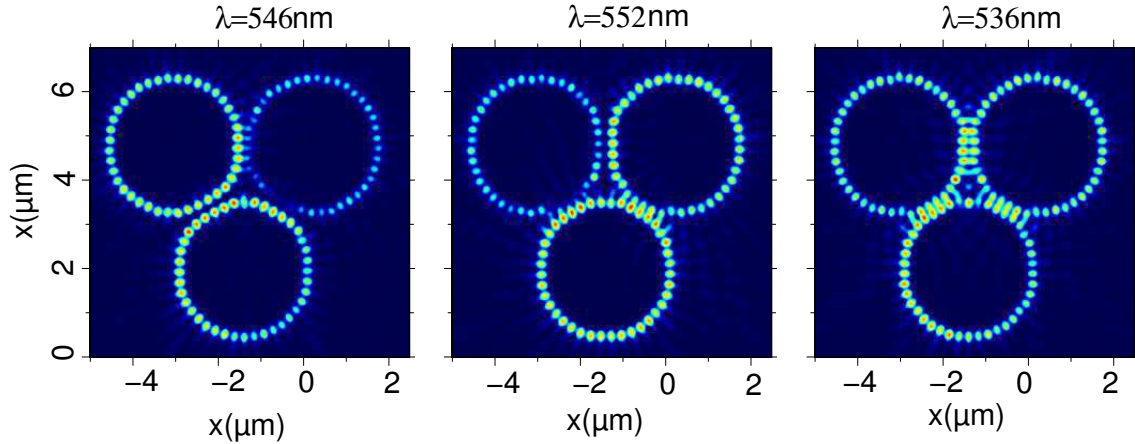


FIG. 9.28 – Trois modes ont été trouvés numériquement.

Nous venons d'étudier une boucle à quatre et trois anneaux, cette dernière s'étant révélée être équivalente une boucle de six anneaux. L'étude de tels systèmes de taille plus importante n'apporterait rien de nouveau. Cependant, nous pouvons nous demander s'il en existe de plus petits. En effet, les matrices \mathcal{B} des deux boucles étudiées avaient la même forme :

$$\mathcal{B} = \begin{bmatrix} 0 & & & \dots & & X^{\alpha_0} \\ & 0 & X^{\alpha_1} & & & \\ & X^{1-\alpha_1} & 0 & & & \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & 0 & X^{\alpha_N} \\ X^{1-\alpha_0} & & & \dots & X^{1-\alpha_N} & 0 \end{bmatrix} \quad (9.14)$$

À l'inverse, existe-t-il des systèmes plus petits de matrices de bouclage analogues ? En particulier, qu'en est-il pour celle-ci :

$$\mathcal{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & e^{i2\pi\alpha kR} \\ 0 & 0 & e^{i2\pi(1-\alpha)kR} & 0 \\ 0 & e^{i2\pi\alpha kR} & 0 & 0 \\ e^{i2\pi(1-\alpha)kR} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (9.15)$$

Considérons alors la figure 9.29-a : il s'agit d'un anneau couplé avec lui-même. Ce système élémentaire n'est pas orientable. Il faut à nouveau mélanger les deux sens de rotation, comme indiquée sur la figure 9.29-b : le champ E' est couplé au champ F et non au champ E . Il y a donc levée de la dégénérescence d'orientation.

Il est intéressant à nouveau de regarder le cas limite $t = 1$. Le système est alors équivalent à un anneau de même rayon, mais comportant deux points de déphasage de $\pi/2$. Le spectre complet est indiqué sur la figure 9.30, en fonction du coefficient de couplage.

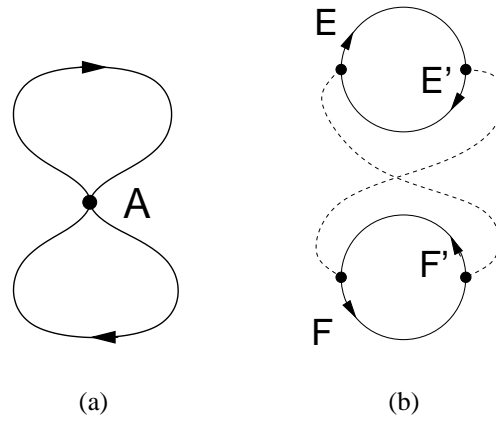


FIG. 9.29 – (a) Anneau couplé avec lui-même, dans le cas $\alpha = \pi$. (b) Représentation équivalente faisant apparaître les deux sens de rotation opposés.

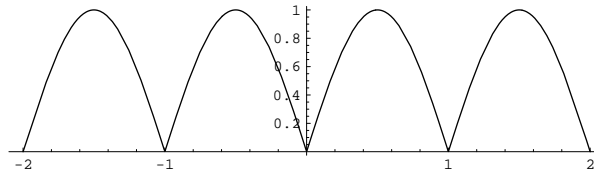


FIG. 9.30 – Spectre d'un l'anneau couplé avec lui-même. Il y a levée de dégénérescence progressive quand t augmente, jusqu'à la limite $t = 1$, correspondant à nouveau à un anneau seul non couplé. Les pics sont alors dégénérés deux fois.

Nous venons d'étudier deux boucles comportant un nombre impair d'anneaux. Pour les décrire, il est obligatoire de prendre en compte les deux orientations possibles des champs dans chacune des branches. En effet, la non-orientabilité de ces systèmes fait que ces champs vont être couplés entre eux, conduisant à une levée partielle de la dégénérescence d'orientation. Les dégénérescences subsistantes sont dues aux symétries du système.

9.7 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthode simple de calcul des modes et des valeurs propres d'un ensemble de résonateurs annulaires couplés. Cette méthode ne prend en compte que la structure longitudinale du champ, et néglige la dispersion de l'indice effectif ainsi que toutes les sources de pertes, essentiellement radiatives.

Cette méthode a été appliquée à l'étude de structures de géométries variées, de l'ensemble de deux anneaux aux boucles à trois et quatre anneaux, et a permis de mettre en évidence les propriétés spécifiques de chacune. Dans tous les cas, le couplage permet de lever la dégénérescence des modes des anneaux individuels, ceux-ci se recombinaient de manière à respecter les symétries du système de départ.

La comparaison avec les résultats d'un calcul numérique utilisant les tenseurs de susceptibilité du champ a montré un bon accord quand à la forme des modes. Cependant, plusieurs points sont difficilement interprétables. Nous avons vu que d'une part le nombre de modes effectivement observés par la simulation n'est pas toujours en accord avec celui prévu par le modèle, et que l'amplitude des résonances variait d'un facteur important d'un

mode à l'autre. Il serait ainsi intéressant de compléter cette étude théorique par une étude expérimentale d'adressage direct par faisceau gaussien focalisé de plusieurs anneaux raisonnant couplés.

Enfin, la géométrie la plus adaptée semble être une configuration à deux anneaux, éclairés de telle manière que le mode antisymétrique est excité. C'est en effet pour celui-ci que le gradient de l'intensité est le plus important, l'antisymétrie conduisant à une annulation rapide du champ entre les deux anneaux.

Chapitre 10

Conclusion générale

Ce travail de thèse est organisé en deux thèmes. Le premier porte sur la manipulation d'atomes lents par des nanostructures régulières et de structure très simple. À l'opposé, le deuxième traite d'un dispositif possible de nanolithographie permettant la création de nanostructures de forme complexe. Dans ces deux parties, nous avons suivi une démarche similaire, reposant sur l'articulation entre une description analytique et une description numérique des phénomènes physiques. L'approche analytique a ainsi permis d'une part de comprendre les mécanismes sous-jacents et d'autre part d'orienter des calculs numériques souvent complexes et longs à effectuer.

Dans la première partie, nous avons donc étudié une expérience de diffraction en réflexion d'atomes lents par des potentiels évanescents nanostructurés en une ou deux dimensions, obtenus en couplant une onde de surface avec un réseau matériel diélectrique périodique. Ce type de potentiel est harmoniquement plus riche que le réseau à ondes évanescentes stationnaires utilisé pendant les années 1990. De plus, cette méthode permet de libérer un degré de liberté, à savoir l'orientation du plan d'incidence par rapport au réseau. Enfin, nous pouvons espérer agir sur la forme des plots pour structurer le champ à courte distance.

L'approche analytique, détaillée dans le chapitre 5, nous a permis de dégager les paramètres caractéristiques du processus, et notamment de mettre en évidence l'augmentation de l'acceptance angulaire atomique par rapport aux réseaux à ondes stationnaires. En complétant cette approche par un calcul numérique plus complet, nous avons vu que, dans la gamme de paramètres envisagés, seuls les harmoniques de plus grande fréquence spatiale interviennent dans le processus de diffraction.

Dans la deuxième partie, nous avons étudié des systèmes diélectriques résonants, composés de plusieurs anneaux couplés de diamètre micronique. L'approche analytique nous a permis de comprendre comment les modes des anneaux isolés se recombinaient pour former les modes collectifs de structures plus complexes. Nous avons vu par ailleurs que ces combinaisons respectent les symétries de la structure physique.

Plusieurs prolongements de ce travail sont possibles. En ce qui concerne la diffraction, la réalisation d'un "réseau à échelottes" atomique semble être une voie prometteuse. Intuitivement, l'effet d'échelottes provient d'une dissymétrie du potentiel sur une période. Un potentiel ne comportant qu'un seul harmonique étant nécessairement symétrique, il faut enrichir le spectre de l'onde de surface à grande distance. Deux voies pour cela

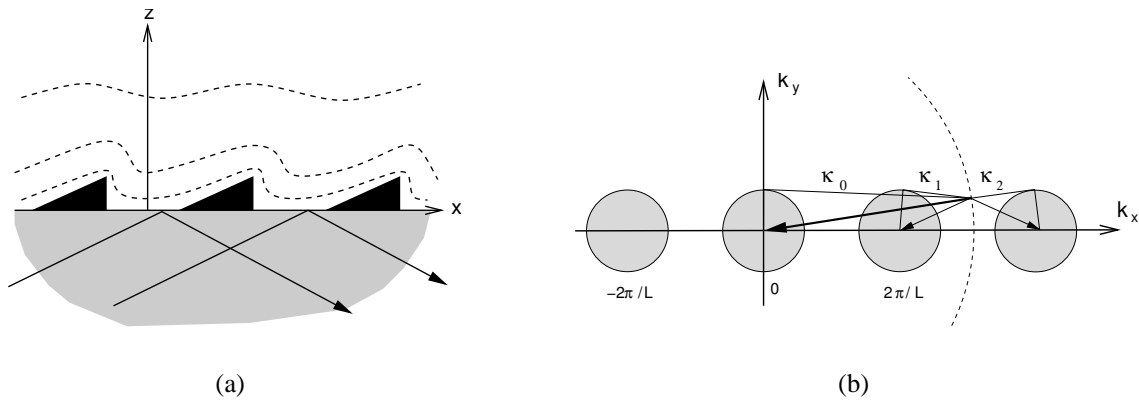


FIG. 10.1 – (a) Motif d'un réseau à échelottes atomique. (b) géométrie du réseau permettant de favoriser les ordres 1 et 2, de manière à créer un réseau à échelottes de diffraction atomique.

semblent envisageables. La première est de jouer sur la forme même du motif du réseau matériel, par exemple en créant un motif dissymétrique comme celui indiqué sur la figure 10.1-a. Le principal obstacle à cette méthode est le filtrage des harmoniques d'ordre $|m| > 1$: à grande distance, le potentiel est quasi-sinusoidal, donc symétrique. L'autre voie, éventuellement complémentaire de la première, est d'essayer de favoriser un deuxième harmonique en jouant sur la géométrie de l'éclairage et la période du réseau. Un exemple de configuration permettant de favoriser l'ordre 2 à grande distance est indiqué sur la figure 10.1-b.

En ce qui concerne les anneaux couplés, il serait intéressant, comme indiqué dans le chapitre 8, de confronter ces prédictions théoriques à des mesures expérimentales. Nous espérons qu'une future collaboration sera possible avec l'équipe d'Alain Dereux du Laboratoire de Physique de l'Université de Bourgogne afin de procéder à la fabrication de ces structures puis à la mesure de leur spectre et de leurs modes. Sur le plan numérique, la suite du projet va essentiellement consister en un calcul tridimensionnel du champ, ainsi qu'aux simulations de trajectoires atomiques afin de quantifier les effets de focalisation attendus.

Bibliographie

- [1] A. Ashkin *Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure* Phys. Rev. Lett. **24**, 156-159 (1970).
- [2] A. Ashkin Phys. Rev. Lett. **40**, 729 (1978).
- [3] R.J. Cook, R.K. Hill Opt. Commun. **43**, 258 (1982).
- [4] V.I. Balykin, V.S. Letokhov, Y.B. Ovchinnikov, A.I. Sidorov JETP Lett **45**, 353 (1987).
- [5] V.I. Balykin, V.S. Letokhov, Y.B. Ovchinnikov, A.I. Sidorov *Quantum-State-Selective Mirror Reflection of Atoms by Laser Light* Phys. Rev. Lett. **60**, 21-24 (1988).
- [6] S. Marksteiner, C. M. Savage, P. Zoller, S. L. Rolston *Coherent atomic waveguides from hollow optical fibers : Quantized atomic motion* Phys. Rev. A **50**, 2680-2690 (1993).
- [7] H. Ito, K. Sakaki, T. Nakata, W. Jhe, M. Ohtsu Opt. Commun. **115**, 57 (1995).
- [8] H. Ito, T. Nakata, K. Sakaki, M. Ohtsu, K. I. Lee, W. Jhe *Laser Spectroscopy of Atoms Guided by Evanescent Waves in Micron-Sized Hollow Optical Fibers* Phys. Rev. Lett. **76**, 4500-4503 (1996).
- [9] C.G. Aminoff, A.M. Steane, P. Bouyer, P. Desbiolles, J. Dalibard, C. Cohen-Tannoudji *Cesium Atoms Bouncing in a Stable Gravitational Cavity* Phys. Rev. Lett. **71**, 3083-3086 (1993).
- [10] J. P. Dowling, J. Gea-Banacloche *Schrödinger modal structure of cubical, pyramidal, and conical, evanescent light-wave gravitational atom traps* Phys. Rev. A **52**, 3997 (1995).
- [11] C.G. Aminoff, A.M. Steane, P. Bouyer, P. Desbiolles, J. Dalibard, C. Cohen-Tannoudji *Cesium Atoms Bouncing in a Stable Gravitational Cavity* Phys. Rev. Lett. **71**(19), 3083-3086 (1993).
- [12] S. Chu *The manipulation of neutral particles* Rev. Mod. Phys. **70**, 685 (1998).
- [13] C.N. Cohen-Tannoudji *Manipulating atoms with photons* Rev. Mod. Phys. **70**, 685 (1998).
- [14] W. D. Phillips *Laser cooling and trapping of neutral atoms* Rev. Mod. Phys. **70**, 721 (1998).
- [15] Y.B. Ovchinnikov, S.V. Shul'ga, V.I. Balykin J. Phys. B **24**, 3173 (1991).
- [16] M. Hammes, D. Rychtarik, V. Druzhinina, U. Moslener, I. Manek-Höninger, R. Grimm *Optical and evaporative cooling of cesium atoms in the gravito-optical surface trap* J. Mod. Optic. **47**(14-15), 2755-2767 (2000).
- [17] M. Hammes, D. Rychtarik, H.C. Nägerl, R. Grimm *Cold-atom gas at very high densities in an optical surface microtrap* Phys. Rev. A **66**, 51401 (2002).

- [18] M. Hammes, D. Rychtarik, B. Entseger, H.C. Nägerl, R. Grimm *Evanescent-Wave Trapping and Evaporating Cooling of an Atomic Gas at the Crossover to Two Dimensions* Phys. Rev. Lett. **90**(17), 173001-173004 (2003).
- [19] P.E. Moskowitz, P.L. Gould, S.R. Atlas, D.E. Pritchard *Diffraction of an Atomic Beam by Standing-Wave Radiation* Phys. Rev. Lett. **51**(5), 370-373 (1983).
- [20] P.L. Gould, G.A. Ruff, D.E. Pritchard *Diffraction of Atoms by Light : The Near-Resonant Kapitza-Dirac Effect* Phys. Rev. Lett. **56**(8), 827-830 (1986).
- [21] P.J. Martin, P.L. Gould, B.G. Oldaker, A.H. Miklich, D.E. Pritchard *Diffraction of atoms moving through a standing light wave* Phys. Rev. A **36**, R2495 (1987).
- [22] P.J. Martin, B.G. Oldaker, A.H. Miklich, D.E. Pritchard *Bragg Scattering of Atoms from a Standing Light Wave* Phys. Rev. Lett. **60**(6), 515 (1988).
- [23] D. W. Keith, M. L. Schattenburg, H. I. Smith, and D. E. Pritchard *Diffraction of Atoms by a Transmission Grating* Phys. Rev. Lett. **61**, 1580-1583 (1988).
- [24] J.V. Hajnal, G.I. Opat Opt. Commun. **71**, 119 (1989).
- [25] J.V. Hajnal, K.G.H. Baldwin, P.T.H. Fisk, H.A. Bachor, G.I. Opat Opt. Commun. **73**, 331 (1989).
- [26] R. Deutschmann, W. Ertmer, H. Wallis *Reflection and diffraction of atomic de Broglie waves by an evanescent laser wave* Phys. Rev. A **47**(3), 2169-2185 (1993).
- [27] D. Gordon, C.M. Savage *Evanescent wave diffraction of multi-levels atoms* Optics Comm. **130**, 34-40 (1996).
- [28] E.M. Rasel, M.K. Oberthaler, H. Batelaan, J. Schmiedmayer, A. Zeilinger *Atom Wave Interferometry with Diffraction Gratings of Light* Phys. Rev. Lett. **75**, 2633-2637 (1995).
- [29] P.R. Berman Ed., *Atom Interferometry* Academic Press, San Diego USA (1997).
- [30] O.J.F. Martin, C. Girard *Controlling and tuning strong optical fields gradients at a local probe microscope tip apex* App. Phys. Lett. **70**(6), 705-707 (1997).
- [31] A. Roberts, J.E. Murphy *Evanescent fields with subwavelength features : their behavior and applications to atom optics* Optics Comm. **128**, 41-47 (1996).
- [32] V.I. Balykin, D.A. Lapshin, M.V. Subbotin, V.S. Letokhov *Near field diffraction grating for atoms* Optics Comm. **145**, 322-328 (1997).
- [33] H. Ito, K. Sakaki, W. Jhe, M. Ohtsu *Atomic funnel with evanescent light* Phys. Rev. A **56**(1), 712-718 (1996).
- [34] K.H. Kim, K.I. Lee, H.R. Noh, W. Jhe, N. Kwon, M. Ohtsu *Cold atomic beam produced by a conical mirror funnel* Phys. Rev. A **64**, 13402-13406 (2001).
- [35] C. Girard, C. Joachim, S. Gauthier *The physics of the near-field* Rep. Prog. Phys. **63**(6), 893-938 (2000).
- [36] D. Courjon, C. Bainier *Le champ proche optique* Springer, Paris (2001).
- [37] E.H. Synge *A suggested method for extending microscopic resolution into the ultra-microscopic region* Philos. Mag. **6**, 356-362 (1928).
- [38] E.A. Ash, G. Nicholls *Super-resolution Aperture Scanning Microscope*. Nature **237**, 510-512 (1972).
- [39] D.W. Pohl, W. Denk, M. Lanz *Optical stethoscopy : image resolution with $\lambda/20$* . Appl. Phys. Lett. **44**(7), 651-653 (1984).

- [40] R. Reddick, R. Warmack, T. Ferrel *New form of scanning optical microscopy*. Phys. Rev. B **39**(1), 767-770 (1989).
- [41] D. Courjon, K. Sarayedine, M. Spajer *Scanning tunneling optical microscopy*. Opt. Commun. **71**(1), 23-28 (1989).
- [42] F. De Fornel, J.P. Goudonnet, L. Salomon, E. Lesniewska *An evanescent field optical microscope* Proc. SPIE **1139**, 77-84 (1989).
- [43] E. Devaux, A. Dereux, E. Bourillot, J.C. Weeber, Y. Lacroute, J.P. Goudonnet *Local detection of the optical magnetic field in the near zone of dielectric samples*. Phys. Rev. B **62**(15), 10504-10514 (2000).
- [44] C. Chicanne, T. David, R. Quidant, J.C. Weeber, Y. Lacroute, E. Bourillot, A. Dereux *Imaging the Local Density of States of Optical Corrals* Phys. Rev. Lett. **88**(9), 97402-97405 (2002).
- [45] G. Colas des Francs, C. Girard, J.C. Weeber, C. Chicanne, T. David, A. Dereux *Optical Analogy to Electronic Quantum Corrals* Phys. Rev. Lett. **86**(21), 4950-4953 (2001).
- [46] D. Barchiesi, T. Pagnot, C. Pieralli, D. Van Labeke *Fluorescence scanning near-field microscopy (FSNOM) by measuring the decay-time of a fluorescent particle in Scanning Probe Microscopies III*, M. Vaez-Iravani, ed., Proc. SPIE **2384**, 90-100 (1995).
- [47] G. Parent, D. Van Labeke, D. Barchiesi *Fluorescence lifetime of a molecular near a corrugated interface : application to near-field microscopy* J. Opt. Soc. Am. A **16**(4), 896 (1999).
- [48] J.R. Krenn, A. Dereux, J.C. Weeber, E. Bourillot, Y. Lacroute, J.P. Goudonnet *Squeezing the Optical Near-Field Zone by Plasmon Coupling of Metallic Nanoparticles* Phys. Rev. Lett. **82**(12), 2590-2593 (1999).
- [49] J.P. Kottmann, O.J.F. Martin, D.R. Smith, S. Schultz *Non-regularly shaped plasmon resonant nanoparticles as localized light source for near-field microscopy* Journal of Microscopy **202**, 60-65 (2000).
- [50] C. Girard, O.J.F. Martin, A. Dereux *Molecular Lifetime Changes Induced by Nanometer Scale Optical Fields* Phys. Rev. Lett. **75** (17), 3098 (1995).
- [51] G. Colas des Francs *Optique sub-longueur d'onde et fluorescence moléculaire perturbée* Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse (2002).
- [52] T. Pagnot, D. Barchiesi, D. Van Labeke, C. Pieralli *Use of a scanning near-field optical microscope architecture to study fluorescence and energy transfert near a metal* Opt. Lett. **22**(2), 120 (1997).
- [53] Jean-Claude Weeber, Yvon Lacroute, and Alain Dereux *Optical near-field distributions of surface plasmon waveguide modes* Phys. Rev. B **68**, 115401 (2003).
- [54] R. Quidant, J.-C. Weeber, A. Dereux, D. Peyrade, Ch. Girard, Y. Chen *Spatially resolved photonic transfer through mesoscopic heterowires* Phys. Rev. E **65**, 036616 (2002).
- [55] R. Quidant, J.-C. Weeber, A. Dereux, D. Peyrade, G. Colas des Francs, C. Girard, and Y. Chen *Addressing and imaging high optical index dielectric ridges in the optical near field* Phys. Rev. E **64**, 066607 (2001).
- [56] J.-C. Weeber, J. R. Krenn, A. Dereux, B. Lamprecht, Y. Lacroute, and J. P. Goudonnet *Near-field observation of surface plasmon polariton propagation on thin metal stripes* Phys. Rev. B **64**, 045411 (2001).

- [57] D. Barchiesi, D. van Labeke *Application of Mie scattering of evanescent waves to scanning tunneling optical microscope theory* J. Mod. Opt. **40**(7), 1239-1254 (1993).
- [58] H.A. Bethe *Theory of Diffraction by Small Holes* Phys. Rev. **66**(7), 163-182 (1944).
- [59] E. Betzig, R.J. Chichester *Single molecules observed by near-field scanning microscopy* Science **262**, 1422-1425 (1993).
- [60] O.J.F. Martin *3D simulations of the experimental signal measured in near field optical microscopy* Journal of Microscopy **194**, 235 (1999).
- [61] D. Barchiesi, C. Girard, O.J.F. Martin, D. van Labeke, D. Courjon *Computing the optical near field distribution around complex subwavelength surface structures : A comparative study of different methods* Phys. Rev. E **54**(4), 4285-4292 (1996).
- [62] F.I. Baida, D. Van Labeke, A. Bouhelier, T. Hueser, D.W. Pohl *Propagation and diffraction of locally excited surface plasmon* J. Opt. Soc. Am. A **18**(7), 1552-1561 (2001).
- [63] D.A. Christensen *Analysis of near-field tip patterns including object interaction using finite-difference-time-domain calculations* Ultramicroscopy **57**, 189-195 (1995).
- [64] H. Furukawa, S. Kawata *Analysis of image formation in a near-field scanning optical microscope : Effects of multiple scattering* Optics Commun. **132**, 170-178 (1996).
- [65] B.E. Little, S.T. Chu, H.A. Haus, J. Foresi, J.P. Laine *Microring Resonator Channel Dropping Filters* J. Lightwave Technol. **15**(6), 998-1005 (1997).
- [66] B. Labani, C. Girard, D. Courjon, D. Van Labeke *Optical interaction between a dielectric tip and a nanometric lattice : implications for near-field microscopy* J. Opt. Soc. Am. B **7**(6), 936 (1990).
- [67] C. Girard, D. Courjon *Model for scanning tunneling optical microscopy : A microscopic self-consistent approach* Phys. Rev. B **42**(15), 9340-9349 (1990).
- [68] O.J.F. Martin, C. Girard, A. Dereux *Generalized Field Propagator for Electromagnetic Scattering and Light Confinement* Phys. Rev. Lett. **74**(4), 526-529 (1995).
- [69] 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), 16487-16497 (1997).
- [70] D. W. Keith, C. R. Ekstrom, Q. A. Turchette, D. E. Pritchard *An interferometer for atoms* Phys. Rev. Lett. **66**, 2693-2696 (1991).
- [71] E. Arimondo, H. Lew, T. Oka *Deflection of a Na Beam by Resonant Standing-Wave Radiation* Phys. Rev. Lett. **43**(11), 753-757 (1979).
- [72] N. P. Bigelow and M. G. Prentiss *Direct observation of the influence of Doppler-induced resonances on atomic velocities* Phys. Rev. Lett. **65**, 555-558 (1990).
- [73] J. J. Tollett, J. Chen, J. G. Story, N. W. M. Ritchie, C. C. Bradley, and Randall G. Hulet *Observation of velocity-tuned multiphoton "Doppleron" resonances in laser-cooled atoms* Phys. Rev. Lett. **65**, 559-562 (1990).
- [74] B.W. Stenlake, I.C. Littler, H.A. Bachor, K.G.H. Baldwin, P.T.H. Fisk *Observation of velocity-tuned resonances in the reflection of atoms from an evanescent light grating* Phys. Rev. A **49**(1), R16-R19 (1994).

- [75] F.I. Baida, B. Van Labeke *Near-field surface plasmon microscopy : A numerical study of plasmon excitation, propagation, and edge interaction using a three-dimensionnal Gaussian beam* Phys. Rev. B **60**(11), 7812-7815 (1999).
- [76] S. Feron, J. Reinhardt, S. Le Boiteux, O. Gorceix, J. Baudon, M. Ducloy, J. Robert, Ch. Miniatura, S. Nic Chormaic, H. Haberland, V. Lorent *Reflection of metastable neon atoms by a surface plasmon wave* Opt. Commun. **102**, 83-88 (1993).
- [77] W. Seifert, C.S. Adams, V.I. Balykin, C. Heine, Yu. Ovchinnikov, J. Mlynek *Reflection of metastable argon atoms from an evanescent wave* Phys. Rev. A **49**(5), 3814-3823 (1994).
- [78] A. Landragin, J.Y. Courtois, G. Lbeyrie, N. Vansteenkiste, C.I. Westbrook, A. Aspect *Measurement of the van der Waals Force in an atomic Mirror* Phys. Rev. Lett. **77**(8), 1464-1467 (1996).
- [79] B. Segev, R. Côté, M.G. Raizen *Quantum reflection from an atomic mirror* Phys. Rev. A **56**(5), R3350-R3353 (1997).
- [80] T.W. Ebbesen, H.J. Lezec, H.F. Ghaemi, T. Thio, P.A. Wolff *Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays* Nature **391**, 667-669 (1998).
- [81] J.J. Greffet, R. Carminati, K. Joulain, J.P. Mulet, S. Mainguy, Y. Chen *Coherent emission of light by thermal source* Nature **416**, 61-64 (2002).
- [82] R. Petit, M. Cadilhac, D. Maystre, P. Vincent, M. Nevière *Electromagnetic theory of gratings* Topic in Current Physics **22**, Heidelberg : Springer-Verlag.
- [83] P. Vincent *Electromagnetic theory of gratings* Topic in Current Physics **22**, 101-121. Heidelberg : Springer-Verlag.
- [84] J.C. Weeber *Diffraction en champ proche optique. Analyse des images de microscopie à effet tunnel photonique*. Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, (1996).
- [85] R.A. Depine, J.M. Simon *Comparison between the differential and integral methods used to solve the gratings problem in the TM case* J. Opt. Soc. Am. A **4**(5), 834-838 (1987).
- [86] F. Montiel, M. Nevière *Differential theory of gratings : Extension to deep gratings of arbitrary profile and permittivity through the R-matrix propagation algorithm* J. Opt. Soc. Am. A **11**(12), 3241-3250 (1994).
- [87] M. Nevière, F. Montiel *Deep gratings : a combination of the differential theory and the multiple reflection series* Opt. Commun. **108**(1-3), 1-7 (1994).
- [88] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg *Processus d'interaction entre atomes et photons* Editions du CNRS, Paris (1988).
- [89] J. Weiner, P.T. Ho *Light-Matter Interactions : Fundamentals and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge (2003).
- [90] R.J. Cook *Atomic motion in a resonant radiation : An application of Ehrenfest's theorem* Phys. Rev. A **20**(1), 224-228 (1979).
- [91] C. Cohen-Tannoudji *Atomic Motion in Laser Light* Les Houches, Session III (1990).
- [92] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë *Mécanique Quantique II* Hermann, Paris (1977).
- [93] A.F. Bernhardt, B. Shore *Coherent atomic deflection by resonant standing waves* Phys. Rev. A **23**, 1290 (1981).

- [94] J.E. Murphy, L.C.L. Hollenberg, A. Smith *Velocity tuned resonances in the diffraction of atoms by an evanescent field* Phys. Rev. A **49**(4), 3100-3103 (1994).
- [95] G. Armand, J.R. Manson *Scattering of Neutral Atoms by an Exponential Corrugated Potential* Phys. Rev. Lett. **43** (24), 1839-1842 (1979).
- [96] J.M. Jackson, N.F. Mott Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **137**, 703 (1932).
- [97] R.P. Feynman, A.R. Hibbs *Quantum Mechanics and Path Integrals* McGraw-Hill, New-York (1965).
- [98] M. Born, E. Wolf *Principles of Optics*, sixième édition Pergamon Press (1980).
- [99] C. Henkel, A.M. Steane, R. Kaiser, J. Dalibard *A modulated mirror for atomic interferometry* J. Phys. II **4**, 1877-1896 (1994).
- [100] C. Henkel, J.Y. Courtois, A. Aspect *Atomic diffraction by a thin phase grating* J. Phys. II **4**, 1955-1974 (1994).
- [101] C. Henkel *Réflexion et diffraction d'atomes lents par un miroir à onde évanescente* Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, Paris (1996).
- [102] M. Abramowitz, L.A. Stegun *Handbook of Mathematical Functions* National Bureau of Standards-Applied Mathematics Series, Washington (1964).
- [103] C. Henkel, H. Wallis, N. Westbrook, C.I. Westbrook, A. Aspect, K. Sengstock, W. Ertmer *Theory of atomic diffraction from evanescent waves* App. Phys. B **69**, 277 (1999).
- [104] P. Storey, C. Cohen-Tannoudji J. Phys. II **4**, 1999 (1994).
- [105] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik *Table of Integrals, Series, and Products* Academic Press, San Diego (1980).
- [106] R. Brouri, R. Asimov, M. Gorlicki, S. Feron, J. Reinhardt, V. Lorent *Thermal atom beam splitting by an evanescent standing wave* Opt. Commun. **124**, 448-451 (1996).
- [107] L. Cognet, V. Savalli, G.Zs.K. Horvath, D. Holleville, R. Marani, N. Westbrook, C.I. Westbrook, A. Aspect *Atomic Interference in Grazing Incidence Diffraction from an Evanescent Wave Mirror* Phys. Rev. Lett. **81**(23), 5044-5047 (1998).
- [108] M. Christ, A. Scholz, M. Schiffer, R. Deutschmann, W. Ertmer *Diffraction and reflection of a slow metastable neon beam by an evanescent light grating* Optics Comm. **94**(107), 211-217 (1994).
- [109] C. Henkel, K. Mølmer, R. Kaiser, C.I. Westbrook *Atomic diffraction assisted by a stimulated Raman transition* Phys. Rev. A **56**(1), R9-R12 (1997).
- [110] C.M. Savage, D. Gordon, T.C. Ralph *Numerical modeling of evanescent-wave atom optics* Phys. Rev. A **52**(6), 4741-4746 (1995).
- [111] J. Murphy, P. Goodman, A. Smith *Calculation of back-reflected intensities of a Na-atom beam by a standing evanescent E-M field* J. Phys. : Condens. Matter **5**, 4665-4676 (1993).
- [112] S. Feron, J. Reinhardt, M. Ducloy, O. Gorceix, S. Nic Chomaic, C. Miniatura, H. Haberland *Doppler-tuned multiphoton resonances in an atom reflection by a standing evanescent wave* Phys. Rev. A **49**(6), 4733-4741 (1994).
- [113] G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, J. Weiner, C. Girard, J.C. Weeber *Atomic diffraction from nanostructured optical potentials* Phys. Rev. A **65**(5), 053615 (2002).

- [114] A.D. Bandrauk, H. Shen *Exponential split operator methods for solving coupled time-dependant Schrödinger equations* J. Chem. Phys. **99**(2), 1185 (1993).
- [115] R.C. Mowrey, D.J. Kouri J. Chem. Phys. **84**, 6466 (1986).
- [116] M. K. Chin, S. T. Ho *Design and Modeling of Waveguide-Coupled Single-Mode Microring Resonators* J. Lightwave Technol. **16**(8), 1433-1446 (1998).
- [117] L. F. Stokes, M. Chodorow, H. J. Shaw *All-single-mode fiber resonator* Opt. Lett. **7**(6), 288 (1982).
- [118] P. Urquhart *Compound optical-fiber-based resonators* J. Opt. Soc. Am. A **5**(6), 803-812 (1988).
- [119] J. E. Heebner, R. W. Boyd, Q-H. Park *SCISSOR solitons and other novel propagation effects in microresonator-modified waveguides* J. Opt. Soc. Am. B **19**(4), 722-731 (2002).
- [120] S. Blair, J. E. Heebner, R. W. Boyd *Beyond the absorption-limited nonlinear phase shift with microring resonators* Opt. Lett. **27**(5), 357-359 (2002).
- [121] B.E. Little, S.T. Chu, H.A. Haus *Second-order filtering and sensing with partially coupled traveling waves in a single resonator* Opt. Lett. **23**(20), 1570-1572 (1998).
- [122] P. Gay-Balmaz, O.J.F. Martin *Electromagnetic resonances in individual and coupled split-ring resonators* J. App. Phys. **92**(5), 2929 (2002).
- [123] E. N. Economou *Green's Functions in Quantum Physics* Springer-Verlag, Berlin (1983).
- [124] J.D. Jackson *Électrodynamique classique - Cours et exercices d'électromagnétisme* Dunod (1995).
- [125] R. E. Collin *Field Theory of Guided Waves* IEEE Press, New York (1991).
- [126] A. Yaghjian *Electric dyadic Green's functions in the source region* Proceedings of the IEEE **68**, 248-263 (1980).
- [127] F. Depasse, M.A. Paesler, D. Courjon, J.M. Vigoureux *Huygens-Fresnel principle in the near field* Opt. Lett. **20**(3), 234 (1995).
- [128] P. Gay-Balmaz, O.J.F. Martin *Validity domain and limitations of non-retarded Green's tensor for electromagnetic scattering at surfaces* Opt. Commun. **184**, 37-47 (2000).
- [129] M. Paulus, O.J.F. Martin *Green's tensor technique for scattering in two-dimensional stratified media* Phys. Rev. E **63**, 66615 (2001).
- [130] M. Paulus, O.J.F. Martin *Light propagation and scattering in stratified media : a Green's tensor approach* J. Opt. Soc. Am. A **18**(4), 854 (2001).
- [131] D. Van Labeke, F.I. Baida, J.M. Vigoureux *A theoretical study of near-field detection and excitation of surface plasmons* Ultramicroscopy **71**, 351-359 (1998).
- [132] J.C. Weeber, A. Dereux, C. Girard, G. Colas des Francs, J.R. Krenn, J.P. Goudonnet *Optical addressing at the subwavelength scale* Phys. Rev. E **62**, 7381-7388 (2000).
- [133] B.E. Little, S.T. Chu, W. Pan, D. Ripin, T. Kaneko, Y. Kokubun, E. Ippen *Vertically Coupled Glass Microring Resonator Channel Dropping Filters* IEEE Photon. Technol. Lett. **11**(2), 1041-1135 (1999).
- [134] R. Quidant *Dispositifs optiques sub-microniques : nano-fabrication et caractérisation en champ proche* Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon (2002).

- [135] R. Carminati, J. J. Greffet *Influence of dielectric contrast and topography on the near field scattered by an inhomogeneous surface* J. Opt. Soc. Am. A **12** (12), 2716 (1995).
- [136] J. E. Sipe *New Green-function formalism for surface optics* J. Opt. Soc. Am. B **4**(4), 481 (1986).

Quatrième partie

Annexes

Annexe A

Diffraction de la lumière par un réseau mince

Dans ce mémoire ont été présentés deux algorithmes. Le premier repose sur la théorie différentielle des réseaux (chapitre 3) et s'applique à l'étude de structures périodiques ; le deuxième utilise la notion de fonction de Green dyadique (chapitre 7) et concerne les objets localisés. Dans cette dernière méthode, le champ diffracté est décrit par l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega_0) + \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r}' [\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \mathbf{S}_{surf}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_0)] \chi(\mathbf{r}', \omega_0) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) \quad (\text{A.1})$$

où $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ et $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega)$ sont respectivement les amplitudes des champs macroscopiques total et non-perturbé, en un point \mathbf{r} de l'espace et pour la pulsation ω . Le tenseur $\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ est la fonction de Green associée au milieu homogène (trajet 1 de la figure A.1), tandis que $\mathbf{S}_{surf}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ est la fonction de Green associée à la réflexion sur la surface (trajet 2), et $\chi(\mathbf{r}', \omega_0)$ la susceptibilité de l'objet diffractant de volume \mathcal{V} .

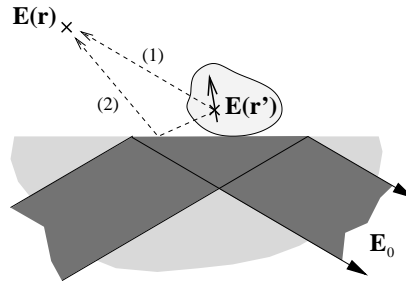


FIG. A.1 – Objet diélectrique plongé dans une onde évanescente.

L'approximation de Born consiste à assimiler le champ total à l'intérieur de l'objet au champ initial non perturbé $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega)$, ce qui revient à négliger l'interaction d'une cellule avec l'ensemble de l'échantillon. Appliquée au réseau diélectrique, cette approximation permet d'extraire des expressions analytiques des coefficients de Fourier du champ diffracté. Dans ce contexte, R. Carminati *et al* [135] ont montré que l'approximation de Born est valable dans la limite des faibles hauteurs et des faibles contrastes d'indice.

Il s'agit donc d'une méthode mixte, combinant les deux approches étudiées dans cette thèse. En premier lieu, le champ électrique diffracté dans le vide obéit au développement

de Rayleigh :

$$\mathbf{E}^3(x, y, z) = \sum_{\nu} \mathbf{E}_{\nu}^{3,(d)} e^{-i\kappa_{\nu}^3 z} e^{i\mathbf{k}_{\nu} \cdot \mathbf{l}} \quad (\text{A.2})$$

De plus, dans l'équation de Lippmann-Schwinger interviennent les deux tenseurs \mathbf{S}_0 et \mathbf{S}_{surf} . Afin d'adapter la théorie des fonctions de Green à une structure périodique, nous avons besoin des développements de Rayleigh de ces deux tenseurs. Cette écriture fait intervenir les deux vecteurs de polarisation de base du champ électrique. Le premier, caractéristique du mode TE (ou s), est perpendiculaire au plan d'incidence de la lumière, et le deuxième, correspondant au mode TM (ou p), est contenu dans le plan d'incidence. Ces vecteurs dépendent de l'ordre de l'harmonique diffracté.

Définition et expression des vecteurs de polarisation s et p

Considérons une onde électromagnétique monochromatique plane dans le vide de vecteur d'onde $\mathbf{k}_d = k^{\parallel} \hat{\mathbf{k}} - w \mathbf{e}_z$. L'indice d indique qu'elle voyage vers $z \rightarrow -\infty$, qui est le milieu de sortie du réseau. Le vecteur unitaire $\hat{\mathbf{k}}$, qui indique la direction de propagation de l'onde, est défini par $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^{\parallel} / k^{\parallel}$.

On définit le vecteur unitaire \mathbf{s} par :

$$\mathbf{s} = \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{e}_z$$

Il s'agit du vecteur de polarisation du champ correspondant au mode transverse élec-

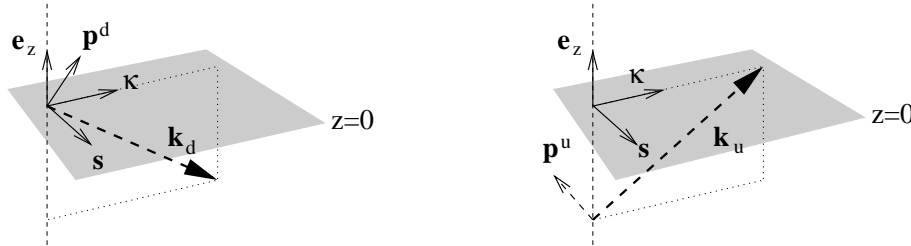


FIG. A.2 – Vecteurs de polarisation des modes TE (\mathbf{s}) et TM (\mathbf{p}^u et \mathbf{p}^d)

trique. Dans ces conditions, la base $(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{e}_z, \mathbf{s})$ est orthonormée. Le vecteur de polarisation \mathbf{p}^d du mode transverse magnétique est alors défini par la relation :

$$\mathbf{p}^d = \frac{\mathbf{s} \times \mathbf{k}_d}{k_0} = k_0^{-1} (k^{\parallel} \mathbf{e}_z + w \hat{\mathbf{k}})$$

On peut facilement vérifier que l'opérateur identité $\mathbf{1}$ dans l'espace des vecteurs d'ondes se décompose sous les trois formes équivalentes :

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \mathbf{e}_x \mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z \\ &= \hat{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}} + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z + \mathbf{s} \mathbf{s} \\ &= \mathbf{s} \mathbf{s} + \mathbf{p}^d \mathbf{p}^d + \mathbf{k} \mathbf{k} \end{aligned}$$

Avec ces notations, $\mathbf{u} \mathbf{v}$ est l'opérateur tensoriel défini par : $\mathbf{u} \mathbf{v} \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{u}$ et s'exprime

sous forme matricielle comme :

$$\mathbf{uv} = \begin{pmatrix} u_x v_x & u_x v_y & u_x v_z \\ u_y v_x & u_y v_y & u_y v_z \\ u_z v_x & u_z v_y & u_z v_z \end{pmatrix}$$

Considérons maintenant l'onde associée qui serait la réflexion de la première sur le plan $z = 0$. Dans ce cas, il est évident que le vecteur \mathbf{s} garde la même expression pour les deux ondes, mais il n'en est pas de même pour le vecteur unitaire de la polarisation TM. En effet, si l'on indice "u" l'onde montante, son vecteur d'onde étant $\mathbf{k}_u = k^{\parallel} \hat{\mathbf{k}} + w \mathbf{e}_z$:

$$\mathbf{p}^u = k_0^{-1}(k^{\parallel} \mathbf{e}_z - w \hat{\mathbf{k}})$$

Cas de l'onde évanescente. La composante z de vecteur d'onde est alors imaginaire : $w = i\kappa$. Les deux vecteurs de polarisation en mode TM deviennent :

$$\mathbf{p}^u = k_0^{-1}(k^{\parallel} \mathbf{e}_z - i\kappa \hat{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{p}^d = k_0^{-1}(k^{\parallel} \mathbf{e}_z + i\kappa \hat{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.4})$$

Nous pouvons les décomposer sur la base normale :

$$\mathbf{p}_+ = -(\hat{\mathbf{k}} + i\mathbf{e}_z)/\sqrt{2} \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{p}_- = (\hat{\mathbf{k}} - i\mathbf{e}_z)/\sqrt{2} \quad (\text{A.6})$$

Ils s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathbf{p}^d = i(\alpha \mathbf{p}_- + \frac{1}{\alpha} \mathbf{p}_+) \\ \mathbf{p}^u = i(\frac{1}{\alpha} \mathbf{p}_- + \alpha \mathbf{p}_+) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \alpha = (x + \sqrt{x^2 - 1})/\sqrt{2}, \quad x = k^{\parallel}/k_0$$

Ainsi, lorsque la composante parallèle du vecteur d'onde augmente, le vecteur de polarisation \mathbf{p}^d tend vers la polarisation circulaire "-", et le vecteur \mathbf{p}^u tend vers la composante circulaire "+".

Coefficients de Fresnel en réflexion. Avec les notations précédentes, pour une onde se propageant dans le vide et se réfléchissant sur une interface vide-verre, les coefficients de Fresnel en polarisation TE et TM s'expriment comme :

$$r^s(\mathbf{k}^{\parallel}) = \frac{w_1 - w_2}{w_1 + w_2} \quad (\text{A.7})$$

$$r^p(\mathbf{k}^{\parallel}) = \frac{w_1 - \epsilon_2 w_2}{w_1 + \epsilon_2 w_2} \quad (\text{A.8})$$

L'indice 1 se réfère au vide et 2 au verre.

Tenseurs de susceptibilité du champ en représentation de Fourier. Dans la référence [136], J.E. Sipe a montré que l'on peut obtenir une expression très compacte des tenseurs de Green du vide et de surface dans l'espace de Fourier. Ils s'expriment de la manière

suivante :

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_0) &= \frac{ik_0^2}{\epsilon_0\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k}^\parallel}{w} \left\{ \mathbf{ss} + \mathbf{p}^d \mathbf{p}^d \right\} e^{i\mathbf{k}^\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') + w|z - z'|} \\ \mathbf{S}_s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_0) &= \frac{ik_0^2}{\epsilon_0\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k}^\parallel}{w} \left\{ r^s \mathbf{ss} + r^p \mathbf{p}^u \mathbf{p}^d \right\} e^{i\mathbf{k}^\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') + w(z + z')}\end{aligned}$$

Expression du champ électrique dans l'approximation de Born

L'équation de Lippmann-Schwinger dans l'approximation de Born s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega_0) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega_0) + \int_V d\mathbf{r}' [\mathbf{S}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_0) + \mathbf{S}_s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_0)] \chi(\mathbf{r}', \omega_0) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', \omega_0) \\ &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega_0) + \frac{ik_0^2}{\epsilon_0\pi^2} \int_V d\mathbf{r}' \int \frac{d\mathbf{k}^\parallel}{w} \left[\left\{ \mathbf{ss} + \mathbf{p}^d \mathbf{p}^d \right\} e^{iw|z - z'|} \right. \\ &\quad \left. + \left\{ r^s \mathbf{ss} + r^p \mathbf{p}^u \mathbf{p}^d \right\} e^{iw(z + z')} \right] e^{i\mathbf{k}^\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \chi(\mathbf{r}', \omega_0) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', \omega_0)\end{aligned}$$

Afin de calculer l'amplitude des différents ordres diffractés, nous introduisons le développement de la susceptibilité du réseau :

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{r}', \omega_0) &= \chi_0(\omega_0) \mathbf{P}_{a,b}(x, y) \star \mathbf{D}_{L_x, L_y}(x, y) \\ &= 1 \text{ si } (x, y) \in [mL_x - a/2, mL_x + a/2] \otimes [nL_y - b/2, nL_y + b/2]\end{aligned}$$

où $\mathbf{P}_{a,b}(x, y)$ est la fonction porte à deux dimensions de largeur a en x et b en y , et $\mathbf{D}_{L_x, L_y}(x, y)$ est le peigne de Dirac à deux dimensions, de périodicité L_x et L_y . En injectant cette expression dans A.9, on trouve, après calcul, et en effectuant l'approximation $h \ll 1/\kappa_v$:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_{m,n} &= \\ &= \frac{1}{2} t_{12}(\theta, \delta) \frac{\chi_0}{\epsilon_0} \left(\frac{k_0 a}{L} \right)^2 \text{sinc}\left(\frac{m\pi a}{L_x}\right) \text{sinc}\left(\frac{n\pi a}{L_y}\right) \frac{h}{\kappa_{m,n}} \times \\ &\quad \left[(1 + r^s) \mathbf{s}_{m,n} \mathbf{s}_{m,n} + \mathbf{p}_{m,n}^d \mathbf{p}_{m,n}^d + r^p \mathbf{p}_{m,n}^u \mathbf{p}_{m,n}^d \right] \cdot \mathbf{e}_0\end{aligned}$$

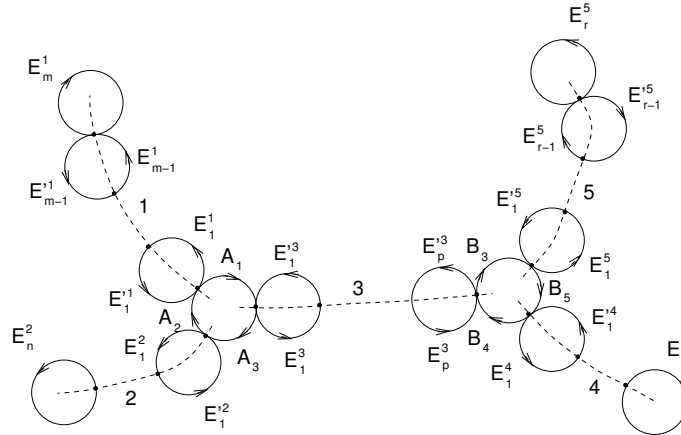
En une dimension, ce résultat devient :

$$\mathbf{e}_m = \frac{1}{2} t_{12}(\theta, \delta) \frac{\chi_0 a}{\epsilon_0 L} k_0^2 \text{sinc}\left(\frac{m\pi a}{L}\right) \frac{h}{\kappa_m} \left[(1 + r^s) \mathbf{s}_m \mathbf{s}_m + \mathbf{p}_{d,m} \mathbf{p}_{d,m} + r^p \mathbf{p}_m^u \mathbf{p}_m^d \right] \cdot \mathbf{e}_0$$

Annexe B

Invariance du spectre d'une chaîne sans boucles

Il s'agit ici de montrer que le spectre des vecteurs d'onde propres d'une chaîne ramifiée sans boucle ne dépend pas de la forme du système. Cette démonstration a été effectuée en collaboration avec Olivier Méjane (Laboratoire de Statistique et Probabilités, Université Toulouse III). La méthode va être présentée pour la chaîne de la figure ci-dessous. Nous admettons que le résultat s'étend à toute chaîne ne comportant pas de boucle. Chaque champ est labellé par deux numéros : l'exposant indique le numéro de la branche



d'appartenance, et l'indice la position de l'anneau sur celle-ci. Ainsi, les chaînes 1, 2, 3, 4 et 5 comportent respectivement m , n , p , q et r anneaux. Les flèches indiquent les sens de rotation des ondes sortant des points de contact. Il y a de plus $m \times n \times (p+1) \times q \times r$ jonctions et $2 \times m \times n \times (p+1) \times q \times r$ champs inconnus. Pour écrire les matrices de couplage et de bouclage, nous ordonnons ceux-ci suivant :

$$\begin{aligned}
 &A_1, E_1^1, E_1^1, E_2^1, E_2^1, \dots, E_{m-1}^1, E_m^1, \\
 &A_2, E_1^2, E_1^2, E_2^2, E_2^2, \dots, E_{n-1}^2, E_n^2, \\
 &A_3, E_1^3, E_1^3, E_2^3, E_2^3, \dots, E_{p-1}^3, E_p^3, B_3, \\
 &B_4, E_1^4, E_1^4, E_2^4, E_2^4, \dots, E_{q-1}^4, E_q^4, \\
 &B_5, E_1^5, E_1^5, E_2^5, E_2^5, \dots, E_{r-1}^5, E_r^5
 \end{aligned}$$

Dans cette représentation, la matrice de couplage est diagonale par blocs, elle a la forme :

$$C = \begin{array}{c} A_1 \cdots E_m^1 \quad A_2 \cdots E_n^2 \quad A_3 \cdots B_3 \quad B_4 \cdots E_q^4 \quad B_5 \cdots E_r^5 \\ \left[\begin{array}{c|c|c|c|c} \begin{array}{cc} C & 0 \\ & \ddots \\ 0 & C \end{array} & & & & \\ \hline & \begin{array}{cc} C & 0 \\ & \ddots \\ 0 & C \end{array} & & & \\ \hline & & \begin{array}{cc} C & 0 \\ & \ddots \\ 0 & C \end{array} & & \\ \hline & & & \begin{array}{cc} C & 0 \\ & \ddots \\ 0 & C \end{array} & \\ \hline & & & & \begin{array}{cc} C & 0 \\ & \ddots \\ 0 & C \end{array} \end{array} \right] \end{array}$$

avec :

$$C = \begin{bmatrix} r & it \\ it & r \end{bmatrix}, \quad \text{et } r = \sqrt{1-t^2}$$

L'expression de la matrice de bouclage est en revanche plus complexe. Elle s'écrit :

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_m & \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_n & \mathbf{A}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_3 & \mathbf{0} & \mathbf{D}_p & \mathbf{E}_3 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_q & \mathbf{E}_4 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{E}_5 & \mathbf{0} & \mathbf{D}_r \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

avec :

$$\mathbf{D}_\mu = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ & \mathbf{B}_1^\mu & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \mathbf{B}_{v-1}^\mu & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad \text{pour } \begin{cases} \mu = 1, 2, 4, 5 \\ v = m, n, q, r \end{cases}$$

et

$$\mathbf{D}_3 = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ & \mathbf{B}_1^3 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \mathbf{B}_p^3 & \\ & & & & 0 \end{bmatrix} \quad \text{avec } \mathbf{B}_v^\mu = \begin{bmatrix} 0 & X^{\alpha_v^\mu} \\ X^{(1-\alpha_v^\mu)} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} X^{\gamma_1} & & & & \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} X^{\gamma_2} & & & & \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} X^{\gamma_3} & & & & \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{E}_3 = \begin{bmatrix} & & & & \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ X^{\eta_3} & & & & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{E}_4 = \begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & X^{\eta_4} & & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{E}_5 = \begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ 0 & & & & X^{\eta_5} \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & 0 \end{bmatrix},$$

et où $2\pi\alpha_\nu^\mu$ est, à 2π près, l'angle entre deux points de couplage de l'anneau numéro ν appartenant à la branche μ . De plus, pour les deux anneaux "A" et "B", où se rejoignent trois branches différentes, on a les relations $\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 = \eta_1 + \eta_2 + \eta_3 = 1$.

Les blocs diagonaux concernent les anneaux d'une même branche, tandis que les éléments hors-diagonaux décrivent les jonctions entre les différentes branches.

Déformation de la chaîne. La forme de la chaîne est complètement déterminée par les valeurs des angles α_ν^μ , γ_i , η_j . Déformer ce système, c'est donc faire varier ces paramètres. La chaîne la plus symétrique correspond à $\alpha_\nu^\mu = 1/2$ et $\gamma_i = \eta_j = 1/3$.

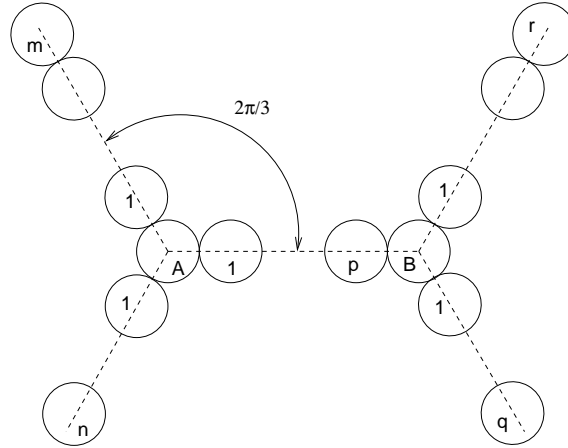


FIG. B.1 – Chaîne droite, correspondant aux paramètres $\alpha_\nu^\mu = 1/2$ et $\gamma_i = \eta_j = 1/3$.

La matrice \mathbf{B}_0 correspondante s'écrit :

$$\mathbf{B}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_m^0 & \mathbf{A}_1^0 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_n^0 & \mathbf{A}_2^0 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_3^0 & \mathbf{0} & \mathbf{D}_p^0 & \mathbf{E}_3^0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_q^0 & \mathbf{E}_4^0 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{E}_5^0 & \mathbf{0} & \mathbf{D}_r^0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Principe de la démonstration. Nous savons que les vecteurs d'ondes propres de ce système sont les solutions de l'équation $\det[1 - \mathbf{C}\mathbf{B}] = 0$.

Considérons la fonction $\mathcal{F}(\alpha_\nu^\mu, \gamma_i, \eta_j, k, t) = \det[1 - \mathbf{C}(t)\mathbf{B}(\alpha_\nu^\mu, \gamma_i, \eta_j, k)]$. Nous allons montrer que \mathcal{F} ne dépend en fait que de k et t : les vecteurs d'ondes solutions de l'équa-

tion $\mathcal{F}(k, t) = 0$ ne dépendront alors plus de la forme de la chaîne. Le principe de la démonstration est de prouver que toutes les matrices $\mathbf{B}(\alpha_v^\mu, \gamma_i, \eta_j, k)$ sont semblables à $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}(\pi, 2\pi/3, 2\pi/3, k)$, c'est-à-dire qu'il existe une matrice \mathbf{P} telle que $\mathbf{B} = \mathbf{P}\mathbf{B}_0\mathbf{P}^{-1}$.

Nous allons chercher cette matrice \mathbf{P} sous la forme particulière :

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_m & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}_n & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_p & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_q & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_r \end{bmatrix} \quad \text{avec}$$

$$\mathbf{L}_\mu = \begin{bmatrix} \Lambda_1^\mu & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \Lambda_v^\mu \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \Lambda_j^i = \begin{bmatrix} \lambda_j^i & 0 \\ 0 & \lambda_j^i \end{bmatrix}$$

L'inverse est simplement :

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_m^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}_n^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_p^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_q^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_r^{-1} \end{bmatrix} \quad \text{avec}$$

$$\mathbf{L}_\mu^{-1} = \begin{bmatrix} (\Lambda_1^\mu)^{-1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & (\Lambda_v^\mu)^{-1} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad (\Lambda_j^i)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/\lambda_j^i & 0 \\ 0 & 1/\lambda_j^i \end{bmatrix}$$

Cette écriture assure que \mathbf{P} et \mathbf{P}^{-1} commutent avec \mathbf{C} . On aura alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\alpha_v^\mu, \gamma_i, \eta_j, k, t) &= \det[\mathbf{1} - \mathbf{C}(t)\mathbf{B}(\alpha_v^\mu, \gamma_i, \eta_j, k)] \\ &= \det[\mathbf{P}^{-1}\mathbf{P} - \mathbf{C}\mathbf{P}^{-1}(\alpha_v^\mu, \gamma_i, \eta_j, k)\mathbf{B}_0\mathbf{P}(\alpha_v^\mu, \gamma_i, \eta_j, k)] \\ &= \det[\mathbf{P}^{-1}(\mathbf{1} - \mathbf{C}\mathbf{B}_0)\mathbf{P}] \\ &= \det[\underbrace{\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1}}_{\mathbf{1}}(\mathbf{1} - \mathbf{C}\mathbf{B}_0)] \end{aligned}$$

ce qui démontrera l'indépendance de \mathcal{F} vis-à-vis de α_v^μ, γ_i et η_j . Nous allons maintenant effectuer le calcul explicite de la matrice \mathbf{P} .

Calcul de P. Nous devons résoudre l'équation $\mathbf{B}_0 = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{P}$. Évaluons donc tout d'abord le produit par blocs $\mathbf{P}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{P}$. Il est de la forme :

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_m \mathbf{D}_m (\mathbf{L}_m)^{-1} & \mathbf{L}_m \mathbf{A}_1 (\mathbf{L}_n)^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}_n \mathbf{D}_n (\mathbf{L}_n)^{-1} & \mathbf{L}_n \mathbf{A}_2 (\mathbf{L}_p)^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_p \mathbf{A}_3 (\mathbf{L}_m)^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_p \mathbf{D}_p (\mathbf{L}_p)^{-1} & \mathbf{L}_p \mathbf{E}_3 (\mathbf{L}_q)^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_q \mathbf{D}_q (\mathbf{L}_q)^{-1} & \mathbf{L}_q \mathbf{E}_4 (\mathbf{L}_r)^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_r \mathbf{E}_5 (\mathbf{L}_p)^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{L}_r \mathbf{D}_r (\mathbf{L}_r)^{-1} \end{bmatrix}$$

Par identification avec \mathbf{B}_0 , on a donc à résoudre les équations :

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_m \mathbf{D}_m (\mathbf{L}_m)^{-1} &= \mathbf{D}_m^0 \\ \mathbf{L}_n \mathbf{D}_n (\mathbf{L}_n)^{-1} &= \mathbf{D}_n^0 \\ \mathbf{L}_p \mathbf{D}_p (\mathbf{L}_p)^{-1} &= \mathbf{D}_p^0 \\ \mathbf{L}_q \mathbf{D}_q (\mathbf{L}_q)^{-1} &= \mathbf{D}_q^0 \\ \mathbf{L}_r \mathbf{D}_r (\mathbf{L}_r)^{-1} &= \mathbf{D}_r^0 \\ \mathbf{L}_m \mathbf{A}_1 (\mathbf{L}_n)^{-1} &= \mathbf{A}_m^0 \\ \mathbf{L}_n \mathbf{A}_2 (\mathbf{L}_p)^{-1} &= \mathbf{A}_n^0 \\ \mathbf{L}_p \mathbf{A}_3 (\mathbf{L}_m)^{-1} &= \mathbf{A}_p^0 \\ \mathbf{L}_p \mathbf{E}_3 (\mathbf{L}_q)^{-1} &= \mathbf{E}_p^0 \\ \mathbf{L}_q \mathbf{E}_4 (\mathbf{L}_r)^{-1} &= \mathbf{E}_q^0 \\ \mathbf{L}_r \mathbf{E}_5 (\mathbf{L}_p)^{-1} &= \mathbf{E}_r^0 \end{aligned}$$

Équations diagonales. Les produits diagonaux du type $\mathbf{L}_\mu \mathbf{D}_\mu (\mathbf{L}_\mu)^{-1}$ se développent en :

$$\begin{aligned} X^{\alpha_l^\mu} \lambda_l^\mu / \lambda_{l+1}^\mu &= X^{1/2}, \quad l = 1, \dots, \mu - 1 \\ X^{1-\alpha_l^\mu} \lambda_{l+1}^\mu / \lambda_l^\mu &= X^{1/2}, \quad l = 1, \dots, \mu - 1 \end{aligned}$$

On vérifie aisément que ces deux équations sont identiques. Les solutions $\alpha_l^\mu, l = 2, \dots, \mu$ sont donc :

$$\lambda_l^\mu = \left[\prod_{l'=1}^{l-1} X^{\alpha_{l'}^\mu - 1/2} \right] \lambda_1^\mu$$

Ainsi, la connaissance de λ_1^μ permet de caractériser tous les coefficients. Nous n'avons donc plus que 5 inconnues : $\lambda_1^m, \lambda_1^n, \lambda_1^p, \lambda_1^q$ et λ_1^r .

Équations hors-diagonales. En développant ces expressions, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_m \mathbf{A}_1 (\mathbf{L}_n)^{-1} = \mathbf{A}_m^0 &\rightarrow X^{\gamma_1} \lambda_1^m / \lambda_1^n = X^{1/3} \\ \mathbf{L}_n \mathbf{A}_2 (\mathbf{L}_p)^{-1} = \mathbf{A}_n^0 &\rightarrow X^{\gamma_2} \lambda_1^n / \lambda_1^p = X^{1/3} \\ \mathbf{L}_p \mathbf{A}_3 (\mathbf{L}_m)^{-1} = \mathbf{A}_p^0 &\rightarrow X^{\gamma_3} \lambda_1^p / \lambda_1^q = X^{1/3} \\ \mathbf{L}_p \mathbf{E}_3 (\mathbf{L}_q)^{-1} = \mathbf{A}_p^0 &\rightarrow X^{\gamma_3} \lambda_1^p / \lambda_1^q = X^{1/3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_q \mathbf{E}_4 (\mathbf{L}_r)^{-1} &= \mathbf{A}_q^0 & \rightarrow & X^{\gamma_4} \lambda_1^q / \lambda_1^r = X^{1/3} \\ \mathbf{L}_r \mathbf{E}_5 (\mathbf{L}_p)^{-1} &= \mathbf{A}_r^0 & \rightarrow & X^{\gamma_5} \lambda_1^r / \lambda_1^p = X^{1/3} \end{aligned}$$

Les relations $\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 = \eta_3 + \eta_4 + \eta_5 = 1$ assurent la compatibilité de ces équations. On a donc :

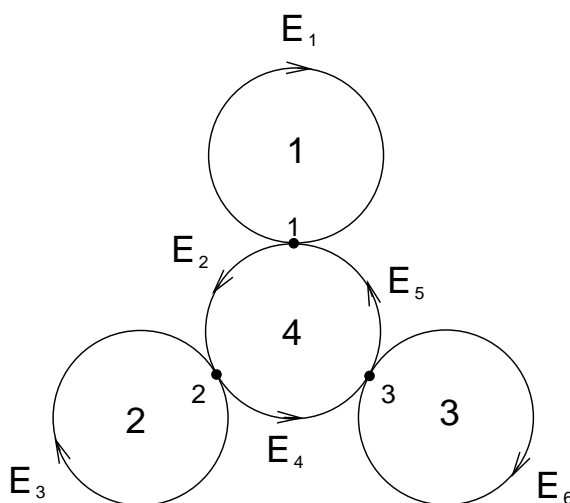
$$\begin{aligned} \lambda_1^n &= X^{\gamma_1 - 1/3} \lambda_1^m \\ \lambda_1^p &= X^{1/3 - \gamma_2} \lambda_1^m \\ \lambda_1^q &= X^{\eta_3 - 1/3} \lambda_1^p \\ \lambda_1^r &= X^{1/3 - \eta_4} \lambda_1^p \end{aligned}$$

Or $\lambda_1^p \propto \lambda_1^m$ et $\lambda_1^p = X^{1/3 - \gamma_2} \lambda_1^m$, donc les coefficients λ_1^n , λ_1^p , λ_1^q et λ_1^r sont tous proportionnels à λ_1^m , ce qui termine la démonstration.

Annexe C

Programme Mathematica : chaîne orientable

Ce code a été écrit par Renaud Mathevet. Il est présenté ici sur le système de quatre anneaux "en trèfle" déjà étudié dans le paragraphe 9.5 :



Les notations sont celles utilisées dans le programme. Attention :

- ▶ cet algorithme ne permet pas de traiter les systèmes comportant des dégénérescences, tels que les quatres anneaux "en cercle",
- ▶ en plus des entrées principales "nœuds", "anneaux", "B" et " φ ", il faut veiller à rentrer la géométrie du système "à la main" dans la dernière partie du programme (paragraphe **visualisation des modes propres**).

Recherche des fréquences et modes propres d'un système d'anneaux orientable.

Définition du réseau :

1) nb de noeuds et d'anneaux;

2) la matrice B, telle que :

$B_{ij} = n^\circ$ de l'anneau auquel appartient la branche qui va du noeud i au noeud j : $B_{22} = 2$ signifie que la branche b_{22} relie le noeud 2 au noeud 2 dans l'anneau 2.

L'anneau 4 relie les noeuds 1 à 2, 2 à 3 et 3 à 1.

3) la matrice φ , qui donne l'angle entre les deux extrémités de la branche : $\varphi_{22} = 2\pi$ signifie que la branche b_{22} fait un tour : c'est un anneau complet comme on peut le vérifier car $B_{22} \neq 0$ (c'est même l'anneau 2 car $B_{22} = 2$).

$\varphi_{12} = \varphi_{23} = \varphi_{31} = 2\pi/3$ signifie que les 3 anneaux 1 à 3 sont disposés régulièrement à 120° les uns des autres autour de l'anneau 4. La somme des phases doit être 2π fois le nombre d'anneaux (cf. dessins de la dernière cellule).

```
noeuds = 3;  
anneaux = 4;
```

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 4 \\ 4 & 0 & 3 \end{pmatrix};$$

$$\varphi = 2\pi \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

```
Apply[Plus, Flatten[ $\frac{\varphi}{2\pi}$ ]] - anneaux
```

0

b: matrice indiquant si une branche existe ou non;
branches: nb de branches. Dans l'exemple il y a 6 branches: les 3 anneaux 1 à 3 correspondent aux termes diagonaux, les 3 branches de l'anneau 4 aux termes hors-diagonaux. Il y a autant de champs inconnus que de branches.
nobranche[[i]]: donne les indices de la branche, c'est-à-dire les noeuds extrêmes associés au champ inconnu i (ex e[1] est le champ sur la branche b_{11} , donc l'anneau 1).
CP=matrice de couplage/propagation des champs inconnus

```
b = Map[If[# > 0, 1, 0] &, B, {2}];
b // MatrixForm
branches = Apply[Plus, b // Flatten]
champs = Array[e, branches]
nobranche = Position[b, 1, 2]
CP = 0 IdentityMatrix[branches];
CP // MatrixForm
```

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

6

```
{e[1], e[2], e[3], e[4], e[5], e[6]}
```

```
{{1, 1}, {1, 2}, {2, 2}, {2, 3}, {3, 1}, {3, 3}}
```

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Les branches qui partent du noeud i sont b_{ik} et b_{il} : elles sont associées aux deux coefficients non nuls sur la ligne i de B.

Les branches qui arrivent noeud i sont b_{mi} et b_{ni} : elles sont associées aux deux coefficients non nuls sur la colonne i de B.

departs[i] = {{n°anneau du lien b_{ik} , {i, k}}, {n°anneau du lien b_{il} , {i, l}}},
et inversement pour les arrivées.

```
departs[i_] := Map[#, Flatten[{i, Position[B[[i]], #]}] &, Select[B[[i]], # > 0 &]]
arrivees[i_] :=
  Map[#, Flatten[{Position[Transpose[B][[i]], #], i}] &, Select[Transpose[B][[i]], # > 0 &]]
```

```
Table[departs[n], {n, noeuds}]
Table[arrivees[n], {n, noeuds}]
```

```
{{{1, {1, 1}}, {4, {1, 2}}}, {{2, {2, 2}}, {4, {2, 3}}}, {{4, {3, 1}}, {3, {3, 3}}}}
```

```
{{{1, {1, 1}}, {4, {3, 1}}}, {{4, {1, 2}}, {2, {2, 2}}}, {{4, {2, 3}}, {3, {3, 3}}}}
```

Construction de CP pas à pas

arrivees[1]={{1,{1,1}},{4,{1,2}}}

departs[1]={{1,{1,1}},{4,{3,1}}}

signifie que le noeud 1 couple les anneaux 1 et 4 par les extrémités finales de b_{11} et b_{31} (soient S_{11} et S_{31} les champs associés) et les extrémités initiales de b_{11} et b_{12} (soient E_{11} et E_{12} les champs associés).

Soit $C_1 = \begin{pmatrix} r_1 & it_1 \\ it_1 & r_1 \end{pmatrix}$ la matrice de couplage du noeud 1. On a alors

$$\begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{12} \end{pmatrix} = C_1 \begin{pmatrix} S_{11} \\ S_{31} \end{pmatrix}$$

On construit la matrice de phase $\psi_1 : \begin{pmatrix} S_{11} \\ S_{21} \end{pmatrix} = \psi_1 \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E^{I k \varphi_{11}} & 0 \\ 0 & E^{I k \varphi_{31}} \end{pmatrix}$

et $\begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{12} \end{pmatrix} = C_1 \psi_1 \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{31} \end{pmatrix}$.

Puisque $nobranch e_{E_{11}} = e[1]$, $E_{12} = e[2]$ et $E_{31} = e[5]$, on a :

$$e[1] = (C_1 \psi_1)_{11} e[1] + (C_1 \psi_1)_{12} e[5]$$

$$e[2] = (C_1 \psi_1)_{21} e[1] + (C_1 \psi_1)_{22} e[5]$$

soit $CP_{11} = (C_1 \psi_1)_{11}$, $CP_{15} = (C_1 \psi_1)_{12}$, $CP_{21} = (C_1 \psi_1)_{21}$ et $CP_{25} = (C_1 \psi_1)_{22}$.

On recommence pour tous les noeuds, ce qui permet de construire CP.

- Dans un premier temps, on ordonne les départs et arrivées: le 1er départ appartient alors au même anneau que la première arrivée. Nécessairement les seconds aussi!

```

in = arrivees[1]
out = departs[1]
If[in[[1, 1]] != out[[1, 1]], out = Reverse[out]];
in
out

{{1, {1, 1}}, {4, {3, 1}}}

{{1, {1, 1}}, {4, {1, 2}}}

{{1, {1, 1}}, {4, {3, 1}}}

{{1, {1, 1}}, {4, {1, 2}}}
```

- Aux arrivées au noeud (in), on retrouve les champs inconnus en début de branche déphasés par la longueur de la branche.

```
coeff[mat_, {i_, j_}] := Part[mat, i, j]
phi1 = coeff[phi, in[[1, 2]]]
phi2 = coeff[phi, in[[2, 2]]]
cpsi = ( r   I t ) . ( E^{I k phi1}   0 )
      ( I t   r ) . (   0   E^{I k phi2} );
cpsi // MatrixForm
```

2π

$\frac{2\pi}{3}$

$$\begin{pmatrix} E^{2Ik\pi} r & I E^{\frac{2Ik\pi}{3}} t \\ I E^{2Ik\pi} t & E^{\frac{2Ik\pi}{3}} r \end{pmatrix}$$

- On récupère les n° des champs correspondant aux branches de sortie (o1,o2) et d'entrée (i1,i2). De plus, o1 et i1 appartiennent au même anneau, ainsi que o2 et i2 :
 chps: 1ere ligne les n° des champs de sortie, 2ème ligne les champs d'entrée, 1ère colonne 1er anneau, 2ème colonne 2eme anneau.
 posCP[[i,j]] donne alors la position dans CP du coefficient (cpsi)_{ij}

```
o1 = Position[nobranche, out[[1, 2]]]
o2 = Position[nobranche, out[[2, 2]]]
i1 = Position[nobranche, in[[1, 2]]]
i2 = Position[nobranche, in[[2, 2]]]

chps = Flatten[Transpose[{{o1, o2}, {i1, i2}}, {3, 4, 1, 2}], 2]

posCP = Table[{chps[[1, j]], chps[[2, i]]}, {j, 2}, {i, 2}]
For[i = 1, i <= 2, i++, For[j = 1, j <= 2, j++, CP = ReplacePart[CP, cpsi[[i, j]], posCP[[i, j]]]]]
CP // MatrixForm
```

{{1}}

{{2}}

{{1}}

{{5}}

{{1, 2}, {1, 5}}

{{{1, 1}, {1, 5}}, {{2, 1}, {2, 5}}}

$$\begin{pmatrix} E^{2Ik\pi} r & 0 & 0 & 0 & I E^{\frac{2Ik\pi}{3}} t & 0 \\ I E^{2Ik\pi} t & 0 & 0 & 0 & E^{\frac{2Ik\pi}{3}} r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

construction de CP directe

```

coeff[mat_, {i_, j_}] := Part[mat, i, j]

coefCP[n_] := Module[{in, out, phi1, phi2, cpsi, chps, posCP},
  in = arrivees[n];
  out = departs[n];
  If[in[[1, 1]] != out[[1, 1]], out = Reverse[out]];
  phi1 = coeff[phi, in[[1, 2]]];
  phi2 = coeff[phi, in[[2, 2]]];

  cpsi =  $\begin{pmatrix} r & I t \\ I t & r \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E^{I k \phi 1} & 0 \\ 0 & E^{I k \phi 2} \end{pmatrix}$ ;
  chps =
  Flatten[Transpose[{{Position[nobranche, out[[1, 2]]], Position[nobranche, out[[2, 2]]]},
    {Position[nobranche, in[[1, 2]]], Position[nobranche, in[[2, 2]]]}}, {3, 4, 1, 2}], 2];
  posCP = Table[{chps[[1, j]], chps[[2, i]]}, {j, 2}, {i, 2}];
  For[i = 1, i <= 2, i++,
  For[j = 1, j <= 2, j++, CP = ReplacePart[CP, cpsi[[i, j]], posCP[[i, j]]];]

```

action des différents noeuds

```

CP = 0 IdentityMatrix[branches];
CP // MatrixForm
coefCP[1]
CP // MatrixForm
CP = 0 IdentityMatrix[branches];
coefCP[2]
CP // MatrixForm
CP = 0 IdentityMatrix[branches];
coefCP[3]
CP // MatrixForm

```

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E^{2 I k \pi} r & 0 & 0 & 0 & I E^{\frac{2 I k \pi}{3}} t & 0 \\ I E^{2 I k \pi} t & 0 & 0 & 0 & E^{-\frac{2 I k \pi}{3}} r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I E^{\frac{2 I k \pi}{3}} t & E^{2 I k \pi} r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E^{\frac{2 I k \pi}{3}} r & I E^{2 I k \pi} t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E^{\frac{2 I k \pi}{3}} r & 0 & I E^{2 I k \pi} t \\ 0 & 0 & 0 & I E^{\frac{2 I k \pi}{3}} t & 0 & E^{2 I k \pi} r \end{pmatrix}$$

action simultanée de tous le noeuds

```
CP = 0 IdentityMatrix[branches];
CP // MatrixForm
For[n = 1, n <= noeuds, n++, coefCP[n]]
CP // MatrixForm
```

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E^{2Ik\pi} r & 0 & 0 & 0 & I E^{\frac{2Ik\pi}{3}} t & 0 \\ I E^{2Ik\pi} t & 0 & 0 & 0 & E^{\frac{2Ik\pi}{3}} r & 0 \\ 0 & I E^{\frac{2Ik\pi}{3}} t & E^{2Ik\pi} r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E^{\frac{2Ik\pi}{3}} r & I E^{2Ik\pi} t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E^{\frac{2Ik\pi}{3}} r & 0 & I E^{2Ik\pi} t \\ 0 & 0 & 0 & I E^{\frac{2Ik\pi}{3}} t & 0 & E^{2Ik\pi} r \end{pmatrix}$$

Soit donc à résoudre $\begin{pmatrix} e[1] \\ \dots \\ e[6] \end{pmatrix} = CP \begin{pmatrix} e[1] \\ \dots \\ e[6] \end{pmatrix}$, ou encore $(CP - Id) \begin{pmatrix} e[1] \\ \dots \\ e[6] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}$.

Il n'existe de solutions non nulles que si $\det (CP - Id) (k) = 0$, dont les solutions k sont les vecteurs d'ondes propres du système.

On posera $X = E^{2Ik\pi}$ et $t = \sqrt{1 - r^2}$. Ainsi $k = \frac{\text{Arg}[X]}{2\pi}$.

Les valeurs propres sont triées par valeur croissante de k à la limite $r \rightarrow 0$.

```
rglX = E^a -> X^{\frac{a}{2Ik\pi}};
rglr = t -> \sqrt{1 - r^2};
CPX = (CP - IdentityMatrix[branches]) /. rglX /. rglr;
CPX // MatrixForm
det = Det[CPX]
```

$$\begin{pmatrix} -1 + rX & 0 & 0 & 0 & I \sqrt{1 - r^2} X^{1/3} & 0 \\ I \sqrt{1 - r^2} X & -1 & 0 & 0 & r X^{1/3} & 0 \\ 0 & I \sqrt{1 - r^2} X^{1/3} & -1 + rX & 0 & 0 & 0 \\ 0 & r X^{1/3} & I \sqrt{1 - r^2} X & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r X^{1/3} & -1 & I \sqrt{1 - r^2} X \\ 0 & 0 & 0 & I \sqrt{1 - r^2} X^{1/3} & 0 & -1 + rX \end{pmatrix}$$

$$1 - 3rX - r^3 X + 6r^2 X^2 - 3rX^3 - r^3 X^3 + X^4$$


```
Xpropres = Solve[det == 0, X] // Simplify;
Xpropres = Sort[Xpropres, Arg[X /. #1 /. r -> 0.] < Arg[X /. #2 /. r -> 0.] &]
```

$$\left\{ \left\{ X \rightarrow \frac{1}{4} \left(3r + r^3 - \sqrt{8+r^2} + r^2 \sqrt{8+r^2} - \sqrt{2} \sqrt{(-1+r^2) (4+7r^2+r^4+3r\sqrt{8+r^2}+r^3\sqrt{8+r^2})} \right) \right\}, \right.$$

$$\left\{ X \rightarrow \frac{1}{4} \left(3r + r^3 + \sqrt{8+r^2} - r^2 \sqrt{8+r^2} - 2 \sqrt{-2-6r^2+\frac{1}{2}r^2(3+r^2)^2-\frac{1}{2}(-1+r^2)\sqrt{8+r^2}(3r+r^3)} \right) \right\},$$

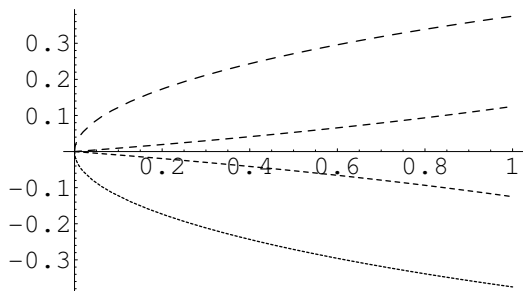
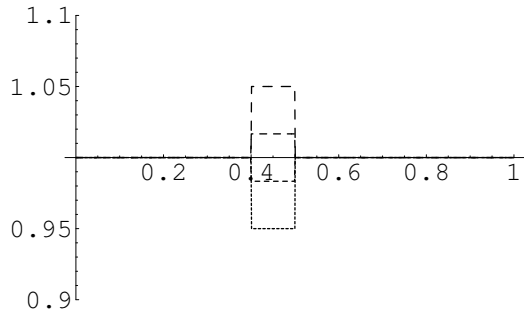
$$\left\{ X \rightarrow \frac{1}{4} \left(3r + r^3 + \sqrt{8+r^2} - r^2 \sqrt{8+r^2} + \sqrt{2} \sqrt{(-1+r^2) (4+7r^2+r^4-3r\sqrt{8+r^2}-r^3\sqrt{8+r^2})} \right) \right\},$$

$$\left\{ X \rightarrow \frac{1}{4} \left(3r + r^3 - \sqrt{8+r^2} + r^2 \sqrt{8+r^2} + \sqrt{2} \sqrt{(-1+r^2) (4+7r^2+r^4+3r\sqrt{8+r^2}+r^3\sqrt{8+r^2})} \right) \right\}$$

Tracé des fréquences propres: les tracé du module permet de vérifier que X est toujours de module 1 donc peut s'écrire $E^{i2\pi k}$. Attention : le tracé est fait à couplage croissant, c'est-à-dire r décroissant. Pour les dessins, une levée de dégénérescence artificielle est imposée autour de r=1/2.

```
levdeg[x_ /; x <= .4] := 0.;
levdeg[x_ /; x >= .5] := 0.;
levdeg[x_ /; x < .5 && x > .4] := 1.;

plk = Show[GraphicsArray[{Plot[Evaluate[(Abs[X /. Xpropres] /. r -> 1 - u)
  Table[1 + .1 ((n - 1) / (anneaux - 1) - .5) levdeg[u], {n, anneaux}], {u, 0, 1},
  PlotStyle -> Table[Dashing[{0.02 * N[ $\frac{i}{anneaux}$ ], 0.02 * N[ $\frac{i}{anneaux}$ ]}], {i, anneaux}],
  DisplayFunction -> Identity, PlotRange -> {.9, 1.1}],
Plot[Evaluate[ $\frac{\text{Arg}[X /. Xpropres]}{2\pi}$  /. r -> 1 - u], {u, 0, 1},
  PlotStyle -> Table[Dashing[{0.02 * N[ $\frac{i}{anneaux}$ ], 0.02 * N[ $\frac{i}{anneaux}$ ]}], {i, anneaux}],
  DisplayFunction -> Identity}]]];
```



Les modes propres s'obtiennent alors pour chaque valeur propre en résolvant le système couplé d'équations avec une valeur imposée.

```
modepropre[Xp_] := Join[{e[1] -> 1}, Solve[
  (CPX /. Xp).ReplacePart[champs, 1, 1] == Table[0, {i, branches}], Drop[champs, 1]]] // Flatten
modes = Map[modepropre, Xpropres];
```

```

plm = Show[GraphicsArray[Table[{Plot[Evaluate[Abs[champs /. modes[[no]] /. r -> 1 - u]
Table[1 + .2 ((n - 1) / (branches - 1) - .5) levdeg[u], {n, branches}], {u, 0, 1},
PlotStyle -> Table[Hue[ $\frac{i}{\text{anneaux}}$ ], {i, branches}], DisplayFunction -> Identity,
PlotRange -> All], Plot[Evaluate[ $\frac{\text{Arg}[champs (1 - 0.001 I) /. modes[[no]] /. r -> 1 - u]}{2 \pi}$ ]
Table[1 + .2 ((n - 1) / (branches - 1) - .5) levdeg[u], {n, branches}],
{u, 0, 1}, PlotStyle -> Table[Hue[ $\frac{i}{\text{anneaux}}$ ], {i, branches}],
DisplayFunction -> Identity, PlotRange -> All]}, {no, anneaux}]]];

```

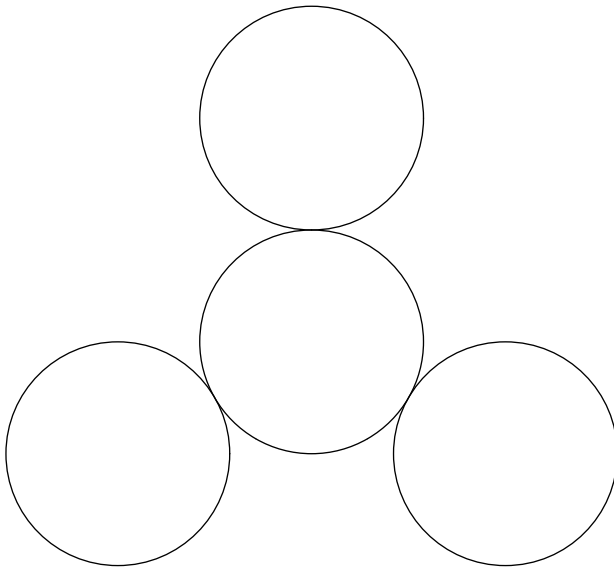
Visualisation des modes propres

```

E1 = Circle[{0, 2}, 1, {0, 2 π}];
E2 = Circle[{0, 0}, 1, {π/2, 4 π/3}];
E3 = Circle[{N[-√3], -1}, 1, {0, 2 π}];
E4 = Circle[{0, 0}, 1, {-2 π/3, -π/3}];
E6 = Circle[{N[√3], -1}, 1, {0, 2 π}];
E5 = Circle[{0, 0}, 1, {-π/3, π/2}];
Etot = {E1, E2, E3, E4, E5, E6};

Show[Graphics[Etot], AspectRatio -> 1 / 1.093]

```



- Graphics -

```

desmodes[no_, refl_] :=
Transpose[{Map[Thickness[.02 #] &, Abs[champs /. modes[[no]] /. r -> refl]], Etot}]

Show[GraphicsArray[
Table[Table[Graphics[{Dashing[{0.04 *  $\frac{\text{no}}{\text{anneaux}}$ , 0.04 *  $\frac{\text{no}}{\text{anneaux}}$ }], desmodes[no, refl]},
AspectRatio -> 1 / 1.093], {no, anneaux}], {refl, 0.01, .99,  $\frac{.98}{6}}$ ]]]

```

