



HAL
open science

MODELISATION D'EFFETS NON LINEAIRES DANS LES CRISTAUX PHOTONIQUES, APPLICATION A LA LIMITATION OPTIQUE

Jean-Jacques Bonnefois

► **To cite this version:**

Jean-Jacques Bonnefois. MODELISATION D'EFFETS NON LINEAIRES DANS LES CRISTAUX PHOTONIQUES, APPLICATION A LA LIMITATION OPTIQUE. Physique mathématique [math-ph]. Université de Nanterre - Paris X, 2006. Français. NNT : . tel-00260364

HAL Id: tel-00260364

<https://theses.hal.science/tel-00260364>

Submitted on 4 Mar 2008

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.

THESE

Présentée à

L'université de Paris X, Nanterre

Pour l'obtention du titre de Docteur en Sciences de l'école doctorale « Connaissance, langage, modélisation »

Spécialité : Electronique et Electromagnétisme

par

Jean-Jacques Bonnefois

MODELISATION D'EFFETS NON LINEAIRES DANS LES CRISTAUX PHOTONIQUES, APPLICATION A LA LIMITATION OPTIQUE

Soutenue le 30 novembre 2006 devant le jury composé de

M. Nevière (Rapporteur)

Professeur à l'Université d'Aix Marseille

J.J. Greffet (Rapporteur)

Professeur à l'école Centrale Paris

G. Berginc

Docteur et Ingénieur Responsable des études technologiques de Thalès Optronique

G. Guida

Maître de Conférences à l'Université Paris X, Coresponsable de Thèse.

P. Masclet

Docteur ès Sciences, Responsable du Domaine Scientifique « Matériaux et chimie » de DGA / MRIS

H. Ouslimani

Professeur à l'Université Paris X

A. Priou

Professeur à l'Université Paris X, Coresponsable de Thèse.

A mes parents

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au GEA, Laboratoire du pôle scientifique et technique de l'université Paris X. Je remercie Mr A. Priou et Mme G. Guida, mes co-responsables de thèse, de m'avoir fait confiance et accepté trois ans parmi eux.

Je remercie messieurs les Professeurs Nevière et Greffet d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse. Je remercie mesdames et messieurs Berginc, Guida, Masclet, Ouslimani et Priou d'avoir accepté d'être membre du jury.

Mes plus sincères remerciements vont à Géraldine Guida qui m'a encadré, formé, épaulé et soutenu contre vents et marées durant toute cette thèse. Géraldine je te souhaite toute la réussite du monde.

Je remercie la DGA, et plus précisément Mr Masclet pour la confiance qui nous a été portée et les financements accordés. Je remercie Thalès pour sa coopération et plus précisément Mr Berginc pour les fructueuses discussions concernant les matériaux à changement de phase.

La mise au point du programme FFF aurait été bien plus longue et délicate sans les discussions avec les Prof. Nevière et Popov de l'université d'Aix Marseille. Je les remercie d'avoir pris le temps de répondre à nos questions.

La parallélisation des programmes n'aurait pu être possible sans le travail désintéressé du Prof Lucio Andrade. En diffusant gratuitement sur internet sa boîte à outil « Parmatlab » il m'a permis de construire sur ce noyau informatique le cluster qui a effectué les campagnes de calcul. Je dois aussi des remerciements à Patrick Moingeon, notre responsable informatique, qui m'a montré comment transformer un compte enseignant en serveur de fichier.

Merci à tous les enseignants du GEA et de l'IUT d'avoir été là. Merci à Frédérique pour sa bonne humeur et à Redha qui dérieraient une statue. Bonne chance à toi Abdelmajid.

Table des matières

Introduction	7
I Les cristaux photoniques, la limitation optique et les effets non linéaires : Posons le problème.	10
<i>A / Rappels sur les Cristaux Photoniques (CP)</i>	<i>10</i>
1/ Propriétés des Cristaux Photoniques (CPs)	11
2/ Perspectives d'utilisations	15
<i>B / Objectif de la thèse</i>	<i>19</i>
1/ Rappel sur la protection optique	19
2/ Cahier des charges indicatif au projet SHIELD	23
3/ Nécessité du non linéaire	23
<i>C / Rappel sur les effets non linéaires</i>	<i>24</i>
1/ Les divers effets non linéaires	24
2/ Focalisation sur l'effet Kerr et sur le changement de phase thermique	28
<i>D / Les méthodes de simulation disponibles pour un cristal photonique.</i>	<i>29</i>
1/ La méthode des ondes planes (PWM en anglais)	29
2/ La FDTD	30
3/ La FDTD d'ordre N	30
4/ La Multiple Scattering Method (MSM)	31
5/ La méthode des fonctions localisées	31
6/ La BPM ou Beam Propagation Method	31
7/ La décomposition en modes propres ou Méthode modale.	32
8/ La FFF ou Fast Fourier Factorization.	33
9/ La RCWA ou Rigorous Coupled Wave Analysis (Aussi appelée Fourier Modal Method)	33
10/ La TMM ou Transfert Matrix Method.	34
11/ La Méthode des éléments finis ou FEM.	34
<i>Conclusion de la première partie</i>	<i>35</i>
II Les outils de simulation développés pour la simulation de Cristaux Photoniques non linéaires (non-linéarité Kerr ou Thermique)	44
<i>A/ Stratégie de simulation (pourquoi de nouvelles méthodes, pourquoi celles-ci)</i>	<i>44</i>
<i>B/ HMSM (Hybrid-MSM)</i>	<i>45</i>
1/ Théorie de la MSM	45
2/ Théorie de l'EFIE	49
3/ La HMSM	54
4/ La HMSM appliquée à des CPs de taille infinie – Amélioration de la prise en compte de l'effet Kerr.	59
<i>C/ FFF-Kerr et FFF-Thermique</i>	<i>66</i>
1/ Théorie de la FFF	67
a/ La méthode différentielle	67
b/ La méthode S	69
c/ Les règles de Li	71
d/ La FFF	73
2/ La FFF-Kerr	81
3/ La FFF-Thermique	85
<i>D/ Validation</i>	<i>90</i>
1/ Validation de la FFF-Kerr et de la HMSM	90
2/ Validation de la partie thermique	92

<i>E/ Possibilités des différentes méthodes.</i>	93
<i>F/ La lourde question de la convergence</i>	99
1/ Le cas idéal et, heureusement, habituel	100
2/ Zones instables	102
3/ Comprendre et limiter l'instabilité	104
4/ Conclusion sur la convergence	110
<i>Conclusions du chapitre II</i>	110
III Résultats apportés par ces nouveaux outils	114
<i>A/ Etude fine de l'impact des effets de bords dans un CP de dimension finie</i>	114
<i>B/ Etude fine de l'impact de l'approximation homogène</i>	120
<i>C/ Lissage des fonctions de transfert par apodisation 2D</i>	126
<i>D/ Etude fine des commutations par déplacement de la bande interdite par effet Kerr. Application à la limitation optique.</i>	129
1/ Modification de la forme de la transmission par effet Kerr	129
2/ Recherche d'un optimum pour la commutation optique	131
Conclusion et perspectives	142
Publications	144

Introduction

La présente thèse se situe à la frontière de plusieurs domaines d'expertises et est le fruit d'un rapprochement entre de nouvelles possibilités et de nouveaux besoins.

La volonté de la DGA de se doter de limiteurs optiques plus performants pour faire face à une menace laser en plein développement d'une part et l'essor spectaculaire des Cristaux Photoniques et de leur applications ces dernières années d'autre part ont amené à ce que l'on se pose la question suivante « Ne pourrait-on pas réaliser des limiteurs optiques plus performants en nanostructurant les matériaux, en les reconstruisant sous la forme de cristaux photoniques ? ». Cette question a donné naissance au contrat S.H.I.E.L.D. liant la DGA, Thalès et le GEA pour une étude exploratoire dont le présent manuscrit est le fruit.

L'espoir de départ était de profiter de plusieurs points apparemment avantageux des cristaux photoniques: un champ localement plus élevé que dans un matériau homogène, une plus grande indépendance à l'angle d'incidence que les traditionnels empilements de couches minces et une bande interdite très marquée qui, si nous pouvions la faire bouger, mènerait naturellement à la commutation entre état transparent et opaque.

L'utilisation de processus non-linéaires optiques s'est imposée comme une évidence avant même la conception du sujet de thèse : la menace laser comprend aujourd'hui des lasers impulsionnels ce qui oblige tout système de protection à commuter de l'état passant à l'état opaque en des temps de l'ordre de la nanoseconde et peut être même moins dans un avenir pas si lointain. De tels temps de réaction interdisent l'utilisation d'une chaîne de détection/commande électronique trop lente et imposent une auto commutation rapide du matériau face à l'accroissement de l'intensité incidente. Des effets non linéaires optiques répondent à cette condition d'auto déclenchement ultra rapide et il n'est donc pas étonnant que l'on retrouve de tels effets dans la plupart des limiteurs optiques actuels.

C'est donc en combinant le monde de la simulation électromagnétique des cristaux photoniques, celui des effets non linéaires et finalement celui de la protection optique que nous avons entamé nos travaux avec comme objectif l'exploration de cette nouvelle voie et l'espoir de trouver une solution efficace à la menace laser émergente dans les bandes optiques visible, IR1 ou IR2.

Dans un premier chapitre nous reviendrons sur les différents éléments nécessaires à notre travail : ce que sont les cristaux photoniques, ce que sont les effets non linéaires optiques, comment on simule aujourd'hui ces composants et finalement ce que l'on attend d'un « bon » limiteur optique.

Dans un deuxième chapitre nous expliquerons pourquoi aucune des méthodes existantes ne nous convenait parfaitement et pourquoi nous avons développé nos propres méthodes de simulation en nous focalisant sur les effets non-linéaires optiques de type Kerr et à changement de phase. Une description très détaillée des nouvelles méthodes conçues et de leurs capacités sera effectuée.

Dans le troisième chapitre nous décrivons des résultats théoriques intéressants obtenus au cours de la recherche portant sur les effets de bords, la technique dite de « l'homogénéisation » et l'apodisation de structures 2D qui permet de supprimer le ripple. Nous viendrons enfin à la fonction de limiteur optique proprement dite et présenterons les plans d'un prototype basé sur l'effet Kerr.

Le succès ayant couronné nos recherches sur les matériaux à changement de phase nous empêchera malheureusement de divulguer nos résultats à ce propos pour des raisons de confidentialité industrielle.

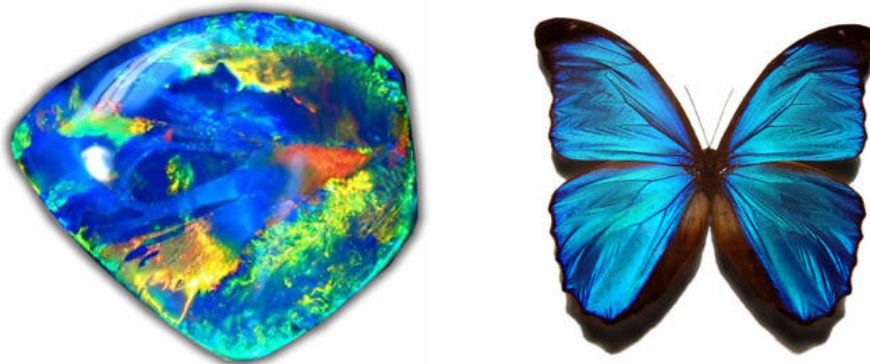
Chapitre I

**Les cristaux photoniques, la
limitation optique et les effets non
linéaires : Posons le problème**

I Les cristaux photoniques, la limitation optique et les effets non linéaires : Posons le problème.

A / Rappels sur les Cristaux Photoniques (CP)

Les Cristaux Photoniques ont ceci de semblable avec la prose de Mr Jourdain que l'homme en faisait déjà avant de le savoir[♦]. Quant à mère nature, elle ne nous avait pas attendu pour y penser et s'en sert depuis longtemps pour fabriquer de magnifiques pigments irisés*. Ces pigments ont été étudiés dès la fin du 19^{ème} [1,2,3,4,5,6,7,8,9,10] mais ce n'est que très récemment que leur véritable nature de cristal photonique est apparue et a enfin résolu le mystère^[11,12,13,14,15,16,17].



Les superbes couleurs de cette opale et de ce « Morpho » proviennent des interférences se produisant dans des cristaux photoniques naturels.

En fait, il a fallu attendre que se produise un déclic^[18] en 1987 avant que la communauté scientifique ne réalise l'intérêt de la chose. Depuis c'est l'explosion. Les articles traitant du sujet sont légions, les nouvelles applications succèdent aux découvertes à un rythme soutenu et l'on se prend parfois à rêver que nous tenons là un des éléments majeurs de la technologie de demain.

Mais qu'est ce qu'un cristal photonique ? Qu'est ce qui a amené à sa « découverte » ? A quoi cela pourrait il servir ? Et où en est on actuellement ?

C'est à ces questions que ce paragraphe d'introduction aux cristaux photoniques, forcément succinct vu l'ampleur du sujet et la complexité des théories, va tenter de répondre.

[♦] Les miroirs de Bragg sont des cristaux photoniques 1D. Mais personne ne l'avait remarqué.

^{*} Un exemple célèbre : le Morpho, magnifique papillon tropical bleu métallique qui rentrait autrefois dans la composition des encres utilisés pour l'impression des Dollars. Un exemple moins célèbre mais plus commun sous nos latitudes : les plumes irisées du cou de nos pigeons des villes. Les opales, le squelette de certains nudibranches représentent d'autres exemples parmi bien d'autres.

1/ Propriétés des Cristaux Phoroniques (CPs)

Un livre de référence permettant une bonne approche des cristaux photoniques est le « Photonic Crystal, Molding the flow of light » de J.D. Joannopoulos que je conseille au lecteur désireux d'approfondir le sujet.

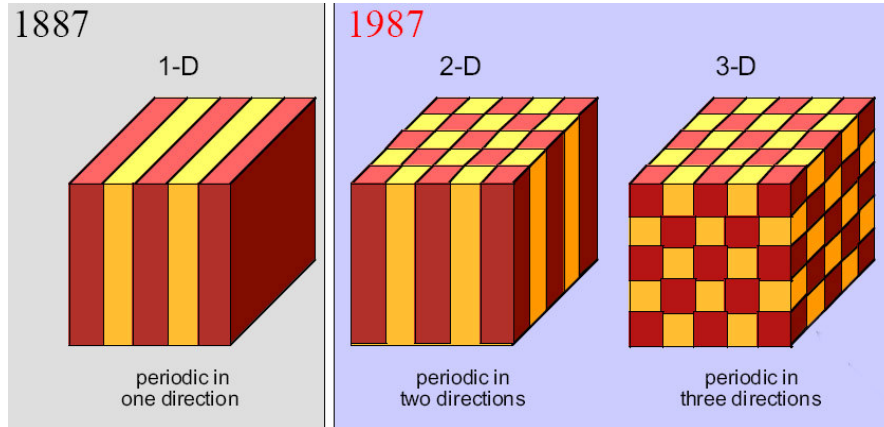


Fig. 1 : Cristaux Photoniques 1D, 2D et 3D : Du réseau de Bragg de 1887 au CP moderne.

Un cristal photonique peut être vu comme la transposition dans le domaine optique des matériaux à bande interdite électronique. Tout comme dans les semi-conducteurs où la périodicité du cristal introduit des gaps dans les énergies permises pour la propagation des électrons, la périodicité de la permittivité des CPs engendre des gaps d'énergie interdite pour les photons. C'est pour cela que le terme Cristal Photonique (CP) peut être échangé avec les termes « Matériaux à gap de photons (PBG chez les anglo-saxons) » ou « Matériaux à bande interdite photonique (BIP) ».

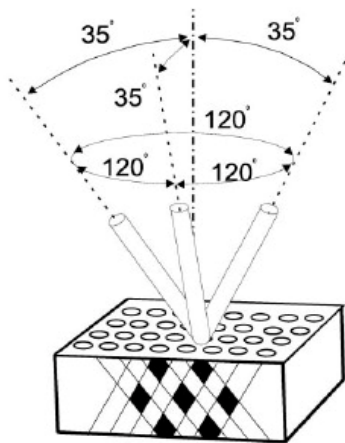


Fig. 2 : Yablonovite

Historiquement, le premier CP fut le miroir de Bragg. C'est un CP à une dimension mais personne n'avait vraiment réalisé qu'il s'agissait du représentant d'une famille beaucoup plus large. Il faut attendre 1987 pour que Eli Yablonovitch^[18] remarquant l'analogie entre les équations de Schrödinger et les équations d'Helmholtz* conceptualise le principe de bande interdite photonique et construisit en 1991^[19] une structure à variation périodique de l'indice dans les trois directions: le premier vrai cristal photonique artificiel apparaît.

Aujourd'hui appelé Yablonovite (Fig.2), ce cristal était un bloc de plexiglas percé de trous régulièrement espacés formant une maille 3D de type

* En toute rigueur Ohtaka y avait pensé dès 1979, avant Yablonovitch, et fut le premier à employer le terme « photon band structure » mais il n'a pas poursuivi son étude jusqu'au concept de bande interdite. (K. Ohtaka, "Energy band of photons and low-energy photon diffraction," Phys. Rev. B 19, 5057-5067 (1979))

diamant. Ce cristal présentait une bande interdite dans la gamme des micro-ondes. Au même moment S. John étudiait la possibilité d'une forte localisation des photons dans les structures diélectriques périodiques^[20].

L'article de Yablonovitch^[18], qui laissait entendre que de telles structures pouvaient mener à la suppression de l'émission spontanée, eut un retentissement considérable et est à l'origine du développement spectaculaire du domaine depuis les vingt dernières années.

Concrètement, qu'est ce qu'un cristal photonique ? C'est un matériau périodique dont le motif est répété à l'infini. Ce motif peut avoir des formes très diverses (Fig. 3), être diélectrique ou métallique ou mixte. Son pas de maille est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde.

D'où viennent les propriétés du cristal photonique ? Pour répondre à cette question revenons un peu en arrière, au problème de la conduction électrique dans les solides. On sait que dans un conducteur électrique, le réseau atomique est cristallin. Pourtant les électrons le traversent sans « rebondir » sur les atomes.

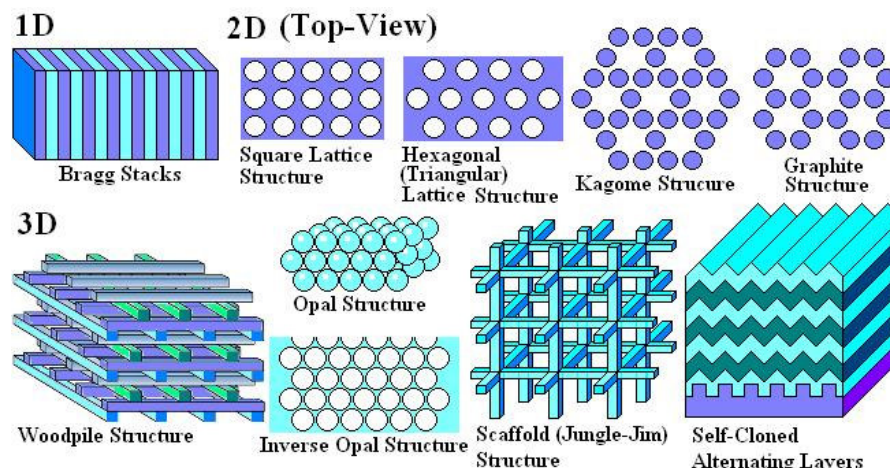


Fig. 3 : Exemples de mailles possibles pour un CP.

Ce grand mystère du 19^{ème} siècle a été résolu par l'étude de l'électron en tant qu'onde et non corpuscule : la diffraction de l'onde électronique par le réseau atomique permettait à certaines énergies de traverser le réseau. Cette découverte repose sur l'utilisation du théorème de Bloch (aussi appelé théorème de Floquet*) énoncé en 1928 qui décrit la propagation d'ondes dans un milieu périodique 3D et a amené à la conclusion que les électrons circulant dans un conducteur sont diffractés par les imperfections d'un réseau atomique et non par le réseau lui-même.

Le point intéressant pour nous ici est que la nature de l'onde en question peut être électronique ou électromagnétique, le théorème de Bloch n'en reste pas moins valide. C'est ce qu'a remarqué Yablonovitch qui a réussi à lier les outils électromagnétiques aux outils jusqu'ici réservés à la physique du solide. Il est passé de {Bloch + Schrödinger} à {Bloch + Helmholtz}.

* Le théorème de Félix Bloch énoncé en 1928 est l'extension en 3D du théorème de Floquet énoncé en 1883 mais limité au cas 1D.

Avec un formalisme mathématique cela donne ceci :

Un cristal photonique correspond à une variation périodique de $\varepsilon(\vec{x}) = \varepsilon(\vec{x} + \vec{R}_i)$ avec les \vec{R}_i qui sont les vecteurs constitutifs de la maille cristalline. Dans ce cas, le théorème de Bloch stipule que les solutions à l'équation $\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla} \times \vec{H} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}$ (équation d'onde issue de l'application des équations de Maxwell à une onde de fréquence ω) sont de la forme $\vec{H}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \cdot \vec{H}_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ avec des valeurs propres $\omega_n(\vec{k})$ et où $\vec{H}_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ est une enveloppe périodique satisfaisant $\vec{H}_{n,\vec{k}}(\vec{x}) = \vec{H}_{n,\vec{k}}(\vec{x} + \vec{R})$. Ces $\vec{H}_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ sont appelés modes de Bloch.

Les valeurs propres $\omega_n(\vec{k})$ sont des fonctions continues de \vec{k} qui dessinent des courbes, ou diagramme de dispersion, lorsque tracées en fonction de ces mêmes \vec{k} (voir Fig. 4).

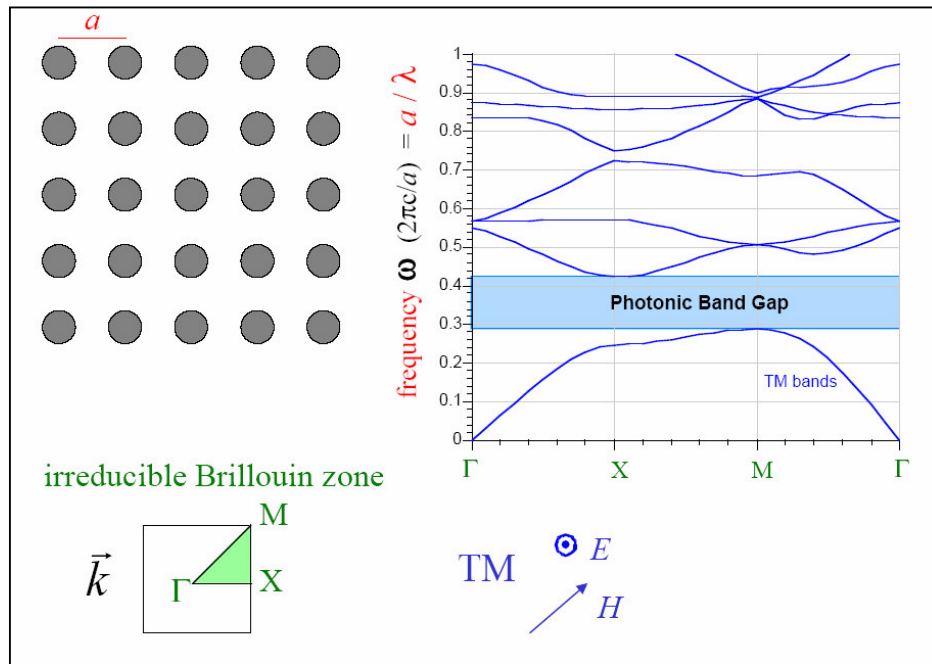


Fig. 4 : Exemple de diagramme de bande en polarisation TM pour un cristal photonique 2D issu de « Photonic Crystal, Molding the flow of light » de J.D. Joannopoulos.

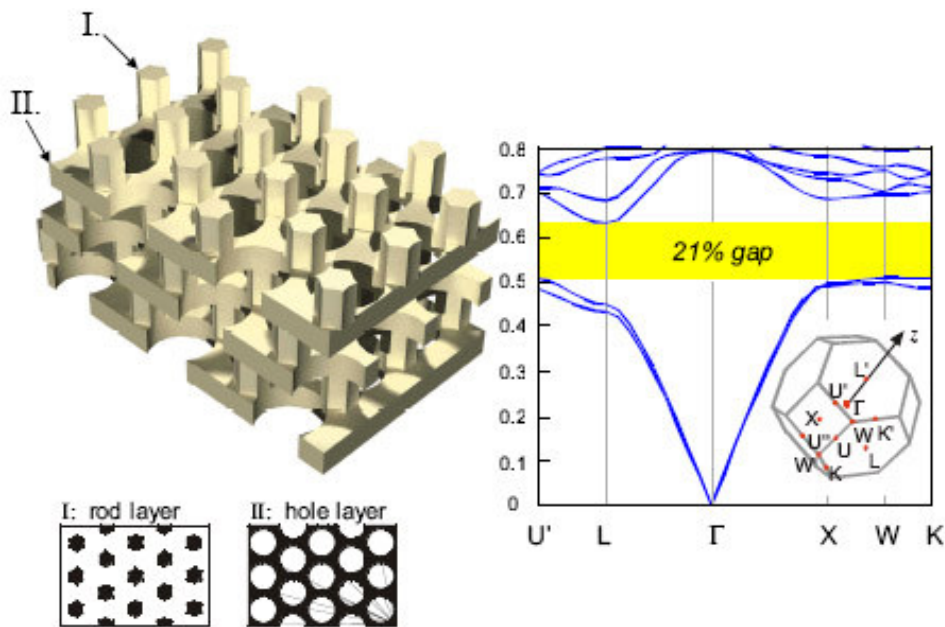
Ces valeurs propres sont périodiques elles aussi. La solution pour \vec{k} est la même que celle pour $\vec{k} + \vec{G}_j$ où \vec{G}_j est un vecteur constitutif du réseau cristallin dans l'espace

réciproque*. Grâce à cette périodicité on n'a besoin de calculer les valeurs propres que pour des \vec{k} limités à la zone de Brillouin irréductible* (Fig. 4).

On peut observer sur la figure 4 un gap ou bande interdite pour la polarisation TM : la figure montre que pour des fréquences comprises entre 0,3 et 0,4 il n'y a aucune solution à la relation de dispersion. Il n'existe dans cette bande spectrale aucune direction \vec{k} possible de propagation : aucune courbe $\omega_n(\vec{k})$ ne traverse cette zone.

En conséquence il est impossible à un photon polarisé TM possédant une fréquence située dans cette bande de se propager dans le cristal : le cristal y est parfaitement réfléchissant dans toutes les directions vis-à-vis d'une onde incidente polarisée TM.

Cet exemple à la géométrie très simple (un réseau 2D de cylindres avec une maille carrée. Voir Fig. 4) qui ne présente une bande interdite que pour une polarisation TM ne doit pas faire croire que l'on est limité à cette polarisation. Il est tout à fait possible de fabriquer des matériaux à bande interdite TE, ainsi que des matériaux à bande interdite indépendante de la polarisation. Ces derniers demandent toutefois une géométrie plus complexe (Fig. 5).



[S. G. Johnson *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 77, 3490 (2000)]

Fig. 5 : Cristal photonique 3D de forme assez complexe présentant un gap complet (TE et TM)

Les propriétés du cristal photonique ne se limitent pas à l'existence de bandes interdites. Conformément à ce qu'attendait S. John^[20] la vitesse de groupe d'une onde se propageant dans le cristal peut devenir très faible, voire s'annuler pour des

* Pour l'espace réciproque, la zone de Brillouin, la zone irréductible de Brillouin, nous renvoyons le lecteur vers la cristallographie. Par exemple dans le Kittel (« Introduction to solid state physics », C. Kittel, Ed. Wiley)

fréquences situées sur les bords de la bande interdite. Ce ralentissement de l'onde s'accompagne d'une exaltation du champ^[21] et fournit plus de temps pour l'interaction photon-matière. C'est là une propriété qui sera très intéressante pour tout ce qui est capteur ou effet non-linéaire.

Une dernière propriété : pour certaines fréquence (près des bords du gap) et pour certaines constructions, un cristal photonique peut se comporter comme un matériau à main gauche^[22], c'est-à-dire un matériau présentant un indice optique apparent négatif et où la lumière semble se propager dans le sens inverse de celui de l'énergie ($S \cdot k < 0$ où S est le vecteur de Poynting). Une des conséquences est le retournement des effets Doppler^[23,24] et Cerenkov^[25]. Une autre est la réfraction à des angles très importants conformément à Snell-Descarte. Bien que ces propriétés soient plus facilement maniables avec des métamatériaux^[26], on les retrouve dans les cristaux photoniques^[22,27,28,29,30,31]. On peut aussi noter qu'il est possible d'obtenir une réfraction négative sans indice négatif^[30,32]

Terminons ce rapide survol des propriétés des cristaux photonique par quelques règles de fabrication qui sont apparues au cours du temps : La recherche d'un cristal photonique 3D possédant une large bande interdite doit respecter les points suivants^[33,34].

- Le contraste d'indice entre les inclusions et la matrice doit être le plus grand possible (élargissement spectral des gaps)
- La zone de Brillouin doit être la plus proche possible d'un cercle (élargissement angulaire des gaps).
- La forme des inclusions doit correspondre à la symétrie de la zone de Brillouin.
- Le cristal photonique doit être constitué d'îlots raccordés entre eux par des veines (Superposition des gaps TE et TM)

2/ Perspectives d'utilisations

L'une des premières utilisation perçues pour les CP fut la réalisation de guides d'ondes insensibles à la brutalité des changements de directions^[35]. On rêve de pouvoir écrire des pistes à photons en optique intégrée aussi facilement que l'on trace des pistes de cuivres dans un circuit intégré (Fig. 6). Dans le même ordre d'idée (passer de circuits intégrés électroniques à des circuits intégrés optiques) mais avec nettement moins de succès, l'éternelle recherche d'un transistor optique industrialisable s'est penchée sur les CPs^[36].

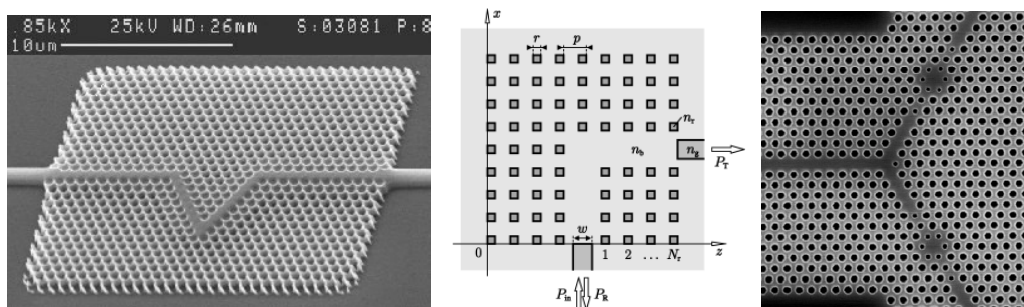


Fig. 6 : Exemples de guides d'ondes à base de CPs.

Une autre application fut la création de cavités à très fort facteur de qualité^[37].

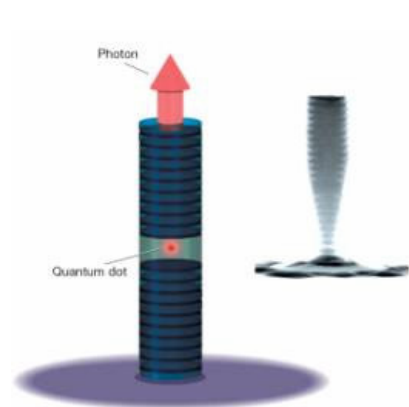


Fig. 7 : Puit quantique dans une cavité faite avec un CP 1D (Architecture micropilier)

Renfermant par exemple un puit quantique^[38] (Fig. 7), ou un élément non linéaire^[39], ces cavités permettraient de renforcer l'efficacité de ce que l'on mettrait dedans. La cavité peut même se ramener à un simple défaut dans le CP^[39]. Des sources, des détecteurs, des limiteurs et des switches^[40] en optique intégrée plus efficaces qu'auparavant sont envisagés^[41]. Récemment, des prototypes de détecteurs infrarouges à base de CP ont été présentés^[42]. Lorsque comparés à des détecteurs dénués de CPs ils possèdent un rapport signal sur bruit amélioré d'un facteur cinq et un rendement un ordre de magnitude supérieur sans augmentation du courant d'obscurité. Dans un autre genre, des biocapteurs adaptés au dépistage cancéreux basés sur les CP sont en train d'apparaître^[43].

Le rapprochement de guides d'ondes et de défauts ou cavités résonnantes dans un CP amène à des possibilités de filtrage et de multiplexage (insertion ou extraction) en longueur d'onde dans le cadre de l'optique intégrée^[44,45] (Fig. 8). Possibilités séduisantes pour le monde des télécoms optiques.

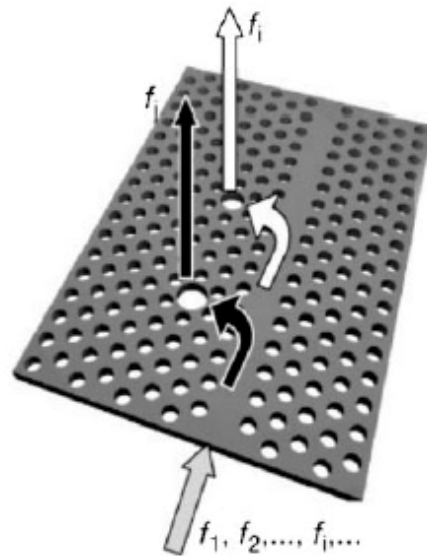


Fig. 8 : Un principe parmi d'autres de filtre add-drop utilisant les CPs.

Sans parler de cavité, l'utilisation des propriétés dispersives des CPs permet d'envisager la création de diodes laser peu divergentes^[46], possédant une bonne qualité spatiale de faisceau (ce qui est probablement le problème numéro un des diodes laser actuelles). Pour continuer sur le thème des diodes lasers, l'utilisation de CPs permet d'abaisser le seuil laser ou de se passer de miroirs^[47].

L'utilisation d'un indice effectif apparent négatif permet la création de super-prismes (Fig. 9), à la déviation bien supérieure à celle des prismes normaux^[48,49].

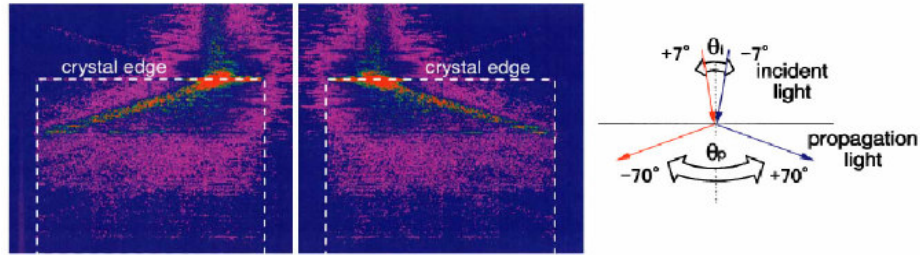


Fig. 9 : Réalisation d'un superprisme

Une application à long terme dont l'on parle beaucoup pourrait être la fabrication de lentilles qui ne soient pas concernées par la limite de diffraction (Fig. 10). Veselago^[50] avait découvert dès 1968 qu'une lame taillée dans un matériau à main gauche imageait telle une lentille. Pendry^[51], grâce à la disponibilité nouvelle de métamatériaux à main gauche, a confirmé l'effet en 2000 mais a de plus découvert que les ondes évanescentes se trouvaient amplifiées dans un tel milieu, ce qui menait à une immunité vis-à-vis de la limite de diffraction. De plus on sait aujourd'hui qu'un tel effet est possible dans un cristal photonique^[52] et pas seulement dans un métamatériau. Quant à l'obligation d'utiliser des matériaux sans ou à faibles pertes, elle est aujourd'hui caduque grâce à l'invention de la lentille de PENDRY-RAMAKRISHNA^[53]

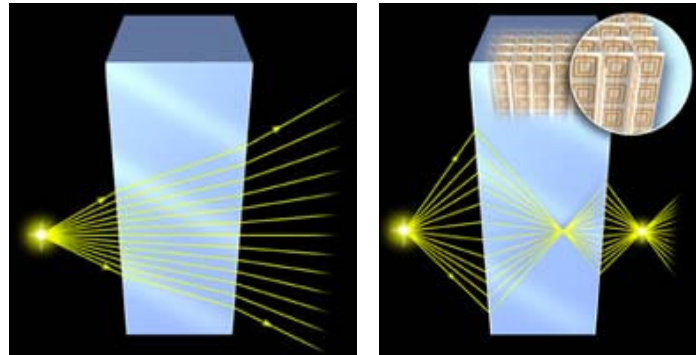
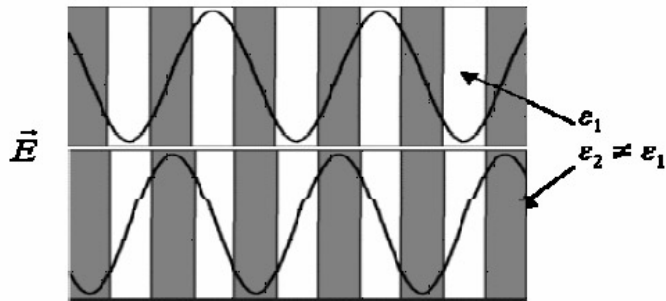


Fig. 10 : Comportement d'un milieu à main droite usuel et d'un milieu à main gauche. La lame de matériau à main gauche agit comme une lentille.

L'exaltation du champ et le ralentissement de la lumière (qui permet une meilleure interaction lumière/matière) dans les zones de bord de gap d'un CP pourraient eux aussi être mis à profit. Cette fois-ci il ne s'agit pas de piéger la lumière dans une cavité entourée de CP. Cette fois-ci il s'agit d'utiliser le CP lui-même. En bord de bande interdite, le champ est concentré dans les zones de haut indice ou de bas indice suivant le côté de la bande où l'on se trouve (voir Fig. 11 pour le cas unidimensionnel). Cette exaltation s'accompagne d'une vitesse de groupe qui tend vers zéro. On peut donc s'attendre à de forts effets non linéaires si le matériau où se concentre l'énergie présente un effet non-linéaire. C'est cette idée qui a amené à se pencher sur le doublage/triplement de fréquence dans les CPs. Rajoutons qu'en

prenant la bonne forme de maille (poling) on peut s'arranger pour avoir un Quasi Phase Matching (QPM)^[54,55] intrinsèque au CP. On a même pu arriver à des accords de phase pour le quadruplement^[56] de fréquence.



Champ électrique des deux modes stationnaires en bord de première zone de Brillouin d'un empilement multicouche de deux matériaux d'indices optiques différents.

Fig. 11

Un cristal photonique 2D est actuellement déjà rentré dans la vie courante, au sens qu'on peut facilement l'acheter chez un grossiste ou acheter des machines qui en contiennent : il s'agit de la fibre à trous, ou fibre à cristal photonique (FCP ou PCF chez les anglo saxons). Le principe est trivial : la bande interdite du cristal photonique confine l'énergie au centre de la fibre, la guidant et l'empêchant de se propager vers la gaine.

Ce type de fibre (Fig. 12) offre des avantages certains en ce qui concerne les télécommunications optiques : tout en restant dans le cadre d'un fonctionnement monomode^[57] la dispersion peut être librement choisie*.

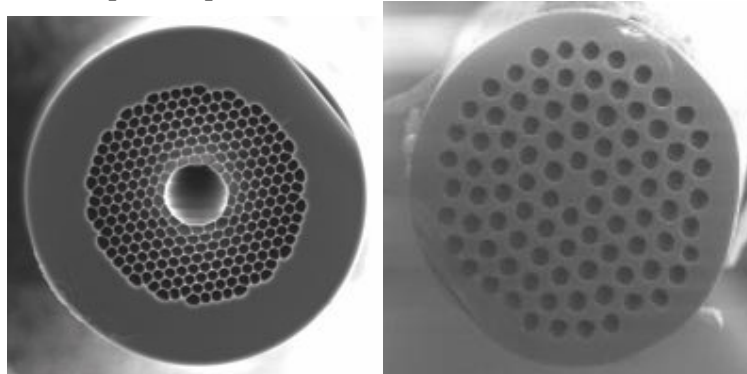


Fig. 12 : Exemples de PCF (en coupe)

L'un des points les plus intéressants est l'application aux effets non-linéaires. La FCP permet un confinement beaucoup plus important de l'énergie dans le cœur. Si ce cœur (cristal dopé, gaz, etc...) présente des propriétés non-linéaires, des effets non linéaires très efficaces auront lieu. On peut ainsi faire du doublement, du triplement de fréquence ou réaliser des oscillateurs paramétriques optiques (OPO). Une application spectaculaire est la création d'un continuum de lumière visible à partir d'une source pulsée infrarouge^[58] (ceci est dû à la présence conjointe d'une

* Et croyez en l'auteur qui connaît bien le monde de la R&D des télécoms optiques, cela n'est pas à négliger.

dispersion quasi nulle et d'un mode de cœur très confiné). De tels produits sont aujourd'hui en vente et ne sont plus des expériences de laboratoires.

La FCP permet aussi la conception de lasers à fibre de forte puissance très efficaces : Une FCP dopée à fort nombre d'ouverture peut être plus efficacement pompée par des diodes lasers qu'une simple fibre monomode conventionnelle. Un cœur large permet de diminuer la densité maximale de puissance tout en restant monomode (impossible sans FCP), ce qui retarde l'apparition des effets non linéaires indésirables qui limitent la puissance maximale de tels lasers.

Sculpter la dispersion permet aussi de fabriquer des lasers impulsionsnels à fibre sans avoir recours à des optiques diffractives tel que les prismes ou les réseaux^[59]

Ces fibres permettent aussi le maintien de polarisation, le transport de faisceaux puissant pour la découpe laser, de nouveaux types de senseurs, le câblage en zone fortement irradiée, etc... la liste s'allonge régulièrement. Il s'agit là d'un succès industriel fulgurant pour une technologie aussi jeune.

Et comme si tout ceci ne suffisait pas, il reste toujours les possibilités offertes par le couplage^[60] des CPs et des MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems).

B / Objectif de la thèse

La thèse ici présentée avait pour but l'étude exploratoire de l'usage des cristaux photoniques pour la protection optique dans un cadre militaire. Ceci passait bien sur par la mise au point de nouveaux outils informatiques de simulation de CPs non-linéaires. Ces algorithmes sont le point principal développé dans ce manuscrit. Il est toutefois intéressant pour comprendre notre démarche durant les trois ans qu'ont duré cette thèse de rappeler ce qu'est la protection optique militaire et ce que l'on attendait de l'emploi des CPs.

1/ Rappel sur la protection optique

La protection optique militaire est l'art de ne pas se faire aveugler (temporairement ce qui est une forme de brouillage, ou définitivement ce qui s'apparente à une destruction) par un laser ennemi.

La menace laser est devenue une réalité et malgré les conventions internationales les interdisant*, des armes fabriquées spécifiquement pour aveugler l'ennemi ont été construites. A notre connaissance (basée sur les événements relatés dans la presse civile), de telles armes ont au moins une fois été utilisées dans un combat entre deux puissances étrangères♦.

* Protocole relatif aux armes à laser aveuglantes (Protocole IV à la Convention des Nations Unies sur l'interdiction ou la limitation de l'emploi de certaines armes classiques 1980), 13 octobre 1995. Entré en vigueur le 30 juillet 1998.

♦ L'armée Nord Coréenne a attaqué un hélicoptère US en Mars 2003 à l'aide d'un laser militaire anti-personnel de fabrication chinoise, le ZM-87. Des incidents sporadiques, certains ayant mené à des dégâts irréparables de la vue chez les pilotes, ont eu lieu en 1997 (Bateau espion russe dans les eaux US) et 1998 (Guerre en Bosnie).

La question du terrorisme, prise très au sérieux depuis le 11 septembre 2001, a aussi fait réaliser qu'un laser médical en vente libre pouvait être utilisé comme arme contre les pilotes d'un avion (civil ou non) en phase d'atterrissage. Un incident a eu lieu à Los Angeles en 1996 où le pilote d'un vol commercial SkyWest Airlines fut blessé en phase d'atterrissage. En 2004, le FBI a lancé une enquête portant sur l'agression de 7 avions en l'espace de 6 jours à Medford, Oregon. Le 22 septembre 2004 un pilote se posant à Salt Lake City a été blessé alors qu'il était encore à 5 miles de l'aéroport, ce qui indique l'utilisation d'un laser de forte puissance.

Tout ceci a eu pour effet de souligner l'avance qu'avait prise la menace laser vis-à-vis des moyens de s'en protéger. Il y a en conséquence aujourd'hui un fort regain d'intérêt^[61] pour tout ce qui a trait à la protection des yeux humains et des capteurs CCD des machines vis-à-vis de cette menace.

Voici ce que l'on pouvait lire sur le site* de la Direction Générale de l'Armement en 2000 sur le sujet :

« L'objectif [de la protection anti-laser] est d'assurer le maintien de l'efficacité opérationnelle des différents canaux visuels d'information des systèmes d'armes en environnement laser, de jour comme de nuit.

La menace court terme est liée à l'utilisation maladroite ou malveillante des télémètres, désignateurs, illuminateurs laser émettant à des longueurs d'onde fixes du spectre visible et proche IR. S'y ajoutent, pour la menace moyen terme, les risques liés à l'utilisation de contre-mesure optronique agiles en fréquence ou multi-raies. »

Il convient de rajouter à ce texte la menace pulsée, les lasers impulsionnels disponibles à la vente ayant fait de grands progrès ces dernières années. L'intérêt du laser pulsé réside dans la concentration des photons dans de brèves impulsions temporelles rendant l'impact très destructeur même à faible énergie moyenne (à quantité d'énergie égale, là où un laser continu chauffe légèrement une plaque d'acier, un laser à impulsions suffisamment brèves la perce).

Les propriétés spectroscopiques de l'atmosphère étant ce qu'elles sont, il n'existe que trois fenêtres (appelées bandes) où un laser peut s'y propager efficacement. Ceci a pour conséquence le cantonnement de la menace laser dans trois plages de longueurs d'onde précises :

Bande I : 400nm à 2,5µm

Bande II : 3µm à 5µm

Bande III : 8µm à 13µm

Une fois la menace identifiée, il faut s'en protéger. Les technologies de protection peuvent être classées en 4 grands groupes :

Obturateurs mécaniques. C'est le système le plus simple, il peut être positionné en interne ou en externe, il offre une protection aux dommages laser. Mais il n'est pas efficace contre les lasers impulsionnels. La commande mécanique ne permet pas de positionner rapidement la pièce mécanique, la densité optique ou le filtre absorbant lors de l'agression.

* Page supprimée depuis.

Concepts de filtres fixes, ces filtres utilisent les propriétés de réflexion ou d'absorption des matériaux utilisés et ils sont centrés autour d'une longueur d'onde. Ils sont utilisables contre les lasers impulsionnels ou continus. Les filtres interférentiels forment le concept le plus utilisé pour rejeter les longueurs d'onde indésirables, ils sont constitués communément de multicouches de matériaux diélectriques déposés sur un substrat. L'acceptance angulaire, l'impact des ces filtres sur les performances optiques du système optronique présentent des limitations techniques importantes. En plus, ces filtres ne peuvent répondre au besoin de protection vis à vis des lasers agiles en fréquence (de type Oscillateurs Paramétriques Optiques couramment désignés par l'acronyme OPO).

Concepts de filtres commutables, ces filtres utilisent des matériaux actifs présentant une bande passante optique contrôlable en fonction du temps. Ils utilisent les principes de réflexion ou d'absorption. Ils fonctionnent plutôt en impulsions longues ou en continu. Les matériaux peuvent être électro-actifs. Le temps d'activation est de l'ordre de la micro à la milli seconde.

Concepts de limiteurs, ces composants peuvent être considérés comme actifs ou passifs. Les composants actifs sont déclenchés par une source d'énergie extérieure, tension électrique par exemple. On peut ainsi construire des valves optiques avec un mélange de composites polymères – cristaux liquides (PDLC). Le mélange PDLC est homogène et transparent lorsque la tension de commande est appliquée, en effet cette tension de commande permet l'alignement des billes de cristaux liquide. Quand on annule la tension, les billes s'arrangent aléatoirement dans la structure et le matériau devient diffusant. Le système passe d'un état passant optique à un état bloquant optique. Le temps de réponse est limité par la viscosité du cristal liquide, ce qui correspond aux rotations des molécules.

Les composants dits passifs sont eux directement déclenchés par l'impulsion laser, le déclenchement dépend alors de la puissance laser. Il faut remarquer que les effets non linéaires peuvent prendre place dans les liquides, les solides et les gaz. L'exploitation de ces effets permet de concevoir les différents limiteurs.

Historiquement* le premier limiteur optique était basé sur le principe de la lentille thermique qui défocalisait le faisceau lors de forte intensité^[62]. Puis fut utilisé l'absorption à deux photon (ADP) capable de protéger contre les lasers pulsés^[63,64]. En 1985, les cristaux liquides (non commandés) sont proposés contre les impulsions^[65,66] très brèves (picoseconde). L'effet semble être un mélange de réfraction non linéaire et d'ADP. Les particules de carbone en suspension (CBS en anglais) ont été suggérées^[67,68] dès les années 80, elles reposent sur la diffusion non linéaire. Elles sont aujourd'hui d'un grand intérêt pour la limitation en raison de leur large bande spectrale et de leur fort effet non linéaire. D'autres nanoparticules en suspension sont aussi étudiées avec succès^[69]. L'absorption saturable inverse (RSA en anglais) a été étudiée dès 1967^[70] et appliquée à la limitation optique à la fin des années 1980^[71,72] et est encore étudiée aujourd'hui^[73]. La photoréfractivité qui permet la déviation ou la défocalisation du faisceau de forte intensité est aussi étudiée^[74] avec succès.

L'efficacité de ces dispositifs est naturellement liée au seuil de déclenchement du matériau non-linéaire. Pour atteindre ces seuils de déclenchement, il est souvent nécessaire de positionner ces dispositifs dans des plans focaux intermédiaires afin

* Cet historique est basé sur le mémoire de thèse de Mme Delphine WOLFERSBERGER « Etude expérimentale et théorique de l'autofoocalisation photoréfractive d'une impulsion laser pour application à la limitation optique » (27 Avril 1999, Univ. Metz)

d'augmenter artificiellement la focalisation du faisceau laser donc d'augmenter les densités d'énergie par unité de surface (Fluence).

Des matériaux non linéaires en couches homogènes ou en suspension dans des solutions^[67,68,75] ont déjà été étudiés dans le passé par de nombreux laboratoires internationaux.

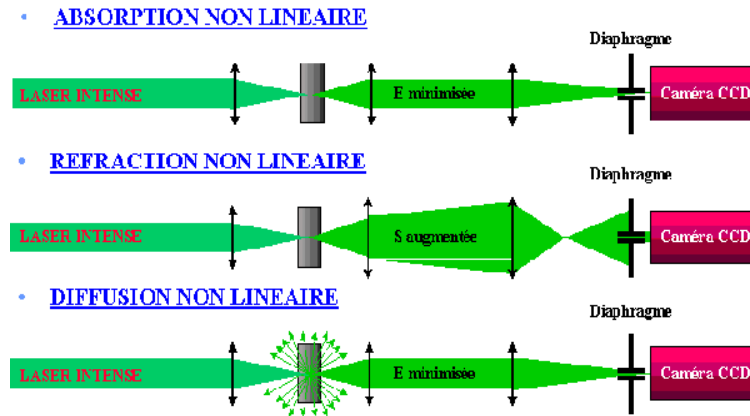


Fig. 13 : Document DGA décrivant des montages limiteurs

Toutefois, les concepts actuels basés sur un usage homogène des matériaux, bien que présentant un intérêt certain, souffrent de défauts. Elles nécessitent de très fortes intensités pour basculer de l'état passant à l'état bloqué, ce qui nécessite l'ajout d'optiques concentratrices coûteuses et encombrantes dans les dispositifs à protéger. Les protections sont rarement large bande et restent sensibles à l'angle d'incidence de la menace. Finalement, il serait souhaitable d'augmenter le contraste de la protection qui n'est pas actuellement totalement satisfaisant

Les grandeurs intéressantes^[73] pour un limiteur optique sont :

- T_{\max} : La transparence maximale qui doit être proche de un.
- T_{\min} : L'opacité maximale qui doit être proche de zéro.
- T_D : La dynamique définie par $T_D = \frac{T_{\max}}{T_{\min}}$ qui doit être la plus grande possible.
- τ : Le temps de réponse ou temps nécessaire pour passer de T_{\max} à un T jugé suffisamment faible.
- S : Le seuil d'activation en dessous duquel le limiteur ne fonctionne pas. Il correspond à une densité d'énergie surfacique (Fluence) et doit être le plus bas possible.
- $\Delta\lambda$: La bande spectrale protégée, la plus large possible.

2/ Cahier des charges indicatif au projet SHIELD

La thèse ici présentée fait l'objet d'un contrat entre la DGA / MRIS* d'une part et le GEA* associé à Thalès Optronique d'autre part. Ce contrat dénommé S.H.I.E.L.D (Saturation Haute Intensité Efficace sur un Large Domaine fréquentiel) avait comme but l'étude exploratoire de l'intérêt des Cristaux Photoniques vis-à-vis de la protection optique militaire.

En effet, l'exaltation des champs présents dans les cristaux photoniques laissait espérer un rendement meilleur des effets non-linéaires tandis que l'indépendance à l'angle d'incidence des cristaux photoniques promettait d'élargir le champ utilisable jusqu'aux $\pm 30^\circ$ qui rendent la vie facile à l'ingénieur en conception optique. L'exaltation du champ, dans le cas où elle se révélerait très importante pourrait aussi amener à abaisser le seuil de déclenchement du limiteur voire à se passer d'une optique concentratrice coûteuse.

Nous ne donnerons évidemment pas ici les caractéristiques précises du contrat. Mais il est utile de connaître les grandes lignes du cahier des charges car il a bien entendu fortement influencé les choix faits au long des trois années de thèse.

Ces grandes lignes étaient :

- Résistance à des lasers pulsés de type 10ns et moins.
- Utilisation sur des plages larges afin de protéger contre des agressions agiles en fréquence (Le laser ennemi capable de changer plusieurs fois de longueurs d'onde pour trouver la faille est une possibilité aujourd'hui prise au sérieux). Ces plages peuvent être le visible, le proche infrarouge, les bandes infrarouges II et III.
- Grande transparence pour une utilisation dans un système optique performant (Pour fixer les idées, il est bon d'être autour ou au dessus de 90%)
- Très forte opacité. Il s'agit d'arrêter un laser agressif pulsé et donc présentant une puissance crête très importante.

3/ Nécessité du non linéaire

A la lecture du cahier des charges, les solutions non-linéaires s'imposent d'elles même.

Si l'on veut se protéger d'une impulsion laser de moins de 10ns, toute la chaîne {Détection de l'impulsion dangereuse / Commande du système de protection / Temps de réponse du système de protection} doit être très inférieure à ces 10ns.

Ceci exclut les systèmes à commande électronique : ils sont trop lent. La détection de l'impulsion dangereuse par une photodiode puis l'envoi d'un signal électronique de commande est déjà trop long. Le système de protection doit être déclenché directement par l'impulsion, sans système électronique intermédiaire.

Ceci nous amène sur des effets physiques rapides, déclenchables par la lumière, de façon très rapide et affectant la transmission optique.

On reconnaît là le portrait des effets non-linéaires optiques, ou du moins de certains d'entre eux.

Nous allons les détailler dans le paragraphe suivant.

* DGA : Direction Générale de l'armement. MRIS : Mission Recherche et Innovation Scientifique.
GEA : Groupe d'Electromagnétisme Appliqué de l'université Paris 10, site de Ville d'Avray.

C / Rappel sur les effets non linéaires

Nous avons vu au chapitre précédent que les nécessités de rapidité de réaction nous imposaient d'utiliser des effets non-linéaires optiques. Il reste à voir quels sont les effets non-linéaires disponibles* et lesquels pourraient avoir un intérêt dans le cadre de la limitation optique.

1/ Les divers effets non linéaires

Les propriétés optiques des matériaux sont décrites à travers les parties réelles et imaginaires de la constante diélectrique ϵ_r . Cette constante est tirée de la polarisation P du milieu de la façon suivante :

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon_0 \epsilon_r E$$

En optique linéaire, on considère que la relation entre P et E est linéaire et l'on peut alors écrire :

$$P = \epsilon_0 \chi E \quad \text{avec } \chi \text{ qui la susceptibilité électrique telle que } \epsilon_r = 1 + \chi$$

Mais à forte intensité, i.e. en optique non-linéaire, la relation entre P et E ne peut plus être considérée comme linéaire♦. Il faut changer de formalisme et on a l'habitude de décomposer la relation constitutive de P en un développement limité :

$$\begin{aligned} P_{\text{nonlinéaire}} &= \epsilon_0 \chi_{\text{nonlinéaire}} E \\ &= \epsilon_0 \left(\chi^{(1)} E + \chi^{(2)} E^2 + \chi^{(3)} E^3 + \dots \right) \end{aligned}$$

Ce qui amène à la relation

$$\epsilon_{r,\text{nonlinéaire}} = 1 + \chi^{(1)} + \chi^{(2)} E + \chi^{(3)} E^2 + \dots$$

C'est de là que provient la classification des différents phénomènes physiques non linéaires en effets dit d'ordre deux, d'ordre 3, etc...

Une remarque importante : le terme $\chi^{(3)} E^2$ peut relier une variation d'indice à l'intensité incidente. Les termes $\chi^{(2)} E$ et $\chi^{(3)} E^2$ peuvent tout deux mener à la création de nouvelles fréquence optiques. On parle de doublage/triplement de fréquence ou bien de mélange à quatre ondes.

Toutefois il ne faut pas se limiter au formalisme de ce développement limité. D'autres effets non-linéaires ne sont pas ou mal pris en compte par cette formulation. La population des niveaux atomiques, qui donne lieu à l'émission stimulée (laser, amplification optique) ne rentre pas dans ce formalisme. L'absorption saturable, qui correspond à une absorption optique qui tombe à zéro lorsque le niveau d'énergie bas de la transition est «vide», n'est pas non plus traitée judicieusement par l'écriture de P en développement limité.

* Une introduction aux effet non linéaires peut être le cours de Mr. J-Y Courtois de l'Institut d'Optique (Orsay) qu'il a mis en ligne à la disposition de tous.

♦ Un point exploré par N.Bloembergen (Lauréat du Prix Nobel 1981) qui fonda l'optique non-linéaire voici 30 ans.

La diffusion non linéaire, les changements de phase liés à la température sont aussi des effets non-linéaires non forcément liés à des ordres du développement limité de P.

Il faut commencer par effectuer une séparation arbitraire entre les différents effets non linéaires. Ceux qui amènent à la création de nouvelles fréquences ne nous sont d'aucune utilité et ne seront pas considérés ici. Ils ne permettent pas d'obtenir un effet de protection optique. En effet si l'on peut imaginer un système protecteur qui serait transparent à ω_1 , opaque à ω_2 , et contenant un matériau transformant ω_1 en ω_2 à forte intensité... les efficacités de conversions actuelles sont incompatibles avec l'idée de basculer presque 100% de l'énergie d'une fréquence vers l'autre*. Reste les autres effets non-linéaires.

La diffusion non linéaire recouvre plusieurs phénomènes physiques. Pour ce qui concerne les effets Brillouin, Raman et Rayleigh c'est une conséquence de l'émission stimulée[♦] : Dans le cadre de la diffusion linéaire, un photon absorbé est réémis dans une autre direction. Suivant sa fréquence ω , la diffusion est plus ou moins forte et on observe sur le spectre de diffusion les raies Raman-Stokes, Brillouin-Stokes, Rayleigh, Brillouin anti-Stokes et Raman anti-Stokes. Dans le cas de la diffusion non linéaire les choses se compliquent. Si le matériau non linéaire est soumis à un fort éclairage, alors le spectre de diffusion est modifié. Les pics de diffusions sont aux mêmes endroits que précédemment mais leurs valeurs sont fortement modifiées. Les raies émettrices peuvent devenir absorbantes ou au contraire voir leur efficacité fortement augmentée. Cette catégorie de diffusion non-linéaire tire son origine dans la présence d'un $\chi^{(3)}$ à partie imaginaire positive présentant des fréquences de résonances. Mais si ce phénomène de diffusion non-linéaire a donné le jour à des applications dans la spectroscopie Raman ou l'amplification Raman par exemple, elle n'est que de peu d'intérêt pour la limitation optique.

Heureusement il existe d'autres sources de diffusion non-linéaire, non liées au $\chi^{(3)}$. Par exemple, une solution de nanotubes de carbones présente un fort effet de diffusion non-linéaire lié à des effets thermiques rapides et à la mécanique des fluides. Les nanotubes lorsque illuminés par une impulsion laser transmettent rapidement l'énergie lumineuse au solvant qui les entoure, provoquant la formation en quelques nanosecondes d'un écran de bulles à fort pouvoir diffusant^[75]. L'effet est actuellement étudié pour la réalisation de limiteurs optiques^[76].

Autre effet non linéaire, la réfraction non linéaire voit l'indice optique se modifier en fonction du faisceau incident. L'effet Kerr optique entre dans cette catégorie, parfois on assimile même l'effet Kerr à tout phénomène de réfraction non-linéaire. Les causes physiques d'un tel effet peuvent être multiples : Polarisation électronique d'un atome liée au champ incident (Effet Kerr proprement dit), élévation de température liée à l'absorption (Parfois appelé Kerr Thermique), orientation moléculaire en

* Les ordres de grandeur indicatifs sont plutôt de l'ordre de 1% pour un matériau nu et de quelques dizaines de % dans une cavité (dans des conditions a priori incompatibles avec la fonction d'imagerie que nous souhaitons pour un limiteur optique).

♦ Celle là même qui avait été prédite par Einstein en 1907.

réponse au champ incident, effet secondaire d'une nonlinéarité d'ordre deux, migration des électrons en fonction des franges d'interférence du faisceau lumineux (Photorefraction)^[77]... l'auteur de ces lignes ne prétend pas connaître tous les mécanismes physiques menant à une réfraction non-linéaire.

La vitesse et l'importance de l'effet varient beaucoup suivant l'origine physique du phénomène : quelques millisecondes pour certains effets thermiques, quelques femtosecondes pour l'effet Kerr électronique.

La séparation entre réfraction non linéaire et diffusion non linéaire peut parfois être floue : une solution de nanoparticules présentant un effet de réfraction non-linéaire va subitement se transformer en un milieu présentant une diffusion non-linéaire lorsque les nanoparticules vont prendre un indice différent de celui du solvant (limitation par désadaptation d'indice^[78]).

L'absorption saturable inverse est encore un autre effet non-linéaire actuellement employé dans la conception des limiteurs optiques^[79].

Un matériau présentant un effet d'absorption saturable inverse se caractérise par des sections efficaces d'absorption beaucoup plus faibles au niveau fondamental qu'aux niveaux excités.

Considérons les niveaux N1 (Fondamental), N2 et N3* (niveaux excités d'énergie croissante). Lorsque l'on a bien choisi le matériau, l'absorption N1→N2 est très faible et le milieu a un comportement transparent (L'absorption N2→N3 n'intervient pas car N2 est dépeuplé). Par contre, à forte intensité N2 se peuple et permet l'absorption de la lumière incidente par le saut N2→N3. Si le matériau est bien choisi, cette raie d'absorption est très importante et le milieu a alors un comportement opaque.

Encore mieux, si le temps de relaxation du niveau N2 vers N1 est long et le temps de relaxation de N3 vers N2 est court, le niveau N2 reste peuplé durant un flash laser ce qui permet à l'absorption en mode « opaque » de rester élevée durant toute la durée de l'impulsion laser.

Les molécules présentant un effet saturable inverses les plus courantes sont les phtalocyanines, les naphthalocyanines^[71,72], les porphyrines et les fullerènes^[80].

Passons maintenant à l'absorption à deux photons (ADP). C'est un autre phénomène non-linéaire intéressant entrant dans la catégorie de l'absorption non linéaire^[63,64]. Prédit dès 1931 par M. Goepper-Mayer, elle n'est expérimentalement observée qu'en 1961 grâce à l'avènement des lasers. Dans les faits, l'absorption à deux photons est un cas particulier du mécanisme d'absorption multi-photonique ; mais les absorptions à trois photons et plus nécessitant des fluences trop importantes, on ne travaille généralement qu'avec l'ADP.

L'ADP se caractérise par une raie d'absorption intense, liée à la transition entre un état N1 et un état N2. Cette transition doit nécessiter une énergie égale à celle de deux photons incidents. Cette nécessité de deux photons a pour conséquence de rendre l'absorption de cette raie dépendante de l'intensité de l'onde incidente : la probabilité d'absorber n photons est proportionnelle à la puissance n^{ième} de l'intensité lumineuse.

* Dans les faits les molécules présentant un effet saturable inverse utilisent plus que trois niveaux d'énergie. On a ici simplifié pour la clarté de l'explication.

$$\frac{dI}{dz} = -\alpha_1 I_z - \alpha_2 I_z^2 - \dots - \alpha_n I_z^n$$

où I_z est l'intensité suivant l'axe z de propagation et α_n le coefficient d'absorption à n photons.

A faible intensité, l'ADP est quasi inexistant et le matériau transparent. A forte intensité, l'ADP est notable et le matériau opaque.

On peut même améliorer les choses en faisant en sorte qu'il existe un niveau d'énergie N3 tel que la raie d'absorption N2→N3 corresponde à un seul des deux photons nécessaire à N1→N2. On a alors, si la durée de vie de N2 est suffisante, un phénomène d'upconversion qui vient renforcer l'absorption à haute intensité.

Cet effet est bien sûr utilisé pour la limitation optique mais a trouvé d'autres applications, en biologie par exemple^[81,82].

Dernier type d'effet non linéaire que nous traiterons ici, le changement de phase thermique ou la transition de phase.

On a vu plus haut que certains effets de diffusion non linéaire étaient liés à la vaporisation sous l'action de l'intensité incidente. Sans aller jusqu'à la vaporisation, il existe des solides qui changent de phase tout en restant solide et ce en réponse à une élévation de température (sans recourir à un changement de pression). Bien sûr on peut penser aux cristaux qui deviennent des verres lorsque l'on s'approche du point de fusion, mais il existe des cas où un état ordonné se transforme en un autre état ordonné^[83,84]. Le plus surprenant de ces matériaux est certainement le Plutonium qui possède 6 phases solides distinctes^[85] à pression normale (une atmosphère), chacune correspondant à une plage de température (Fig.14).

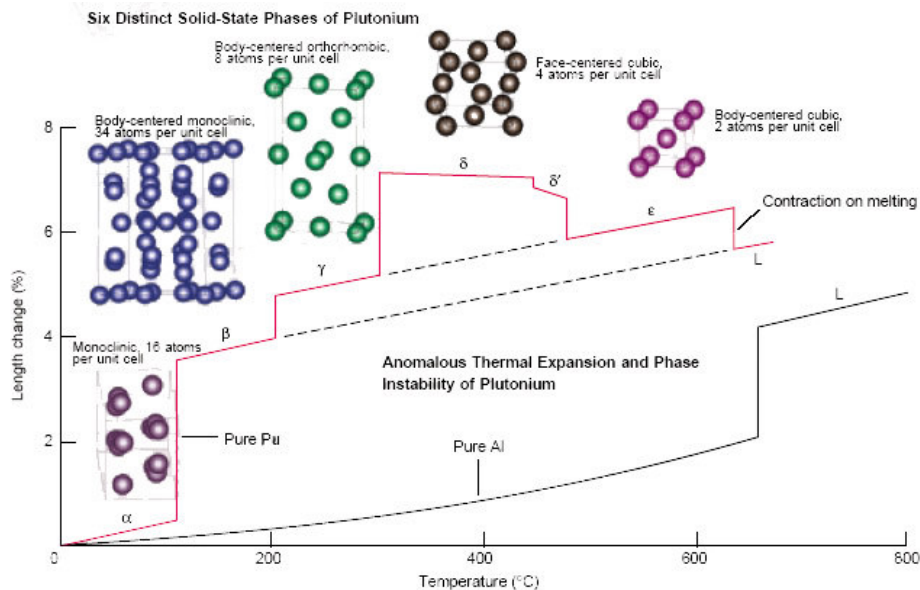


Fig. 14 : Exemple de changement de phase exotique : Les six phases solides à pression normale du Plutonium en fonction de la température. (Tiré de [85])

Les variations de la forme de maille cristalline s'accompagnent de changement dans les propriétés électromagnétiques du matériau telle que sa conductivité, son spectre d'absorption et son indice (il est possible de passer d'un diélectrique à un métal). D'où bien sûr un intérêt en optique non-linéaire.

Habituellement les transitions de phases de ce type se produisent lentement. Mais il existe des cas où la transition peut se produire en 100 femtosecondes. Dans ces conditions, l'échauffement produit par une onde incidente de forte puissance modifie la permittivité du matériau de façon quasi instantanée.

2/ Focalisation sur l'effet Kerr et sur le changement de phase thermique

Nous avons énuméré les différents effets non-linéaires susceptibles d'intérêt dans le cadre de la limitation optique.

Les effets liés à la conversion de fréquence ont été écartés car ne présentant pas un rendement suffisant. Il reste à trouver quels sont les effets restants qui sont compatibles avec une utilisation en conjonction avec un cristal photonique.

Tout ce qui était liquide ou gazeux a été écarté car jugé trop compliqué à ordonner dans l'espace.

La propriété jugée la plus intéressante du cristal photonique étant sa bande interdite, nous avons eu l'idée de la faire se déplacer en fonction de l'intensité incidente. Ceci passait par la modification de l'indice en fonction de l'intensité, donc des effets de réfraction non linéaire ou de transition de phase d'origine thermique. Ces deux effets existent sous des formes rapides et sont donc adaptés à une protection optique contre des lasers impulsionsnels (L'Effet Kerr et certains matériaux exotiques à transition de phase fournis par la société Thalès Optronique voient leur indice se modifier en quelques femtosecondes).

On s'est donc focalisé durant cette thèse sur ces deux effets.

L'ADP et l'absorption saturable inverse pourraient sans doute aussi gagner à être étudiées lorsque utilisées en conjonction avec un cristal photonique. L'exaltation du champ que présente une structure en CP sur les bords de la bande interdite renforcerait sans doute ces effets non linéaires. Toutefois ceci dépassait le cadre de la thèse.

L'apparition de nanotubes de carbones sous forme solide et non plus en suspension dans un liquide permet d'envisager leur utilisation dans un cristal photonique lorsque les effets non-linéaires liés à ces tubes seront bien compris. Mais là aussi, cela dépassait le cadre de cette thèse.

Nous en resterons aux deux effets sélectionnés plus haut.

D / Les méthodes de simulation disponibles pour un cristal photonique.

Il n'existe pas qu'une seule façon de simuler le comportement d'un cristal photonique. Plusieurs méthodes très différentes existent, avec chacune leurs avantages et leurs inconvénients.

1/ La méthode des ondes planes (PWM en anglais)

Il s'agit là de la méthode la plus populaire pour calculer les bandes d'un cristal photonique 2D ou 3D. Inspirée de la méthode de calcul de bande utilisée en physique du solide pour les matériaux à bande interdite électronique, elle est basée sur la décomposition de la permittivité et des ondes de Bloch sur une base de Fourier utilisant les vecteurs réciproques du cristal.

Les équations de Maxwell appliquées à des champs harmoniques de fréquence ω amènent à l'équation d'onde :

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Cette équation une fois projetée dans la base de Fourier se ramène à un système linéaire dont on cherche les valeurs propres. Le problème est de dimension $2N \times 2N$ pour une description utilisant N ondes planes. Le lecteur intéressé par la théorie détaillée de la méthode pourra consulter par exemple la référence [86].

On différencie la méthode directe de la méthode Ho-Chan-Soukoulis^[87]. La première consiste à calculer directement l'inverse de la permittivité en espace réel puis d'en faire la transformée de Fourier. L'autre méthode consiste à faire la transformée de Fourier de la permittivité puis à inverser la matrice obtenue. Il est à noter que la méthode de Ho permet une bien meilleure convergence^[88].

Limitée à l'obtention des diagrammes de bande, elle ne peut pas fournir des valeurs telles que la transmission ou la réflexion. Par contre elle est très rapide.

Originellement limitée aux cristaux photoniques infinis et réguliers, elle peut traiter les cas désordonnés^[89,90,91,92,93] via l'utilisation d'une supercellule : au lieu de considérer la maille élémentaire du réseau, on prend une maille plus grande qui contient plusieurs motif défectueux. Cette supermaille ou supercellule est alors considérée comme la maille élémentaire d'un supercristal photonique et on lui applique la méthode des ondes planes habituelle. Mais attention, l'utilisation de supercellules force à utiliser un plus grand nombre d'ondes planes, donc force à traiter des matrices plus grandes et fait perdre son atout principal à cette méthode : sa vitesse.

Toutefois le traitement d'un guide d'onde complet par le biais d'une supercellule n'est pas impossible^[94,95].

2/ La FDTD

Abordons tout de suite la méthode la plus communément utilisée actuellement dans les simulations de structures complexes faces à des ondes électromagnétiques, il s'agit de la FDTD^[96] ou Finite Difference Time Domain.

Issue de l'algorithme présenté par Yee^[97] en 1966 cette méthode revient à mailler finement l'intégralité de la structure ainsi qu'une partie du vide qui l'entoure puis à appliquer les équations de Maxwell discrétisées dans le temps et l'espace en chaque point du maillage afin d'obtenir l'évolution temporelle du champ en réponse à une excitation donnée. Les autres points importants de la méthode sont un artefact mathématique se comportant comme la source d'une onde électromagnétique et des conditions sur les bords de l'espace maillé qui empêchent toute réflexion (On utilise couramment la condition de Bérenger^[98], plus connue sous le nom de PML pour Perfectly Matched Layer). Extrêmement versatile cette méthode peut en théorie traiter tous les problèmes (de l'Airbus complet^[99] au coupleur optronique), d'où sa popularité dans les laboratoires de R&D. Elle traite les matériaux linéaires comme non linéaires et fournit les cartes de champ, la transmission et les diagrammes de rayonnement.

Elle souffre toutefois de deux handicaps : le maillage devant être précis nous sommes très vite menés à des occupations mémoires gigantesques. La réponse fournie étant une évolution temporelle, il faut de nombreux cycles de calculs avant d'atteindre le régime permanent qui caractérise par exemple la réponse à une onde monochromatique. Ce dernier point peut se contourner en récupérant la réponse impulsionnelle et en lui appliquant une transformée de Fourier, mais même ainsi les temps de calculs demeurent très longs. La FDTD se prête très bien à une exécution en parallèle sur plusieurs processeurs comme dans un supercalculateur ou dans une grappe (plus couramment appelée « cluster ») ce qui devrait encore augmenter sa popularité dans les années à venir car de grands progrès sont actuellement fait dans ce domaine. Mais la FDTD peine à simuler rapidement des cristaux photoniques de forme non triviale non linéaires 2D (et encore moins 3D) sur un ordinateur individuel contemporain.

3/ La FDTD d'ordre N

Pour pallier au temps de calcul prohibitif et à la quantité de RAM nécessaire à l'emploi de la FDTD pour la simulation des cristaux photoniques, A. Ward et Pendry ont perfectionné la FDTD d'ordre N^[100] pour en faire une méthode adaptée au problème^[101].

Le principe est de ne traiter via la FDTD qu'une seule maille du cristal photonique et d'appliquer des conditions aux limites tirées des modes de Bloch. La complexité du programme est alors grandement diminuée.

Cette méthode aurait la réputation d'être plus rapide que la méthode des ondes planes pour le calcul des bandes.

Sakoda^[102] a réussi à perfectionner la méthode la rendant capable de traiter les cas de taille finie^[102] et les structures à défaut^[103].

4/ La Multiple Scattering Method (MSM)

La MSM (Matrix Scattering Method) permet de traiter le cas d'un groupe de tiges (ou de sphères dans le cas 3D) sans contraintes sur leurs tailles / positions / compositions. Cette méthode permet donc la simulation de tous les cristaux photoniques 2D à base de cylindres avec une immense souplesse : le désordre^[104], les cavités^[105], les géométries complexes sont permises. Les cylindres n'ont même pas à être parfaitement cylindriques. La méthode n'est pas temporelle mais fréquentielle : elle donne tout de suite la réponse à l'illumination par une onde monochromatique et est de ce fait beaucoup plus rapide que la FDTD.

Le défaut actuel de la méthode est son incapacité à traiter le cas de cylindres inhomogènes ainsi que le fait que l'on traite toujours le cas d'un nombre fini de cylindres et donc de cristaux photoniques de dimensions finies.

La méthode^[106,107,108] repose sur une décomposition des champs dans une base de Fourier-Bessel ce qui permet de ramener le calcul du champ total à une inversion de matrice.

Les résultats fournis sont la carte de champ ainsi que la transmission/réflexion de l'objet.

Nous donnons une description plus détaillée de cette méthode au paragraphe II.B.1.

5/ La méthode des fonctions localisées

Cette méthode a été conçue afin d'optimiser les calculs dans des guides d'ondes créés dans des cristaux photoniques. Elle n'a pas pour but d'étudier un cristal photonique dénué de guide d'onde.

Il existe deux versions de cette méthode. La première version^[109] consiste d'abord à trouver les modes de Bloch du cristal photonique dénué de défaut en utilisant par exemple la méthode des ondes planes puis de construire une base avec des fonctions de Wagner adaptée à ce cristal. Une fois la base trouvée, on peut y exprimer le cristal photonique avec son guide d'onde en utilisant peu de coefficients et sans recourir aux supercellules^[110,111].

La deuxième version de cette méthode utilise une base de fonction prédéfinie, les fonctions de Gauss-Hermite. Elle est utilisée dans le cadre des fibres à cristaux photoniques^[112,113,114].

6/ La BPM ou Beam Propagation Method

La BPM est une méthode qui a fait ses preuves dans la simulation des faisceaux optiques. Très peu gourmande en puissance de calcul et simple à mettre en œuvre c'est aujourd'hui un produit commercial très utilisé dans le domaine des fibres optiques.

La théorie se base sur l'approximation d'une enveloppe lentement variable le long de l'axe de propagation. L'étude n'est possible que pour des faisceaux très peu divergents, l'acceptance angulaire de la méthode étant faible.

L'approximation de variations faibles le long de l'axe de propagation s'accommode mal de la géométrie d'un cristal photonique où la permittivité subit des variations très rapides et contrastées. Pourtant, via une approximation de Padé, on a réussi à adapter

la méthode à un cristal photonique 2D présentant un guide d'onde « coudé » brutalement^[115].

7/ La décomposition en modes propres ou Méthode modale.

Cette méthode^[116] est elle aussi dédiée à des structures où il existe une direction privilégiée de propagation. Elle est donc bien adaptée à des guides d'onde et a une tolérance aux angles plus importante que la BPM.

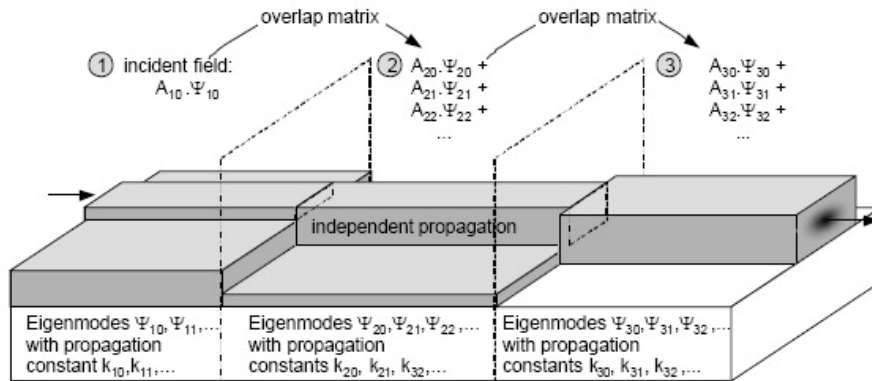


Fig. 15: Exemple d'un guide d'onde traité par la méthode modale. Source : Photon Design.

La configuration la plus attractive pour cette méthode est lorsque l'objet peut être décomposé en zones où l'indice est jugé invariant selon la direction de propagation. Les modes propres de chaque zone sont alors calculés et adaptés entre eux aux interfaces entre zones (Fig. 15 et 16). La structure elle-même est placée entre deux couches de matériau PML (décrit plus haut dans la partie dédiée à la FDTD) ce qui permet de simuler une structure ouverte^[117] et non infinie.

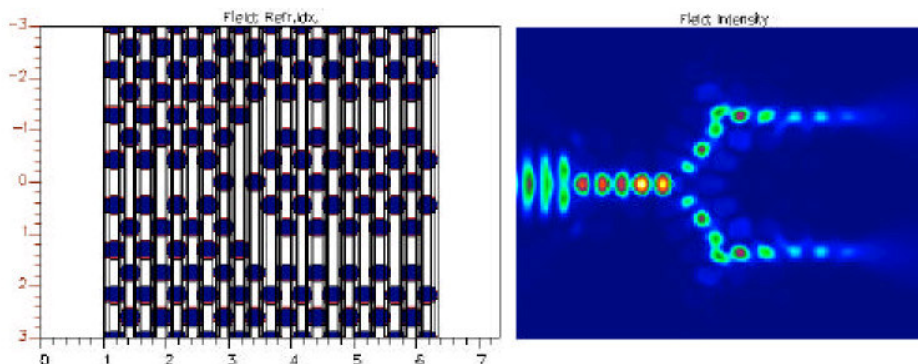


Fig. 16: Exemple de jonction Y à base de CPs traité par la méthode modale. Source Photon Design.

Cette méthode a donné naissance au logiciel FIMMPROP-3D de la société Photon Design ainsi qu'au programme libre de droit CAMFR*.

* CAMFR :Cavity Modeling Framework. Disponible auprès de l'université de Ghent.

8/ La FFF ou Fast Fourier Factorization.

Avancée relativement récente de la méthode différentielle (travaux des Prof. M. Nevière et E. Popov^[118], de l'Institut Fresnel à Marseille). Cette méthode est basée sur l'algorithme S (Voir le II.C.1b) qui permet de traiter le cas d'objets épais ainsi que sur les règles de calcul de Lifeng Li^[119] qui permettent la convergence dans les cas difficiles (polarisation TM et/ou forts contrastes d'indices). La nouveauté remarquable de la FFF est l'utilisation d'une base mobile épousant la normale à la surface des inclusions du cristal photonique ce qui permet de profiter du cas le plus favorable des règles de Li en tout point d'un profil diélectrique quelconque. La convergence s'en trouve fortement améliorée^[118].

Le principe est détaillé au chapitre II.C.1. de ce mémoire de Thèse. Nous nous bornerons ici à préciser que le cristal photonique est découpé en tranches dont on va calculer les matrices de transfert.

Capable de traiter tous les types de cristaux photoniques possédant deux dimensions infinies et une troisième forcément finie, son avantage principal est sa rapidité. Moins souple que la MSM, elle ne permet pas, par contre, de traiter les cas désordonnés ou les géométries très exotiques.

9/ La RCWA ou Rigorous Coupled Wave Analysis (Aussi appelée Fourier Modal Method)

Evolution de la méthode différentielle au même titre que la FFF, cette méthode a commencé à se répandre dans les années 1980^[120, 121]. Elle est aussi appelée « Méthode Fourier Modale »^[122].

Elle repose sur le découpage en tranches de l'objet à simuler et à son approximation en escalier : on considère que dans une tranche, ϵ_r est constant le long de l'axe z choisi proche de l'axe de propagation (Fig 17).

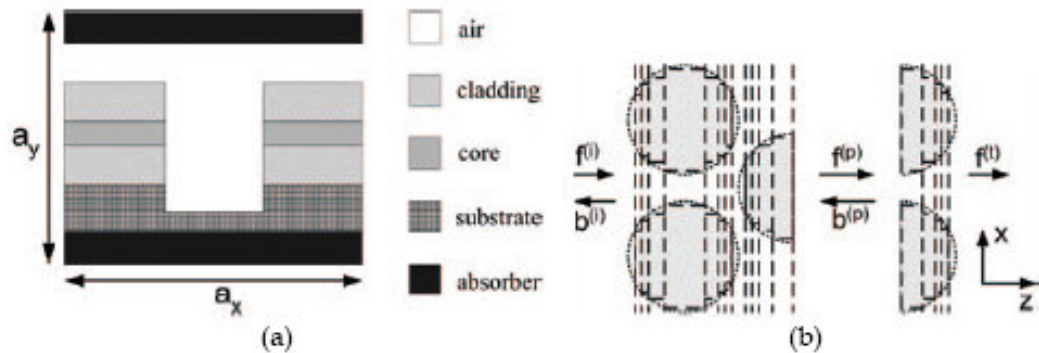


Fig. 17: Exemple de découpage de la permittivité avant application de la RCWA (tiré de [Lalanne 2000])

L'équation différentielle qui relie le champ entre les deux faces de la tranche peut alors être mise sous la forme :

$$\frac{d[F(y)]}{dy} = M.F(y)$$

L'intérêt est que M est ici indépendant de y (contrairement à la méthode FFF). L'intégration est alors mathématiquement très simple : les fonctions solutions sont de la forme $\exp(M)$.

Cette connaissance des solutions, alliée à la « shooting method », permet de résoudre le problème électromagnétique et fournit la matrice de transfert de chaque tranche. La méthode récursive S décrite au chapitre II.C.1.b. permet d'empiler ces matrices de transfert et d'obtenir la fonction de transfert de l'objet complet (La multiplication directe des matrices de transfert entre elles mène à une instabilité numérique).

La méthode RCWA est efficace en polarisation $TE^{[123,124]}$ mais son approximation systématique des profils de permittivité par un profil en escalier^[125] ne lui permet pas d'être aussi efficace que la FFF en polarisation $TM^{[126]}$.

Les objets qu'elle peut simuler sont semblables à ceux traités par la FFF^[127].

Il est à noter qu'une convergence des deux méthodes a eu lieu. La RCWA ayant intégré les « plus » de la FFF^[128].

10/ La TMM ou Transfert Matrix Method.

Développée par Pendry et McKinnon^[129] c'est une méthode aux différences finies dans le domaine fréquentiel : elle repose sur la discrétisation des équations de Maxwell pour des champs électromagnétiques en $e^{i\omega t}$.

Au lieu de passer en espace de Fourier comme dans la FFF ou la RCWA, on reste ici en espace réel et l'on détermine la matrice de transfert de chaque fine « tranche » de notre cristal photonique.

Le calcul de la matrice de transfert de l'ensemble se fait via un algorithme récursif : la méthode S .

La méthode fournit bien sûr la transmission et la réflexion du cristal mais aussi les modes de Bloch via la détermination des valeurs propres de la matrice de transfert.

Le maillage était à l'origine cartésien, mais une méthode de transformation des coordonnées donne aujourd'hui de meilleurs résultats^[130].

Le code est disponible librement sous le nom de *Translight*, et la méthode est largement utilisée^[131,132,133,134,135].

11/ La Méthode des éléments finis ou FEM.

Cette méthode très utilisée en électromagnétisme^[136,137] peut être appliquée à l'étude des cristaux photoniques, de dimension finie ou non, via l'emploi de conditions aux limites absorbantes ou miroir. Elle se révèle toutefois assez lente et est peu employée pour les CPs. Elle est par contre un outil de choix dans l'étude des métamatériaux : L'utilisation de maillage très petit devant la longueur d'onde permet à des logiciels commerciaux comme HFSS^[138] de traiter par exemple les métamatériaux à base de pistes de cuivre dans le domaine micro-onde^[139].

Conclusion de la première partie

Nous avons survolé dans cette partie la nature des cristaux photoniques, leurs propriétés ainsi que les usages actuels et à court terme de tels objets.

L'intérêt de la protection optique (appelée limitation optique) et les méthodes actuellement utilisées ont aussi été abordés. Il apparaît face aux menaces actuelles qui deviennent de plus en plus crédibles tant en probabilité d'utilisation (les cas se multiplient) qu'en dangerosité (augmentation des puissances, agilité en fréquence, apparition de lasers impulsionnels) que les effets non linéaires soient incontournables. Eux seuls sont assez rapides pour se protéger d'impulsions nanosecondes via un auto-déclenchement ne nécessitant pas l'intervention d'une électronique de commande.

La panoplie des effets non linéaires utilisés ou à l'étude dans le cadre de la limitation optique a aussi été parcourue. Deux effets, l'effet Kerr et la transition de phase thermique ont été sélectionnés pour être associés à l'utilisation d'un cristal photonique. Le but est bien sûr d'obtenir une protection encore meilleure que celle actuellement disponible.

L'objectif de cette thèse est ainsi de coupler des effets non-linéaires à un CP afin d'aboutir à un limiteur optique performant.

Enfin, la liste des méthodes de simulation de cristaux photonique a été dressée. Nous verrons dans la partie suivante qu'aucune ne nous convenait et qu'il a fallu développer de nouvelles méthodes.

Bibliographie du chapitre I

- ¹ Lord Raleygh, "On the optical character of some brilliant animal colours", *Phil. Mag.* 6th ser. ,37, 98-111, 1919.
- ² H. onslow, « on a periodic structure in many insect scales and the cause of their iridescent colours », *Phil. Trans. B*, 211, 1-74, 1921
- ³ Lord Rayleigh (Junior), « Studies of iridescent colour and the structure producing it. IV, iridescence beetles », *Proc. Roy. Soc. A* 103, 233-9, 1923.
- ⁴ J.V. Sanders, "Diffraction of light by opals" *Acta Crst.* A24, 427-434, 1968
- ⁵ R.M. Strong « The metallic colour of feathers from the neck of the domestic pigeon », *Biol. Bull. Woods Hole* 3, 85-7, 1902.
- ⁶ A. Michelson, "On the metallic colouring in birds and insects", *Phil. Mag.* 6th ser., 21, 554-67, 1911
- ⁷ W. Biederman, « Farbe und Zeichnung des insecten », *Handbuch des l'ergleichenden Physiologie*, Teil II, pp 1657-1994 (Verlag von Gustav Fischer, Jena, 1914)
- ⁸ A.G. Mayer "On the colour and colour pattern of moths and butterflies" *Bull. Mus. Comp. Zool. Harv.* 30, 169-259, 1897
- ⁹ H. Kalmus, "Physiology and ecology of cuticle colour in insects", *Nature* 148, 428-431, 1941
- ¹⁰ A.C. Neville, *Biology of arthropod cuticle* (McGraw-Hill, New-York, 1975)
- ¹¹ A.R. Parker, R.C. McPhedran, D.R. McKenzie, L.C. Botten, N. Nicorovici, "Photonic engineering aphrodite iridescence", *Nature* 409, 36-37, 2001.
- ¹² R.C. McPhedran, N. Nicorovici, D.R. McKenzie, L.C. Botten, A.R. Parker, G. W. Rouse, "The sea mouse and the photonic crystal", *Aust. J. Chem.* 54, 241-244, 2001.
- ¹³ P.Vukusic, J.R. Sambles, C.R. Lawrence, R.J. Wootton, « Quantified interference and diffraction in single morpho butterfly scales" *Proceedings Bio. Sciences, The Royal Society of London* 266, 1403-1411, 1999.
- ¹⁴ P. Vukusic and J.R. Sambles, "Shedding light on butterfly wings", *Proceedings of SPIEE* 4438, 85-95, 2001.
- ¹⁵ S. Berthier, « Les couleurs des papillons ou l'imperative beauté » (Springer-Verlag France, 2000)
- ¹⁶ H.Tada, S. Mann, I. Miaoulis, P. Wrong, « Effects of a butterfly scale microstructure on the iridescent colour observed at different angles », *Opt. Express* 5, 87, 1999.
- ¹⁷ B. gralak, G. Tayeb, S. Enoch, "Morpho butterflies wing colour modelled with lamellar grating theory", *Opt. Express* 9, 568-578, 2002.
- ¹⁸ E. Yablonovitch, *Phys. Rev Lett.* 58 (1987) 2059.
- ¹⁹ E. Yablonovitch, T. J. Gmitter , K. M. Leung, "Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms", *Phys. Rev. Lett.* 67, 2295–2298 (1991)
- ²⁰ S. John, *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987) 2059.
- ²¹ "Photonic Band Using Vector Spherical Waves. I. Various Properties of Bloch Electric Fields and Heavy Photons". *Journal of the Physical Society of Japan.* Vol. 65 No. 7, July, 1996 pp. 2265-2275

-
- ²² M. Notomi, "Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals : refractionlike behaviour in the vicinity of the photonic gap" *Phys. Rev. B.* 62, 10696-10705 (2000)
- ²³ N. Seddon, T. Bearpark, "Observation of the inverse Doppler effect" *Science* 302, 1537-1540 (2003)
- ²⁴ E.J. Reed, M. Soljacic, J.D. Joannopoulos "Reversed Doppler effect in photonic crystals", *Phys. Rev. Lett* 91, 133901 (2003)
- ²⁵ C. Luo, M. Ibanescu, G. Johnson, J.D. Joannopoulos, "Cerenkov radiation in photonic crystals" *Science* 299, 368-371 (2003)
- ²⁶ R. A. Shelby, D.R. Smith, S. Schultz, "Experimental verification of a negative index of refraction", *Science* 292, 77-79 (2001).
- ²⁷ S. Foteinopoulou, C. M. Soukoulis, "Negative refraction and left handed behaviour in two dimensional photonic crystals", *Phys. Rev. B* 67, 235107 (2003)
- ²⁸ P. A. Belov, R. Constantin, R. Simovski, P. Ikonen, "Canalization of subwavelength images by electromagnetic crystals", *Phys. Rev. B* 71, 193105 (2005)
- ²⁹ A. Martinez, J. Marti, "Analysis of wave focusing inside a negative photonic crystal slab" *Opt. Express* 13, 2858 (2005)
- ³⁰ C. Luo, S.G. Johnson, J. D. Joannopoulos, J.B. Pendry "All negative refraction without negative effective index" *Phys. Rev. B* 65 201104 (2002)
- ³¹ Z. Tang, R. Peng, D. Fan, S. Wen, H. Zhang, and L. Qian, "Absolute left-handed behaviors in a triangular elliptical-rod photonic crystal," *Opt. Express* 13, 9796-9803 (2005)
- ³² R. Moussa, S. Foteinopoulou, Lei Zhang, G. Tuttle, K. Guven, E. Ozbay and C. M. Soukoulis, "Negative refraction and superlens behavior in a two-dimensional photonic crystal," *Phys. Rev. B* 71, 085106 (2005)
- ³³ « Photonic Crystal, Molding the flow of light » de J.D. Joannopoulos.
- ³⁴ R. Wang, X. Wang, B. Gu, G. Yang, "Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals", *Journal of Applied Physics*, Volume 90, Issue 9, pp. 4307-4313.
- ³⁵ "Optical Properties of Photonic Crystals," by K. Sakoda, Springer Verlag, 2001.
- ³⁶ "Photonic Band Gap Materials: Towards an All-Optical Micro-Transistor", Sajeev John and Marian Florescu, *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* 3, S103 (2001).
- ³⁷ J. Vuckovic, M. Loncar, H. Mabuchi, and A. Scherer, "Optimization of the Q Factor in Photonic Crystal Microcavities," *IEEE J. Quantum Electron.* 38, 850-856 (2002)
- ³⁸ Y. Nakamura, H. Nakamura, S. Ohkouchi, N. Ikeda, Y. Sugimoto and K. Asakawa, "Selective formation of high-density and high-uniformity InAs/GaAs quantum dots for ultra-small and ultra-fast all-optical switches," *In Proc. 29th Int. Symp. Compound Semiconductors*, Lausanne, Switzerland, 174, 133 (2002).
- ³⁹ T. Hattori, N. Tsurumachi, and H. Nakatsuka, "Analysis of optical nonlinearity by defect states in one-dimensional photonic crystals," *J. Opt. Soc. Am. B* 14, 348- (1997)
- ⁴⁰ L. J. Guo, X. Cheng, and C. Y. Chao, "Fabrication of photonic nanostructures in NLO polymer," *J. Modern Optics*. Vol. 49, pp. 663-673, 2002.
- ⁴¹ "Nonlinear photonic crystals, Toward all-optical technologies", S. Mingaleev, Y. Kivshar, *Optics & Photonics news* July 2002.

-
- 42 "Nanoscale quantum dot infrared sensors with photonic crystal cavity", K. T. Posani, V. Tripathi, S. Annamalai, N. R. Weisse-Bernstein, S. Krishna, R. Perahia, O. Crisafulli, and O. J. Painter, *Appl. Phys. Lett.* 88, 151104 (2006)
- 43 "Self-Referenced Assay Method for Photonic Crystal Biosensors: Application to Small Molecule Analytes," L.L. Chan, P.Y. Li, D. Puff, and B.T. Cunningham, *Sensors and Actuators B*, Accepted, February, 2006
- 44 A. Chutinan, M. Mochizuki, M. Imada and S. Noda, "Surface-emitting channel drop filters using single defects in two-dimensional photonic crystal slabs", *Applied Physics Letters* Vol. 79 No. 17, pp.2690-2692 (2001)
- 45 AS Jugessur, P. Pottier, and R. M. De La Rue, "Engineering the filter response of photonic crystal microcavity filters," *Optics Express*, Vol. 12, No 7, (2004)
- 46 "Highly directive light sources using two-dimensional photonic crystal slabs" Anne-Laure Fehrembach, Stefan Enoch, and Anne Sentenac, *Appl. Phys. Lett.* Vol 79, 26, (2001)
- 47 S. H. Kwon, H. Y. Ryu, G. H. Kim, Y. H. Lee, and S. B. Kim, "Photonic bandedge lasers in two-dimensional square-lattice photonic crystal slabs," *Appl. Phys. Lett.* 83, 3870-3872 (2003).
- 48 H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami, "Superprism phenomena in photonic crystals," *Phys. Rev. B* 58, 10096-10099, (1998).
- 49 T. Baba and T. Matsumoto, "Resolution of photonic crystal superprism," *Appl. Phys. Lett.* 81, 2325-2327 (2002).
- 50 V.G. Veselago, « The electrodynamics of substances with simultaneously negatives values of ϵ and μ », *Sov. Phys. Usp.* 10, 509-514, 1968
- 51 J.B. Pendry, "Negative refraction makes a perfect lens", *Phys. Rev. Lett.* Vol 85, 18, (2000)
- 52 "Imaging by Flat Lens using Negative Refraction", P. V. Parimi, W. T. Lu, P. Vodo, and S. Sridhar, *Nature*, 426, 404 (2003)
- 53 "Removal of absorption and increase in resolution in a near-field lens via optical gain", S. Anantha Ramakrishna and J. B. Pendry, *Phys. Rev. B* 67, 201101(R) (2003)
- 54 "Hexagonally Poled Lithium Niobate: A Two-Dimensional Nonlinear Photonic Crystal", N. G. R. Broderick*, G. W. Ross, H. L. Offerhaus, D. J. Richardson, and D. C. Hanna, *Phys. Rev. Lett.* 84, 4345-4348 (2000)
- 55 N. G. R. Broderick, R. T. Bratfalean, T. M. Monroe, D. J. Richardson, and C. M. de Sterke, "Temperature and wavelength tuning of second-, third-, and fourth-harmonic generation in a two-dimensional hexagonally poled nonlinear crystal," *J. Opt. Soc. Am. B* 19, 2263-2272 (2002)
- 56 A. Norton and C. de Sterke, "Two-dimensional poling patterns for 3rd and 4th harmonic generation," *Opt. Express* 11, 1008-1014 (2003)
- 57 TA Birks, JC Knight, and PSJ Russell, "Endlessly single-mode photonic crystal fiber," *Opt. Lett.* 22, 961-963 (1997)
- 58 J. K. Ranka, R. S. Windeler, and A. J. Stentz, "Visible continuum generation in air silica microstructure optical fibers with anomalous dispersion at 800nm," *Opt. Lett.* 25, 25-27
- 59 H. Lim, FO Ilday, and FW Wise, "Femtosecond ytterbium fiber laser with photonic crystal fiber for dispersion control," *Opt. Exp.* 10, 1497-1502 (2002)
- 60 S. Rajic and P.G. Datskos, "Feasibility of tunable MEMS photonic crystal devices" *Ultramicroscopy* 97, 473-479 (2003).

-
- ⁶¹ Le premier colloque international sur le sujet à eu lieu en Juillet 1998 à Cannes.
- ⁶² R.C.C Leite, S.P.S. Porto, P.C. Damen, "The thermal lens effect as a power limiting device" Appl. Phys. Lett. 10, 100, (1967)
- ⁶³ J.M. Ralston, K.R. Chang, "Optical limiting in semiconductors", Appl. Phys. Lett. 15,164, (1969)
- ⁶⁴ J.L. Bredas, T. Kogej, D. Beljonne, S.R. Marder, "Mechanism for enhancement of two photons absorption in donor-acceptor conjugated cromophore" Journal of Non Linear Optics (1998)
- ⁶⁵ M.J. Soileau, S. Guha, E. William, E. W. Van Stryland, J.L.W. Pohlmann, E.J. Sharp, G. Wood, "Studies of the non linear switching properties of Liquid Crystal with picosecond pulses", Mol. Cryst. Liq. Cryst., 127, 321, (1985)
- ⁶⁶ I.C. Khoo, S.L. Zhuang, S. Shepard, "Self focusing of low power cw laser beam via optically induced birefringence in nematic liquid crystal film", Appl. Phys. Lett. 39, 937, (1981)
- ⁶⁷ K.M. Nashold, R.A. Brown, D.P. Walter, R.C. Honey, SPIE 1105, 78, (1989)
- ⁶⁸ F. Fougeanet, D. Rhiel, "Investigation on limiting mechanisms in carbon black suspensions", Journal of Non Linear Optics (1998).
- ⁶⁹ N. Venkatram, D. N. Rao, and M. A. Akundi, "Nonlinear absorption, scattering and optical limiting studies of CdS nanoparticles," Opt. Express 13, 867-872 (2005)
- ⁷⁰ C. R. Guliano, L.D. Hess, "Nonlienaar absorption of light: Optical saturation of electronic transitions in organic molecules with high intensity laser radiation ", IEEE, J. of. Quant. Electron., QE-3, 358-367, (1967)
- ⁷¹ D.R. Coulter, V.M. Miskowsky, J.W. Perry, T.H. Wei, E.W Van Stryland, D.J. Hagan, "optical limiting in solutions of Metallo-Phtalocyanines and Naphtalocyanines" Proceedings of SPIE, vol. 1105, Materials for optical switches isolators and limiter, 42-51, 1989
- ⁷² J.S. Shirk, R.G.S Pong, F. J. Bartoli, A.W Snow, "Optical limiter using a lead Phtalocyanine", Appl. Phys. Lett. 63, 1880, (1993)
- ⁷³ « One dimensional photonic crystal optical limiter », Boon Yi Soon, Joseph W. Hauss, Michael Scarola, Concita Sibilila, Optics Express, Vol 11, 17, pp2007-2018, (August 2003)
- ⁷⁴ Delphine Wolfersberger : *Etude expérimentale et théorique de l'auto-focalisation photoréactive d'une impulsion laser pour application à la limitation optique*, These soutenue à l'Université de Metz le 27 Avril 1999.
- ⁷⁵ L. Vivien, D. Riehl, P. Lanon, F. Hache, and E. Anglaret, "Pulse duration and wavelength effects on the optical limiting behavior of carbon nanotube suspensions ," Opt. Lett. 26, 223-225 (2001)
- ⁷⁶ Comme exemple : la thèse de Mr. Nicolas Izard soutenue en 2004 à l'université de Montpellier sur crédits DGA et intitulée « Nanotubes de Carbone : Systèmes pour la limitation optique »
- ⁷⁷ Photorefractive materials and effects for photonics, V I Vlad et al 2003 J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 5 doi:10.1088/1464-4258/5/6/E01
- ⁷⁸ V. Joudrier, P. Bourdon, F. Hache, C. Flytzanis, "Nonlinear light scattering in a two-component medium: optical limiting application," Appl. Phys. B 67, 627-632 (1998).
- ⁷⁹ « One dimensional photonic crystal optical limiter », Boon Yi Soon, Joseph W. Hauss, Michael Scarola, Concita Sibilila, Optics Express, Vol 11, 17, pp2007-2018, (August 2003)

-
- ⁸⁰ LW Tutt, A. Kost: Nature 356, 225 (1992)
- ⁸¹ W. Denk, J.H. Strickler, and W.W. Webb. Two-photon laser scanning fluorescence microscopy. Science, 248:73–76, April 1990.
- ⁸² F. Helmchen and W. Denk. Deep tissue two-photon microscopy. Nature Methods, 2, December 2005
- ⁸³ "Phase transitions in rubidium hydrogen sulfate: crystal structures at 293 and 200 K", Nalini, G and Row, Guru TN (2003), Phase Transitions: A Multinational Journal 76(11):pp. 923-934.
- ⁸⁴ "Low temperature phase transitions and crystal structure of Na_{0.5}CoO₂" Q Huang et al 2004 J. Phys.: Condens. Matter 16 5803-5814
- ⁸⁵ "Plutonium: An element at odds with itself," *Los Alamos Science* 26 (2000): 16-23, on 16
- ⁸⁶ Progress In Electromagnetic Research 41 (PIER 41) edité en 2002 par J Kong, A Priou et T. Itoh. Se rapporter au chapitre "Study on Bandwidth of 2-D Dielectric PBG Material"
- ⁸⁷ K.M. Ho, C.T. Chan, C.M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 3152.
- ⁸⁸ P.R. Villeneuve, M. Piché, Prog. Quantum Electron. 18 (1994) 153.
- ⁸⁹ M.M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C. T. Chan, D. Turner, Phys. Rev. B, Vol 53, 8340, 1996.
- ⁹⁰ S. Fan, P. R. Villeneuve, J.D. Joannopoulos, Journal of Applied Physics Vol 78, 1415, 1995
- ⁹¹ H.Y. Ryu, J.K. Hwang, Y.H. Lee, Phys. Rev. B vol 59, 5463, 1999.
- ⁹² A. Chutinan, S. Noda, Journal of the Optical Society America B, vol 16, 240, 1999.
- ⁹³ Z. Y. Li, X. Zhang, Z. Q. Zhang, Phys. Rev. B, vol 61, 15738, 2000.
- ⁹⁴ S.G. Johnson, "Guided mode in photonic crystal slabs", phys. Rev. B 60, (1999), 5751.
- ⁹⁵ S. Kuchinsky "3D localization in a channel waveguide in a photonic crystal with 2D periodicity", Opt. Comm. 75 (2000) 145.
- ⁹⁶ A. Taflov, « Computational Electrodynamics : The finite difference time domain method », Norwood, MA: Artech House 1995
- ⁹⁷ K.S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problem involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Trans Antennas Propagation, Vol 14, pp 302-307, 1966.
- ⁹⁸ J.-P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Comput. Phys.*, vol. 114, no. 1, pp. 185-200, 1994
- ⁹⁹ Présentation EADS « Les apports du calcul haute performance pour la modélisation des phénomènes de propagation d'onde » faite au GDR Ondes de 2003 à Marseille.
- ¹⁰⁰ Chen C.T, Yu Q.L., Ho K.M., « Order N spectral method for electromagnetic waves » Phys. Rev. B, 51 (1995), 16635.
- ¹⁰¹ A.J. Ward, J.B. Pendry "A program for calculating photonic band structures, Green's functions and transmission/reflection coefficients using a non-orthogonal FDTD method". Comput. Phys. Commun. 128, (2000), 590.
- ¹⁰² K. Sakoda, J. Kawamata, Opt. Express 3 (1998) 12.
- ¹⁰³ K. Sakoda, H. Shiroma, Phys. Rev. B 56 (1997) 4830.
- ¹⁰⁴ Guida G. Optics Communications, Volume 156, Number 4, 15 November 1998, pp. 294-296(3)

- ¹⁰⁵ E. Centeno, D. Felbacq “Optical bistability in finite-size nonlinear bidimensional photonic crystals doped by a microcavity” *Phy. Rev. B*, 62(12), 2000, 7683(4)
- ¹⁰⁶ D. Felbacq, G. Tayeb and D. Maystre, *J. opt. Soc. Am. A/ Vol. 11/* (1994).
- ¹⁰⁷ G. Tayeb, D. Maystre, « Rigorous theoretical study of finite-size two dimensional photonic crystals doped by microcavities”, *J. Opt. Soc. Am. A* 14, (1997) 3323.
- ¹⁰⁸ E. Centeno, D. Felacq « Rigorous vector diffraction of electromagnetic waves by bidimensional photonic crystals”, *J. Opt. Soc. Am A*, (2000 Feb), 17(2):320-7.
- ¹⁰⁹ K. M. Leung, "Defect modes in photonic band structures: a Green's function approach using vector Wannier functions," *J. Opt. Soc. Am. B* 10, 303- (1993)
- ¹¹⁰ "Photonic crystal modelling using a tight-binding Wannier function method", J.P. Albert, C. Jouanin, D. Cassagne, and D. Monge, *Optical and Quantum Electronics* 34, 251 (2002).
- ¹¹¹ JP Albert, D. Cassagne, and D. Bertho, “Generalized Wannier function for photonic crystals,” *Phys. Rev. B* 61, 4381–4384 (2000)
- ¹¹² D. Mogilevtsev, TA Birks, and PSJ Russell, "Group-velocity dispersion in photonic crystal fibers," *Opt. Lett.* 23, 1662-1664 (1998)
- ¹¹³ D. Mogilevtsev, T. A. Birks, and P. S. J. Russell, "Localized Function Method for Modeling Defect Modes in 2-D Photonic Crystals," *J. Lightwave Technol.* 17, 2078- (1999)
- ¹¹⁴ TM Monro, DJ Richardson, NGR Broderick, and PJ Bennett, "Holey Optical Fibers: An Efficient Modal Model," *J. Lightwave Technol.* 17, 1093- (1999)
- ¹¹⁵ M. Koshiba, Y. Tsuji, and M. Hikari, "Time-Domain Beam Propagation Method and Its Application to Photonic Crystal Circuits," *J. Lightwave Technol.* 18, 102- (2000)
- ¹¹⁶ P. Bienstman, R. Baets, Optical modelling of photonic crystals and VCSELs using eigenmode expansion and perfectly matched layers, *Optical and Quantum Electronics*, 33, p.327-341 (2001)
- ¹¹⁷ P. Bienstman, R. Baets, Advanced boundary conditions for eigenmode expansion models, *Optical and Quantum Electronics*, 34(5/6), p.523-540 (2002)
- ¹¹⁸ « Light Propagation in périodic Media, Differential Theory and Design » de M. Nevières et E. Popov. Marcerl Dekker Editions (2003)
- ¹¹⁹ L. Li «Use of Fourier Series in the analysis of discontinuous periodic structures », *JOSA A* 13, 1870-1876, 1996
- ¹²⁰ M.G. Moharam, t.K. Gaylord, « Rigorous coupled-wave analysis of planar grating diffraction ». *J. Opt. Soc. Am.* 71, 811-818, 1981.
- ¹²¹ “Rigorous coupled-wave analysis of dielectric surface-relief gratings », *J. Opt. Soc. Am.* 72, 1385-1392, 1982.
- ¹²² L. Li, « New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings », *J. Opt. Soc. Am. A* 14, 2758-2767, 1997.
- ¹²³ T.K. Gaylord, M.G. Moharam, “Analysis and applications of optical diffraction by gratings”, *Proceedings of the IEEE*, 73, 894-937, 1985.
- ¹²⁴ E. glystis, T. Gaylord “Three dimensional vector) rigorous coupled wave analysis of anisotropic grating diffraction”, *J. Opt. Soc. Am A* 7, 1399-1419, 1990.
- ¹²⁵ S.T. peng, T. Tamir and H.L. Bertoni, « Theory of periodic dielectric waveguides » *IEEE Trans. Microwave Theory and Techn.* MTT-23, 123-133, 1975.
- ¹²⁶ E. Popov, M Neviere, B. Gralak, G. Tayeb, “Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings”, *J. Opt. Soc. Am. A* 19, 33-42, 2002.

-
- ¹²⁷ P. Dansas and N. Paraire, "Fast modeling of photonic bandgap structures by use of a diffraction-grating approach," *J. Opt. Soc. Am. A* 15, 1586-1598 (1998)
- ¹²⁸ C.G. Bostan, R.M. Ridder, "Modeling of 2D photonic crystals using the "layer by layer method" and "fast fourier factorization" rules", *Proceeding SPIE*, vol 5227, pp205-211, ISBN: 08194-4742-0
- ¹²⁹ J.B. Pendry, A MacKinnon, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1993) 2772.
- ¹³⁰ "Calculating photonic band structure", J B Pendry 1996 *J. Phys.: Condens. Matter* 8 1085-1108.
- ¹³¹ Sigalas, C. M. Soukoulis, C.T. Chan, K.M. Ho, *Phys. Rev. B*, Vol 49, 11080-11087, 1994
- ¹³² J. B. Pendry, L. martin-Moreno, *Phys Rev B*, Vol 50, 5062-5073, 1994.
- ¹³³ D.R. Smith, S. Schultz, N. Kroll, M. Sigalas, K.M. Ho, C.M. Soukoulis, *Appl. Phys. Lett.* Vol 65, 645-647, 1994.
- ¹³⁴ Ozbay, E. Michel, G Tuttle, M. Sigalas, K.M. Ho, *Appl. Phys. Lett.* Vol 65, 2059-2061, 1994.
- ¹³⁵ F. Gadot, A. Chelnokov, A. De Lustrac, P. Crozat, J.M. Lourtioz, D. Cassagne, C. Jouanin, *Appl. Phys. Lett.* Vol 71, 1780-1782, 1997.
- ¹³⁶ G. Pelosi, R. Cocciolo, S. Selleri (Eds), « Quick Finite Elements for Electromagnetics waves », Artech House.
- ¹³⁷ D.R. Smith, W.J. Padilla, D.C. Vieer, S.C. Nemat-Nasser, S. Schutz, *Phys. Rev. Lett.* Vol 84, No 18, 4184-4187, 2000.
- ¹³⁸ Logiciel commercialisé par Ansoft Corporation.
- ¹³⁹ Djermoun, A. de Lustrac, A. Gadot, F. Akmansoy, E. « Design and characterization of a controllable left-handed material at microwave frequencies», *IEEE Proceedings of the 2005 European Microwave Conference*.

Chapitre II

**Les outils de simulation développés
pour la simulation de Cristaux
Photoniques non linéaires
(non-linéarité Kerr ou Thermique)**

II Les outils de simulation développés pour la simulation de Cristaux Photoniques non linéaires (non-linéarité Kerr ou Thermique)

A/ Stratégie de simulation (pourquoi de nouvelles méthodes, pourquoi celles-ci)

Notre but ultime étant d'apporter des réponses au projet SHIELD (cf I.B.2), il nous fallait trouver le moyen de simuler efficacement des cristaux photoniques (CPs) présentant un effet Kerr important ainsi que des cristaux photoniques créés à partir de matériaux à changement de phase.

Certaines méthodes existantes au moment du démarrage de cette thèse permettaient de répondre à certaines de ces problèmes mais à nos yeux jamais de façon assez satisfaisante vis-à-vis de nos objectifs (voir le chapitre I.D « Les méthodes de simulation »). La Multiple Scattering Method (MSM) pouvait traiter l'effet Kerr mais seulement via une approximation consistant à considérer que les inclusions restent toujours homogènes. Si cette approximation semble séduisante pour des inclusions de moins de $\lambda/10$, notre obligation de travailler avec des inclusions nettement plus grandes nous la rendait inutilisable. Nous nous heurtions là à un écueil théorique de la méthode. La méthode Finite Difference Time Domain (FDTD) pouvait répondre à nos besoins, en effet il existe des variantes de cette méthode tout à fait capable de traiter un cristal photonique non-linéaire. Toutefois cette méthode est extrêmement gourmande en temps de calcul ainsi qu'en mémoire. Elle ne nous aurait pas permis, sur les ordinateurs du laboratoire, d'enchaîner les simulations sur de nombreux échantillons (limitation par le temps de calcul), encore moins de traiter de grands échantillons comme nous en avons besoin (limitation par la mémoire vive). D'autres méthodes différentielles semblaient aussi pouvoir répondre à nos besoins mais quelques discussions nous persuadèrent vite que toutes n'offraient pas de garantie de stabilité lors de la simulation de structures à fort contraste d'indice (diélectrique/métal réel). Or nous devions justement simuler de telles structures.

Il a donc fallu innover et créer nous-mêmes nos outils.

Notre choix s'est rapidement porté sur deux méthodes dont les prémices étaient bien connues dans l'équipe ou dans des laboratoires de simulation électromagnétique et qu'il semblait possible de modifier pour les adapter à nos besoins : La MSM et la Fast Fourier Factorisation (FFF).

Pourquoi deux méthodes ? Car durant toute la durée de la thèse nous n'aurions pas accès à des mesures expérimentales sur les CPs à effet Kerr. Etant devant l'impossibilité de valider nos codes en les confrontant à l'expérience, nous avons choisi de concevoir deux méthodes « ab-initio » ne présentant que les équations de Maxwell comme point commun. Si ces deux méthodes radicalement différentes nous donnaient des résultats concordants, cela les validerait mutuellement.

Si la validation mutuelle des méthodes était l'argument principal pour le développement de deux algorithmes, il en existait un deuxième, moins important mais absolument pas négligeable : les capacités complémentaires des deux méthodes. L'une traite les cavités et pas l'autre, l'une traite le cas d'une matrice Kerr en plus des inclusions Kerr et pas l'autre, l'une permet d'étudier les effets de bords et pas l'autre, l'une permet la simulation d'édifices désordonnés et pas l'autre, etc... Avec ces deux cordes à notre arc nous pouvions traiter beaucoup plus de cas qu'avec une seule.

La MSM qui repose sur l'utilisation de la traduction des inclusions du CP en matrices de diffraction a été modifiée en HMSM (Hybrid-MSM). L'idée directrice est de ne plus se limiter au calcul analytique de la matrice de diffraction d'un cylindre homogène mais de calculer précisément la matrice d'une inclusion inhomogène via un programme annexe d'éléments finis. Ceci sera détaillé dans la partie B.

La FFF a été adaptée au traitement de CPs (ce qui avait déjà été fait par N. Bonod ^[140]) puis remodelée afin de supporter l'effet Kerr. Ultérieurement, la FFF a été encore une fois modifiée afin d'obtenir une FFF-Thermique capable de traiter le cas de matériau à changement de phase. Le point clef ici est le couplage entre le calcul d'une carte de champ via la FFF et l'évolution thermique associée sur des durées sub-nanosecondes qui va à son tour modifier la réponse électromagnétique de l'objet. Ceci sera détaillé dans la partie C.

En conclusion, la stratégie peut être ramenée à ces deux points

- Partir de méthodes robustes et proches de ce que l'on désire. Ajouter ce qui leur manque pour répondre à nos besoins.
- Développer deux méthodes « ab-initio » n'ayant rien en commun afin de les valider mutuellement pour pallier à l'absence de mesures expérimentales.

Pour la partie thermique, la validation est possible par confrontation à des mesures expérimentales. Une seule méthode suffirait.

B/ HMSM (Hybrid-MSM)

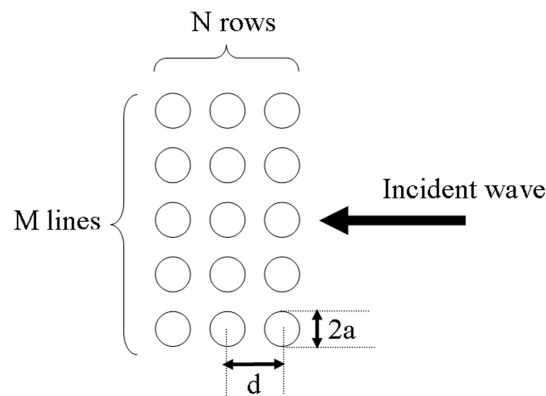
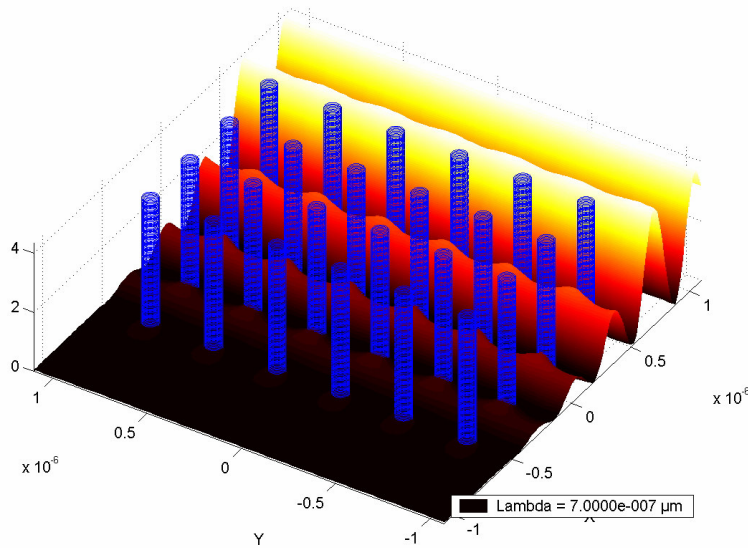
1/ Théorie de la MSM

La MSM permet de traiter le cas d'un groupe de tiges (ou de sphères dans le cas 3D) associées sans contraintes sur leurs tailles / positions / compositions. Cette méthode permet donc la simulation de tous les cristaux photoniques 2D à base de cylindres avec une immense souplesse : le désordre, les cavités, les géométries complexes sont permises. La méthode n'est pas temporelle mais fréquentielle : elle donne tout de suite la réponse à l'illumination par une onde monochromatique et est donc beaucoup plus rapide que la FDTD. Un Pentium IV et 512Mo de mémoire vive permettent de traiter des problèmes comportant jusqu'à 800 cylindres.

Le défaut actuel de la méthode est son incapacité à traiter le cas de cylindres inhomogènes ainsi que le fait que l'on traite toujours le cas d'un nombre finis de cylindres et donc de

cristaux photoniques de dimensions finies. Mais ces défauts peuvent être supprimés comme nous le montrerons plus loin.

La MSM est basée sur la théorie modale rigoureuse de la diffraction. La théorie détaillée peut être trouvée dans D. Felbacq et al ^[141]. Nous en ferons ici une présentation rapide.



Pour chaque point P de l'espace, le champ électrique est décomposé sous la forme d'un champ incident sur le l_0^{eme} cylindre et du champ diffracté par ce cylindre.

$$E(P) = E_{inc,l_0}(P) + E_{sca,l_0}(P)$$

Le champ incident sur le l_0^{eme} cylindre est alors décomposé comme la somme de l'onde incidente U sur le cristal photonique plus tous les champs diffractés par tous les cylindres exceptés le l_0^{eme} .

$$E_{inc,l_0}(P) = U_{inc}(P) + \sum_{l \neq l_0} E_l^{sca}(P)$$

Ces champs doivent être décomposés sur des bases de Fourier-Bessel centrées sur chaque cylindre l considéré.

$$E_{inc,l_0}(P) = U_{inc}(P) + \sum_{l \neq l_0} \left(\sum_n b_{l,n} \cdot H_n^1(kr_l(P)) \cdot e^{in\theta_l(P)} \right)$$

où $r_l(P)$ et $\theta_l(P)$ sont les coordonnées polaires du point P dans une base centrée sur le l^{eme} cylindre*.

$E_{inc,l_0}(P)$ et U_{inc} sont alors eux aussi exprimés dans une base de Fourier-Bessel cette fois ci centrée sur le l_0^{eme} cylindre♦.

$$\begin{cases} E_{inc,l_0}(P) = \sum_n a_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)} \\ U_{inc,l_0}(P) = \sum_n Q_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)} \end{cases}$$

Le tout donne :

$$\begin{aligned} \sum_n a_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)} &= \sum_n Q_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)} \\ &+ \sum_{l \neq l_0} \left(\sum_n b_{l,n} \cdot H_n^1(kr_l(P)) \cdot e^{in\theta_l(P)} \right) \end{aligned}$$

En appliquant un changement de base de l vers l_0 pour le dernier terme (via les formules de Graf^[142]) l'équation devient :

$$\begin{aligned} \sum_n a_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)} &= \sum_n Q_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)} \\ &+ \sum_q \left[\sum_n \sum_{l \neq l_0} b_{l,n} \cdot \left(H_{q-n}^1(kr_l^l) \cdot e^{i(n-q)\theta_l^l} \right) \right] \cdot J_q(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{iq\theta_{l_0}(P)} \end{aligned}$$

$$\text{Equation de Graf : } H_n^1(kr_l(P)) \cdot e^{in\theta_l(P)} = \sum_q H_{q-n}^1(kr_{l_0}^l) \cdot e^{i(n-q)\theta_{l_0}^l} \cdot J_q(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{iq\theta_{l_0}(P)}$$

avec $r_{l_0}^l$ et $\theta_{l_0}^l$ qui définissent l'écart relatif de position entre les cylindre l et l_0 .

* J'attire ici l'attention du lecteur sur la différence entre une base centrée sur le l^{eme} cylindre et une autre centrée sur le l_0^{eme} cylindre. Petite différence de notation mais grande importance.

♦ Attention à ne pas confondre le champ incident sur la structure complète et le champ incident sur un cylindre qui est la somme du champ incident sur la structure et des champs diffractés par les autres cylindres.

En remarquant que les termes $J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_{l_0}(P)}$ forment une base mathématique on peut mettre la longue et incommode équation précédente sous forme matricielle. On obtient alors une expression matricielle plus concise :

$$\begin{bmatrix} a_{l_0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{l_0} \end{bmatrix} + \sum_{l \neq l_0} \begin{bmatrix} T_l \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_l \end{bmatrix}$$

Nous savons que pour chaque cylindre il existe une matrice de diffraction S telle que $b_0 = S_0 \cdot a_0$. C'est la clef de la méthode : la matrice de diffraction et ses propriétés.

En multipliant l'équation matricielle précédente par S et en utilisant l'identité $b_0 = S_0 \cdot a_0$ on obtient:

$$b_{l_0} - \sum_{l \neq l_0} S_{l_0} \cdot T_l \cdot b_l = S_{l_0} \cdot Q_{l_0}$$

Lorsque appliqué à chaque cylindre nous obtenons le système linéaire suivant:

$$\begin{bmatrix} I & -S_1 T_{1,2} & -S_1 T_{1,3} & \dots \\ -S_2 T_{2,1} & I & -S_2 T_{2,3} & \dots \\ -S_3 T_{3,1} & -S_3 T_{3,2} & I & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1 \cdot Q_1 \\ S_2 \cdot Q_2 \\ S_3 \cdot Q_3 \\ \dots \end{bmatrix}$$

La résolution numérique du système, qui revient à une inversion de matrice*, nous fournit les coefficients b et, de là, le champ total en n'importe quel point P de l'espace via la formule suivante :

$$E(P) = U_{inc}(P) + \sum_l \left(\sum_n b_{l,n} \cdot H_n^1(kr_l(P)) \cdot e^{in\theta_l(P)} \right)$$

Cette méthode permet ainsi d'obtenir des cartes du module du champ électrique dans les cristaux photoniques ainsi que des spectres de transmission obtenus en faisant le rapport du module du champ incident et du module du champ transmis en un point situé derrière l'échantillon (matérialisé par une croix sur la figure 1 ci-dessous).

* Lors de la programmation, on se gardera bien d'inverser la matrice. Des méthodes de résolution numériques bien plus efficaces en terme de temps de calcul, telles que le pivot de gauss, existent.

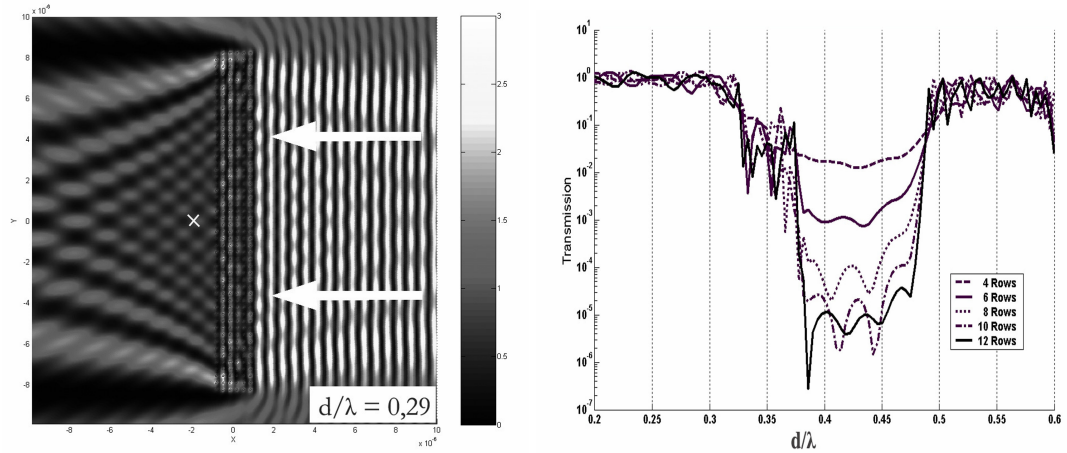


Fig 1. Carte de champ d'un cristal photonique illuminé et courbes de transmission pour diverses épaisseurs

Deux problèmes sont à régler si nous voulons pouvoir rendre cette méthode adaptable à nos applications. Le premier est que les structures simulées sont petites (Pas plus de 800 tiges sur un Pentium 4 @ 3GHz avec 512Mo de RAM en double précision) et présentent en conséquence des effets de bords importants alors que les structures réelles qui nous intéresseront, beaucoup plus grandes et s'apparentant à des couches minces déposées sur des lentilles, en seront dépourvues. Ce point sera abordé en II.B.4.

Le deuxième est que la méthode prend seulement en compte des cylindres homogènes, or ceux-ci deviennent inhomogènes lorsque nous introduisons des effets non linéaires.

2/ Théorie de l'EFIE

La méthode MSM exposée précédemment permet le calcul pour des amas de tiges quelconques à la condition qu'elles soient circulaires et homogènes.

Dans le cas de l'étude des effets non-linéaires cela pose problème car les cylindres vont devenir inhomogènes en réponse aux champs électromagnétiques inhomogènes qui vont les traverser. La figure 2 ci-dessous illustre bien le phénomène.

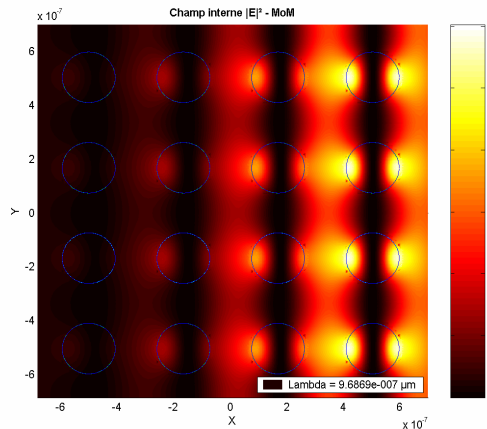


Fig. 2 : Ici, bien que les cylindres aient une dimension de seulement $\lambda/5$ le champ reste très inhomogène à l'intérieur des cylindres.

Face à un cylindre diélectrique homogène, l'écriture de la continuité des composantes tangentiels à la surface du cylindre mène à

$$\begin{cases} b_n \cdot H_n^{(1)}(k_1 r) - c_n J_n(k_2 r) = -a_n J_n(k_1 r) \\ k_1 b_n \cdot H_n'^{(1)}(k_1 r) - k_2 c_n J_n'(k_2 r) = -k_1 a_n J_n'(k_1 r) \end{cases}$$

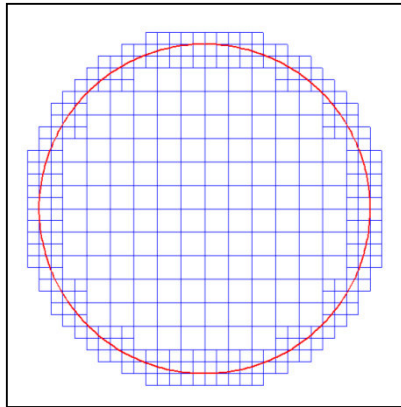
Où **a**, **b** et **c** sont les développements des champs incident, diffracté et à l'intérieur du cylindre dans une base de Fourier-Bessel tels que.

$$\begin{aligned} E_{incident} &= \sum_n a_n \cdot J_n(k_1 r) \cdot e^{in\theta} \\ E_{diffracté} &= \sum_n b_n \cdot H_n^{(1)}(k_1 r) \cdot e^{in\theta} \\ E_{interne} &= \sum_n c_n \cdot J_n^{(1)}(k_2 r) \cdot e^{in\theta} \end{aligned}$$

Dans ces conditions, la matrice **S** de diffraction liant **a** et **b** et la matrice **C** liant **c** à **a** sont des matrices diagonales dont les coefficients peuvent être trouvés analytiquement par résolution linéaire du système formé par les conditions aux limites.

Face à un cylindre inhomogène, les formules analytiques qui permettaient de déterminer sa matrice de diffraction ne nous sont plus d'aucune utilité. On ne peut plus, ni trouver la matrice de diffraction nécessaire à la MSM pour fonctionner, ni connaître le champ interne au cylindre dont nous avons pourtant besoin afin de quantifier l'effet Kerr.

Face à cette difficulté, nous allons faire appel à une méthode capable de décrire le champ électromagnétique dans un milieu inhomogène : l'Electric Field Intégral Equation (EFIE) traitée via la « méthode des moments ».



Le cylindre considéré est maillé (voir ci-contre). Chaque cylindre est maillé et traité indépendamment des autres ce qui représente une occupation mémoire sans commune mesure avec le maillage direct et complet du cristal photonique. Nous gardons ainsi les avantages de la méthode MSM vis-à-vis d'une méthode nécessitant de mailler tout l'espace.

Le principe de l'EFIE est le suivant^[143] : On décompose le champ **E** en champ diffracté plus champ incident. Par le théorème des sources équivalentes, on exprime le champ diffracté avec l'effet de courants **J** parcourant chaque cellule de notre maillage. Le champ diffracté peut alors s'écrire via la convolution des courants avec les fonctions de Green.

$$E_{inc}(x, y) = E_z + j\omega\mu_0 \iint \frac{1}{4j} J_z(x', y') H_0^{(2)}(kR) dx' dy'$$

Pour éviter toute instabilité numérique lorsque l'on travaille dans le vide ($\epsilon_r - 1$ ne doit pas devenir nul lorsqu'il est au dénominateur), le courant J est remplacé par le champ total E via la relation

$$J(x, y) = j\omega\epsilon_0(\epsilon_r(x, y) - 1) \cdot E_z(x, y)$$

ce qui nous donne

$$E_{inc}(x, y) = E_z - \omega^2 \epsilon_0 \mu_0 \iint \frac{1}{4j} \cdot (\epsilon_r(x', y') - 1) \cdot E_z(x', y') H_0^{(2)}(kR) dx' dy'$$

$$\text{avec } R = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2}$$

Utilisons maintenant l'avantage d'utiliser un maillage en petites cellules : Discrétisons le champ E et la permittivité ϵ_r .

Posons

$$E_z(x, y) = \sum_{n=1}^N E_n \cdot p_n(x, y) \quad \text{et} \quad \epsilon_r(x, y) = \sum_{n=1}^N \epsilon_{r,n} \cdot p_n(x, y)$$

$$\text{avec } p_n(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si dans cellule } n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On peut maintenant faire sortir les E et ϵ de l'intégrale et l'expression des champs devient :

$$E_{inc} = \sum_{n=1}^N E_n \left(p_n + \frac{j}{4} (\epsilon_{r,n} - 1) \cdot (\omega^2 \epsilon_0 \mu_0) \cdot \iint_{\text{cellule } n} H_0^{(2)}(kR) dx' dy' \right)$$

Cela mène au système matriciel suivant

$$\begin{bmatrix} E_{inc} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \dots & Z_{1N} \\ Z_{21} & Z_{22} & \dots & Z_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ Z_{N1} & Z_{N2} & \dots & Z_{NN} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \dots \\ E_n \end{bmatrix}$$

$$Z_{mn} = j \frac{\pi^2 (\epsilon_r - 1)}{\lambda^2} \iint_{\text{cellule } n} H_0^{(2)}(kR_m) dx' dy' \quad m \neq n$$

avec

$$Z_{mm} = 1 + j \frac{\pi^2 (\epsilon_r - 1)}{\lambda^2} \iint_{\text{cellule } n} H_0^{(2)}(kR_m) dx' dy'$$

Nous allons travailler avec des mailles fines, cela va nous permettre d'utiliser l'approximation des mailles carrées par des disques de même aire. L'avantage est que la fonction de Green d'un disque peut être mise sous la forme d'une expression analytique à base de fonctions de Bessel. Or le calcul d'une fonction de Bessel J ou H est, tout en gardant une précision suffisante, bien plus rapide et simple que le calcul de la forme

$$\iint_{\text{cellule } n} H_0^{(2)}(kR_m) dx' dy'.$$

L'expression des Z devient alors:

$$Z_{mn} = j \cdot \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2 \cdot (\epsilon_r - 1) \cdot \frac{2\pi a}{k} \cdot J_0(ka) \cdot H_0^{(2)}(kR_{mn}) \quad m \neq n$$

$$Z_{mn} = 1 + j \cdot \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2 \cdot (\epsilon_r - 1) \left[\frac{2\pi a}{k} \cdot H_1^{(2)}(ka) - \frac{4j}{k^2} \right]$$

La résolution de ce système matriciel permet ainsi de connaître pour n'importe quel champ incident (en restant dans le cadre TE bien sur, pour le cas TM il faudra prendre une méthode voisine de la EFIE, légèrement plus lente) le champ total dans chaque maille du cylindre.

Il est à noter que la EFIE n'est plus exacte si les mailles deviennent trop grandes devant la longueur d'onde. Nous travaillons justement avec des tiges pas plus grandes que quelques lambdas (ce qui est déjà très gros du point de vue des CPs) et nous restons toujours éloignés de la zone dangereuse. (Il existe une autre méthode qui supprime ce défaut mais elle est plus longue et a donc été jugée inutile).

Les illustrations suivantes (figures 3 à 5) ont été réalisées avec le maillage qui sera en permanence utilisé dans notre programme : un maillage a nombre de maille fixes quelque soit la taille du cylindre. Elles permettent d'illustrer l'accord dans le cas d'un cylindre homogène entre la méthode analytique et la EFIE appliquée a notre maillage. Elles permettent aussi d'estimer le domaine de validité de notre maillage. Nous voyons ainsi que dans le cas de cylindres ayant une permittivité de 9 placés dans le vide et d'une onde incidente à 1µm, on peut monter jusqu'à des diamètres de cylindres de 700nm avec confiance.

La dernière figure (Fig. 5) est à but illustratif : une divergence pour cause de mailles trop grandes peut être spectaculaire. Notez bien qu'appliquer un maillage plus serré même dans ce cas extrême ramène l'EFIE dans le droit chemin.

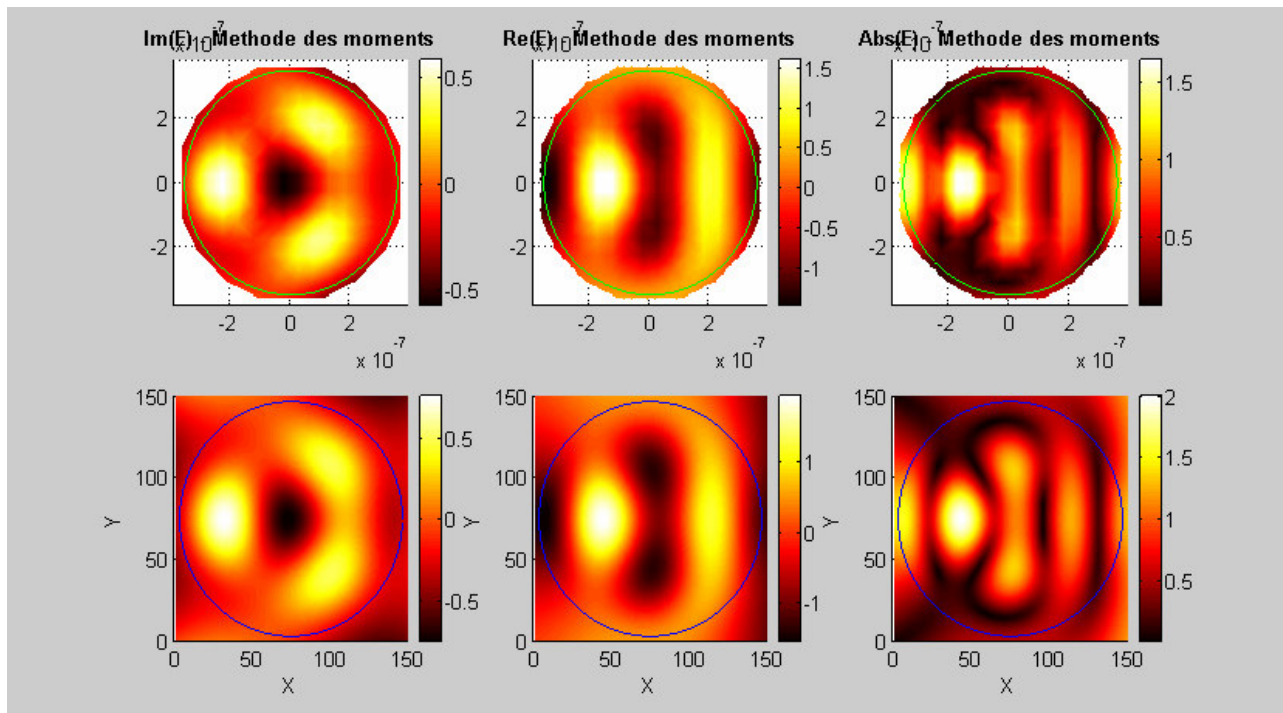


Fig. 3 : Vérification sur des cylindres homogènes : longueur d'onde de $1\mu\text{m}$, tiges de diamètre 700nm et de constante diélectrique 9. En haut la méthode EFIE des moments, en bas la méthode analytique.

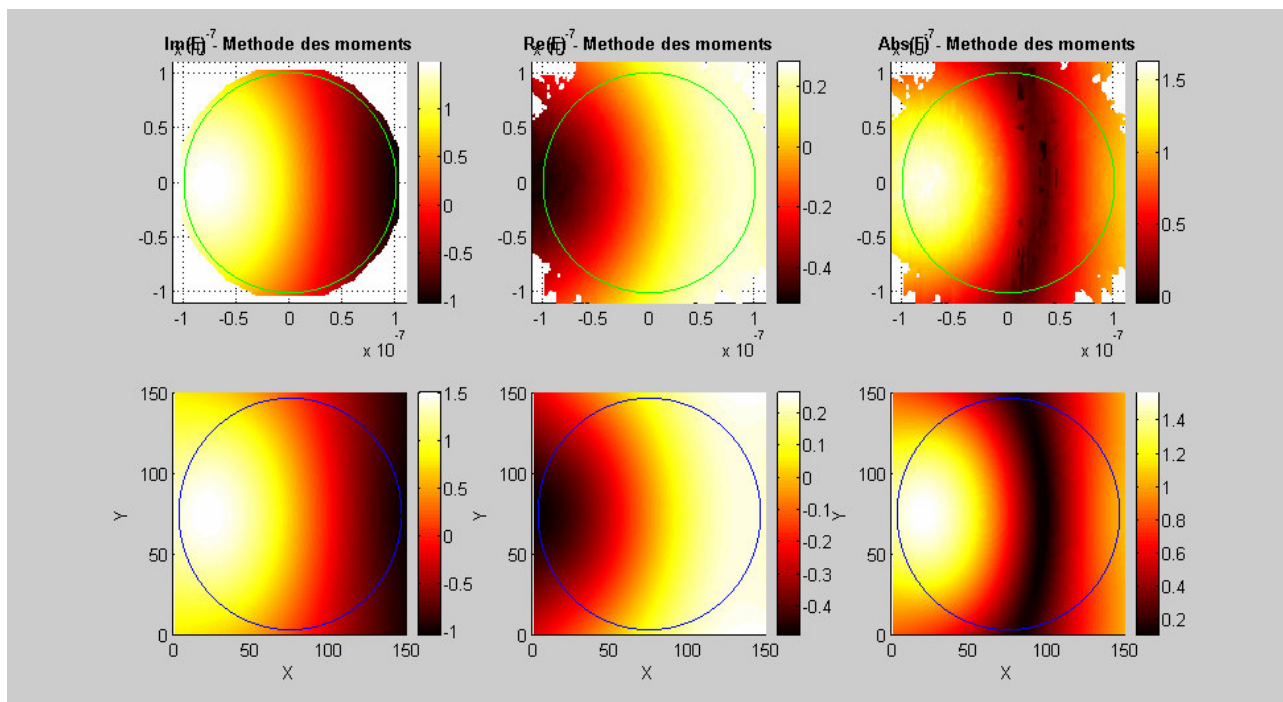


Fig 4 : Cas typique : longueur d'onde de $1\mu\text{m}$, tiges de diamètre 200nm et de constante diélectrique 9

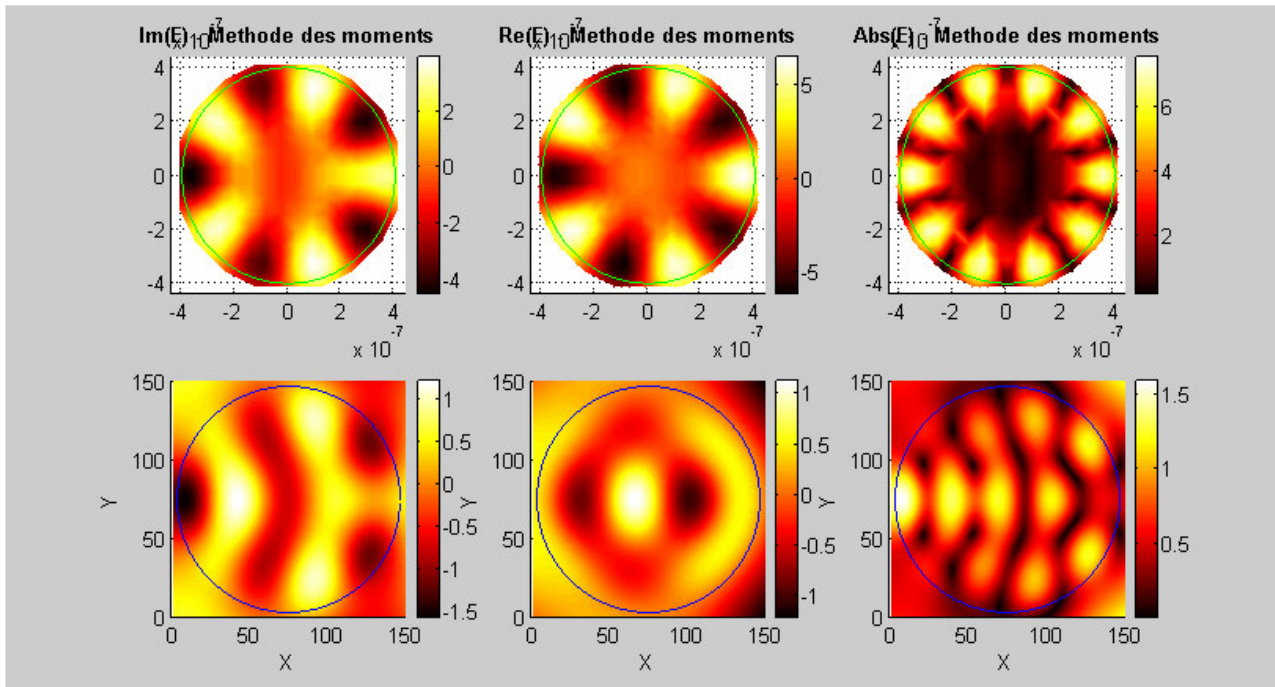


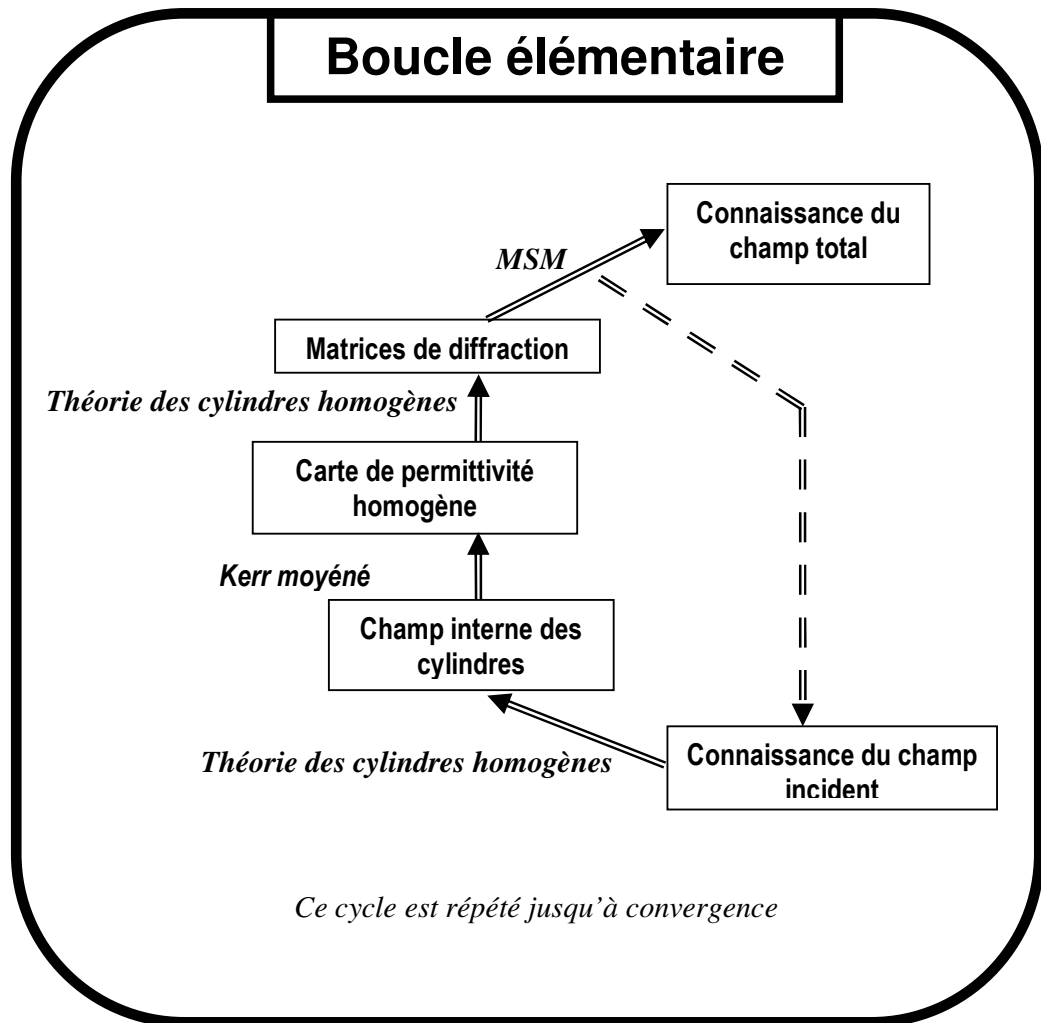
Fig. 5 : Longueur d'onde de $1\mu\text{m}$, tiges de diamètre 800nm et de constante diélectrique 9. Il y a divergence de l'EFIE. (A noter : augmenter le nombre de mailles dans ce cas permet d'obtenir le bon résultat)

3/ La HMSM

Avant de se plonger dans la HMSM regardons de quoi aurait l'air une MSM adaptée à l'effet Kerr mais qui adopterait l'approximation des cylindres homogènes.

L'effet Kerr menant à des réponses non-linéaires de la transmission et de la carte de champ d'un cristal photonique, on aborde le problème par le biais d'une boucle itérative... que l'on espère convergente.

L'idée est la suivante : On part d'une carte des permittivités données, c'est dire de cylindres homogènes ayant tous une permittivité qui leur est propre, et l'on calcule la carte de champ via la MSM. On moyenne la valeur de $|E|^2$ dans chaque cylindre et l'on applique à la permittivité de chaque cylindre l'effet Kerr suivant $\epsilon_r = \epsilon_{r,0} + \chi^{(3)} \cdot |E_{moyen}|^2$. On obtient ainsi une nouvelle carte des permittivités (toujours constituée de cylindres homogènes) qui va servir de support à une nouvelle itération de la MSM et ainsi de suite.



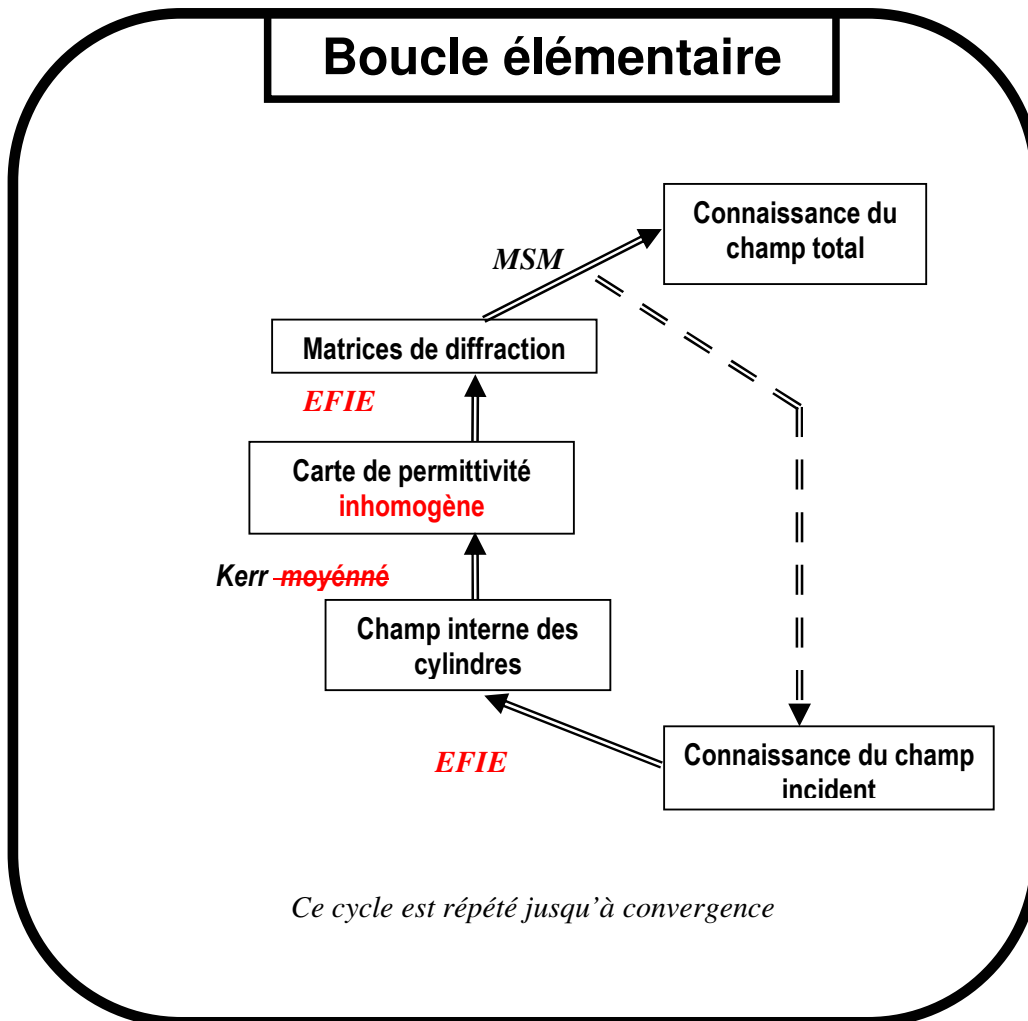
Si le système converge, au bout d'un nombre indéterminé d'itérations nous convergerons vers une carte des permittivité stable : un point d'équilibre. Ce point d'équilibre se caractérise par une carte des permittivité qui produit une carte de champ qui reproduit la même carte de permittivité par effet Kerr : il s'agit d'une solution qui a un sens physique et est donc recevable.

Ce type de programme fonctionne très bien^[144] et donne des résultats tout à fait convenables. Mais il repose entièrement sur l'approximation des cylindres homogènes. Hors nous avons vu que dans la réalité le champ n'était pas homogènes et les inclusions loin d'être toujours petites devant la longueur d'onde*.

Pour s'affranchir de cette imprécision, on vise une simulation rigoureuse prenant en compte l'aspect inhomogène de la carte des permittivités de chaque cylindre. Cela va malheureusement nous coûter cher : nous ne pouvons plus calculer analytiquement et simplement les matrices de diffraction et le champ interne du cylindre.

Pour palier à cette défaillance, on va utiliser l'EFIE décrite au paragraphe précédent. Le nouvel algorithme aura donc la forme suivante :

* On estime communément que l'approximation est valide pour tout objet plus petit que $\lambda/10$.



Reste à voir comment on obtient précisément les éléments manquants grâce à l'EFIE. Il nous faut :

- 1/ La matrice de diffraction de chaque cylindre pour pouvoir appliquer la méthode MSM.
- 2/ La carte de champ interne de chaque cylindre pour pouvoir gérer le couplage entre le champ et le nouvel indice local du matériau (changement d'indice proportionnel au carré du module du champ pour l'effet Kerr par exemple).

Pour le deuxième élément la réponse est évidente. La EFIE présenté au paragraphe précédent répond précisément à cette question : calculer le champ total en fonction d'un champ incident. Par contre pour le premier élément, le calcul de la matrice de diffraction, il va falloir rajouter quelques calculs.

Commençons par remarquer que la matrice \mathbf{S} relie les champs incidents \mathbf{a} et \mathbf{b} avec \mathbf{a} et \mathbf{b} les coefficients du développement des champs dans une base de Fourier-Bessel centrée sur l'objet (ie : le cylindre). En regardant la forme matricielle rappelée ci-dessous nous pouvons voir que si \mathbf{a} est judicieusement choisi, alors \mathbf{b} peut être la copie d'une colonne de la matrice \mathbf{S} . Ceci va nous permettre d'obtenir successivement les valeurs pour chaque colonne de \mathbf{S} .

$$\begin{bmatrix} b \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{-1,-1} & S_{-1,0} & S_{-1,1} \\ S_{0,-1} & S_{0,0} & S_{0,1} \\ S_{1,-1} & S_{1,0} & S_{1,1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} b_{-1} \\ b_0 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{-1,-1} & S_{-1,0} & S_{-1,1} \\ S_{0,-1} & S_{0,0} & S_{0,1} \\ S_{1,-1} & S_{1,0} & S_{1,1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_{-1,n} \\ \delta_{0,n} \\ \delta_{1,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{-1,n} \\ S_{0,n} \\ S_{1,n} \end{bmatrix}$$

Chaque n^{ième} colonne de **S** est obtenue en illuminant le cylindre avec une onde incidente

de la forme $\begin{bmatrix} a \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{-1,n} \\ \delta_{0,n} \\ \delta_{1,n} \end{bmatrix}$ qui correspond, d'après le formalisme de Fourier-Bessel, à un

champ incident de la forme $E_{inc}(r, \theta) = J_n(kr)e^{in\theta}$. La EFIE va alors nous fournir le champ total produit sur notre maillage par cette onde incidente. En interpolant les valeurs fournies sur chaque maille, nous pourrions alors déterminer les valeurs du champ sur le cercle limite du cylindre. Une fois ces valeurs connues, une FFT pourra fournir les valeurs de **b** (le développement du champ diffracté dans sa base de Fourier-Bessel) en accord avec la formule suivante.

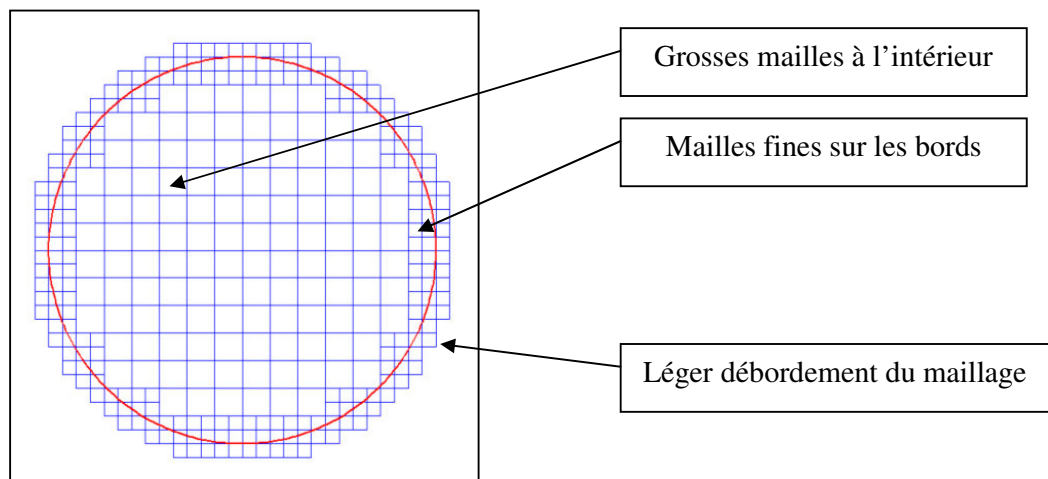
$$b_n = \frac{1}{2\pi \cdot H_n^{(1)}(kr_l)} \int_0^{2\pi} E_{boundary}(r_l, \theta) e^{-jn\theta} d\theta$$

En répétant n fois l'application de la EFIE pour n vecteurs **a** incidents différentes, on détermine les n colonnes de la matrice **S**.

Nous sommes maintenant capable avec la EFIE de fournir les morceaux manquants de l'algorithme : le calcul de la matrice de diffraction et le calcul du champ interne au cylindres et ce de façon rigoureuse, sans plus faire appel à l'approximation d'homogénéisation des cylindres.

Il reste toutefois quelques précisions à donner sur la méthode de calcul de la matrice **S**.

On a vu qu'il y a une étape d'interpolation pour passer des valeurs du champ au centre des mailles aux valeurs précises sur le bord du cylindre. Il faut souligner que c'est là que la précision de la méthode se joue. Cette interpolation et le calcul de FFT qui suit doivent être fait avec le plus grand soin.



Ayant rapidement constaté que le goulet d'étranglement pour la précision de la méthode était là, nous avons opté pour un maillage non régulier, plus fin autour des bords, et « débordant » le cylindre. Quelques mailles situées entièrement en-dehors du cylindre permettent d'obtenir plus de valeurs significatives pour l'interpolation.

Une deuxième étape fut la sélection d'une méthode d'interpolation 2D suffisamment précise. Nous avons utilisé le script « griddata.m » sous le logiciel MATLAB. Ce script, via des options d'appel, permet de choisir entre plusieurs méthodes évoluées d'interpolation 2D :

- 1/ La méthode usuelle (défaut) qui repose sur une approximation linéaire basée sur des triangles (méthode Delaunay).
- 2/ Il existe une méthode cubique elle aussi basée sur les triangles de Delaunay que l'on a éliminé d'emblée car elle donne de mauvais résultats.
- 3/ La méthode dite « v4 » est issue de « "Biharmonic Spline Interpolation of GEOS-3 and SEASAT Altimeter Data", Geophysical Research Letters, 2, 139-142, 1987. ». Beaucoup plus lente (5 fois plus lente dans notre exemple) que les autres elle donne d'excellent résultats.

Dernièrement, fournir un grand nombre de points sur le cylindre afin que la FFT soit la plus précise possible est aussi important. Un minimum de 512 points est à recommander. Avec 1024 points nous n'avons jamais eu de problème tout au long de l'ensemble des simulations réalisées pour cette thèse.

Comme on peut le voir sur courbes de la figure 6, le soin apporté à l'interpolation et à la FFT influent fortement sur la précision.

On a comparé les transmissions d'un cristal photonique suivant la méthode de calcul de la matrice de diffraction. Il n'y a là aucun effet Kerr, les cylindres sont homogènes et les deux méthodes, l'une basée sur le calcul analytique de la matrice S l'autre sur sa détermination via l'EFIE devraient donner des résultats identiques.

Le cristal photonique simulé est un ensemble de tiges à maille carré. Les figures du haut montrent la transmission en échelle linéaire et logarithmique sur la bande [1,3-2,4] μm centrée sur la bande interdite. Chaque couleur de courbe correspond à une méthode de calcul. Les figures du bas montrent l'écart entre les transmissions trouvées et celle fournie par la solution analytique qui sert ici de référence.

Les courbes montrent que la méthode d'interpolation « défaut » fournit des transmissions supérieures à l'unité (de 2% au pire, ce qui reste très faible) mais colle très bien (mieux que 1%) à la solution analytique à l'intérieur du gap.

La solution « v4 » colle à mieux que 1% tant que la transmission reste supérieure à 0,2. Elle ne produit jamais une transmission supérieure à 1.

La solution v4 semble donc supérieure à la solution « défaut ». Malgré son coût numérique important, elle est à privilégier.

L'intérêt d'augmenter le nombre de points pour la FFT au delà de 1024 (comparaison entre 1024 et 4096 sur les courbes) semble minime voire nul. Dans les faits, il faut atteindre de très basses valeurs de transmission, inférieures à 10^{-8} pour que l'intérêt de dépasser 1024 points refasse surface. A de si faibles valeurs, les courbes de transmission commencent à être affectées par un bruit numérique qui ne disparaît que si l'on augmente l'échantillonnage de la FFT.

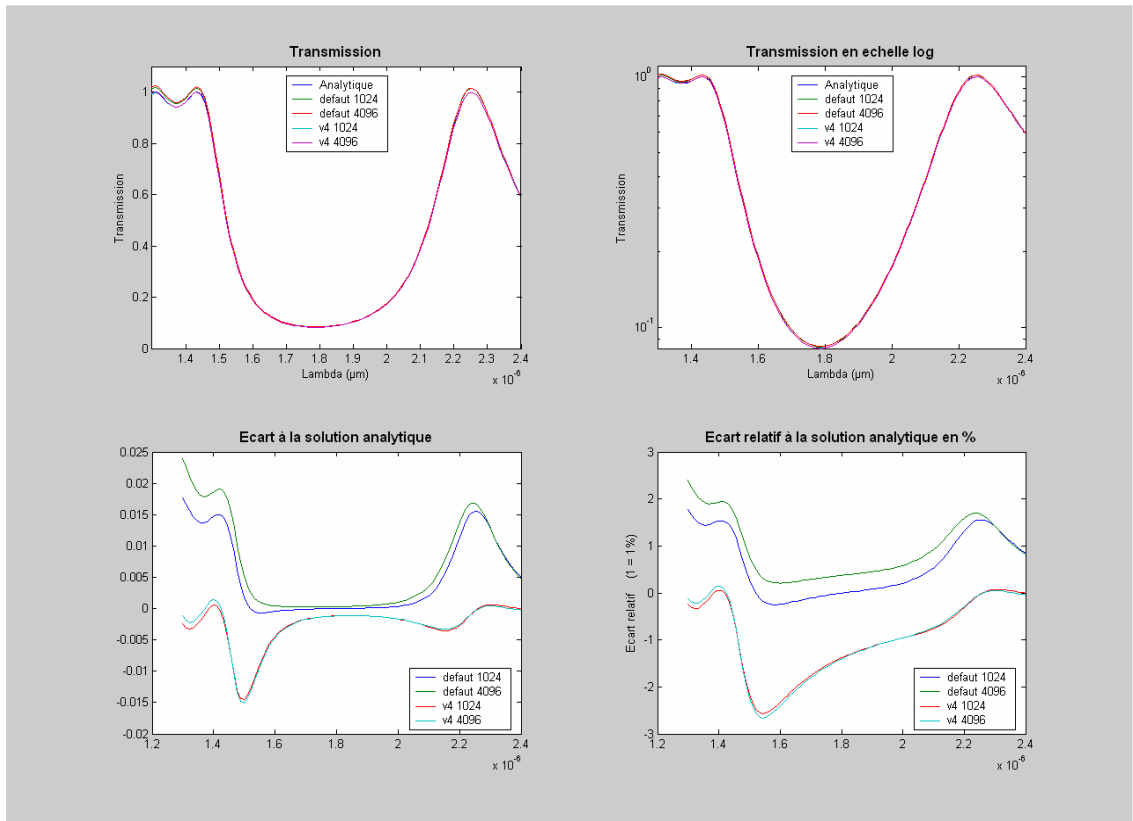


Fig. 6 : Ecart entre la HMSM et la MSM analytique dans le cas homogène linéaire suivant les méthodes d'interpolation et d'échantillonnage retenue.

Voici ce qui conclut à la description de la HMSM, évolution de la MSM qui permet de traiter rigoureusement les cristaux photoniques Kerr, sans approximation ni limitations aux cristaux constitués d'éléments très petits devant la longueur d'onde.

La HMSM ou Hybrid – MSM va permettre de traiter efficacement les cas qui nous intéressent.

4/ La HMSM appliquée à des CPs de taille infinie – Amélioration de la prise en compte de l'effet Kerr.

MSM et HMSM partagent a priori la même caractéristique : elles ne s'appliquent qu'à des objets de taille finie. C'est une conséquence directe du fait qu'elle traite l'interaction d'un nombre fini d'élément diffractant.

Cette caractéristique est à double tranchant. Si d'une part on peut se réjouir de pouvoir avec elles étudier des objets de taille finis et donc présentant des effets de bords totalement cachés aux méthodes travaillant sur des échantillons infinis... On peut aussi se désoler qu'elle ne puisse s'affranchir des effets de bords lorsque l'on souhaiterait justement voir la transmission et la carte de champ d'un échantillon de taille infinie.

L'utilisateur est humain, il n'est jamais content. Et l'auteur de cette thèse ne fait pas exception à la règle.

Il serait tout de même bien agréable de pouvoir simuler à la fois des objets infinis et finis avec la même méthode.

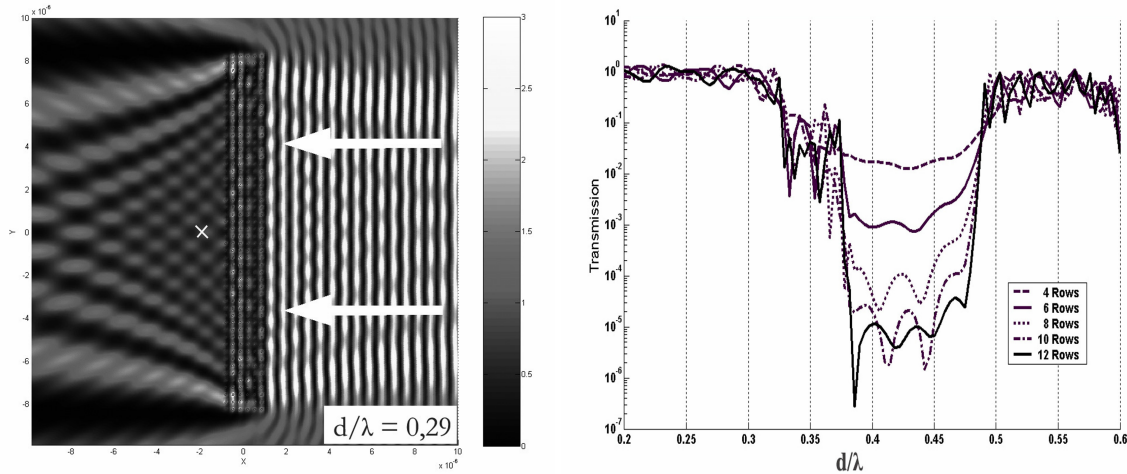


Fig. 7 : Ici les effets de bords sont très visibles. Tant dans le bruit de la courbe de transmission que dans la figure d'interférence en queue de comète située derrière l'échantillon

Une solution évidente est, bien sûr, d'augmenter la taille de l'objet, le nombre de cylindres contenu dans le cristal photonique. Mais les capacités de mémoire, la rapidité de calcul des ordinateurs étant finie, la solution montre très vite ses limites.

Une autre solution évidente est de placer notre « détecteur » (matérialisé par une croix dans la figure 7) le plus près possible de l'échantillon et le plus loin des bords inférieurs et supérieurs. Cela ne règle que le problème de la transmission, la carte de champ n'étant pas améliorée, et d'autre part on ne peut se rapprocher à moins d'un λ^* de la structure sans craindre de capter le champ évanescent. D'autre part on peut remarquer que les figures ci-dessous ont justement été prises dans ces conditions : la résolution du problème est toute relative.

Le physicien aurait bien une idée : éradiquer le mal à la racine.

Les trois causes physiques des effets de bords sont

1. La diffraction par les bords, ce qui renvoie de l'énergie vers le capteur.
2. Le couplage de l'onde dans le cristal photonique par les bords. On excite ainsi des modes ne correspondant pas à l'angle d'incidence voulu.
3. Un effet Fabry-Perrot qui n'existe que grâce à l'existence des bords et à la réflexion interne qui se fait dessus.

La réponse du physicien à ces trois défauts si l'échantillon était réel et l'expérimentation avait lieu serait de ne plus éclairer les bords afin de supprimer les couplage, de choisir un profil d'onde incidente dont la figure de diffraction n'est pas un problème (un faisceau gaussien par exemple) et de tailler en biseau les bords de son échantillon pour limiter au maximum l'effet Fabry-Perot.

Mais nous ne sommes pas en expérimentation mais dans une simulation. Si tailler des biseaux semble facile (il suffit de rajouter quelques cylindres bien placés) éclairer par autre chose qu'une onde plane ne coule pas de source. La Théorie MSM a été pensée pour une onde plane, comment réagirait elle face à une onde à profil gaussien ?

* Valeur indicative. Cette distance est en fait inférieure mais varie vite en réponse à des changements de paramètres tels la géométrie de la maille. Avec un λ , on a une marge de sécurité.

Dans la théorie de la MSM exposée au paragraphe 1, nous avons vu que le champ incident sur la structure* complète était décomposé sur une base de Fourier-Bessel de la façon suivante.

$$U_{inc}(P) = \sum_n Q_{l_0,n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_0(P)}$$

Dans le cas où l'onde incidente est une onde plane les coefficients Q sont simples et déterminés par $Q_{l,n} = (i)^n$. L'onde incidente plane s'exprime alors par la somme

$$U_{inc}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (i)^n J_n(kr) e^{in\theta} \text{ qui a le bon goût d'être rapidement convergente.}$$

Ici « rapidement convergente » signifie que $U_{inc}(x, y) = \sum_{n=-N}^{+N} (i)^n J_n(kr) e^{in\theta}$ donne

une valeur approchée avec une précision satisfaisante pour un N assez faible, inférieur à 5. C'est très important car dans la MSM, les matrices que nous utilisons sont de taille finie et de dimension $(2N+1) \times (2N+1)$. Un N faible, ou du moins compatible avec les possibilités de mémoire et de calcul d'un ordinateur doit suffire à correctement décrire l'onde.

Qu'en est il d'une onde à profil gaussien ou supergaussien ? Le problème est que

$$U(P) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} Q_{l,n} \cdot J_n(kr_l(P)) \cdot e^{in\theta_l(P)} \text{ est à convergence extrêmement lente lorsque l'onde est}$$

de forme gaussienne. Il faut plusieurs milliers de coefficients si l'on veut que la somme donne un résultat convenable.

Pourtant cela va fonctionner. Pourquoi ? Car seules les valeurs proche du bord du cylindre nous importent. Afin de le comprendre, posons nous une autre question : « **Pourquoi la méthode matricielle marche t'elle alors que la représentation d'une onde plane sous la forme $\sum a_n \cdot J_n \cdot e^{in\theta}$ devient très mauvaise (convergence lente) si l'on s'éloigne suffisamment du point d'origine du repère ?** »

Réponses :

- 1/ Car pour une onde plane, la série de Fourier-Bessel associée décrit bien le champ au voisinage des cylindres et c'est tout ce qui compte pour le calcul des b_n .
- 2/ Car le champ diffracté par des tiges est bien représenté par les séries du type $\sum b_n \cdot H_n \cdot e^{in\theta}$

En effet les valeurs des coefficients Q que nous utilisons pour décrire l'onde incidente sont obtenues via la formule suivante

$$Q_{l,n} = \frac{1}{J_n(kr_l)} \int_0^{2\pi} U_{inc}(r_l, \theta) \cdot e^{-in\theta} d\theta \text{ où } r_l \text{ est le rayon du cylindre.}$$

On peut remarquer que les seules valeurs du champ incident qui sont prises en compte sont celles situées sur le bord du cylindre et nulle part ailleurs. Ainsi même si la série

* Attention à ne pas confondre le champ incident sur la structure complète et le champ incident sur un cylindre qui est la somme du champ incident sur la structure et des champs diffractés par les autres cylindres.

$U_{inc}(P) = \sum_n Q_{l_0, n} \cdot J_n(kr_{l_0}(P)) \cdot e^{in\theta_0(P)}$ décrit mal le champ incident loin des tiges,

cela n'impacte pas la précision du calcul des coefficients b_n décrivant le champ diffracté. Seul compte le fait que le champ soit bien décrit sur le bord du cylindre. Voilà pour

l'inutilité de se préoccuper de la précision de $U_{inc}(x, y) = \sum_{n=-N}^{+N} (i)^n J_n(kr) e^{in\theta}$ en dehors du bord du cylindre.

Dans le cas d'une forme d'onde incidente gaussienne ou supergaussienne qui aurait besoin de plusieurs milliers de coefficients pour être correctement décrite dans le voisinage du cristal photonique, on peut se contenter de ne prendre que les deux ou trois premiers termes du développement qui suffisent amplement à décrire le champ sur le bord d'un cylindre.

On peut noter que l'on assiste ici à une illustration du **principe d'équivalence de Huygens** qui indique que seules comptent les valeurs des champs tangentiels à la surface des cylindres : Si deux champs différents ont mêmes valeurs tangentielles à la surface du cylindre, ils produiront la même onde diffractée.

Remarquons de plus que le champ diffracté par un cylindre épousant naturellement la forme des fonctions de Bessel, son expression sous la forme

$E_{diffracté} = \sum_n b_n \cdot H_n^{(1)}(k_1 r) \cdot e^{in\theta}$ est très rapidement convergente en tout point du plan.

Pour calculer le champ total en tout point du plan après application de la MSM, il suffira de sommer le champ diffracté obtenu via \mathbf{b} qui est correctement représenté par une somme de Fourier-Bessel (convergence rapide de cette forme) et le champ incident sur l'échantillon que l'on prendra soin d'exprimer directement et non par l'un de ses développements en termes de Fourier-Bessel qui donnerait de très mauvais résultats dès que l'on s'éloignerait d'une tige.

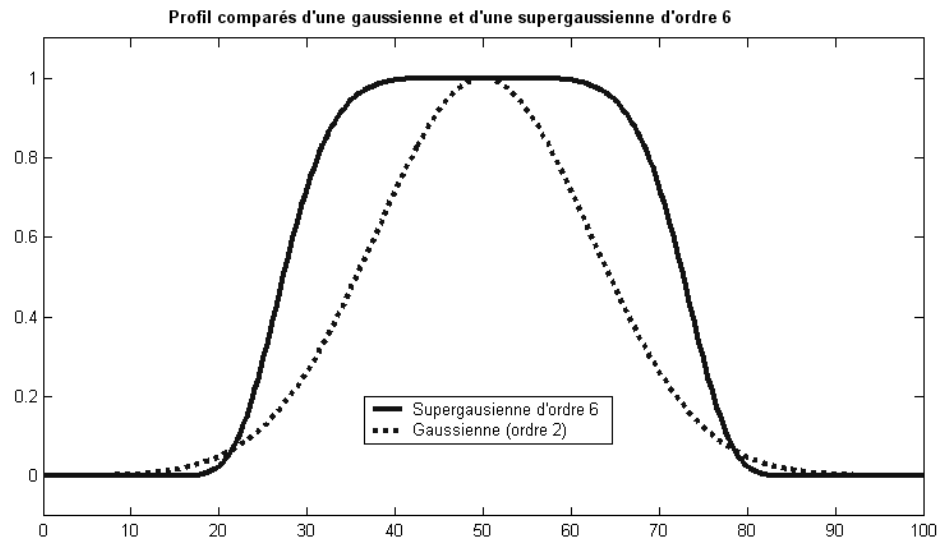
Pour ce qui est du choix de la forme d'onde incidente la plus appropriée, un faisceau gaussien réel dans l'approximation paraxiale devrait avoir le profil suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 E(x, y, z, t) = E_0(z) \cdot e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)}} \cdot e^{-\frac{ikx^2+y^2}{2R(z)}} \cdot e^{-i(kz-\varphi(z)+\omega t)} \\
 \text{avec} \\
 E_0(z) = \left(1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} = \frac{w_0}{w(z)} \\
 w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2} \quad \text{avec} \quad z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda} \\
 R(z) = z \left(1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2 \right) \\
 \varphi(z) = \text{Arctan} \left(\frac{z}{z_R} \right)
 \end{array} \right.$$

Mais l'utilisation d'un profil supergaussien d'ordre 6 plaquée sur une onde plane bien que physiquement non rigoureux, donne les mêmes résultats de façon plus simple. On préfère donc la supergaussienne :

$$E(x, y, z, t) = E_0(z) \cdot e^{-\left(\frac{x}{w_0}\right)^6} \cdot e^{-i(kz + \omega t)}$$

L'utilisation de l'ordre 6 plutôt que de l'ordre 2 plus habituel permet d'obtenir un sommet large et plat tout en fournissant des bords à décroissance rapide sans discontinuité.



Au final, nous pouvons maintenant espérer avoir supprimé les effets de bords en rajoutant des biseaux à notre structure et en l'éclairant avec une onde plane à profil supergaussien qui laisserait les bords de notre structure dans l'ombre. Et c'est bien le cas.

Voici ce que l'on obtient avec ces modifications (à comparer avec la fig. 7).

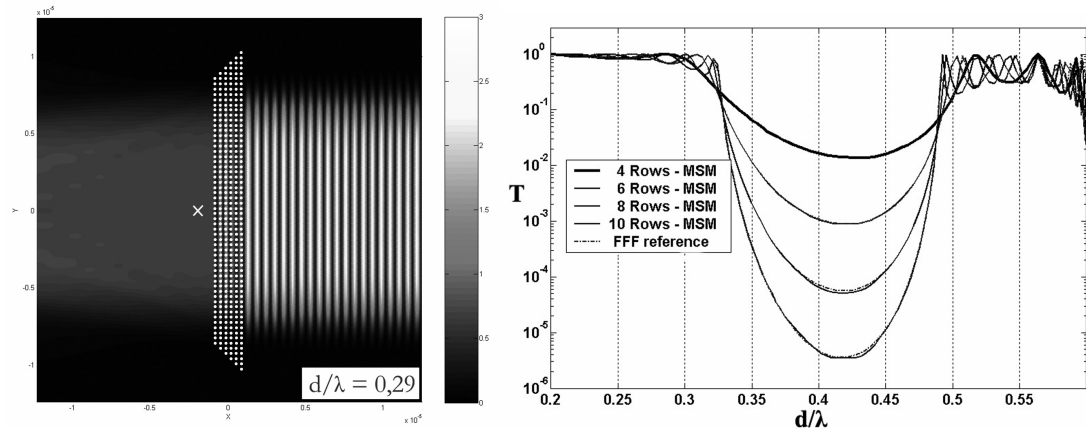


Fig. 8a et 8b : Re-simulation des courbes de la fig. 7 mais avec biseaux et éclairage supergaussien. Notez que les bords ne sont pas éclairés par l'onde incidente.

La figure d'interférence en queue de comète a disparu, et les courbes de transmission ne sont plus bruitées par des effets de bords. La transmission est exactement la même que celle calculée par FFF dans le cas d'un échantillon de dimension infinie.

Une autre vérification, faite sur la structure (infinie) proposée par Mr Asatryan dans un de ses articles¹⁴⁵ peut être vue sur la figure suivante : sans précautions on obtient la réponse entachée d'effets de bords d'une structure 70×10 tiges alors qu'avec des biseaux et une supergaussienne on retrouve une courbe de transmission régulière et conforme aux résultats de Mr Asatryan (fig. 9) : on a effectivement simulé une structure infinie avec la MSM.

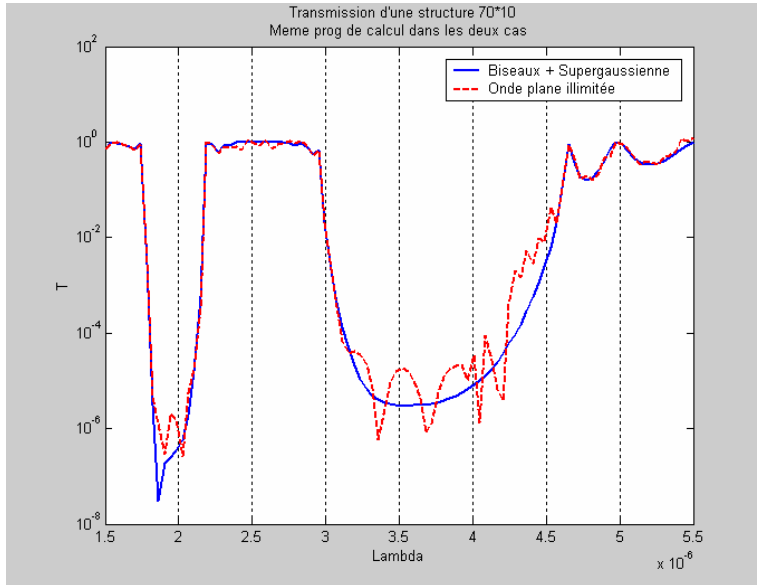


Fig. 9 : Transmission du CP d'Asatryan. Echantillon limité ou illimité

Avec l'ajout de cette procédure (biseau + supergaussienne) la HMSM est maintenant capable de traiter les cas de structures infinies en plus des structures finies.

Bien sûr la méthode présente des limites. Elle a évidemment un plancher de bruit. Mais comme on peut le constater sur les figures 8 et 9, ce plancher est très bas. A 10^{-8} il n'apparaît toujours pas.

Dans les faits, le bruit va entacher d'abord la carte de champs avant de se répercuter sur le calcul de la transmission. Il est lié à la difficulté de correctement traduire le champ incident sur une base de Fourier-Bessel lorsque l'on est dans le flanc pentu de la supergaussienne.

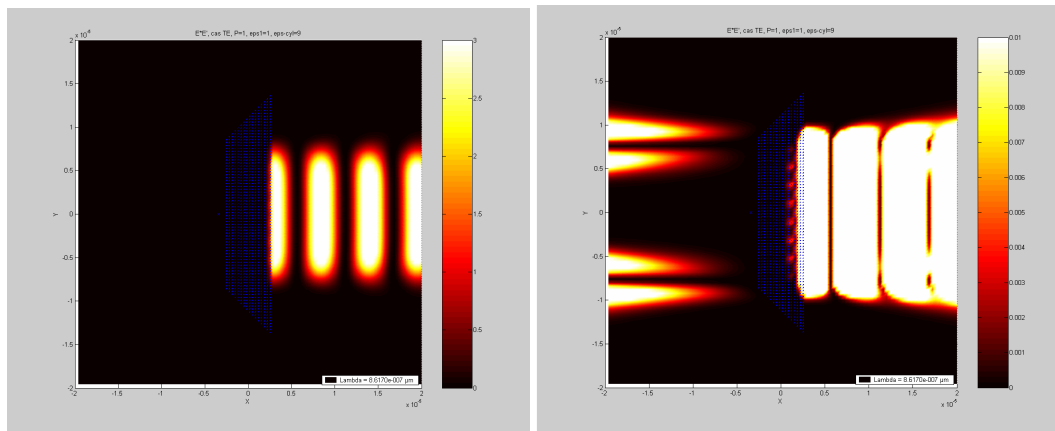


Fig 8c et 8d : Recherche du bruit dans le cas totalement réfléchitif

Pour illustrer ce point, prenons la carte de champ de la figure 8a mais calculée pour une longueur d'onde se trouvant dans le gap. On est alors en réflexion totale. Nous obtenons la figure 8c. Rien d'anormal sur cette figure, on observe bien une réflexion totale et la figure d'interférence associée. Modifions alors l'échelle colorée de la figure jusqu'à des valeurs suffisamment basses pour faire apparaître le bruit. On obtient la figure 8d où tout ce qui est blanc correspond à des valeurs de $|E|^2$ supérieures à 10^{-2} (rappelons que l'onde incidente a été normalisée à 1). On distingue nettement quatre traînées parasites. Ces traînées sont issues des zones éclairées par les points d'inflexions de la super gaussienne et sont assez éloignées du point sonde (la croix) qui permet de calculer la transmission. Cet éloignement est la raison pour laquelle la carte de champ sera entachée d'erreur bien avant le calcul de la transmission.

Qu'est ce qui cause ces traînées parasites ? La décomposition du champ incident sur une base de Fourier-Bessel. Sur les points d'inflexion de la supergaussienne (les virages avant et après le flanc quasi rectiligne) le champ incident sur le pourtour des cylindres a une forme qui se prête mal à une décomposition en série de Fourier-Bessel, il faudrait augmenter le nombre de coefficients pris en compte pour que le champ incident à ces endroits précis soit correctement pris en compte. Comme ce plancher de bruit est très faible et absolument pas gênant, nous ne nous en préoccupons plus. Mais il est bon de savoir qu'il existe et d'où il vient.

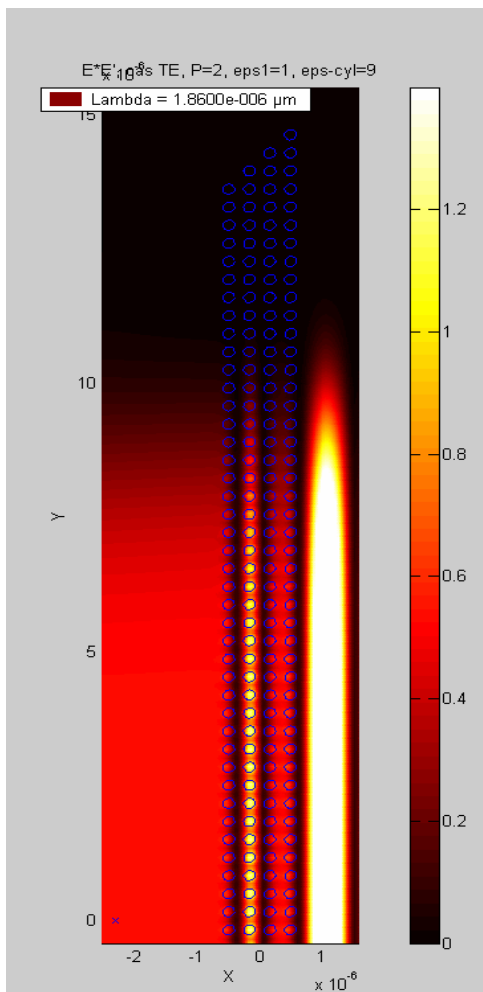


Fig. 10 : détail du champ interne à un échantillon de CP biseauté et illuminé par une supergaussienne.

Maintenant que nous pouvons simuler des échantillons infinis avec la MSM et la HMSM cela ouvre une nouvelle possibilité pour la simulation des effets Kerr.

La carte de champ étant maintenant débarrassée des artefacts dus aux effets de bords et l'on peut pratiquer un regroupement des tiges non-linéaires.

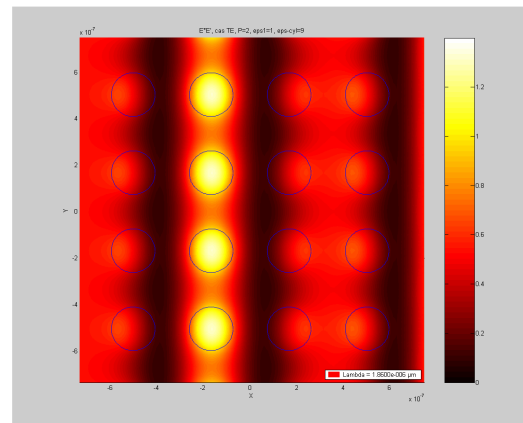


Fig. 11 : Zoom sur la partie basse de la fig. 10

Sur la figure 10 ci-contre, représentant la moitié de la carte de champ d'un cristal photonique à quatre couches illuminé par la droite, on peut voir que le motif du champ dans un cylindre est toujours le même à condition de rester dans la

même colonne et dans la zone centrale. Cela signifie aussi que leur cartes de permittivité produites par l'effet Kerr sont les mêmes.

Un zoom (Fig. 11) permet de se rendre compte de la régularité de la carte de champ dans la partie illuminée par le plateau de la supergaussienne.

Toute pseudo périodicité parasite introduite par les effets de bords, et notamment par des résonances Fabry-Perot, a disparu.

Il vient alors à l'idée de ne plus calculer la matrice de diffraction de chaque cylindre mais de n'en calculer qu'une par colonne. On appliquerait alors à tous les cylindres de la même colonne la même matrice de diffraction.

Bien sûr, cette matrice serait fautive pour les cylindres situés près et dans les biseaux car n'étant pas ou peu éclairés ils ne présenteraient pas la même carte de permittivité due à l'effet Kerr. Mais comme on a pris soin de choisir une onde incidente à profil supergaussien, on dispose d'une large partie d'éclairage homogène comparable à celui d'une onde plane ainsi que de bords abrupts et ne transportant quasiment pas d'énergie. En conséquence la majeure partie des cylindres voit une onde qui semble une onde plane et ceux qui voient autre chose sont loin et ne rayonnent pas d'énergie. La contribution à l'ensemble de ces cylindres du bord peut donc être négligée et le fait qu'en toute rigueur on leur associe une matrice de diffraction qui n'est pas la leur peut être ignoré.

Cette méthode fonctionne très bien et a de plus l'avantage d'être beaucoup plus rapide : dans le cas d'un cristal photonique de maille carré de dimension 4×100 il fallait avant déterminer via l'EFIE les matrices de diffraction de 400 cylindres alors que maintenant cela ne se fait plus que sur 4. Il y a là un gain de vitesse d'un facteur cent.

C/ FFF-Kerr et FFF-Thermique

La deuxième méthode mise en place ainsi que ses variantes s'appuient sur la FFF ou Fast Fourier Factorization. Cette méthode rentre dans le cadre des méthodes différentielles et a été mise au point par M.Nevière et E.Popov^[118] de l'institut Fresnel à Marseille.

Basée tant sur l'algorithme S qui permet de traiter le cas d'objets épais que sur les règles de calcul de Lifeng Li qui permettent la convergence dans les cas difficiles (polarisation TM et/ou forts contrastes d'indices). Cette méthode a été utilisée par ses créateurs pour concevoir avec succès les miroirs diffractants du laser Mégajoule.

Capable de traiter tous les types de cristaux photoniques possédant deux dimensions infinies et une troisième forcément finie, son avantage principal est sa rapidité. Moins souple que la MSM, elle ne permet pas, par contre, de traiter les cas fortement désordonnés ou les géométries très exotiques.

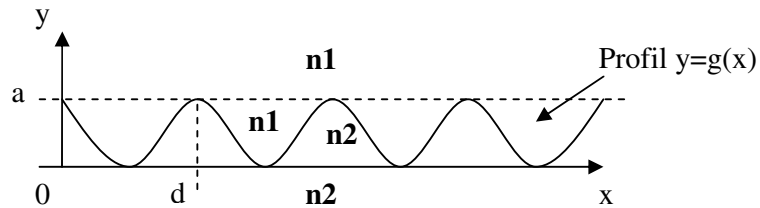
1/ Théorie de la FFF

Tout ce qui suit dans cette partie est largement inspiré du livre^[118] « Light Propagation in périodic Media, Differential Theory and Design » de M. Nevière et E. Popov que je conseille à toute personne désireuse d'aborder la FFF. Nous reprenons ici les mêmes notations.

a/ La méthode différentielle

La Méthode différentielle permet de traiter le cas de milieux périodiques et notamment les réseaux. Elle revient à transformer le problème complet en un système d'équations différentielles dotées de conditions aux limites appropriées. Ces équations différentielles, habituellement exprimées dans une base de Fourier sont résolues par intégration numérique.

Nous nous limiterons ici à la polarisation TE pour décrire succinctement la théorie.



Décrivons un champ électromagnétique \mathbf{u} baignant le réseau de pas \mathbf{d} .

Le champ électrique étant pseudo-périodique en x , on peut donc le décomposer sous la forme :

$$u(x, y) = e^{i\alpha_0 x} \cdot \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(y) \cdot e^{inKx}$$

ou

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(y) \cdot e^{i\alpha_n x} \quad \text{avec} \quad \alpha_n = \alpha_0 + nK \quad \text{et} \quad K = \frac{2\pi}{d}$$

Dans le substrat $u(x,y)$ peut s'exprimer ainsi (avec des termes propagatifs et contra-propagatifs) :

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(1)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_n^{(1)} y) + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_n^{(1)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_n^{(1)} y)$$

avec $\beta_n^{(j)} = \sqrt{k_j^2 - \alpha_n^2}$ ou $\beta_n^{(j)} = i \cdot \sqrt{k_j^2 - \alpha_n^2}$

Alors que dans le superstrat $u(x,y)$ peut s'exprimer ainsi :

$$u(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(2)} \exp(i\alpha_n x - i\beta_n^{(2)} y) + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_n^{(2)} \exp(i\alpha_n x + i\beta_n^{(2)} y)$$

Dans le cas TE, les équations de Maxwell se réduisent à

$$\Delta E_z + k^2(x, y) E_z(x, y) = 0$$

La périodicité en x du réseau de pas d permet de décomposer le vecteur d'onde k^2 sur une base de Fourier.

$$k^2(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (k^2)_n(y) \cdot e^{inKx}$$

injecté dans l'équation précédente nous obtenons

$$\forall n : \frac{d^2 E_n(y)}{dy^2} + \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (k^2)_{n-m}(y) \cdot E_m(y) - \alpha_n^2 E_n(y)$$

Si l'on suppose qu'il ne faut pas une infinité de termes mais qu'une somme finie suffit à décrire le phénomène, alors on peut passer en forme matricielle et la relation devient :

$$\frac{d^2 [E(y)]}{dy^2} = M^{TE}(y) [E(y)]$$

C'est la relation fondamentale de l'algorithme de résolution du problème. Concrètement, il faudra résoudre cette équation différentielle un grand nombre de fois. Mais n'allons pas trop vite.

Les conditions aux limites, en l'occurrence la continuité des composantes tangentes de E et H aux zones frontières du réseau (en $y=0$ et $y=a$) plus la supposition qu'il n'existe pas de termes contra-propagatifs en 0 (Objet illuminé par une seule onde incidente, voir Fig. 12) amènent les relations suivantes :

$$E_n(a) = A_0^{(2)} \exp(-i\beta_0^{(2)} a) \delta_{n,0} + B_n^{(2)} \exp(i\beta_n^{(2)} a) \quad (\text{Continuité})$$

$$E_n(0) = A_n^{(1)} \quad (\text{Pas d'illumination par le « bas », pas de terme en } B_n \text{ à } y=0)$$

et

$$\frac{dE_n(a)}{dy} = -i\beta_0^{(2)} A_0^{(2)} \exp(-i\beta_0^{(2)} a) \delta_{n,0} + i\beta_n^{(2)} B_n^{(2)} \exp(i\beta_n^{(2)} a)$$

$$\frac{dE_n(0)}{dy} = -i\beta_n^{(1)} A_n^{(1)}$$

Le problème de diffraction se réduit maintenant à un problème d'équations différentielles avec condition aux limites.

Les conditions aux limites précédentes amènent à la relation

$$\left. \frac{dE_n(y)}{dy} \right|_{y=0} = -i \cdot \beta_n^{(1)} \cdot E_n(0)$$

Cela va suffire à résoudre le système via la « shooting method »

L'idée est de construire arbitrairement une base d'ondes incidentes, soit $2N+1$ vecteurs incidents indépendants et de les intégrer numériquement avec

$$\frac{d^2 [E(y)]}{dy^2} = M^{TE}(y) [E(y)] \text{ pour obtenir } 2N+1 \text{ solutions particulières.}$$

Les $2N+1$ vecteurs formant une base sont construits en accord avec la condition aux limites en 0 :

$$\hat{E}_{n,p}(0) = \delta_{n,p} \quad \text{et} \quad \hat{E}'_{n,p}(0) = -i\beta_p^{(1)} \delta_{n,p}$$

Par intégration on obtient $2N+1$ vecteurs solutions

$$\hat{E}_{n,p}(y) \quad \text{et} \quad \hat{E}'_{n,p}(y)$$

Comme nous sommes dans le cadre d'un problème linéaire d'électromagnétisme, on sait qu'il existe un opérateur \wp linéaire tel que $\wp\left(\left[\hat{E}(0)\right]_p\right) = \left[\hat{E}(a)\right]_p$

On en déduit qu'il existe une matrice T de propagation reliant $\left[E(a)\right]$ à $\left[E(0)\right]$ et que cette matrice est, justement, celle créée par la concaténation des vecteurs colonnes $\hat{E}_{n,p}(y)$ et $\hat{E}'_{n,p}(y)$ calculés précédemment.

Voici pour l'explication succincte de la méthode différentielle.

Rajoutons qu'un empilement de réseaux se traite par le calcul des matrices T de chacun et par leur multiplication : Nous aurons un premier outil pour traiter les cristaux photoniques... qu'il est tout à fait possible de décrire comme un mille-feuille de réseaux bi-périodiques.

b/ La méthode S

Malheureusement, la méthode décrite plus haut souffre d'un gros handicap pour la résolution de l'empilement de réseaux. La solution simple consistant à déterminer les matrices T_j de chaque réseau de l'empilement et à considérer que la matrice de transfert T de l'ensemble est $T = \prod T_j$ est mathématiquement exacte mais numériquement catastrophique. Très vite un bruit numérique enfle et fait s'écrouler le bel édifice. Dans la pratique, les profondeurs autorisées avant que le système ne devienne instable sont très faibles.

Le problème vient de termes exponentiels qui deviennent très grand lorsque N augmente alors que les autres termes de la matrice n'enflent pas. On se retrouve alors dans un cas classique de précision numérique ou {« grand nombre + epsilon » - « grand nombre » } renvoi zéro et non epsilon car les variables informatiques ne peuvent stocker qu'un nombre fini de chiffres significatifs pour chaque valeur.

Heureusement, il existe une méthode pour contourner l'obstacle et c'est l'algorithme S. L'idée est de fragmenter les matrices T et de les combiner dans un certain ordre afin de ne jamais se retrouver dans un cas où la précision numérique de la machine introduirait une erreur. En clair, la soustraction citée plus haut ne doit pas se produire.

Il s'agit d'un algorithme récursif.

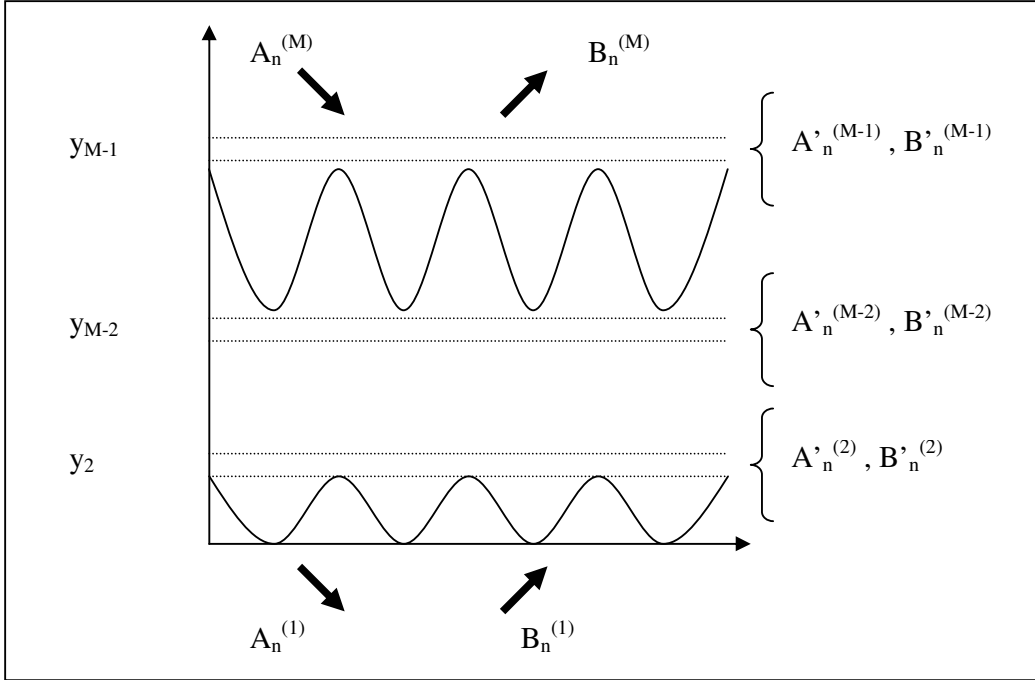


Fig. 12 : Convention pour un empilement de réseaux

Posons d'abord un nouveau formalisme pour un empilement de réseaux selon l'axe y : Les ondes entrantes et sortantes pour chaque face de l'empilement sont déterminées par leur décompositions de Fourier dont les composants sont les $A_n^{(i)}$ ou $B_n^{(i)}$ suivant le sens de propagation et la couche n^o_j où l'on se trouve.

$$\text{On définit } V^{(j)} = \begin{pmatrix} \dots \\ A_n^{(j)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(M)} y_j) \\ \dots \\ B_n^{(j)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(M)} y_j) \\ \dots \end{pmatrix}, \text{ empilement d'une onde entrante et d'une onde}$$

sortante de la couche j .

On définit la transmission $T^{(j)}$ par $V^{(j)} = T^{(j)} \cdot V^{(j-1)}$

$$\text{On a alors } \begin{pmatrix} \dots \\ A_n^{(j)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(j)} y_j) \\ \dots \\ B_n^{(j)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(j)} y_j) \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots \\ A_n^{(j-1)} \\ \dots \\ B_n^{(j-1)} \\ \dots \end{pmatrix}$$

Chaque matrice $T^{(j)}$ de l'empilement est fractionnée en quatre blocs :

$$T^{(j)} = \begin{pmatrix} T_{11}^j & T_{12}^j \\ T_{21}^j & T_{22}^j \end{pmatrix}$$

La méthode S est alors récursive :

$$\begin{aligned} Z^{(1)} &= (T_{11}^{(2)})^{-1} \\ \text{Départ : } S_{12}^{(2)} &= T_{21}^{(2)} \cdot Z^{(1)} \\ S_{22}^{(2)} &= Z^{(1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z^{(q)} &= (T_{11}^{(q+1)} \cdot T_{12}^{(q+1)} \cdot S_{12}^{(q)})^{-1} \\ \text{Incrément : } S_{22}^{(q+1)} &= S_{22}^{(q)} \cdot Z^{(q)} \\ S_{12}^{(q+1)} &= (T_{21}^{(q+1)} \cdot T_{22}^{(q+1)} \cdot S_{12}^{(q)}) \cdot Z^{(q)} \end{aligned}$$

La matrice S de l'empilement complet de M couches est alors :

$$\begin{pmatrix} \dots \\ B_n^{(M)} \cdot \exp(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \dots \\ \dots \\ A_n^{(1)} \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(M-1)} & S_{12}^{(M-1)} \\ S_{21}^{(M-1)} & S_{22}^{(M-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots \\ B_n^{(1)} \\ \dots \\ \dots \\ A_n^{(M)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}) \\ \dots \end{pmatrix}$$

Et nous pouvons directement y lire les matrices de transfert relatives à la transmission ($S_{12}^{(M-1)}$) et à la réflexion ($S_{22}^{(M-1)}$) de l'empilement. Elles n'ont pas souffert de contamination.

Pour savoir quelle épaisseur maximale une tranche peut avoir avant que sa matrice T ne souffre de contamination numérique, il faut vérifier qu'aucun terme plus grand que 10^{15} n'apparaissent sinon des chiffres seront perdus (on part du principe qu'on travaille avec des variables de type double, contenant 16 chiffres significatifs au plus).

Le terme le plus grand d'une matrice T^j étant de l'ordre de $\left| \exp\left[\left(\text{Im} \beta_{\pm N}^{(j)}\right) \cdot \Delta y\right] \right|$ avec Δy l'épaisseur de la tranche. Il faut vérifier que $\left| \exp\left[\left(\text{Im} \beta_{\pm N}^{(j)}\right) \cdot \Delta y\right] \right| < 10^{15}$

c/ Les règles de Li

Il s'agit de règles découvertes empiriquement et concernant la précision de la factorisation de séries de Fourier lorsque l'on travaille avec un nombre fini de coefficients. Mr Lifeng Li les étudia et fournit des bases mathématiques solides à ces règles^[146].

La question d'un point de vue électromagnétique est de représenter au mieux εE_z qui est le produit d'une fonction continue et d'une fonction discontinue ainsi que εE_x et $\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x}$ qui sont tous deux les produits de deux fonctions discontinues. Or chaque élément des produits est traduit par un nombre fini de termes de sa décomposition en espace de Fourier.

Si l'expression du produit de deux fonctions à partir du développement de Fourier de chaque terme est triviale lorsque l'on a une infinité de coefficients, c'est la règle de Laurent, le problème est moins évident lorsque l'on a un nombre fini de termes à disposition : un terme d'erreur apparaît.

$$(fg)_n = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f_{n-m} g_m = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} g_{n-m} f_m$$

mais $(fg)_n = \sum_{m=-N}^{+N} f_{n-m} g_m + \text{Terme d'erreur}$

Définissons à cette occasion la matrice de Toeplitz et sa notation. Une matrice de Toeplitz est une matrice dont les coefficients (n,m) sont les n-m^{ième} coefficients de Fourier d'une fonction. Elle est notée $[[f]]$.

Avec cette nouvelle notation on peut écrire facilement les équations précédentes sous forme matricielle (à l'erreur de troncation près) :

$$[fg] = [[f]][g] = [[g]][f]$$

Le travail de Li a été de chercher le domaine de validité de cette expression tronquée qui est valable presque tout le temps mais qui, en certains points, mène à un terme d'erreur trop important.

1. Règle 1 : Si les fonctions f et g sont continues par parties, bornées, périodiques et qu'il n'existe pas de points où les deux fonctions sont discontinues à la même abscisse alors la règle de Laurent est valide pour les séries tronquées

$$(fg)_n^{\{N\}} = \sum_{m=-N}^{+N} f_{n-m} g_m$$

2. Règle 2 : Si les fonctions f et g sont continues par parties, bornées, périodiques et que si f et g présentent des discontinuités aux mêmes abscisses mais que ces discontinuités se compensent de telle sorte que fg soit continu à ces abscisses alors la règle de Laurent n'est pas valide mais on peut utiliser la règle inverse :

$$(fg)_n^{\{N\}} = \sum_{m=-N}^{+N} \left(\left[\left[\frac{1}{f} \right] \right]_{n,m}^{\{N\}} \right)^{-1} \cdot g_m$$

3. Règle 3 : Si les fonctions f et g sont discontinues aux mêmes abscisses et que le produit fg est lui aussi discontinu à ces abscisses, alors on ne peut appliquer ni la règle de Laurent ni la règle inverse.

La règle 1 s'explique par le fait que si l'une des deux fonctions est continue sur le point considéré alors ses coefficients vont décroître au moins en $1/n^2$. Remplacer les termes d'ordres supérieurs par zéro aura donc peu d'impact. La troncation des termes de la

fonction discontinue, qui ne décroissent eux qu'en $1/n$, est alors sans impact car les termes manquants seraient de toute façon multipliés par les termes proches de zéros de la fonction précédente.

On peut remarquer à ce propos que la troncation de la fonction discontinue étant plus grave que celle de la fonction continue (rapidité de convergence en $1/n$ ou $1/n^2$), il est plus avantageux d'utiliser la fonction continue sous forme de Toeplitz (qui tronque plus tôt).

Si f est continue et g discontinue $(fg)_n^{\{N\}} = \sum_{m=-N}^{+N} f_{n-m} g_m$ donnera de meilleurs résultats

$$\text{que } (fg)_n^{\{N\}} = \sum_{m=-N}^{+N} g_{n-m} f_m.$$

La règle 2 peut s'expliquer par application de la règle 1 au produit $\frac{1}{f} \cdot (fg)$.

Le terme (fg) étant continu et $1/f$ discontinu, l'application de la règle stipule que l'on peut écrire :

$$g_n^{\{N\}} = \sum_{m=-N}^{+N} \left[\left[\frac{1}{f} \right]_{n,m}^{\{N\}} \cdot (fg)_m \right] \Leftrightarrow [g] = \left[\left[\frac{1}{f} \right] [fg] \right]$$

En multipliant par $\left[\left[\frac{1}{f} \right] \right]^{-1}$ on obtient l'expression de la règle inverse : $\left[\left[\frac{1}{f} \right] \right]^{-1} [g] = [fg]$.

Ces règles ont un grand intérêt pour notre problème car dans les produits issus des expressions de Maxwell que nous devons calculer sous la forme de produits de développement de Fourier tronqués, plusieurs peuvent se voir appliquer la règle 2. Ceci mène à des erreurs de troncation moindres et une convergence rapide des solutions. Voire à la convergence de certains cas difficiles (grand contraste d'indice, une interface métal réel/diélectrique réel par exemple) qui ne pourraient pas être traités sans cela.

Dans le cadre de réseaux lamellaires, le produit εE_z vaut D_z , normal au profil, est continu, on peut donc lui appliquer la règle 2. Le produit $\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x}$ est proportionnel à E_y et est donc aussi continu dans le cas de réseaux lamellaires car purement tangentiel, on peut lui appliquer la règle 2.

Pouvoir utiliser la règle 2 en dehors du cas des réseaux lamellaires, pour un profil quelconque, est l'un des points forts de la FFF. Cela se fera grâce à l'emploi d'une base géométrique variant au long de la structure et assurant que la décomposition des champs se fasse toujours sur des directions normales ou tangentielles à la structure.

Pouvant ainsi utiliser la règle 2 même pour des géométries exotiques, la FFF permet d'assurer la convergence de cas difficilement traitables auparavant.

d/ La FFF

La FFF ou Fast Fourier Factorization^[118] est une méthode développée par les Mrs Nevrière et Popov de l'institut Fresnel.

La FFF permet de simuler des cristaux photoniques infinis en largeur mais d'épaisseur finie. La partie effectivement simulée est la maille élémentaire qui permet de reconstruire l'objet complet par périodicité selon l'axe y (voir figure).

Le principe en revient à décomposer la maille élémentaire (qui contient quatre cylindres dans l'exemple ci-dessous) en tranches, à passer dans l'espace des fréquences en effectuant la transformée de Fourier de toutes les valeurs mises en jeu, à calculer les matrices de transfert de chaque tranche via la méthode différentielle et à empiler les transmissions des tranches successives.

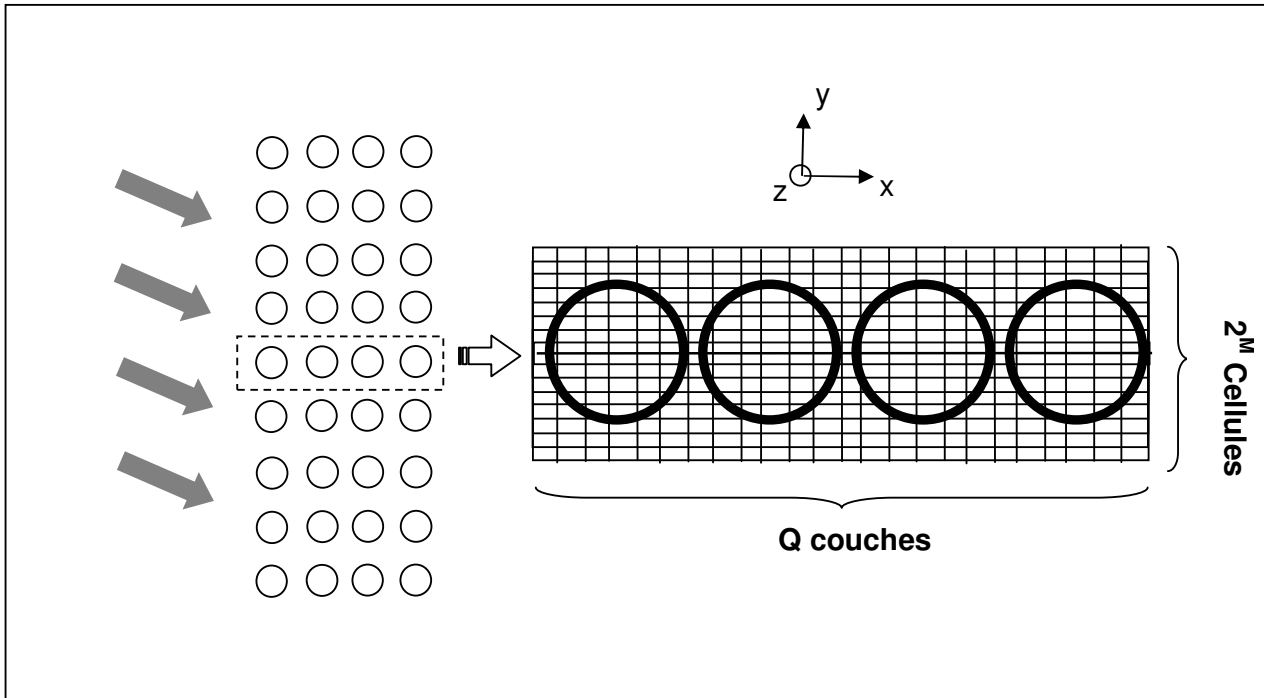


Fig. 13 : Echantillonnage type d'un cristal photonique à 4 rangées de cylindres pour un traitement par FFF.

La FFF se démarque sur deux points d'une méthode différentielle standard.

- le problème de la discontinuité des champs aux interfaces est réglé grâce à une décomposition dans une base géométrique mobile prenant en compte la géométrie des structures : en tout point le champ est décomposé sur les axes fournis par la normale et la tangente à la surface locale. La règle inverse de Li peut alors être utilisée partout, ce qui accélère spectaculairement la convergence et débloque des cas insolubles autrement.
- L'algorithme S permet d'empiler les couches épaisses sans soucis d'instabilité numérique faisant ainsi sauter le verrou de l'épaisseur de la structure à simuler.

La FFF fournit à la fois cartes de champ et taux de transmission. Les données d'entrée de la méthode sont une carte des permittivités d'une cellule élémentaire du cristal photonique. Cette cellule est maillée avant de subir une FFT pour passer dans l'espace des fréquences. La prise en compte d'inclusions inhomogènes, qui s'avéreront nécessaires lors de la simulation des effets non-linéaires, se fait naturellement.

Passons maintenant au côté pratique de la méthode FFF 2D.

La maille élémentaire de l'échantillon est divisée en Q couches. Chaque couche doit être assez fine pour qu'on considère qu'il n'y ait pas de variation de permittivité au long de l'épaisseur. Chaque couche est échantillonnée en 2^M cellules : il doit y en avoir suffisamment pour satisfaire deux conditions : traduire avec une échelle suffisante les variations de permittivité qui seront induites par l'effet Kerr et être suffisamment nombreuses pour que le calcul de la transformée de Fourier de la permittivité au long d'une couche soit correct. (On passe par le biais d'une Fast Fourier Transform (FFT), d'où la puissance de deux dans le choix du nombre d'échantillons).

Dorénavant $[\mathcal{E}]$ et $[E]$ dénoteront les vecteurs colonne contenant les $2N+1$ composants de Fourier de ε et E .

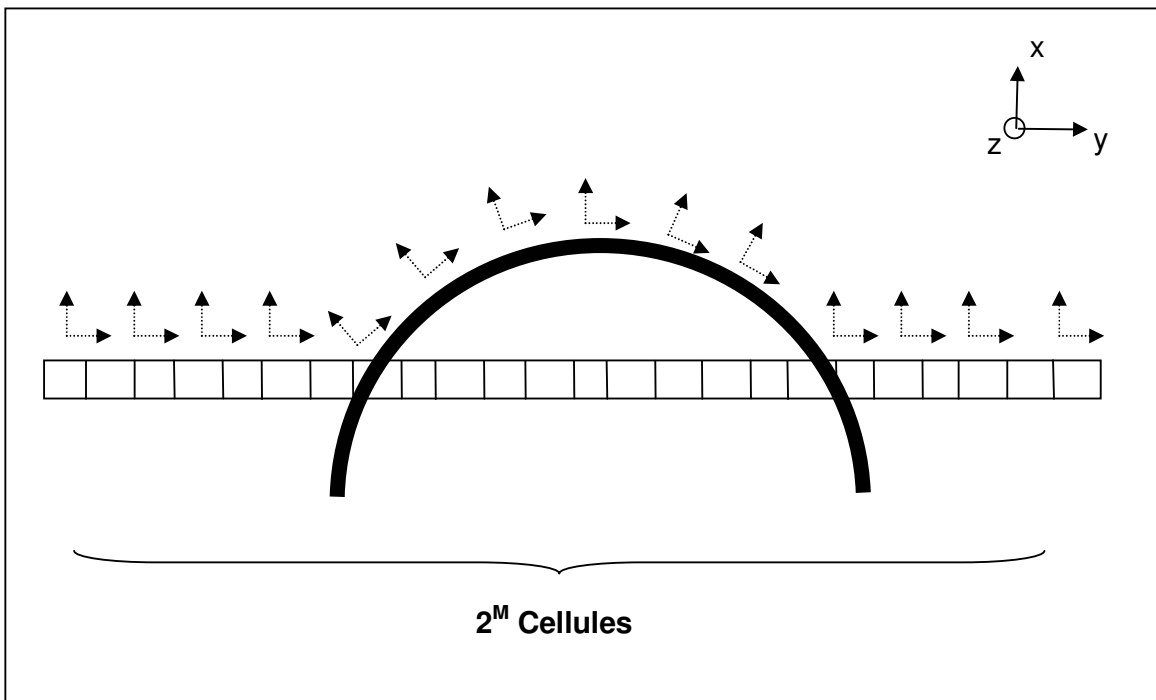


Fig. 14 : Exemple de base mobile dans le cas d'un demi-cylindre

Il faut ensuite créer la base mobile (\vec{T}, \vec{N}) qui permettra de tirer pleinement partie des règles de Li. On peut voir ci-dessus l'exemple d'une couche qui traverse un cylindre. Les vecteurs (\vec{T}, \vec{N}) se calquent sur le vecteur normal et tangent du cylindre, même là où la surface du cylindre n'est pas dans la couche. En toute rigueur, il suffit que (\vec{T}, \vec{N}) soit compatible avec la pente de la frontière cylindre-matériau extérieur mais imposer le respect de cette pente partout simplifie l'algorithme.

Les vecteurs (\vec{T}, \vec{N}) seront ensuite mis sous forme de décomposition de Fourier.

Nous pouvons alors calculer la matrice Q_ϵ reliant le champ E à l'induction D tel que $[\vec{D}] = Q_\epsilon [\vec{E}]$. Comme on a travaillé dans une base mobile, on peut considérer que D est continu aux interfaces et profiter de la règle inverse de Li pour le calcul.

Son expression est donnée par

$$Q_\epsilon = \begin{bmatrix} \left[\epsilon \right] \left[N_y^2 \right] + \left[\frac{1}{\epsilon} \right]^{-1} \left[N_x^2 \right] & - \left(\left[\epsilon \right] - \left[\frac{1}{\epsilon} \right]^{-1} \right) \left[N_x N_y \right] & 0 \\ - \left(\left[\epsilon \right] - \left[\frac{1}{\epsilon} \right]^{-1} \right) \left[N_x N_y \right] & \left[\epsilon \right] \left[N_x^2 \right] + \left[\frac{1}{\epsilon} \right]^{-1} \left[N_y^2 \right] & 0 \\ 0 & 0 & \left[\epsilon \right] \end{bmatrix}$$

La matrice Q_μ telle que $[\vec{B}] = Q_\mu [\vec{H}]$ est simple dans un matériau non magnétique et

vaut simplement $Q_\mu = \mu_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ & \ddots \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

Après projection sur les trois axes x,y et z, les équations de maxwell donnent le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial [E_z]}{\partial y} - \frac{\partial [E_y]}{\partial z} = i\omega [B_x] \\ \frac{\partial [E_x]}{\partial z} - \frac{\partial [E_z]}{\partial x} = i\omega [B_y] \\ \frac{\partial [E_y]}{\partial x} - \frac{\partial [E_x]}{\partial y} = i\omega [B_z] \\ \frac{\partial [H_z]}{\partial y} - \frac{\partial [H_y]}{\partial z} = -i\omega [D_x] \\ \frac{\partial [H_x]}{\partial z} - \frac{\partial [H_z]}{\partial x} = -i\omega [D_y] \\ \frac{\partial [H_y]}{\partial x} - \frac{\partial [H_x]}{\partial y} = -i\omega [D_z] \end{array} \right.$$

De ce système d'équation et des relations $[\vec{B}] = Q_\mu [\vec{H}]$ et $[\vec{D}] = Q_\epsilon [\vec{E}]$, on va tirer l'équation caractéristique de la méthode différentielle:

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} \text{ à l'intérieur de chaque couche}$$

(Une matrice M pour chaque couche).

On peut noter qu'avec cette expression du vecteur $F = \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix}$, on traite les cas TE et TM

en une fois.

La matrice M a une expression assez complexe basée sur les composants de Q_ε et Q_μ

$$M = \begin{bmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} & M_{1,3} & M_{1,4} \\ M_{2,1} & M_{2,2} & M_{2,3} & M_{2,4} \\ M_{3,1} & M_{3,2} & M_{3,3} & M_{3,4} \\ M_{4,1} & M_{4,2} & M_{4,3} & M_{4,4} \end{bmatrix}$$

avec

$$M_{11} = -i\alpha Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yx} - iQ_{\mu,yy} Q_{\mu,yy}^{-1} \gamma$$

$$M_{12} = -i\alpha Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yz} - iQ_{\mu,zy} Q_{\mu,yy}^{-1} \alpha$$

$$M_{13} = i\omega Q_{\mu,zy} Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yx} - i \frac{\alpha}{\omega} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \gamma - i\omega Q_{\mu,zx}$$

$$M_{14} = i\omega Q_{\mu,zy} Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yz} + i \frac{\alpha}{\omega} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \alpha - i\omega Q_{\mu,zz}$$

$$M_{21} = -i\gamma Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yx} + iQ_{\mu,xy} Q_{\mu,yy}^{-1} \gamma$$

$$M_{22} = -i\gamma Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yz} - iQ_{\mu,xy} Q_{\mu,yy}^{-1} \alpha$$

$$M_{23} = -i\omega Q_{\mu,xy} Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yx} - i \frac{\gamma}{\omega} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \gamma + i\omega Q_{\mu,xx}$$

$$M_{24} = -i\omega Q_{\mu,xy} Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yz} + i \frac{\gamma}{\omega} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \alpha + i\omega Q_{\mu,xz}$$

$$M_{31} = -i\omega Q_{\varepsilon,zy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yx} + i \frac{\alpha}{\omega} Q_{\mu,yy}^{-1} \gamma + i\omega Q_{\varepsilon,zx}$$

$$M_{32} = -i\omega Q_{\varepsilon,zy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yz} - i \frac{\alpha}{\omega} Q_{\mu,yy}^{-1} \alpha + i\omega Q_{\varepsilon,zz}$$

$$M_{33} = -i\alpha Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yx} - iQ_{\varepsilon,zy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \gamma$$

$$M_{34} = -i\alpha Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yz} + iQ_{\varepsilon,zy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \alpha$$

$$\begin{aligned}
M_{41} &= -i\omega Q_{\varepsilon,xy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yx} + i \frac{\gamma}{\omega} Q_{\mu,yy}^{-1} \gamma + i\omega Q_{\varepsilon,xx} \\
M_{42} &= -i\omega Q_{\varepsilon,xy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} Q_{\varepsilon,yz} - i \frac{\gamma}{\omega} Q_{\mu,yy}^{-1} \alpha + i\omega Q_{\varepsilon,xz} \\
M_{43} &= -i\gamma Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yx} + i Q_{\varepsilon,xy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \gamma \\
M_{44} &= -i\gamma Q_{\mu,yy}^{-1} Q_{\mu,yz} - i Q_{\varepsilon,xy} Q_{\varepsilon,yy}^{-1} \alpha
\end{aligned}$$

Où α et γ sont des matrices issues de α_0 et γ_0 déterminant l'angle d'incidence de l'onde incidente $\vec{E}^{(i)} = \vec{A} \exp(i(\alpha_0 x + \beta_0 y + \gamma_0 z))$

$$[\alpha] = \begin{pmatrix} \alpha_0 - N \frac{2\pi}{d_x} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & & \\ 0 & & & \alpha_0 + N \frac{2\pi}{d_x} \end{pmatrix} \text{ et } [\gamma] = \begin{pmatrix} \gamma_0 - N \frac{2\pi}{d_z} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & & \\ 0 & & & \gamma_0 + N \frac{2\pi}{d_z} \end{pmatrix}$$

Une fois les matrices M (une par couche) déterminées, on calcule successivement les matrices de transfert de chaque couche. La méthode employée est la « shooting method » et le l'algorithme d'intégration est un Runge-Kutta d'ordre 4.

Comme l'on fait des « couches » fines dans cet empilement, il en découle deux avantages : D'une part la matrice M est considérée constante dans chaque couche et (Valeur M fixe et non M(y)) ce qui simplifie le calcul d'intégration, mais d'autre part la finesse de la couche nous permet de nous contenter d'un Runge-Kutta d'ordre quatre, très rapide et à la précision très suffisante.

Ceci dit, il n'y a pas d'obstacle théorique à faire des couches plus épaisses, possédant une matrice M(y) variable et intégrable avec des algorithmes plus évolués que Runge-Kutta. Ce serait toutefois numériquement beaucoup plus lourd en temps de calcul pour un résultat identique*.

Pour appliquer la shooting method on va commencer par fabriquer $2*(2N+1)$ ondes incidentes indépendantes et propagatives, et $2*(2N+1)$ ondes incidentes indépendantes et contra-propagatives.

Les $V_{eh,p}^{(j-1)}$ correspondant aux vecteurs de tirs pour la couche j-1 peuvent être écrits sous

$$\text{la forme : } V_{eh,p}^{(j-1)} = \begin{pmatrix} [E_z] \\ [H_z] \\ [E_z] \\ [H_z] \end{pmatrix} \text{ avec une partie propagative au dessus et une partie contra-}$$

propagative en dessous

* Un tel algorithme a été écrit durant la thèse. Il a fini de nous persuader que mieux valait diviser notre cristal photonique en beaucoup de couches très fines facilement intégrables qu'en peu de couches nécessitant des intégrations délicates et donc lourdes en temps de calcul.

On en veut $2 \cdot (2N+1)$ indépendants. Ce qui donne si on les note les un à la suite des autres dans la même matrice

$$V_{ep}^{(j-1)} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{pmatrix} \text{ pour le propagatif ...}$$

$$\text{et } \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{pmatrix} \text{ pour le contra propagatif.}$$

Cela revient à la matrice identité $\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ & & 1 \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$ de dimension $(8N+4) \cdot (8N+4)$

Les conditions aux limites donnent des valeurs pour $\frac{dE_z}{dy} = -i\beta_n^{(M)} \cdot \delta_{n,p}$ et aussi pour $\frac{dH_z}{dy} = cst \cdot \delta_{n,p}$. De ces conditions aux limites on va tirer une matrice de transfert

$$\Psi_{eh}^{(j-1)} \text{ qui permet de passer de la notation } \begin{pmatrix} [E_z] \\ [H_z] \\ [E_z] \\ [H_z] \end{pmatrix} \text{ à la notation } \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix}.$$

$$\Psi_{eh}^{(j)} = \begin{pmatrix} p & q_e & p & -q_e \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ q_h & p & -q_h & p \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ avec } \begin{aligned} p_{m,n} &= \delta_{m,n} \frac{-\gamma_0 \alpha_n}{k_M^2 - \gamma_0^2} \\ q_{e,mn} &= \delta_{m,n} \frac{\omega \mu_0 \beta_n^{(M)}}{k_M^2 - \gamma_0^2} \\ q_{h,mn} &= -\delta_{m,n} \frac{\omega \epsilon_M \beta_n^{(M)}}{k_M^2 - \gamma_0^2} \end{aligned}$$

$$\text{On a alors } F(y_{j-1}) = \begin{pmatrix} [E_x(y_{j-1})] \\ [E_z(y_{j-1})] \\ [H_x(y_{j-1})] \\ [H_z(y_{j-1})] \end{pmatrix} = \Psi_{eh}^{(j-1)} \cdot V_{eh}^{(j-1)}$$

L'ensemble des vecteurs de tirs ayant été transformés par application de la matrice de transfert $\Psi_{eh}^{(j-1)}$ en vecteurs F, ils peuvent maintenant être intégrés via la

$$\text{relation } \frac{d}{dy} \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} [E_x] \\ [E_z] \\ [H_x] \\ [H_z] \end{pmatrix}. \text{ C'est-à-dire que grâce au système différentiel, on pourra}$$

par un Runge-Kunta d'ordre quatre faire se propager chaque vecteur $V_{eh,p}^{(j-1)}$ sur la couche décrite par M.

En appliquant $(\Psi_{eh}^{(j-1)})^{-1}$ nous pouvons retranscrire les vecteurs de tirs résultats dans la bonne notation, ils forment alors la matrice de transfert T de la couche telle que :

$$\begin{pmatrix} \dots \\ A_n^{(j)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(j)} y_j) \\ \dots \\ \dots \\ B_n^{(j)} \cdot \exp(-i\beta_n^{(j)} y_j) \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots \\ A_n^{(j-1)} \\ \dots \\ \dots \\ B_n^{(j-1)} \\ \dots \end{pmatrix}$$

Une fois tous les T connus, il ne reste plus qu'à appliquer l'algorithme S décrit au paragraphe précédent pour retrouver la transmission totale.

Mais on ne s'arrête pas là. Tous les S calculés au fur et à mesure de l'algorithme S, qui concernent la transmission entre des empilement de plus en plus importants de couches, nous donne une autre information précieuse. Ces S nous permettent de calculer les A_n et B_n pour chaque couche.

Ces A_n et B_n sont la décomposition de Fourier des ondes propagatives et contra propagatives dans la couche considérée. Une fois repassé de l'espace des fréquences spatiales vers l'espace réel et sommé, ils nous donne la valeur du champ dans la couche. On obtient ainsi la carte de champs du cristal photonique.

2/ La FFF-Kerr

Nous avons décrit dans les parties précédentes la FFF telle que décrite par ses inventeurs. Il s'agit maintenant de l'utiliser comme socle pour en faire un algorithme capable de simuler un cristal photonique à effet Kerr.

Comme nous allons le voir, la FFF s'y prête bien.

La figure 13 montre le maillage typique d'une cellule élémentaire. Ce maillage doit respecter deux conditions :

- L'échantillonnage sur les deux dimensions doit être assez fin pour qu'il décrive correctement la carte des permittivités et la carte de champ. La bonne prise en compte de l'effet Kerr le nécessite.
- Les tranches doivent être assez fines pour que l'intégration de la matrice M se fasse par un seul pas de Runge-Kutta d'ordre 4. Utiliser moins de tranches les rend plus épaisses, donc nécessitant des méthodes d'intégrations plus subtils que la RK4 ce qui au final se révèle contre-productif en terme de temps de calcul.

Il existe en fait une troisième condition à respecter : comme vu dans le paragraphe précédent, aucune tranche ne doit avoir une épaisseur qui ne respecte pas la condition $\left| \exp\left[\left(\text{Im } \beta_{\pm N}^{(j)} \right) \cdot \text{epaisseur}_{Tranche} \right] \right| < 10^{15}$ sous peine d'apparition d'erreurs voire d'instabilités. Mais dans les faits, comme on choisit justement de prendre un grand nombre de tranches fines, cette condition est toujours respectée.

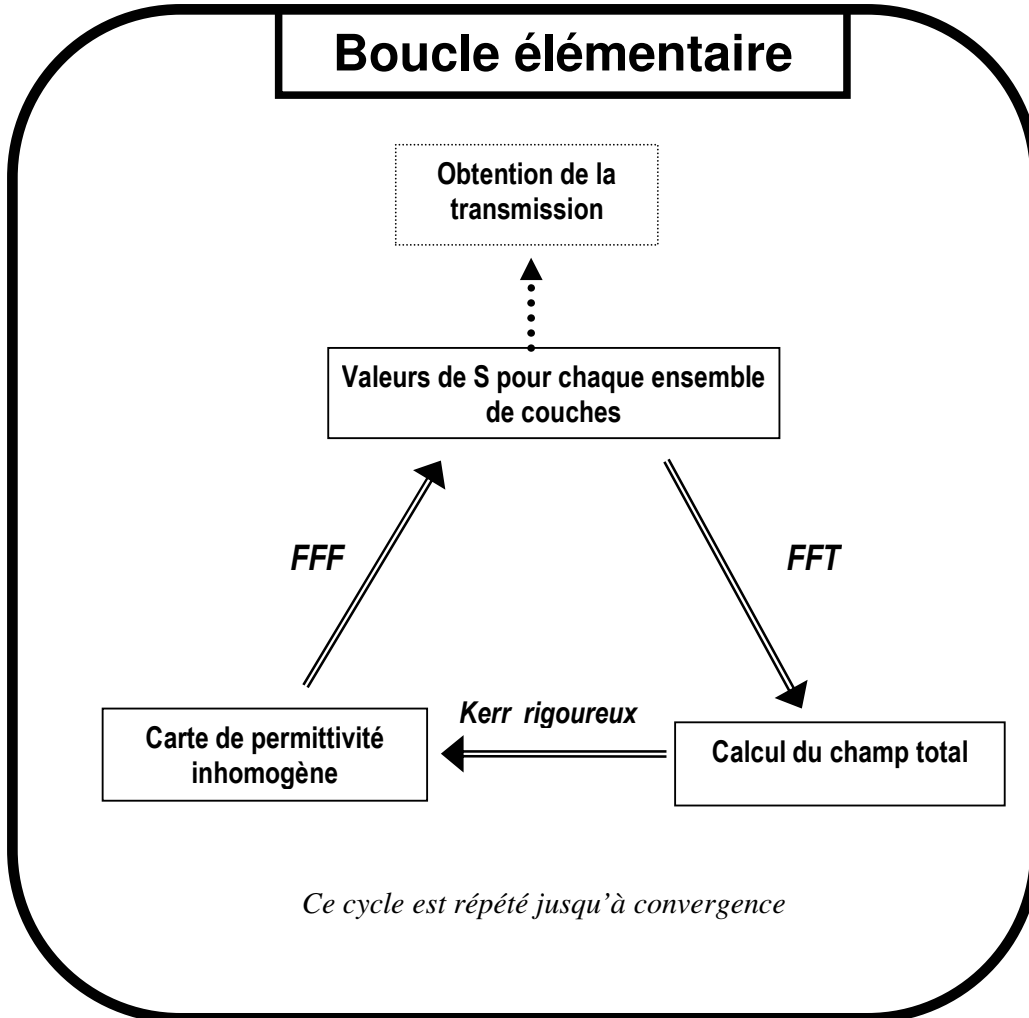
Le cycle élémentaire de la FFF Kerr n'est pas éloigné de celui de la HMSM (voir figure suivante). Il repose aussi sur un schéma itératif consistant à utiliser la carte de permittivité qui vient d'être calculé comme point de départ de l'itération suivante. Si le système converge vers une réponse, cette réponse à un sens physique (accord carte de permittivité – champ).

Plus pratiquement, après application de la FFF à une carte de permittivité, on obtiens les matrices de transfert de type S de chaque empilement de couches (ie les piles {1} {1,2} {1,2,3} ... {1,2,...,N}). Connaissant la transmission de chacune de ces piles, on peut remonter aux valeurs de A_n et B_n de chaque dessus de pile via la relation.

$$\begin{pmatrix} \dots \\ B_n^{(M)} \cdot \exp\left(i\beta_n^{(M)} y_{M-1}\right) \\ \dots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(M-1)} & S_{12}^{(M-1)} \\ S_{21}^{(M-1)} & S_{22}^{(M-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ A_n^{(M)} \cdot \exp\left(-i\beta_n^{(M)} y_{M-1}\right) \\ \dots \end{pmatrix}$$

On a simplement repris la relation habituelle de S en imposant qu'il n'y ait pas d'onde incidente sur la face arrière (on éclaire d'un seul coté) et que l'on éclairait la face avant avec une onde connue (ici une onde plane).

Connaissant le S de la pile, les A_n et B_n calculables par l'expression ci-dessus sont la décomposition en série de Fourier des champs propagatif et contra-propagatif présents à la surface de la pile. Donc, pour une pile $\{1,2,\dots,p\}$ on a le champ à l'interface couche p / couche $p+1$. Par extension, comme nos couches sont très fines, on discrétise le champ en admettant que les valeurs trouvées décrivent correctement le champ dans la couche $p+1$.



Passer des A_n et B_n aux valeurs du champ dans l'espace réel ne demande qu'une FFT. Et comme on a pris soin de travailler avec une carte de champ échantillonnée exactement comme notre carte des permittivités, les choses se passent naturellement, le nombre de points fournis à la FFT étant justement le nombre de points voulus dans l'espace réel. On évite ainsi des problèmes d'échantillonnage sources de bruit numérique.

Une fois toutes les piles traitées, on dispose d'une carte de champ détaillée. Ce champ va permettre d'appliquer tout naturellement l'effet Kerr point par point et de créer une nouvelle carte des permittivités. Et le cycle élémentaire recommencera, jusqu'à que la différence entre deux cartes de permittivités successives soit inférieure à une valeur arbitrairement choisi par l'utilisateur. Cette valeur doit être choisie suffisamment petite afin d'être sûr de la convergence et d'éviter d'arrêter trop tôt le cycle.

La dernière matrice S relative à la pile complète de tranches, l'ensemble du cristal photonique, fournit alors les valeurs de transmission et réflexion de l'objet sur chaque ordre de diffraction de l'objet*.

Intéressons nous maintenant à la précision de la méthode, ou plutôt trouvons les points qui limitent sa précision. L'information est d'importance pour l'utilisateur s'il ne veut pas se retrouver dans la position délicate de celui qui fait confiance à des résultats faux.

Trois paramètres sont directement accessibles pour contrôler la précision de la méthode

- La troncature des développements de Fourier. Il y en a $2N+1$ et évidemment augmenter N est bénéfique mais alourdi de plus en plus le poids numérique de l'algorithme.
- La finesse des couches.
- Le nombre de points par couche

Commençons par la finesse des couches. On trouvera figure 15 les résultats d'un test fait sur un cristal photonique typique de nos utilisations (pas de maille carré 336nm, Cylindres d'indice 3 baignés par le vide, diamètre 94nm). On a dans ce test volontairement pris un nombre de tranches trop peu important et comparé le résultat à la MSM dans le cas linéaire.

Les tranches sont évidemment trop épaisses, pourtant à 40 tranches par cylindre on est déjà à moins de 10% d'erreur sur toute la bande spectrale (courbes FFF et MSM de la fig. 15a confondues). A 80 tranches on tombe en dessous de 5% même au pire endroit (bord de gap courte longueur d'onde)

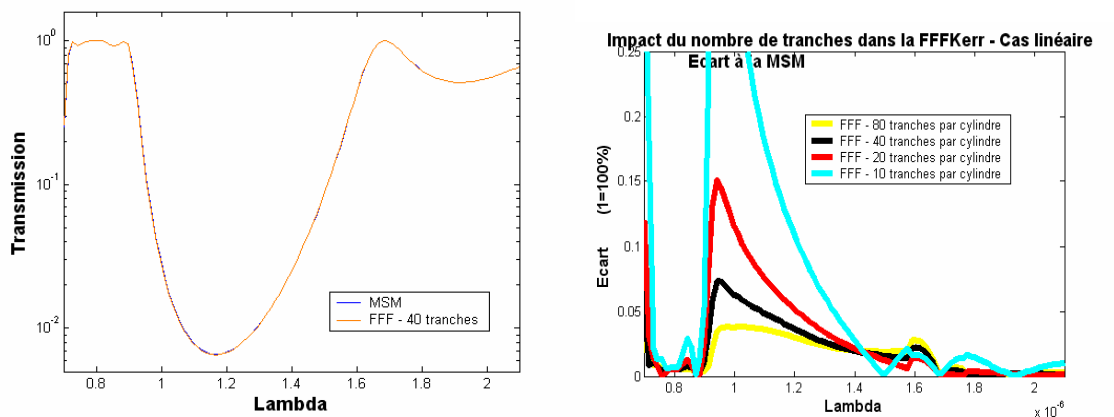


Fig. 15a et b : Impact de l'épaisseur des tranches sur la précision

Pour juger de l'impact du nombre (Il y en a $2N+1$) de coefficients de Fourier utilisés et de la finesse de l'échantillonnage (nombre de points par tranche), on s'est livré à l'expérience suivante : On a simulé un cristal photonique constitué de minuscules

* Dans le cas usuel des cristaux photoniques, on aura tout intérêt à s'assurer via le rapport entre la longueur d'onde et le/les pas de maille qu'il ne puisse exister qu'un seul ordre de diffraction : l'ordre zéro.

inclusions, si petites que le nombre usuel de coefficients de Fourier peine à contenir correctement l'information (Fig. 16).

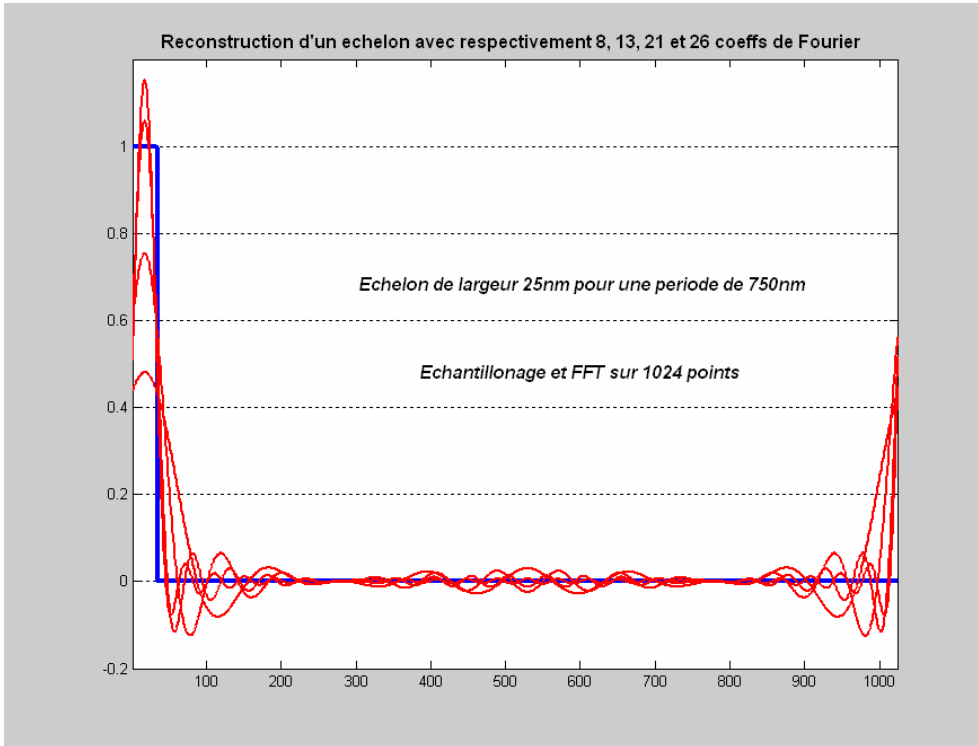


Fig 16 : Profil effectivement contenu par une série de Fourier tronquée à diverses longueurs et censée représenter une petite inclusion (courbe bleue)

L'inclusion fait 25nm de largeur pour un pas de maille de 750nm (courbe bleue figure 16). L'échantillonnage de 1024 points assure que cette petite inclusion est « vue » par la FFT. On reconstruit ensuite les courbes associées aux développements tronqués issus de la FFT. On s'aperçoit que même avec 26 coefficients le profil n'est pas rendu avec satisfaction. L'information relative à la forme de l'inclusion n'est pas correctement contenue dans les informations que l'on va injecter dans la FFF (qui ne travaille qu'avec le développement de Fourier tronqué de ϵ)

Pourtant les valeurs de transmission fournies par la FFF convergent très vite :

Nb de coefficients = 7+1	T = 0,9685
Nb de coefficients = 12+1	T = 0,9687
Nb de coefficients = 20+1	T = 0,9687
Nb de coefficients = 25+1	T = 0,9687

Le nombre de coefficients utilisés devient rapidement sans importance dès que l'on utilise au moins 13 coefficients alors même que ces coefficients ne suffisent pas encore à reconstruire correctement le profil de permittivité.

Hypothèse : les structures sont minuscules devant la longueur d'onde ($3\mu\text{m}$). Les détails à haute fréquence spatiale sont donc sans importance et seules comptent les premières valeurs du développement. Il serait donc important d'obtenir des valeurs précises pour ces

premiers coefficients tandis que les autres pourraient être omis. Or la précision des valeurs des coefficients de Fourier dépend du nombre d'échantillons utilisés pour le calcul.

L'hypothèse se vérifie en pratique en jouant sur l'échantillonnage : On utilise seulement 13 coefficients de Fourier dans la FFF mais ces coefficients sont calculés plus ou moins précisément en utilisant un échantillonnage plus ou moins fin.

Nb_points_d'échantillonnage = 64	T = 0,9704
Nb_points_d'échantillonnage = 128	T = 0,9704
Nb_points_d'échantillonnage = 256	T = 0,9704
Nb_points_d'échantillonnage = 512	T = 0,9669
Nb_points_d'échantillonnage = 1024	T = 0,9687
Nb_points_d'échantillonnage = 2048	T = 0,9687

Voilà qui prouve que ce n'est pas tant le nombre de coefficients que leur exactitude qui importe.

Si l'on veut optimiser la précision de la FFF, il vaut mieux échantillonner les permittivités sur plus de points plutôt que d'augmenter le nombre de coefficients de Fourier pris en compte.

Dernier point sur la FFF-Kerr : Concernant les vitesses d'exécutions, la FFF s'avère à l'usage significativement plus rapide que la HMSM à précision comparable.

3/ La FFF-Thermique

Nous avons aussi étudié au cours de la thèse des matériaux non linéaires qui tout en restant solide présentent la remarquable propriété de changer de phase suivant leur température. La maille atomique de ces matériaux se réorganise et en change radicalement les propriétés optiques. Le changement peut être ultra-rapide (quelques picosecondes) et il est initié par le franchissement d'une température seuil.

Nous désignons cette famille de matériau par le terme de «matériaux à effet non-linéaire thermique». Pour des raisons de propriété industrielle, nous ne pouvons pas rentrer plus dans les détails.

Ils sont d'un grand intérêt mais nécessitent une étude de leur comportement dynamique lors de l'éclairement par un flash laser afin d'avoir accès aux renseignements importants.

Nous n'avons en effet pas besoin de connaître la réponse électromagnétique de ce genre de matériau monté en cristal photonique lorsqu'il est à température d'équilibre (totalité du matériau au-dessus de la température seuil). Cette information n'a pas d'intérêt car un flash laser est bien trop court pour amener la totalité du matériau au-dessus de cette température de façon homogène : l'énergie thermique n'ayant que peu de temps pour se propager dans le cristal photonique, les changements de phase du matériau non-linéaire thermique sont localisés sur des points chauds dont la position et la taille varient au cours du flash.

L'information importante ici est l'évolution à très petite échelle de temps (inférieure à la nanoseconde) de la carte des températures et son influence sur la carte de champs... qui influence à son tour la carte des températures en fournissant le terme source d'énergie.

Nous avons donc besoin d'un algorithme capable de simuler et surveiller le comportement dynamique d'un cristal photonique créé à partir de matériau à non-linéarité thermique.

Nous pouvons bâtir un tel outil en partant de la FFF.

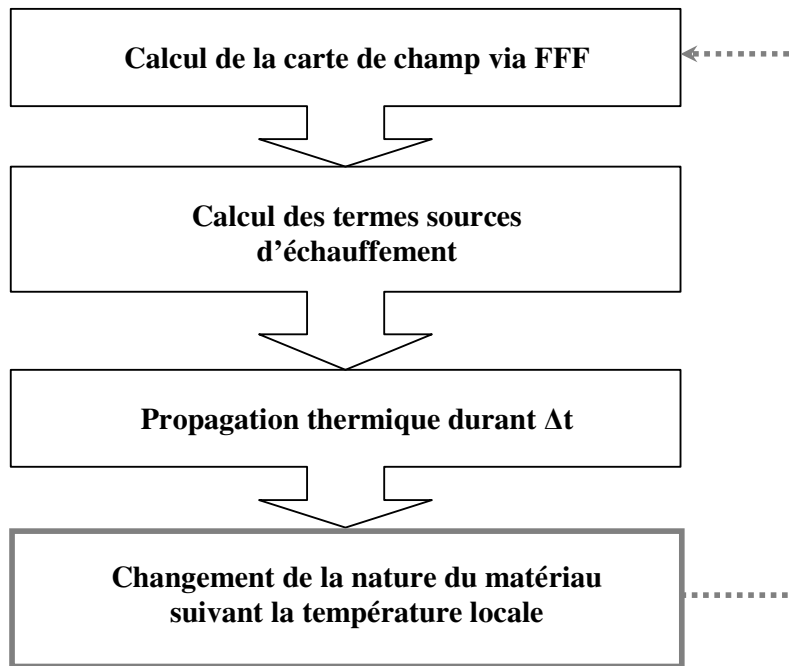
Afin d'étudier le comportement dynamique de nos nanostructures de matériau non linéaire thermique, nous avons besoin d'un nouvel outil de simulation faisant le lien entre le comportement électromagnétique de la structure, la propagation de la chaleur à l'intérieur, et la modification des caractéristiques du matériau en fonction de cette température. L'échelle de temps de la simulation doit être compatible avec l'étude d'une impulsion laser courte.

Le problème revient donc à coupler un algorithme électromagnétique adapté aux cristaux photoniques à un algorithme de simulation thermique.

Le réflexe lorsque l'on veut faire du temporel avec des nanostructures est de penser « FDTD ». Nous avons pourtant évité cette solution.

D'abord, le problème de sa gourmandise en mémoire vive qui rend insoluble notre problème sur un PC usuel, voire sur une grappe de PCs usuels, est toujours d'actualité. Ensuite, les échelles de temps que nous allons considérer, bien que très courtes, sont encore suffisantes pour que l'on parle du point de vue électromagnétique d'une succession d'états en régime harmonique calculables bien plus rapidement par un unique passage FFF que par une longue successions d'itérations FDTD.

La structure de l'algorithme devra donc ressembler à :



Le calcul des termes sources d'échauffement se fait de façon directe vis-à-vis de la carte de champ : il est proportionnel au carré du champ et le coefficient de proportionnalité est lié à l'absorption du matériau.

$$\frac{\partial Q}{\partial x \partial y \partial z} = \frac{\pi \cdot c}{\lambda} \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_r \cdot |E_{\max}^2| \quad \text{ou} \quad \frac{\partial Q}{\partial x \partial y \partial z} = \frac{4 \cdot \pi \cdot k}{\lambda} \cdot \frac{\epsilon_0 \cdot c}{2} \cdot n \cdot |E_{\max}^2|$$

avec Q la quantité de chaleur

La propagation thermique est régie par l'équation de la chaleur

$$\tau \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \text{div}(\text{grad } T)$$

Le terme d'ordre deux est généralement omis car négligeable en dehors des temps ultra-courts et la résolution se fait classiquement par une méthode aux éléments finis (FEM¹⁴⁷). Nous avons choisi la méthode explicite directe de préférence à Crank-Nicolson*, Combines, ADE ou ADI car mieux elle est mieux adaptée à la taille de notre problème. Lors d'un passage de l'algorithme en 3D, la question devra être reconsidérée et nos derniers travaux tendent à montrer la supériorité dans ce cas de l'ADE (Alternante Direction Explicit) pour ce qui est du rapport précision/coût numérique.

Notre formule itérative (ramené ici à une dimension pour des soucis de clarté) sera

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{(\Delta x)^2}$$

avec T_i^n la température à l'instant n au point i

Le problème ici est que la FEM va travailler avec un pas temporel Δt si court que le terme d'ordre deux de l'équation différentielle n'est plus négligeable^[148]. Malheureusement prendre en compte ce terme se révélerait très complexe : la nature de l'équation différentielle étant totalement changée et nécessitant des outils mathématiques bien plus évolués et numériquement coûteux pour être résolue.

Heureusement il y a moyen de passer outre.

Nous avons déjà dit que lorsque l'on avançait dans le temps l'importance du terme d'ordre deux devenait négligeable.

En effet, lorsque intégrée sur une durée suffisante, intégrer l'équation

$$\tau \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \text{div}(\text{grad } T) \text{ ou } \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \text{div}(\text{grad } T) \text{ fournit la même réponse}^{[148]}.$$

L'astuce a été de remarquer que si chaque itérations de la FEM thermique se faisait sur un temps trop court pour négliger le second ordre de l'équation différentielle, la réponse finale délivrée par la FEM après des milliers d'itérations correspond à un temps d'intégration beaucoup plus long... suffisamment long pour que les réponses fournies par

$$\tau \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \text{div}(\text{grad } T) \text{ et } \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \text{div}(\text{grad } T) \text{ soient les mêmes}^\diamond.$$

Programmer la version usuelle d'ordre un de l'équation de la chaleur dans la FEM nous donnera donc des étapes intermédiaires toutes les femtosecondes fausses du point de vue physique car une femtoseconde est un délai trop court pour négliger l'ordre deux. Mais le

* Le défaut de Crank-Nicholson que nous avons trouvé rédhibitoire en plus de son coût numérique est sa propension à générer des oscillations parasites lorsque son point de départ est un profil thermique discontinu. Or nous ne travaillerons qu'avec des profils discontinus. Pour les autres méthodes, le rapport précision/temps de calcul était moins intéressant dans le cas 2D qu'une simple FEM.

♦ On s'est appuyé pour ces considération sur le terme de second ordre de l'équation différentielle de la chaleur sur « Analyse de la conduction de la chaleur aux temps ultra-courts dans un solide par la thermodynamique irréversible étendue et à la dynamique moléculaire » de S. Volz publié dans *Revue Générale de Thermique*, 36, 826-835, 1997

résultat final sera juste car correspondant au résultat après une propagation thermique d'une demi nanoseconde... et une demi nanoseconde est une durée suffisamment longue vu les dimensions de nos objets pour que le terme d'ordre deux ait perdu tout impact sur les valeurs calculées par la FEM.

Comme les résultats intermédiaires ne sont utilisés ou considérés en aucune manière et que l'on a seulement besoin des résultats toutes les demi nanosecondes cette solution apporte toute satisfaction tout en limitant le temps de calcul et la complexité de l'algorithme.

Pour ce qui est de la modification du matériau en fonction de la température, il a d'abord été utilisé un modèle à échelon ou il n'existe que deux états possibles de la matière avec un transition brusque à la température de changement de phase. Puis, après l'arrivée des données fines sur le matériau à non-linéarité Thermique disponible chez Thalès, ce modèle a été remplacé par une réponse continue (polynôme d'ordre 5) liant les caractéristiques optiques à la température.

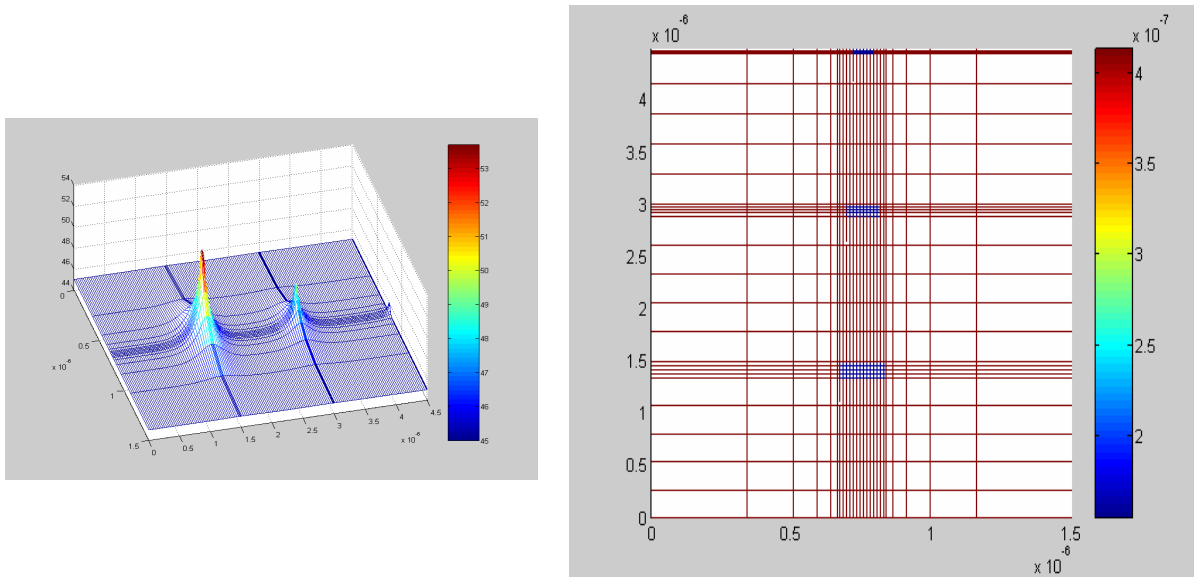


Fig. 17 : Maillage à pas variable pour le calcul de l'évolution thermique.

Une autre difficulté à surmonter fut l'occupation mémoire et le temps de calcul. En effet, les inclusions à simuler sont petites par rapport aux distances les séparants les unes des autres (très faible taux de remplissage) et ont de plus une taille variable. Appliquer un maillage fin sur tout le cristal photonique mène à une impasse pratique (trop gros, trop lent) mais prendre un maillage homogène à pas plus grand ne permet plus la simulation correcte des inclusions non linéaires. Il a fallu trouver un maillage à pas variable, compatible avec les critères de stabilité d'une FEM Thermique, et modifier la FFF afin de la rendre capable d'utiliser ce maillage.

Le pas de maille varie de façon géométrique de raison proche de 2 afin de conserver l'exactitude des résultats (une variation trop brutale et non progressive du pas de maille apporte des erreurs dans le résultat final).

Constantes Physiques

c: m/s
 μ_0 : m/s
eps_relatif_externe:

Adaptation Peut être différent de 1, pour éviter la réflexion à l'entrée de l'échantillon

Ambiance thermique

T* initiale: °C
T* ambiante: °C
Convection: W / m²

Apodisation Linéaire des tailles et positions des patches

Indice de taille coté illuminé:
Indice de taille coté obscur:

Illumination

Incidence: rad
Intensité: W/m²
Longueur d'onde: µm

Paramètres de FFF

Nb tranches:
Nb tranches Mat:
Nb pts FFT:
N:
dt pour FFF: ns
Durée totale: ns
dt pour FDTD: ns
Stabilité: < 1/2 ?

Géométrie de l'échantillon

Epaisseur lame: nm
dont épaisseur inclusion: nm
Nb de rangs:
Périodicité en X: nm
dont largeur inclusion: nm

Définition du []

Indice: []
Phase 1: [] Phase 2: [] **AUTO**
T* chg de: °C

Conductivité thermique
Phase 1: W / °K.m
Phase 2: W / °K.m

Masse volumique
Phase 1: Kg / m³
Phase 2: Kg / m³

Chaleur spécifique
Phase 1: J / Kg. °K
Phase 2: J / Kg. °K

Interstices

Matrice
 Vide

Définition de la matrice

Indice:
Conductivité thermique: W / °K.m
Masse volumique: Kg / m³
Chaleur spécifique: J / Kg. °K

VALIDER

Fig. 18 : Contrôle des paramètres de la structure à simuler

D/ Validation

1/ Validation de la FFF-Kerr et de la HMSM

La FFF-Kerr et la HMSM ont été développées conjointement afin de se valider mutuellement comme expliqué auparavant.

Ne disposant pas de résultats expérimentaux concernant les cristaux photoniques à effet Kerr, on a fait le choix de développer deux méthodes « ab-initio », n'ayant en commun que les équations de Maxwell. Nous allons voir dans cette partie que ces deux méthodes

fournissent les mêmes résultats lorsqu'elles simulent le même objet. Cela a à nos yeux valeur de preuve de l'exactitude de nos méthodes.

Tout d'abord, comparons ce qui est comparable : les deux méthodes doivent simuler le même objet. La FFF ne pouvant s'occuper que d'objets de largeur infinie et non désordonnés c'est sur ce type d'objet que la comparaison va porter.

On choisit un cristal photonique à maille carré constitué de cylindres diélectriques baignant dans le vide. Les cylindres présentent un effet Kerr très important (on veut pousser la méthode, l'existence de matériaux réels présentant un effet Kerr aussi important que simulé ici n'est pas notre souci) tel que le $\Delta\epsilon$ apporté par l'effet Kerr vaille 0,5 lorsque illuminé par une onde plane d'intensité normalisée à 1. Bien sûr, à l'intérieur du cristal photonique, avec la figure d'interférence, les effets Kerr seront localement encore plus élevés.

Le cristal photonique possède quatre rangées de cylindres, la maille est de 336nm et le diamètre des cylindres est de 188nm. L'incidence est normale.

La simulation est faite sur toute la bande [1,4-2,1] μm .

Il ressort des calculs un accord quasi-parfait des deux méthodes sur toute la bande spectrale et sur des intensités variant de 0 à 1.

La figure 21 qui représente la courbe de transmission sur la bande spectrale considéré pour trois intensités incidente différentes illustre cet accord. Le zoom sur le bord droit du gap qui se déplace lorsque l'intensité augmente montre que même pour un effet Kerr très marqué, les courbes de transmission restent les mêmes.

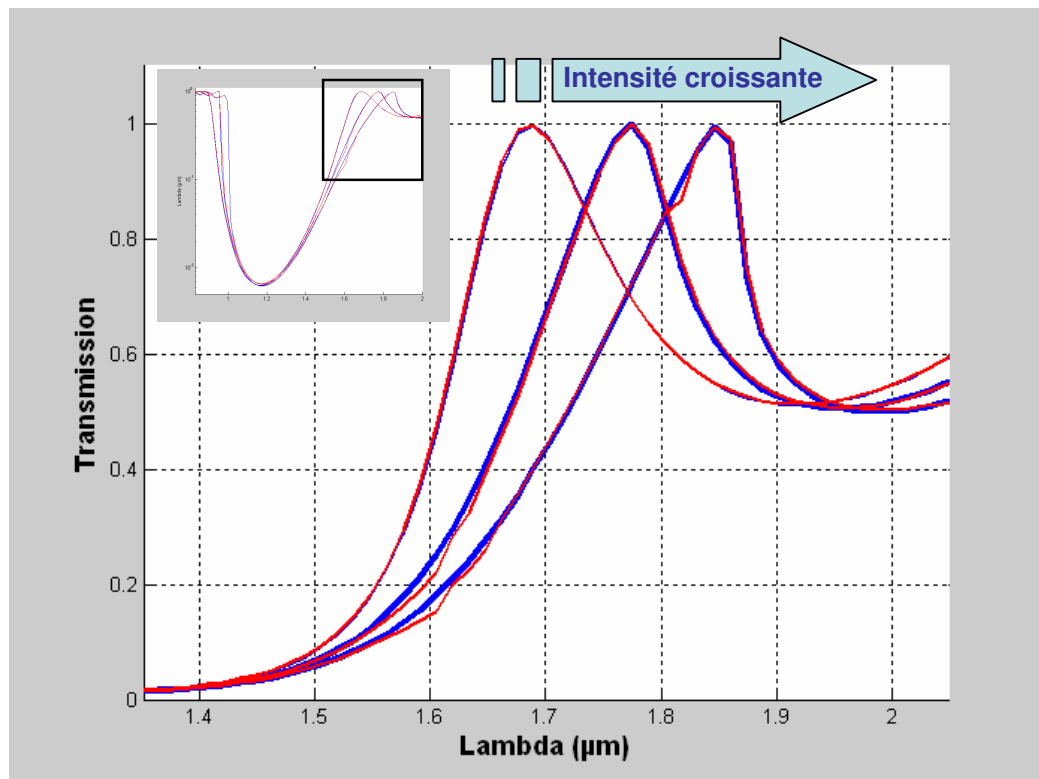


Fig. 19 : Transmissions pour trois intensités incidente d'un cristal photonique Kerr calculées par FFF-Kerr et HMSM.

Mais la comparaison des transmissions ne suffit pas. Nous avons pu parfois observer des transmissions identiques alors que les cartes de champ et de permittivités étaient différentes (c'est le cas dans les boucles d'hystérésis où deux cartes de permittivité au moins fournissent la même transmission).

Comparons donc les cartes de champ (Fig. 20 a et b): Elles sont elles aussi identiques

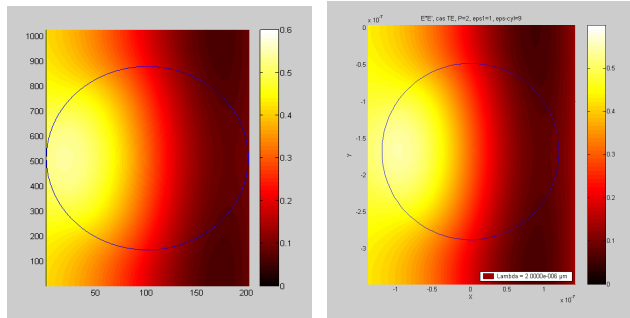


Fig. 20a et b : Détail du champ dans un cylindre à $2\mu\text{m}$ calculé par FFF-Kerr et par HMSM

Voilà qui achève de nous rassurer sur l'identité des résultats fournis par les deux méthodes. Les deux méthodes étant « ab-initio » sans aucun point commun autre que les équations de Maxwell, on peut légitimement penser que les résultats sont corrects et que les deux méthodes sont valides.

2/ Validation de la partie thermique

Pour valider la partie thermique nous avons pu nous appuyer sur des mesures réelles : La thèse de physique soutenue par Mr Dillemann^[149] en 1995 concerne l'étude du comportement de couches minces d'un matériau non linéaire thermique lorsque illuminées par un laser. Il y a suffisamment de données disponibles dans son mémoire pour pouvoir simuler ses expériences grâce à notre nouvel outil informatique : la FFF-Kerr. Les mesures qu'il a effectuées à l'ONERA sont aussi très intéressantes de notre point de vue car elles correspondent à des puissances de laser et des impulsions proches de la menace réelle que représente un laser agressif actuel. Nous sommes en plein dans le domaine énergétique et temporel qui nous intéresse.

La reprise de ses données, couplées à l'utilisation des valeurs précises caractérisant le matériau produit par Thalès (qui ont rapidement remplacées les valeurs génériques trouvées dans la littérature ouverte) a permis une validation de nos codes : nous retrouvons par la simulation les mêmes résultats tant qualitatifs (allure des courbes, tendances spectrales et temporelles) que quantitatifs (Valeurs des transmissions au cours de l'illumination, épaisseur de matériau commuté).

Nous retrouvons comme lui une transmission variant dans le temps au cours de l'illumination avec une rupture brutale entre un état opaque et un état transparent justifiant le terme de switch.

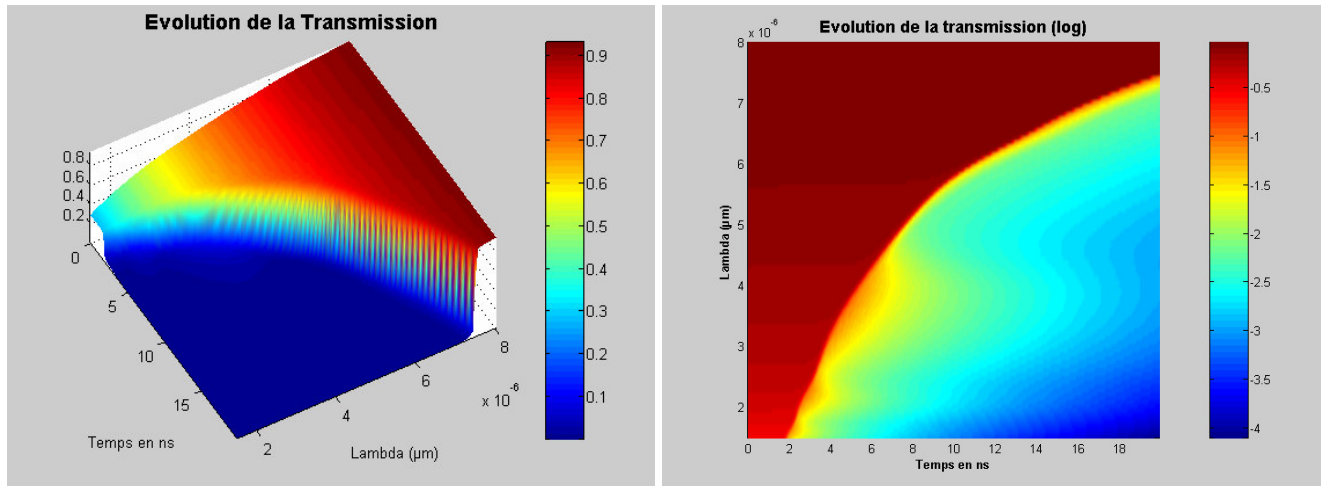


Fig. 21 : Evolution sur 20ns de la transmission d'une lame de matériau non-linéaire thermique illuminée par un laser. Etude sur la bande [2-8] μm .

On peut d'ailleurs en profiter pour remarquer que les problèmes inhérents à une répartition homogène de ce matériau en couche mince, non nano structuré, apparaissent ici clairement : Faible transmission à l'état transparent. Opacité qui tombe à une valeur plancher insuffisante et ne se modifie plus par la suite. Changement de phase affectant seulement une couche superficielle de 200nm et rendant inutile tout le matériau situé au-delà de cette profondeur.

Par la suite, nos premières simulations sur des matériaux nano-structurés de formes fournies par la société Thalès ont été jugées « conformes à l'expérience » par Thalès. Nous avons considéré que c'était un pas de plus vers la validation de notre méthode.

Cette correspondance entre les expériences sur des couches minces menées à l'ONERA et nos simulations, plus l'approbation d'une simulation sur un matériau nanostructuré par Thalès qui dispose d'un point de comparaison expérimental, nous donne confiance en nos outils et nous estimons que les résultats concernant les matériaux nano structurés délivrés par notre algorithme sont proches de la réalité.

E/ Possibilités des différentes méthodes.

Nous avons expliqué dans les parties précédentes ce que nous cherchions à obtenir des méthodes de simulation créées, d'où était issues ces méthodes, et en quoi consistaient les algorithmes. Pour certaines, nous avons même détaillé les paramètres importants influant sur la précision attendue.

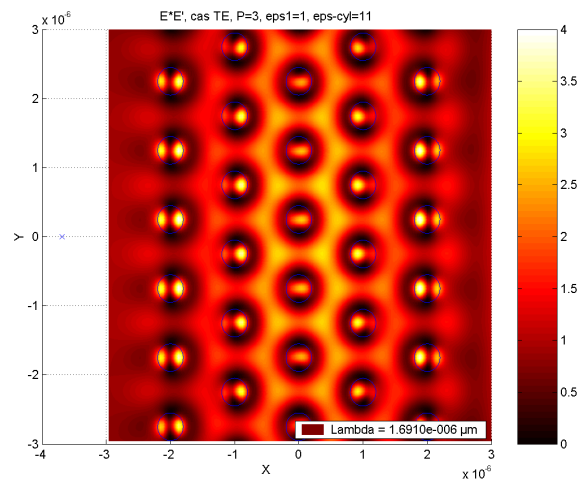
Il reste maintenant à faire l'état des possibilités offertes par ces méthodes.

La FFF-Kerr et la HMSM sont capables de fournir cartes de champs et valeurs de transmissions pour de multiples cristaux photoniques. La HMSM est limitée à des inclusions de forme cylindrique et ne peut traiter que le cas où ce sont les cylindres qui présentent un effet Kerr. Le cas d'une matrice qui serait elle-même non-linéaire est

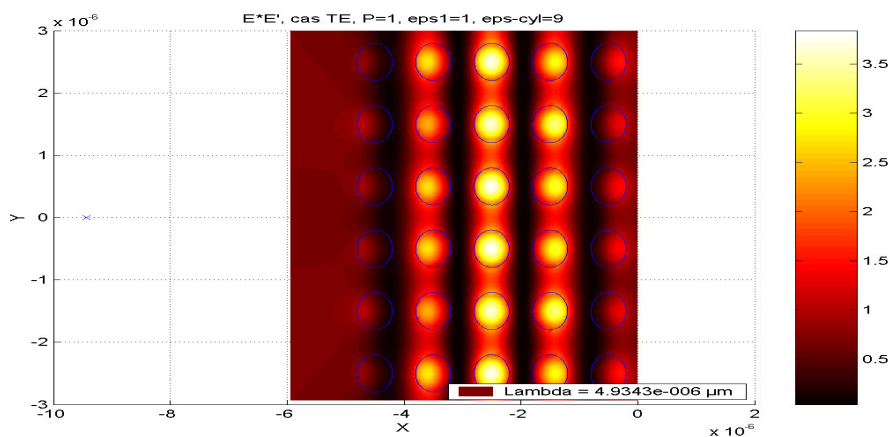
intraitable. La FFF-Kerr ne souffre pas de telles limitations : la forme des inclusions est libre et la répartition des matériaux non linéaires aussi.

Toutes deux peuvent traiter toutes sortes de mailles. Toutes deux peuvent traiter les inclusions Kerr de l'ordre de la longueur d'onde voire plus et ne sont pas limitées à des tailles de l'ordre de $\lambda/10$.

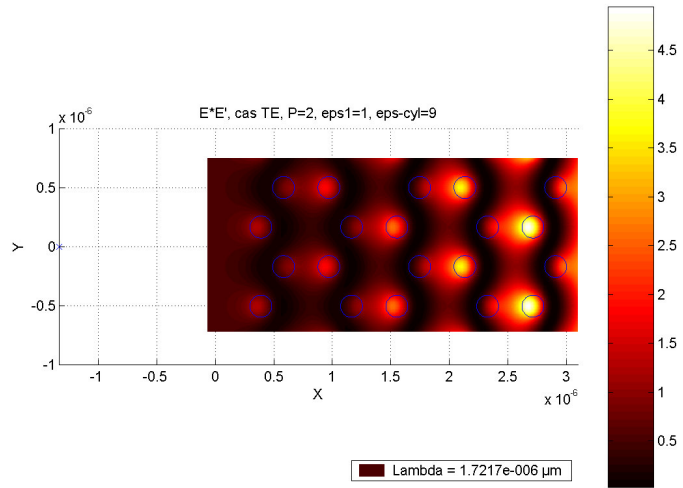
Toutes les figures qui suivent ont évidemment été faites avec nos propres programmes issus des algorithmes décrits précédemment.



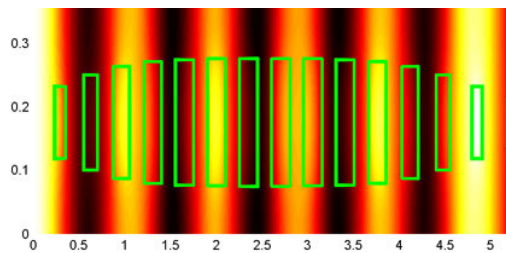
Maille triangulaire



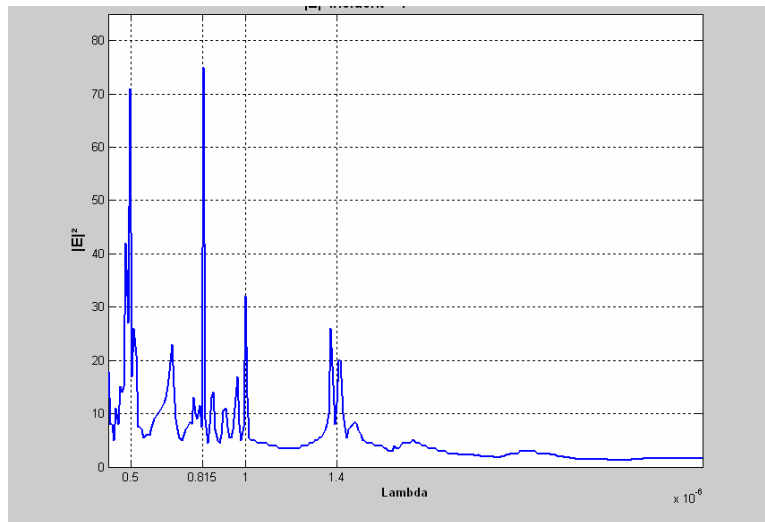
Maille carrée



Maille graphite



Inclusions non cylindriques traitées par FFF-Kerr

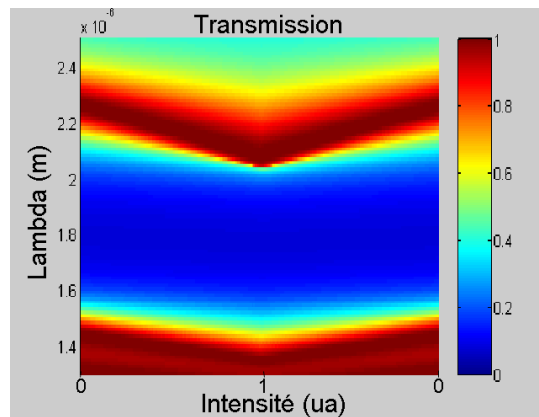


Valeur maximale de l'exaltation du champ en fonction de la longueur d'onde dans CP à maille graphite.

Il est noter qu'en déplaçant la position de notre capteur, nous pouvons mesurer l'exaltation du champ électromagnétique en fonction de la longueur d'onde au lieu de relever la transmission.

Les algorithmes sont suffisamment rapides pour pouvoir effectuer des balayages tant en longueur d'onde qu'en intensité incidente.

Ci-dessous on peut voir un tel balayage pour une structure à base de cylindres présentant un effet Kerr. Les longueurs d'onde sont en ordonnées, l'intensité incidente (en unité arbitraires) varie en abscisse de 0 à 1 puis retourne à 0. La couleur code la transmission. On aperçoit nettement la bande interdite ou gap (zone bleue) se décaler en fréquence en réponse à la variation d'intensité incidente.



Déplacement du gap lors d'une variation d'intensité incidente. Front montant puis descendant

Nos algorithmes prenant comme point de départ pour chaque nouvelle intensité la carte des permittivités ayant convergées pour l'intensité précédente. Il est possible de discriminer les fronts d'intensité montant et descendant (ie :Le point de départ du calcul pour I_{n+1} est la carte de champ trouvée pour I_n . La réponse fournie par notre programme pour l'intensité I_{n+1} dépend donc de l'intensité ayant précédé). Ceci nous permet de prendre en compte d'éventuels effets d'hystérésis ou bistabilité optique.

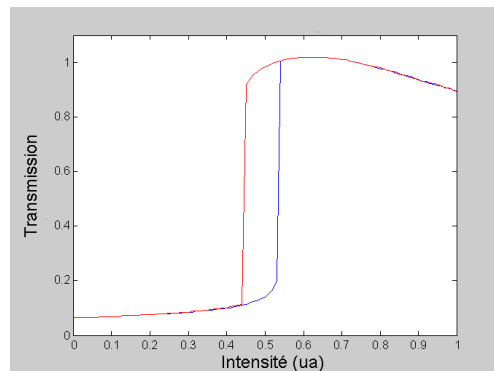
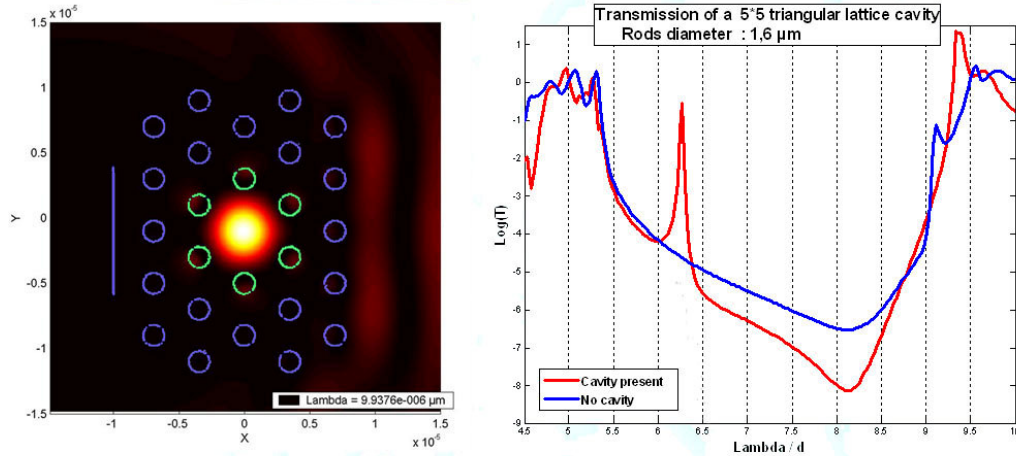


Illustration d'une bistabilité optique. La transmission sur front montant (courbe bleue) est différente à intensité incidente égale de la transmission à front descendant (courbe rouge).

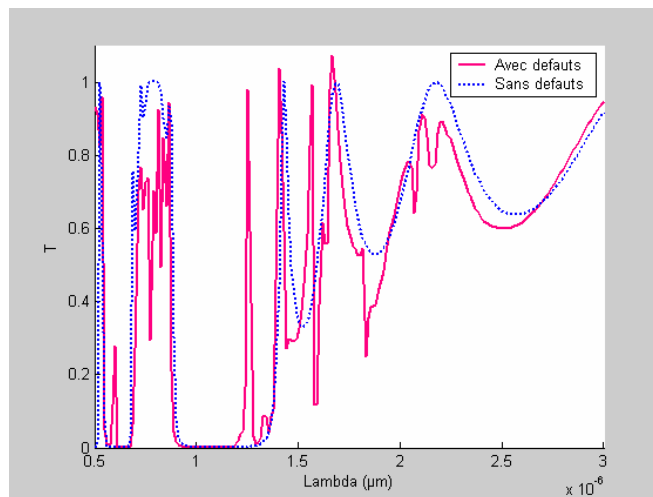
La sensibilité peut être très poussée pour peu que l'utilisateur le veuille. Ainsi sur la courbe précédente, lors du premier basculement, l'écart entre les intensités situées de part

et d'autre de la transition n'est que de $1/1000^{\text{ème}}$. Pourtant les transmissions et cartes de champ associées sont radicalement différentes.

La HMSM, au contraire de la FFF peut aussi simuler tout cristal photonique à base de cylindres en nombre fini. Ceci inclu les cristaux photoniques à taille finie présentant des effets de bords mais aussi toutes les possibilités où les cylindres varient en taille et en position sans contraintes. Deux exemples de ces capacités sont les cavités et le désordre (défauts de positionnement).



Exemple de cavité comportant des cylindres non linéaires sur le pourtour (cylindres verts).



Exemple de la transmission d'une structure avec et sans défauts aléatoires sur la taille et la position des inclusions.

La possibilité d'inclure un léger désordre permet par exemple de se faire une idée des tolérances aux inévitables imperfections de fabrication d'une structure donnée.

Il est aussi à noter que la FFF-Kerr et la HMSM ne se limitent pas à la simulation de diélectriques parfaits. Des permittivités complexes, contenant des termes de pertes sont tout à fait acceptables. L'adjonction de métal se passe bien.

On peut aussi remarquer que si ces deux méthodes simulent des effets Kerr, il suffirait de modifications mineures pour qu'elles puissent traiter le cas de l'absorption à deux photons. En effet si l'effet Kerr se traduit par $\epsilon_r = \epsilon_{r,linéaire} + \chi^{(3)} |E|^2$, l'absorption à deux photons peut s'écrire $\text{Imag}(\epsilon_r) = \text{Imag}(\epsilon_{r,linéaire}) + f(|E|^2, \lambda) \cdot |E|^2$ où f est une fonction caractéristique de la non-linéarité. La modification à apporter est donc évidente et ne concernerait qu'une seule ligne des programmes. Tout le reste (le calcul des champs, la boucle de convergence, etc...) demeurerait strictement inchangé.

Pour ce qui est des possibilités de la FFF thermique, elle permet de suivre avec une résolution temporelle de l'ordre du quart de nanoseconde (des résolutions inférieures ou supérieures sont bien entendues possibles) l'évolution des températures, des permittivités, des cartes de champ et des transmissions/réflexion/absorption de la structure.

La prise en compte des paramètres est large (cf capture d'écran Fig. 18) puisque plus de deux matériaux peuvent être utilisés et leur paramètres thermiques, tels la capacité thermique et leur conductivité, pris en compte. Le refroidissement par les bords, simulant un transfert de chaleur convectif avec l'atmosphère ambiante, est pris en compte et de valeur réglable. On peut aussi s'affranchir de l'effet Fabry-Perot si on le désire : le milieu extérieur à l'échantillon est alors pris identique à la matrice baignant les inclusions dans le cristal photonique (Silice, Saphir ou autre)

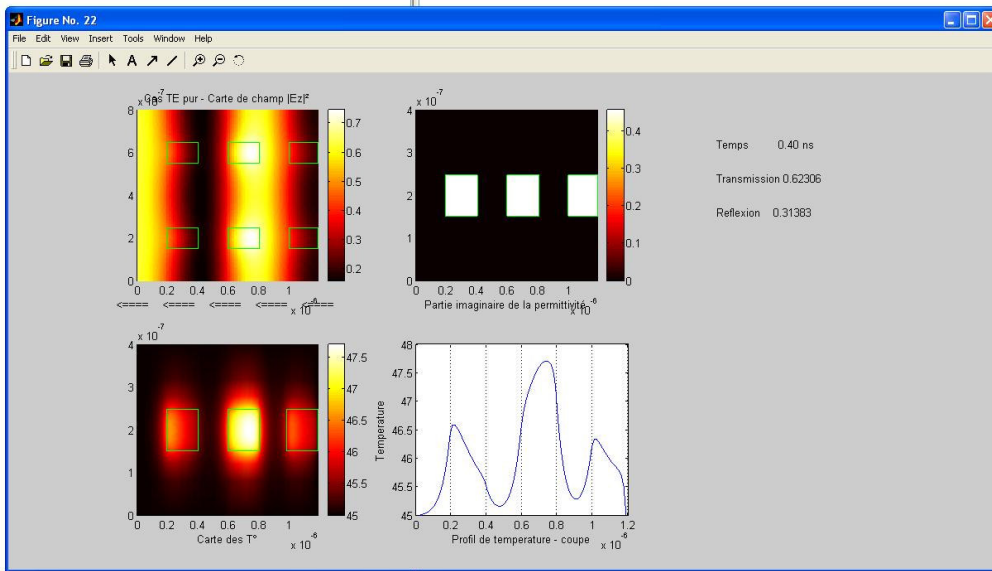


Fig.22: Surveillance en temps réel de l'évolution lors d'une illumination

On peut voir sur la figure 22 la carte de champs en haut à gauche, la carte des permittivités en haut à droite, la carte des températures en bas à gauche, un profil des températures en bas à droite. Le « temps » depuis lequel le laser incident a touché la structure est affiché à l'extrême droite.

Sur la figure 23, on peut lire l'évolution temporelle des transmissions/réflexions/absorption à gauche. Le temps est en abscisse. A droite, l'évolution temporelle de la température donne des indications sur la survivabilité de la structure.

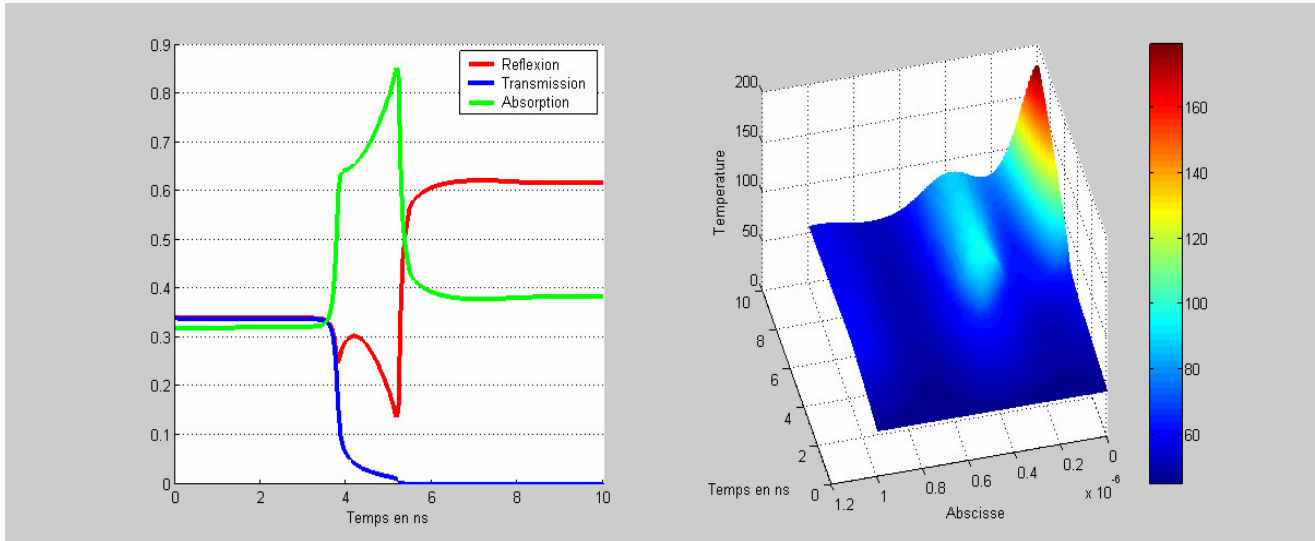


Fig. 23: Ecran de présentation des résultats : Transmission et carte temporelle de température

F/ La lourde question de la convergence

On a vu dans les paragraphes précédents que la partie itérative de l'algorithme de résolution convergeait vers la solution.

La réalité est que cette convergence n'est pas toujours facile à obtenir et mérite que l'on s'intéresse à elle de très près. L'expérience personnelle de l'auteur au cours de cette thèse est même que ce point est peut être le plus délicat de tout l'édifice.

La boucle de convergence qui assure la recherche d'un point stable tant dans la FFF-Kerr que la HMSM peut être lue comme l'application successive d'une fonction mathématique F qui relie une carte de permittivité x_n à la carte de permittivité suivante x_{n+1} . Cette fonction F traduit le calcul de la carte de champ et l'effet Kerr appliqué à partir de cette carte de champ.

$$\begin{array}{c}
 x_n \\
 \downarrow \\
 x_{n+1} = F(x_n) \\
 \downarrow \\
 x_{n+2} = F(x_{n+1})
 \end{array}$$

Arrêt lorsque $|F(x_{n+1}) - x_n| < \text{précision}$

On arrête la boucle lorsque en chaque maille des cylindres la permittivité relative calculée est identique à celle calculée au tour précédent à une constante près. Cette constante, choisie arbitrairement, nommée par la suite « seuil de convergence » ou « condition de

convergence » définit la précision de nos résultats*. L'écart entre deux cartes de permittivité n'est pas calculé sous la forme d'un écart RMS (ie : au sens des moindres carrés) mais d'un maximum d'écart peak to peak. Ce parti pris, beaucoup plus sévère, a été choisi afin de renforcer la confiance dans nos simulations♦

Si $\mathbf{F}(\mathbf{x}_n) = \mathbf{x}_n$ au seuil de convergence prôt alors la solution \mathbf{x}_n a un sens physique : une carte de champ et carte d'indice sont compatibles, nous avons un équilibre physique.

Cette recherche du point de convergence (s'il existe) par application successive de la fonction F est connue des mathématiciens sous le nom de « Méthode du point fixe ». Elle

converge si elle vérifie la condition de Lipschitz $\sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial F}{\partial \alpha_i} \right| < 1$ où les α_i sont les variables indépendantes de F. Cette condition peut aussi s'écrire de façon plus physique $\exists C, |F(a) - F(b)| < C|a - b|$.

Le problème est que notre fonction F est d'une telle complexité que l'on ne peut identifier ses variables indépendantes, ou lui définir une norme, ou calculer ses dérivées partielles. Le calcul de la condition de Lipschitz nous est inaccessible.

La « méthode du point fixe » est, du point de vue des mathématiciens, quelque chose d'assez brut, voir archaïque rentrant dans la catégorie du vaste problème de la recherche d'une racine de fonction. Ils ont mis au point des méthodes issues du point fixe mais plus efficaces comme les méthodes de Jacobi ou Seidel ou Gauss-Seidel. La méthode de Newton-Raphson, très séduisante car d'expression simple $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, est à mettre

dans ce « bestiaire ». Toutes sont plus rapides, plus efficaces, que notre méthode du point fixe. Malheureusement toutes nécessitent le calcul des dérivées partielles de F ou la décomposition de F sur une base.

Nous nous retrouvons dans la désagréable position de celui qui a devant lui une galerie d'outils performants mais tous inutilisables pour son problème particulier.

Il faut faire avec la méthode du point fixe.
Heureusement elle suffit dans la plupart des cas.

1/ Le cas idéal et, heureusement, habituel

La figure 24 illustre ce qui se passe dans un calcul heureux. (Dans ce cas précis, un cristal photonique constitué de quatre couches). Cet exemple est représentatif d'un comportement habituel.

La convergence se fait habituellement en 2 à 3 itérations, sauf pour des variations brusques de la transmission où elle est beaucoup plus lente (Les deux pics à 30 de la figure de droite).

* Pour des tiges faites dans un matériau $\epsilon_r = 9$ j'ai, sauf mention contraire, pris cette constante égale à 0,01.

♦ On ne voulait pas risquer l'apparition d'artefacts numériques où des écarts très localisés menant à de grandes différences de transmissions étaient « ignorés » par le moyennage du RMS.

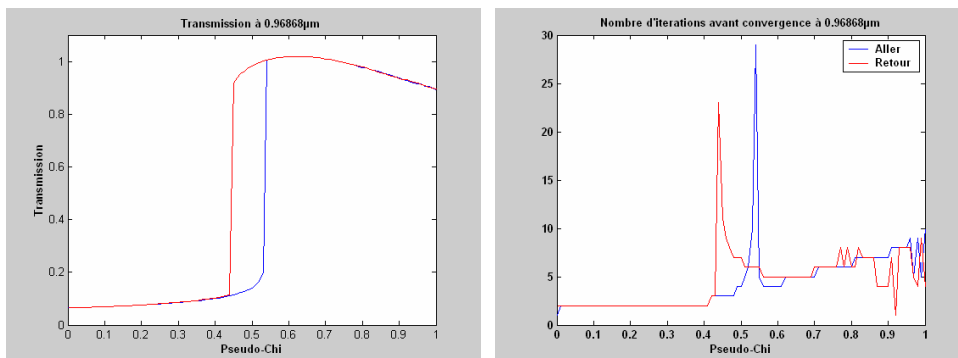


Fig. 24a et b : Exemple d'une convergence typique. A gauche les courbes de transmission en fonction de l'intensité incidente. A droite le nombre d'itération qui a été nécessaire pour le calcul de chaque point des courbes de gauche.

L'explication que l'on a envie de proposer est qu'entre deux intensités voisines, la carte des indices varie peu et de façon continue, et donc le programme retrouve très vite le nouveau point d'équilibre. Par contre pour une transition brusque, les cartes d'indices sont très différentes et le programme ne bénéficie pas d'un point de départ proche de l'arrivée. L'étude des cartes de champs corrobore cette hypothèse (voir Fig. 25).

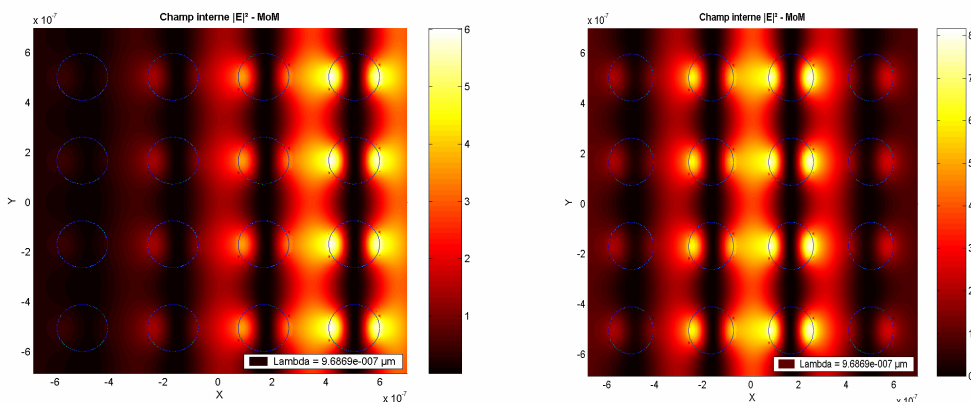


Fig. 25 : Carte de champ de part et d'autre d'une discontinuité de la transmission. Les parties éclairées ne sont plus les mêmes.

Relâcher la finesse du pas d'échantillonnage sur l'intensité incidente augmente un peu le nombre d'itérations mais de façon très supportable.

On pourrait avoir calculé la même courbe, avec moins de points, en faisant un nombre d'itérations total moindre ce qui peut s'avérer très intéressant..

Il est donc possible d'obtenir des courbes de transmission moins denses en moins de temps. Le programme continue à fonctionner et permet une forme d'utilisation du style « peu de points mais vite obtenus » qui s'avère très pratique pour l'exploration de nouveaux cristaux photoniques.

Si, lors d'une transition brusque de la transmission, le nombre d'itérations atteint une limite que l'on a mis là par sécurité pour éviter une boucle infinie, le programme reste solide et peut « rattraper » la solution correcte pour l'intensité suivante sans crasher.

Pour illustrer ce point, considérons la figure 26. Il s'agit du même calcul que précédemment mais cette fois on a mis une limite faible au nombre maximal d'itérations autorisé par le programme. Les points de la courbe cerclés sont des points où le critère de convergence n'a pas été atteint à temps. Le point de départ utilisé pour le calcul de la transmission liée à l'intensité suivante est donc incorrect.

On observe que malgré trois ou quatre « ratés » consécutifs, le programme reprend correctement ses calculs par la suite.

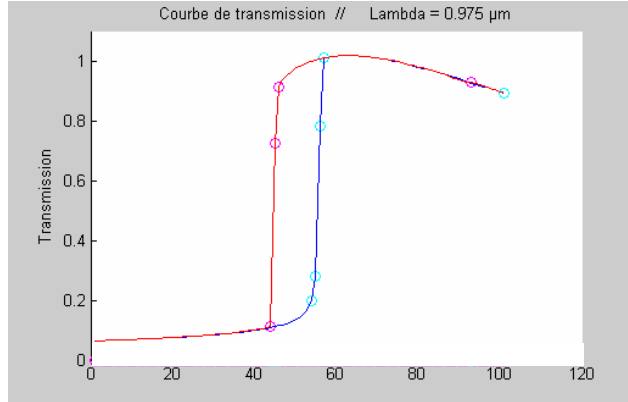


Fig. 26 : Résistance de la courbe (100 points) prise dans son ensemble à des non-convergence locales

Malheureusement, tout ne se passe pas toujours aussi bien.

2/ Zones instables

Lorsque l'on fait une cartographie d'un gap en fonction de l'intensité, il apparaît des zones où la convergence est impossible.

La figure suivante montre la cartographie complète de la transmission du même échantillon que précédemment pour toute la bande spectrale autour du premier gap et pour des intensités (200 valeurs) variant de zéro à une valeur physiquement irréaliste avant de redescendre à zéro.

Cette figure est typique et j'insiste là dessus.

Les zones hachurées sont celles où il n'y a pas eu convergence.

Celles hachurées en biais et placées sur les flancs des gaps correspondent à des transitions assez brusques de la transmission. Elles sont sans conséquences, il suffit d'augmenter le nombre maximal d'itérations pour atteindre un résultat correct qui respecte la valeur de condition de convergence choisie. Il n'en va pas de même des zones hachurées en croisillons qui elles représentent un vrai problème.

Ces zones se retrouvent sur tous les échantillons :

- Bord interne du flanc basse fréquence du gap à forte intensité
- Bord interne et sommet du flanc haute fréquence du gap à forte intensité
- Et une large zone, très chaotique, située en haute fréquence, au-delà du bord du gap.

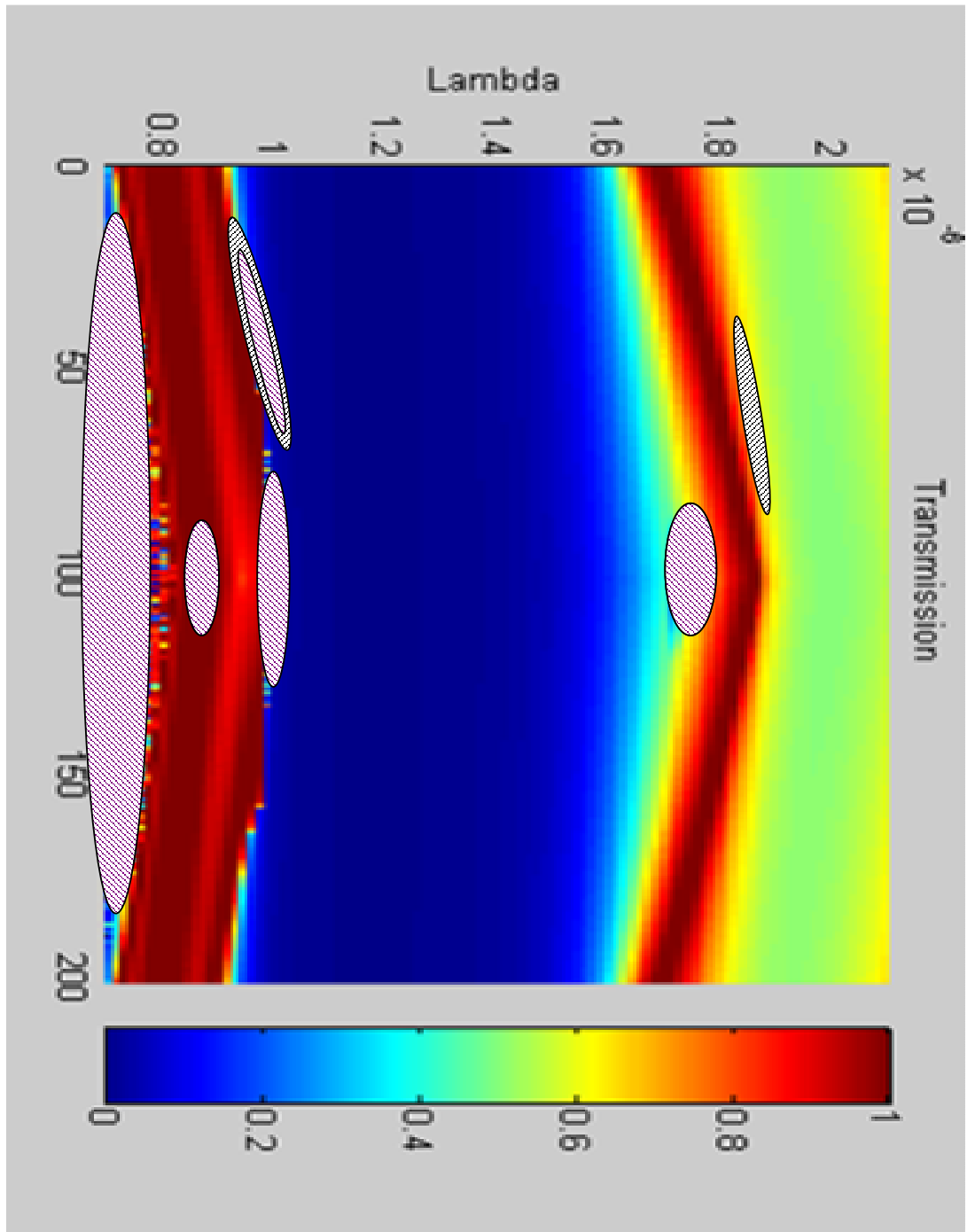


Fig 27 : Nappe typique présentant des zones de non-convergence

En ne prenant que les points où la convergence a été atteinte, on obtient une cartographie limitée. En prenant les mêmes paramètres mais en affectant un indice Kerr négatif aux inclusions non linéaires on retrouve les mêmes zones d'instabilité.

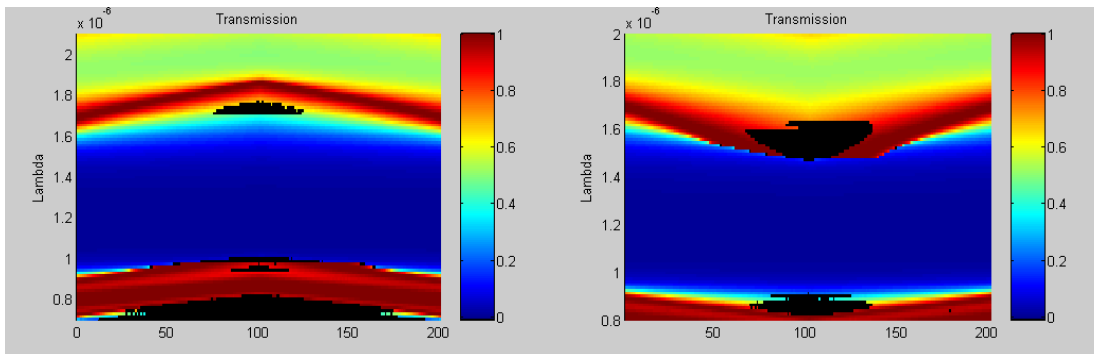


Fig. 28a et b : Zones de non convergences (noires) pour des effets Kerr positifs (gauche) ou négatifs (droite)

D’ailleurs on les retrouvera tout le temps, ce qui pose problème.

3/ Comprendre et limiter l’instabilité

L’étude de la cartographie du nombre d’itérations nous donne des renseignements (fig. 29)

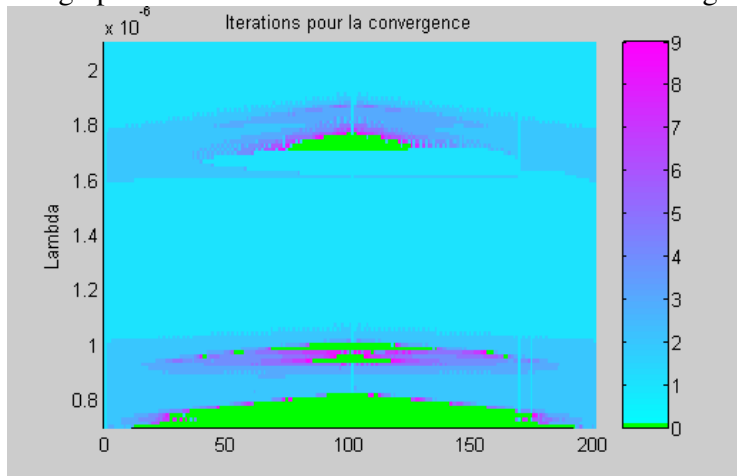


Fig. 29 : Nombre d’itérations nécessaires à la convergence pour chaque couple $(\lambda, I_{incident})$

L’instabilité est précédée par une zone où le programme a de plus en plus de mal à converger rapidement.

La réponse évidente qui est d’« augmenter le nombre maximal d’itérations » se révèle malheureusement inopérante.

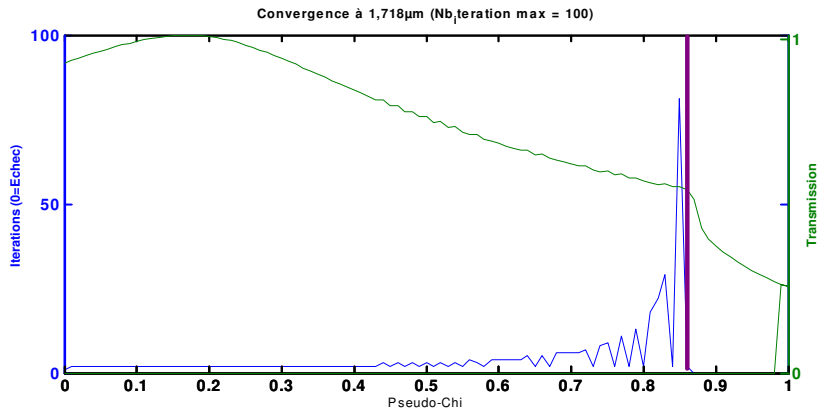


Fig. 30 : Evolution de la transmission d'un cristal photonique à $1,72\mu\text{m}$ en fonction de l'intensité incidente (courbe verte). La courbe bleue représente le nombre d'itérations nécessaire au calcul de chaque point.

Ci-dessus (fig. 30), on a en vert la courbe de transmission à $\lambda=1,72\mu\text{m}$ en fonction de l'intensité incidente et en bleu le nombre d'itérations nécessaire au calcul. Au-delà de la ligne verticale violette, augmenter le nombre d'itérations autant qu'on le souhaite n'amène plus rien.

Toutes les simulations répétées amèneront à la même conclusion :

Le nombre d'itérations augmente de plus en plus vite à l'approche d'un point, puis ce point dépassé il n'y a plus de convergence possible.

Est-ce parce que la convergence est devenue extrêmement lente ou est ce parce qu'elle est réellement impossible. Je ne peux trancher mais le résultat est le même : certains domaines nous sont interdits.

Prendre un échantillonnage de l'intensité moins serré afin de limiter l'impact de l'accumulation d'un hypothétique bruit numérique ne changera rien : la non convergence sera toujours au même endroit.

Affiner le maillage des cylindres tant dans la FFF-Kerr que dans la HMSM ne changera rien non plus.

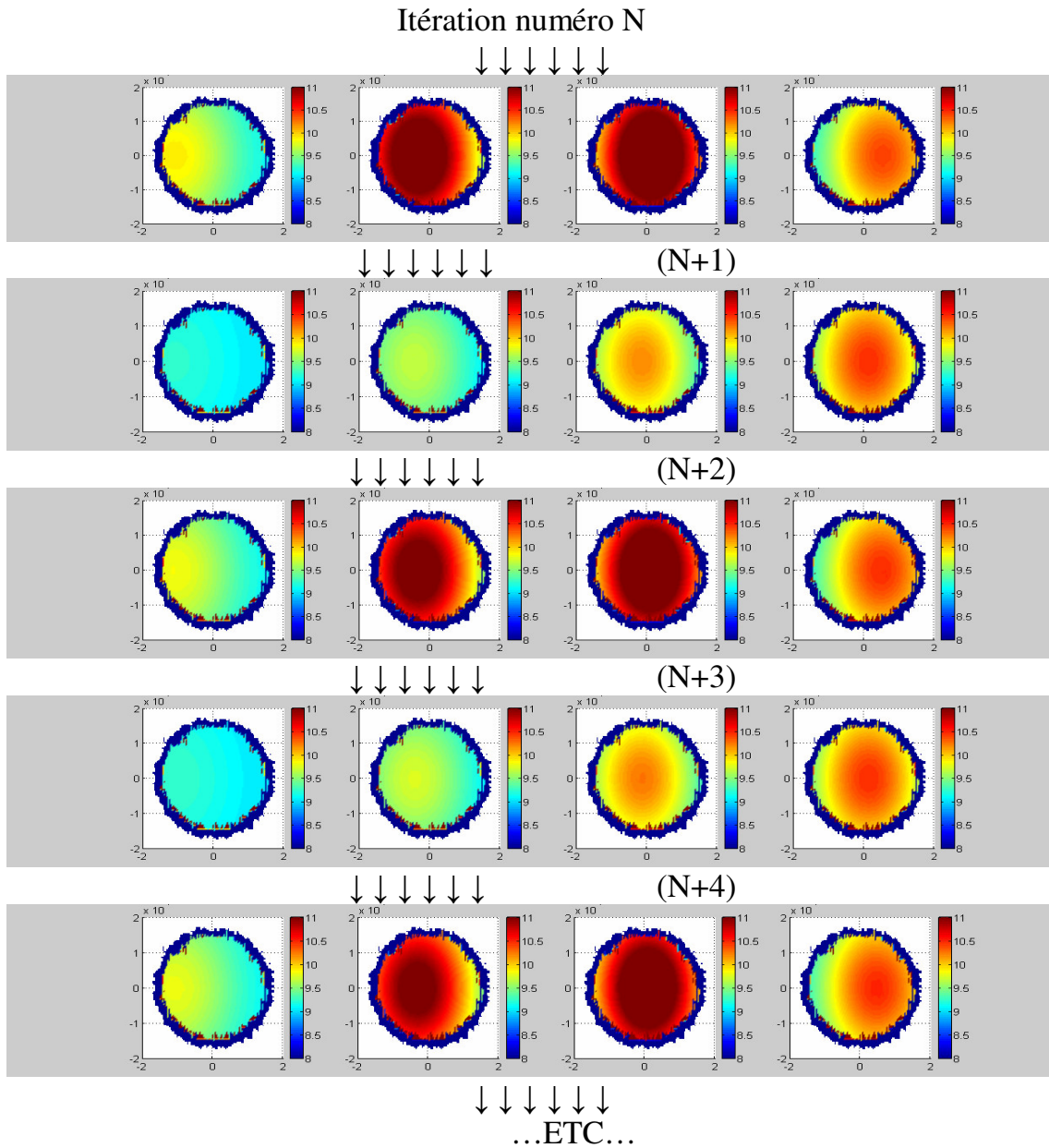
Augmenter la taille des matrices de diffraction (de $5*5$ à $7*7$ et $9*9$) dans la HMSM ou le nombre de coefficients de Fourier pris en compte dans la FFF-Kerr ne changera rien non plus. Il ne semble pas que le problème vienne d'une imprécision du calcul des cartes de champs ou d'une imprécision d'échantillonnage de la carte des permittivités.

Plus grave, on constate qu'augmenter le nombre de couches de nos cristaux photoniques (8 rangées de cylindres au lieu de 4 par exemple) élargit ces zones de non convergences : Elles surviennent à des intensités plus basses et son spectralement plus larges.

Visualiser les cartes de champs à l'approche du point fatidique ne donnera pas plus d'explication. On en vient à supposer que le problème ne vient pas forcément d'une réalité physique mais d'un problème purement mathématique de notre méthode du point fixe.

En suivant cette idée d'une anomalie mathématique on finit par remarquer que souvent lors d'une non convergence, le système se met à osciller indéfiniment entre deux points fixes.

Exemple (On visualise la carte d'indice d'une tige pour chaque couche d'un échantillon. Chaque groupe d'image correspond à une itération successive sur un point que l'on sait non convergent). Rapidement on peut observer un cycle à deux temps



Le système bascule indéfiniment entre deux états stables sans converger vers la solution

Notons x_n la carte d'indice (en toute rigueur la carte de permittivité) obtenue à l'itération n . On considère que l'on a atteint un résultat valide lorsque $x_{n+1}=x_n$, ie : Lorsque une carte d'indice produit un champ qui redonne la même carte d'indice.

Normalement, l'algorithme converge vers ce point d'équilibre $x=F(x)$, c'est la propriété attendue de la méthode du point fixe lorsque la condition de Lipschitz est vérifiée. Mais ici nous ne savons rien de la condition de Lipschitz et il semble bien qu'elle ne soit pas vérifiée systématiquement.

L'incident de convergence illustré ici relève d'un artefact mathématique et n'a pas de réalité physique :

Il existe un autre point d'équilibre pour cet algorithme du point fixe, mais un point d'équilibre qui ne valide pas $x=F(x)$ (et donc dénué de sens physique). Ce point d'équilibre parasite provient de la convergence de deux sous-suites (x_{2n}) et (x_{2n+1}) vers des points différents :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_{2n} = x_{limit,1} \quad \text{et} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} x_{2n+1} = x_{limit,2} \quad \text{avec} \quad x_{limit,1} \neq x_{limit,2}$$

Pour remédier à ce problème de pseudo-convergence parasite il suffit de modifier la procédure d'itération.

On n'applique plus la fonction F sur (x_n) mais la fonction G sur (y_n) . G et (y_n) étant définis

$$\text{par : } y_{n+1} = G(y_n) = \frac{1}{2}(y_n + F(y_n))$$

La condition de convergence pour stopper les calculs n'est pas $G(y_n)=y_n$ qui n'a pas de sens physique mais reste toujours $F(y_n)=y_n$ comme auparavant.

Cette technique est la « **convergence amortie** » et l'introduction d'une pondération peut être rapproché de l'introduction d'un terme d'amortissement pour stabiliser et faciliter la résolution numérique d'une équation différentielle^[150]. Cette technique est d'utilisation courante dans le cas de l'optique non-linéaire^[151].

Avec elle, il est impossible d'avoir (y_{2n}) et (y_{2n+1}) convergeant vers deux points distincts. L'artefact mathématique est donc supprimé.

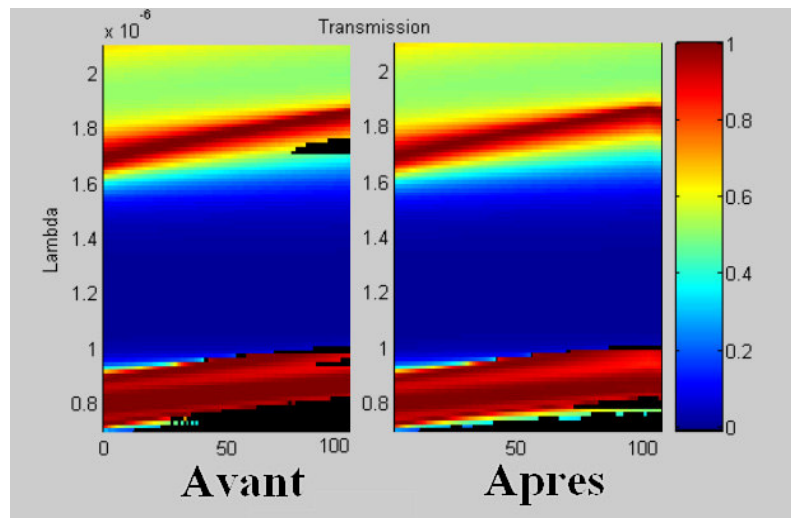


Fig. 31 : Evolution de la transmission face à une intensité lumineuse croissante avec et sans « amortissement » de l'algorithme.

Les zones de non convergences sont maintenant beaucoup plus limitées (Fig. 31). Le bord de gap supérieur est totalement fiable.

Cette efficacité se paye au prix d'un nombre d'itérations légèrement plus élevé (convergence plus lente).

Malheureusement, ce n'est pas un outil miracle, il reste encore des zones non convergentes.

La zone haute fréquence, bien que moins bruitée qu'avant (on devine facilement une forme de courbe crédible, cf Fig. 32) est toujours non convergente.

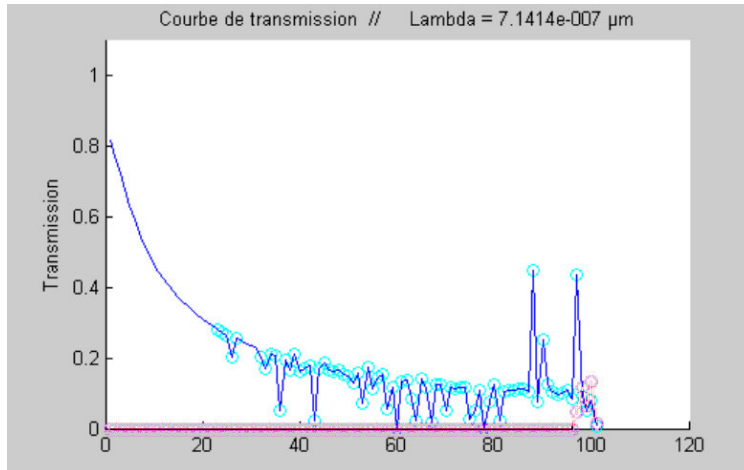


Fig. 32 : Transmission calculée dans une zone haute fréquence présentant des non convergences Les points cerclés de bleu sont des résultats hors convergence. Toutefois la forme d'une courbe régulière de transmission se devine facilement dans le nuage de point

Encore une fois, augmenter le nombre maximal d'itérations ou augmenter la taille des matrices de diffraction, n'arrange rien.

Modifier la formule de convergence pour renforcer le poids du terme précédent (stabilisation) n'améliore rien non plus : Définir G et (y_n) par $y_{n+1} = (0,7 \cdot y_n + 0,3 \cdot F(y_n))$ ou $y_{n+1} = (0,9 \cdot y_n + 0,1 \cdot F(y_n))$ n'apporte rien.

L'étude de l'évolution itérations après itérations des cartes de permittivité lors d'une non convergence alors même que la technique de l'amortissement est employée montre parfois le phénomène suivant (Fig 33) :

Ecart au critère de convergence

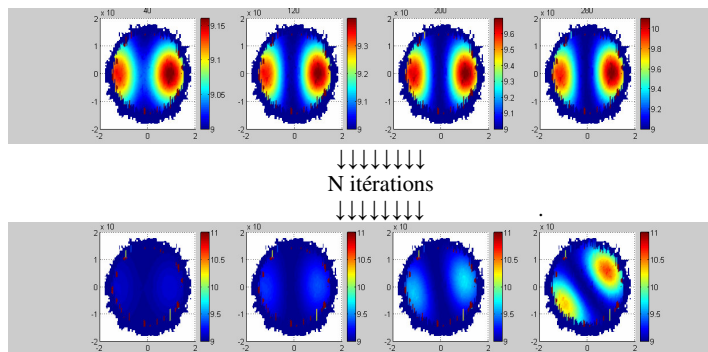
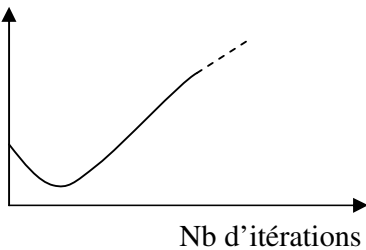
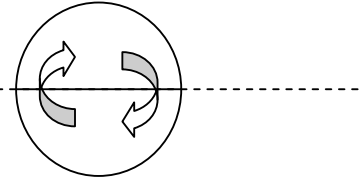


Fig 33 : Caractéristiques d'une non convergence liée à une rotation de la carte de permittivité

Subitement, la carte de permittivité tourne et le phénomène s'amplifie, menant à une divergence du système. Cette rotation d'après nos tests semble être l'amplification d'un bruit numérique inhérent à notre méthode. Nous n'avons pas été en mesure de trouver (et corriger) sa cause.

Toutefois, dans le cas d'une illumination en incidence normale, lorsque l'on est sûr de la symétrie des cartes de champ, une opération simple permet de contrer l'apparition du phénomène.

Concrètement, La nouvelle carte d'indice produite par la méthode amortie est symétrisée autour de l'axe de propagation par la méthode $\frac{1}{2} * le_haut + \frac{1}{2} * le_bas$.



Cette technique permet de réduire un peu plus les zones de non convergence. Sans toutefois les supprimer définitivement. Par contre avec cette solution les résultats issus d'une non convergence (donc faux en toute rigueur mais supposés s'être tout de même approchés d'une solution valable) sont notablement moins bruités (Fig 34).

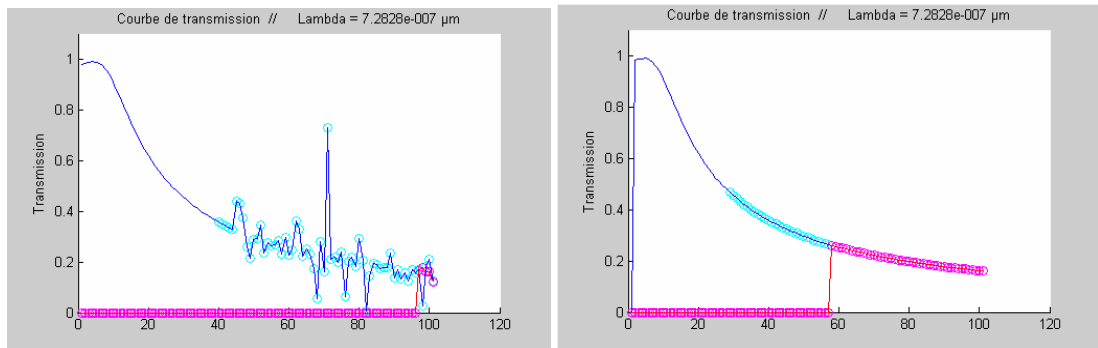
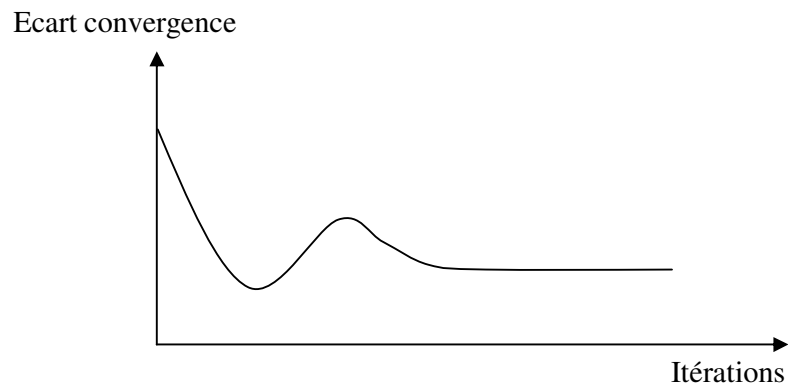


Fig 34 : Calcul de la transmission d'un CP en fonction de l'intensité incidente. A gauche sans symétrisation, à droite avec. Les ronds signalent des points où le critère de convergence n'a pu être atteint.

Le profil itératif d'évolution d'une non convergence résiduelle est alors le suivant : Après un rebond et oscillation, l'écart refuse de diminuer. Ce qui nous amène à une impasse.



Avec cette dernière évolution de la méthode d'itération, l'utilisateur qui choisirait un critère de convergence lâche obtiendrait des résultats convergents partout, et bien sur dénués de bruit.

Leur faire ou non confiance dans les zones où l'on sait qu'en poussant le critère de convergence cela s'arrêterait de fonctionner relèverait alors de la responsabilité de l'utilisateur.

4/ Conclusion sur la convergence

Nous disposons d'une méthode assurant la convergence presque partout.

Les zones de non convergence sont cantonnées dans les gaps secondaires de haute fréquence ou aux effets Kerr/intensité incidente si importants qu'ils sont peu réalistes*.

Malheureusement, malgré ces succès certaines combinaisons de nature du CP/longueur d'onde/intensité incidente résistent encore. Il s'agit de notre point de vue d'un sujet qui mériterait que l'on poursuive les travaux le concernant, avec peut être deux axes possibles: l'un purement mathématique basé sur la convergence rapide des séries, l'autre sur la physique expérimentale des CP non-linéaires : plus précisément l'apparition de motifs non-linéaires recouvrant plusieurs cellules élémentaires et ne possédant donc plus le même pas de maille que le cristal qui leur a donné naissance. Nous reparlerons de ces spéculations dans les perspectives.

Conclusions du chapitre II

Nous avons vu dans ce deuxième chapitre pourquoi les outils informatiques existants ne convenaient pas à nos besoins. Nous avons donc développé de nouveaux algorithmes : la HMSM, une évolution de la MSM qui permet de prendre en compte l'inhomogénéité des cylindres, et les FFF-Kerr et FFF-Thermique capable de traiter les non linéarité dans un CP d'origine Kerr ou provenant d'un changement de phase. Ces deux méthodes sont décrites de façon très détaillée dans ce chapitre.

Si la HMSM permet de traiter toutes les géométries possibles (même dans le cas illimité grâce au contrôle des effets de bords), la FFF amène elle une rapidité de calcul appréciable lors de longues séries de simulations.

Etant des méthodes « ab-initio » sans autre point commun que les équations de Maxwell, l'accord des résultats fournis par les diverses méthodes permet de les valider

* Peu réalistes au sens qu'il n'existe probablement pas de matériaux présentant de telles valeurs de non linéarité Kerr. Toutefois la plage de valeur de l'effet Kerr connue actuellement ne doit pas empêcher de « pousser » les simulations pour vérifier leur stabilité.

mutuellement. Pour le cas thermique, nous avons pu nous adosser à des résultats expérimentaux publiés dans la littérature pour effectuer la validation des codes.

Enfin, l'étude des plages de convergence des méthodes révèle que nous pouvons simuler les domaines spectraux et énergétiques qui nous intéressent. Si nous avons pu grâce à des techniques d'amortissement et de symétrie élargir la plage de convergence, notons toutefois qu'il existe des zones liées à de très fortes non-linéarités (correspondant à des valeurs dépassant les capacités des matériaux Kerr actuels) où les algorithmes refusent de converger et ce en dépit de nos efforts pour régler ce point.

Nous voici équipés pour explorer le comportement des CPs constitués de matériaux présentant un effet Kerr ou à non-linéarité thermique ce qui fait l'objet du chapitre suivant.

Bibliographie du chapitre II

- ¹⁴⁰ N.Bonod, L.Li, S.Enoch, M.Neviere, and E.Popov: "Resonant optical transmission through thin metallic films with and without holes," *Opt. Ex.* 11, 482-490 (2003)
- ¹⁴¹ D. Felbacq, G. Tayeb and D. Maystre, *J. opt. Soc. Am. A/ Vol. 11/* (1994)
- ¹⁴² M. Abramovitz and I.Stegun, "Handbook of Mathematical functions (Dover, New York, 1970)
- ¹⁴³ « Computational Methods for Electromagnetics » by A. F. Peterson, S. L. Ray and R. Mittra. Published by IEEE Press.
- ¹⁴⁴ E. Centeno, D. Felbacq "Optical bistability in finite-size nonlinear bidimensional photonic crystals doped by a microcavity" *Phy. Rev. B*, 62(12), 2000, 7683(4)
- ¹⁴⁵ "Effects of geometric and refractive index disorder on wave propagation in two-dimensional photonic crystals", A. A. Asatryan, P. A. Robinson, L. C. Botten, R. C. McPhedran, N. A. Nicorovici¹ and C. Martijn de Sterke, *Phys. Rev. E* 62, 5711–5720 (2000)
- ¹⁴⁶ L. Li «Use of Fourier Series in the analysis of discontinuous periodic structures », *JOSA A* 13, 1870-1876, 1996.
- ¹⁴⁷ « Finite difference methods in heat transfert », M. Necati, Ozisik
- ¹⁴⁸ S.Volz, M. Lallemand, J.B. Saulnier, « Analyse de la conduction de la chaleur aux temps ultra-courts dans un solide par la thermodynamique irréversible étendue et la dynamique moléculaire », *Rev. Gen. Therm.* 36 (1997)
- ¹⁴⁹ « Comportement dynamique du dioxyde de vanadium sous illumination laser impulsionnelle », Benoît Dillemann, Mémoire de Thèse Mars 1995.
- ¹⁵⁰ P.Vincent, N. Paraire, M. Nevrière, A. Koster, R. Reinisch, "Gratings in nonlinear optics and optical bistability", *J. Opt. Soc. Am. B*, Vol 2, p1106-1116, (1985)
- ¹⁵¹ V. Lousse, JP. Vigneron, "Use of Fano resonances for bistable optical transfer through photonic crystals films", *Phys. Rev. B* 69, 155106-155117 (2004)

Chapitre III

**Résultats apportés par ces nouveaux
outils**

III Résultats apportés par ces nouveaux outils

Nous décrivons dans ce chapitre les principales applications que nous avons pu traiter grâce aux outils numériques du chapitre précédent[♦].

Nous avons étudié un grand nombre de cristaux photoniques différents en utilisant soit la HMSM soit la FFF-Kerr vues au chapitre précédent et parfois les deux méthodes conjointement. Les résultats obtenus peuvent être classés selon quatre grandes familles :

- L'étude fine des effets de bords et leur impact tant quantitatif que qualitatif dans un cristal photonique de taille finie.
- Les différences entre le modèle rigoureux et l'approximation dite « du cylindre homogène ». A cette occasion la vieille règle qui veut que toute inclusion plus petite que $\lambda/10$ puisse être homogénéisée sera revue et précisée.
- Une étude sur l'apodisation des structures 2D afin d'éliminer le ripple et de transformer leurs fonction de transfert spectrale en quelque chose d'utilisable.
- L'étude de la commutation par effet Kerr de cristaux photonique et la possibilité de faire un système limiteur optique dédié à la protection laser.

A/ Etude fine de l'impact des effets de bords dans un CP de dimension finie

Considérons un cristal photonique de dimensions finies constitué d'un maillage carré de cylindres d'indice 3 ($M \times 50$ cylindres disposés en rectangle comme visible sur la figure 2) baignant dans l'air.

Les méthodes décrites au chapitre II.B.4 permettent d'isoler, trier et quantifier les effets de bords. Ceci va nous permettre de les étudier et de juger de leurs effets respectifs.

La méthode des ondes planes, qui se base sur les ondes de Bloch utilisées en physique des solides, nous donne la structure de bande de notre cristal photonique (figure 1) dans le cas de polarisation TE (E colinéaire à l'axe des cylindres). Toutes les directions possibles du vecteur d'onde k sont considérées grâce aux points cristallographiques Γ , X et M. Dans le cas que nous étudions, l'onde incidente sera orientée selon ΓX (normale à la surface de l'échantillon). Notons d'ores et déjà que ΓM représente une propagation « en diagonale ».

[♦] Rappelons toutefois que nous ne pouvons pas décrire ici la structure finale en raison de la demande de brevet déposée...

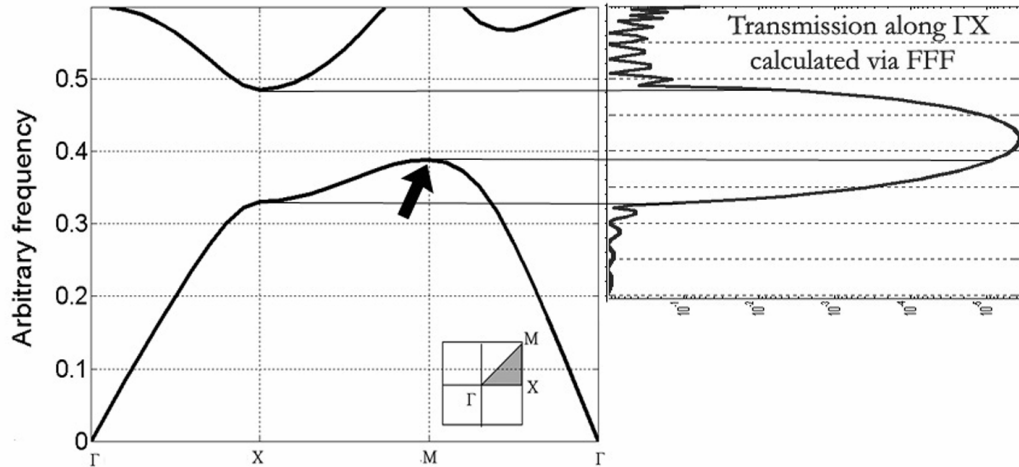


Fig. 1 : Structure de bande et transmission selon ΓX pour une structure parfaite et infinie.

La structure infinie présente d'après l'analyse par la méthode des ondes planes une bande interdite apparente sur l'axe ΓX de $d/\lambda=0.34$ à 0.48 (où d est le pas de maille, ici 336nm). C'est bien ce que l'on retrouve lorsque l'on simule le cristal photonique infini en largeur mais d'épaisseur finie via la méthode FFF illuminé selon ΓX (Fig. 1b) : nous obtenons un beau spectre de transmission en parabole en accord avec la bande interdite calculée.

Notons toutefois que la bande interdite au sens strict, celle où il ne peut y avoir de photons quelque soit la direction de propagation, est plus restreinte que cette bande interdite apparente : elle s'étend seulement de $d/\lambda=0.39$ à 0.48 et non de $d/\lambda=0.34$ à 0.48 en raison des modes autorisés selon ΓM (Flèche sur Fig. 1).

Simulons maintenant notre échantillon de dimension finie via la méthode HMSM (Fig. 2 et 3).

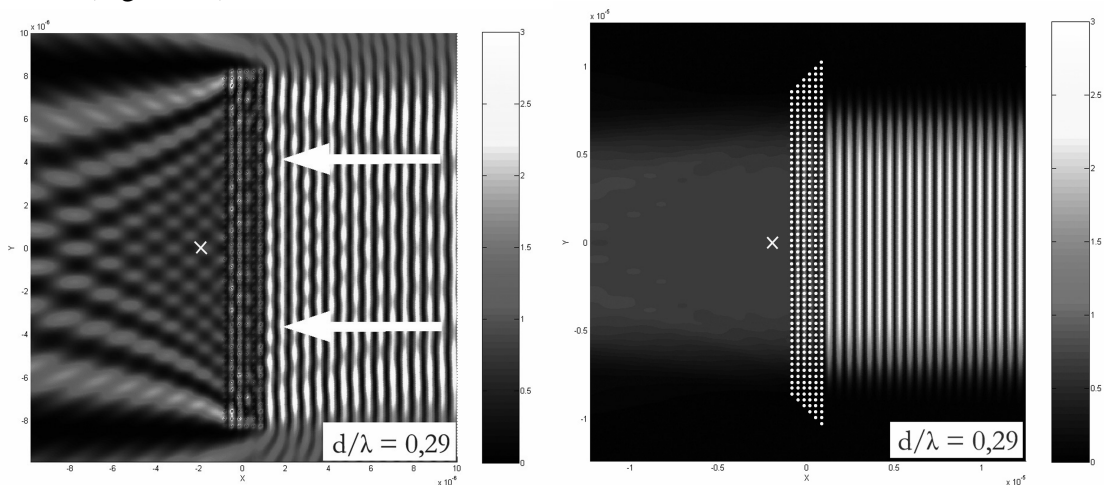


Fig 2 et 2.bis: Carte de champ à $d/\lambda=0,29$ d'un cristal photonique de taille finie (6×50). A droite la meme simulation mais avec le dispositif anti-effets de bords (supergaussienne et biseaux) enclenché.

Nous pouvons observer sur la figure 2 une onde stationnaire à l'intérieur du CP organisée selon son épaisseur mais aussi selon sa largeur. Nous observons aussi une figure interférentielle dessinant un damier très marqué derrière la structure. La croix visible sur la figure 2 marque la position de notre point sonde.

L'intensité relevée en ce point est décrite sur la figure 3 pour diverses épaisseurs d'échantillons (de 4 à 12 rangées de cylindres en épaisseur). Nous parlerons dorénavant pour cette figure de « spectre de transmission » bien qu'en toute rigueur les effets de bords soient tels que cette dénomination est abusive.

Nous constatons sur la figure 3 que bien que l'échantillon soit d'une largeur grande devant la longueur d'onde (50 tiges avec un pas de maille de 336nm soit 17 μ m de largeur pour une onde incidente de longueur d'onde variant de 500nm à 1,6 μ m) des effets de bords très importants sont visibles. La forme parabolique du gap est absente, de nombreux pic sont apparus. Ceci dit, la position et la largeur du gap restent en accord avec la prédiction faite pour un cristal infini.

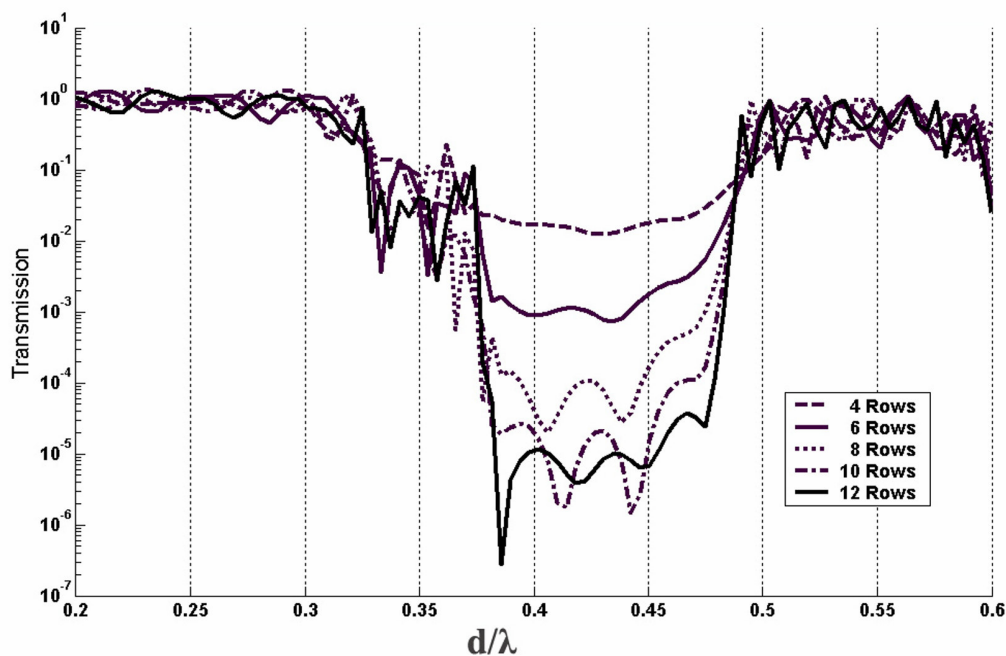


Fig 3 : Transmission de cristaux photoniques de dimension finie (50 tiges de largeur, épaisseur variable)

En fait il faut distinguer deux régions dans la zone opaque. Une première zone de $d/\lambda=0.32$ à 0.37 puis une seconde de $d/\lambda=0.37$ à 0.48 . Dans la première région, de grandes variations de l'intensité sont visibles et dégradent fortement le flanc du gap. La transmission y forme un plateau qui sature à 10^{-2} . Le fond du gap (deuxième région), lui, n'est plus parabolique. Toutefois les valeurs moyennes relevées au fond du gap sont du même ordre de grandeur que celles relevées dans le cas d'un cristal de largeur infini exempt d'effets de bords (Fig. 3.bis).

La figure 4 illustre ce à quoi ressemble la carte de champ quand les effets de bords sont très importants. Elle a été calculée à $d/\lambda=0.3697$ ce qui correspond au plus haut

pic de la première région, très près de la transition entre première et deuxième région. La figure de diffraction située juste derrière le CP est très différente de ce que l'on peut voir sur la figure 2 qui correspondait elle a un état passant du CP: on y trouve des franges d'interférences perpendiculaires à la face arrière du CP.

Nous allons progressivement supprimer ces effets de bords en utilisant les techniques vues en II.B.4 : adjonction de biseaux pour limiter l'effet Fabry-Pérot et profil super gaussien pour limiter le couplage par les bords et la diffraction de l'ensemble. Appliquer en deux temps ces techniques plutôt que simultanément va nous permettre de séparer les différentes sortes d'effets de bord ainsi que leur causes.

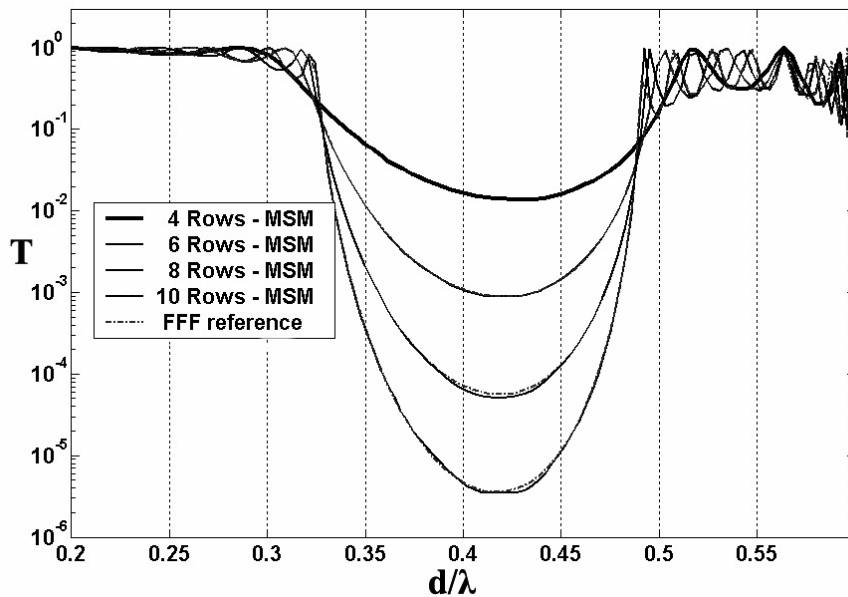


Fig 3.bis : Transmission de cristaux photoniques de dimension finie (50 tiges de largeur, épaisseur variable) obtenues via MSM avec les dispositifs de réduction d'effets de bord enclenchés. Il y a supersposition parfaite avec les courbes obtenues pour des structures infinies via la FFF.

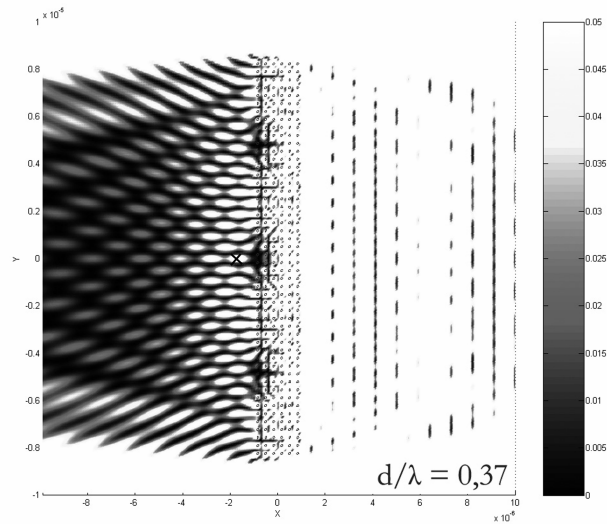


Fig. 4: Carte de champ à $d/\lambda=0,37$, ie sur un pic de transmission de la première région

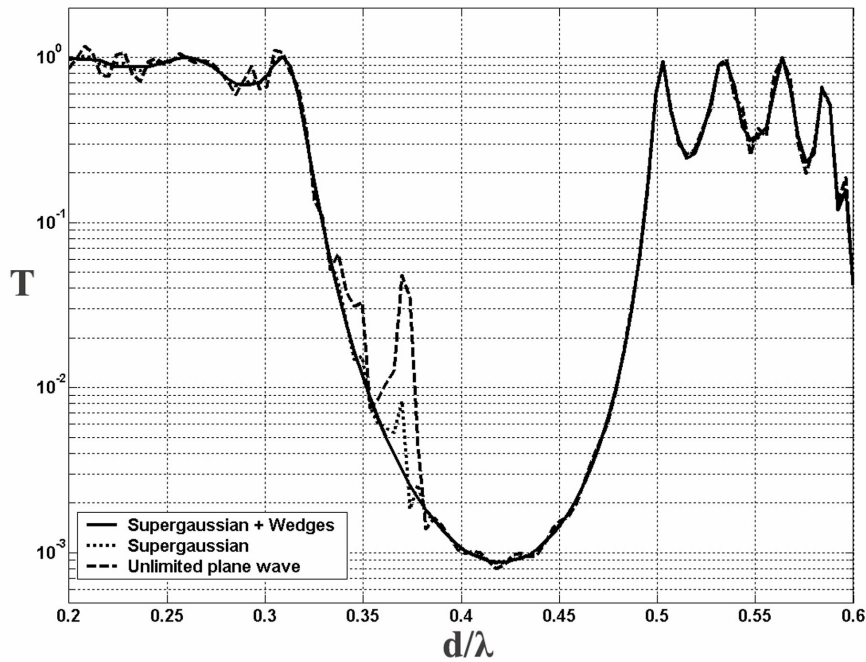


Fig. 5: Transmission d'un CP de 6 couches d'épaisseur simulé sans biseaux ni supergaussienne, puis sans biseaux, puis avec les deux.

La figure 5 représente la transmission (ou plus exactement l'intensité relevée au point sonde) selon que l'on simule sans biseaux ni supergaussienne, puis avec

supergaussienne mais sans biseaux, et finalement avec biseaux et supergaussienne. Elle va nous permettre de quantifier l'intensité des différents effets de bord.

Analysons maintenant ces résultats.

Pour un CP d'épaisseur finie, il est connu que les oscillations de transmission dans la bande permise sont le fait de modes Fabry-Perot déterminés par l'épaisseur du CP. Si la zone $d/\lambda < 0.32$ présente du bruit la zone $d/\lambda > 0.48$ est elle tout à fait similaire à ce que l'on attend d'un CP de largeur infini mais de même épaisseur. Ceci provient très certainement de la diffraction par les bords. En effet, si l'on s'en réfère aux formules en sinus cardinal* connues de tous, les grandes longueurs d'ondes correspondent à de plus grands angles de diffractions. Ainsi l'influence de la diffraction par les bords sera plus importante sur le point sonde (Fig. 2) pour $d/\lambda < 0.32$ que pour $d/\lambda > 0.48$. Cette supposition est renforcée par l'observation de la figure de diffraction visible fig. 2 : l'œil de l'opticien y reconnaît la queue de comète caractéristique de la diffraction de l'onde plane incidente par les bords du CP. La disparition de cette forme sur la carte de champ (Fig 2.bis) et la suppression du bruit dans la zone $d/\lambda < 0.32$ dès que les bords sont laissés dans l'ombre (Fig. 5) confirme que ce bruit ne venait que de la diffraction par les bords.

Dans la zone $0.32 < d/\lambda < 0.37$, des pics significatifs apparaissent. Ces résultats sont en accord avec ceux de la référence ^[152] qui présente quelques similarités avec notre étude. Les auteurs de ^[152] ont numériquement démontré qu'il était possible de prévoir l'apparition de ces pics à partir de l'étude des singularités de la matrice de diffraction du cristal photonique complet. Les pôles de cette matrice donnent des informations sur la densité d'état dans un cristal de dimension finie. Ici, nous allons essayer une approche plus physique des phénomènes ayant lieu dans le cristal. De plus, nous allons séparer l'impact des différentes sortes d'effet de bords.

La structure de bande photonique de notre cristal explique pourquoi les très fortes variations de la transmission semblent limitées à la zone $0.32 < d/\lambda < 0.37$. Nous pouvons voir sur la figure 1 (voir flèche sur figure) que dans cette zone des modes sont autorisés à se propager selon la direction ΓM alors qu'ils sont interdits selon ΓX . Le fait que la zone du spectre de transmission où nous observons des effets importants et que la zone du spectre où ces modes ΓM soient autorisés se recouvrent exactement n'est pas le fruit du hasard. Très probablement, les effets de bords mènent à un couplage avec les modes ΓM qui sont eux même renforcés par une résonance Fabry-Pérot ayant lieu entre les bords supérieurs et inférieurs de notre structure. Remplacer l'onde plane illimitée par une supergaussienne laissant les bords de la structure dans le noir réduit très significativement les pics (Fig. 5). Ceci confirme qu'une part importante du champ incident peut rentrer dans la structure par les bords inférieurs et supérieurs, excitant des modes selon l'axe ΓM où les hautes fréquences sont autorisées alors qu'elles sont interdites sur ΓX .

Toutefois, si supprimer le couplage entre l'onde incidente et les bords supérieurs et inférieurs de notre CP réduit grandement le bruit, cela ne suffit pas à annuler tous les pics. Celui situé à $d/\lambda = 0.3697$ se révèle d'ailleurs très robuste (Fig. 5). Ce pic correspond apparemment à une singularité dans la structure de bande (indiqué par une flèche sur la fig. 2). Cette singularité est connue sous le nom de « singularité de Van Hove » ou « point critique » en physique du solide. Elle correspond à une singularité dans la densité d'états adjoints (JDOS ou Joint Density of States) : En

* Le sinus cardinal apparaissant dans la diffraction 2D de la lumière par un trou.

électromagnétisme, la vitesse de groupe est nulle en ce point dans le cas d'une structure infinie. En d'autres termes : l'énergie est piégée et les photons disposent d'un très long moment pour interagir avec la structure. Dans le cas de notre structure de dimension finie, la vitesse de groupe diminue au fur et à mesure que le profil de la bande s'aplatit en se rapprochant du point d'inflexion¹⁵³. Si nous regardons la carte du champ précisément sur ce pic (Fig. 4) nous observons quelque chose d'inhabituel. La figure d'interférence dans la région de la face arrière du CP se compose de franges perpendiculaires à la face arrière. Intuitivement, une telle figure doit provenir de deux modes émergeant du CP avec respectivement les angles θ et $-\theta$. On ne peut s'empêcher de penser qu'il s'agit là du mode selon ΓM qui rayonne hors de la structure.

Ce pic à $d/\lambda=0.3697$ ne disparaît que si l'on handicape la cavité Fabry-Pérot en ajoutant des biseaux* à 45° (Fig. 5). Nous avons pu vérifier qu'il ne disparaissait pas si au lieu d'ajouter des biseaux nous augmentions sensiblement la largeur de l'échantillon (sans modifier la largeur de la supergaussienne). Ceci prouve la réalité de l'effet Fabry-Perot même lorsqu'il n'y a plus de couplage d'énergie par les bords (illumination par une supergaussienne), un effet qui ne peut exister dans le cas structures de largeur infinie.

Dans la zone $0.37 < d/\lambda < 0.48$, moins intéressante, on observe de faibles oscillations. Elles sont principalement dues à la diffraction par les bords mais ne peuvent être totalement supprimées (Fig. 5) qu'après avoir inhibé l'effet Fabry-Pérot.

En conclusion, les effets de bords affectant un cristal photonique de dimensions finies sont de trois sortes. Le plus important de tous est le couplage par les bords : l'entrée de l'énergie selon un angle d'incidence rasant et l'excitation de modes qui ne correspondent pas à l'incidence de l'onde illuminatrice. Cet effet est d'autant plus important si l'on se trouve dans un gap apparent (gap sur quelques directions cristallographiques) et non total (bande interdite quelle que soit la direction du mode) car l'énergie en arrivant sur les bords inférieur et supérieur du CP va profiter de ces modes autorisés pour pénétrer le cristal.

Bien que moins important (d'un facteur 10 d'après la fig. 5) les effets liés à un effet Fabry-Pérot dans le sens de la largeur, non alimenté par l'énergie venue des bords, ne sont pas négligeables et doivent être pris en compte.

Le troisième effet, la diffraction par les bords du CP, ne concerne que l'espace situé derrière le CP et n'influe pas sur son champ interne.

B/ Etude fine de l'impact de l'approximation homogène

Lorsque l'on souhaite étudier le comportement d'une ou de plusieurs petites inclusions Kerr, disons de taille de l'ordre de $\lambda/10$ ou plus petite, une approximation très employée est l'approximation homogène. Elle revient à considérer qu'une petite

* Une technique bien connue des laséristes.

structure qui a vu sa carte de permittivité modifiée via l'effet Kerr peut être remplacée par une carte de permittivité homogène, lisse, ayant même valeur moyenne que la carte de permittivité rigoureuse.

Le grand mérite de cette approximation c'est qu'elle simplifie considérablement le travail de celui qui cherche à simuler le phénomène Kerr dans de petits objets.

Ayant dû explorer les cas où un grand nombre d'inclusions Kerr (un amas de cylindre formant un cristal photonique pour être précis) étaient de tailles beaucoup plus importantes que $\lambda/10$, nous avons dû concevoir des outils ne reposant pas sur cette approximation (cf chapitre II : la HMSM et la FFF-Kerr). Et une fois ces outils traitant l'effet Kerr de façon rigoureuse disponibles, nous avons eu l'idée de comparer leurs résultats avec ceux fournis par l'approximation homogène.

Ceci a bien entendu confirmé que l'approximation était valable à petite taille mais nous avons eu la surprise de constater qu'elle pouvait rester correcte bien au-delà de $\lambda/10$ ou au contraire mener à de grands écarts même en dessous de $\lambda/10$ lorsque le champ était particulièrement exalté.

Lorsque illuminé par une onde incidente de longueur d'onde adaptée, un cristal photonique présente une carte de champ assez inhomogène, très différente de celle d'un objet non nano structuré. Cette carte de champ est suffisamment inhomogène pour que très vite, l'idée de supposer que le champ est homogène à l'intérieur d'un cylindre devienne abusive. Les figures qui suivent sont assez parlantes.

Toutefois, l'approximation homogène présuppose que la carte de permittivité associée par effet Kerr à ce champ peut être remplacée, cylindre par cylindre, par une permittivité moyenne. On peut voir Figure 6 et 7 la différence fondamentale entre la méthode homogène et une méthode rigoureuse.

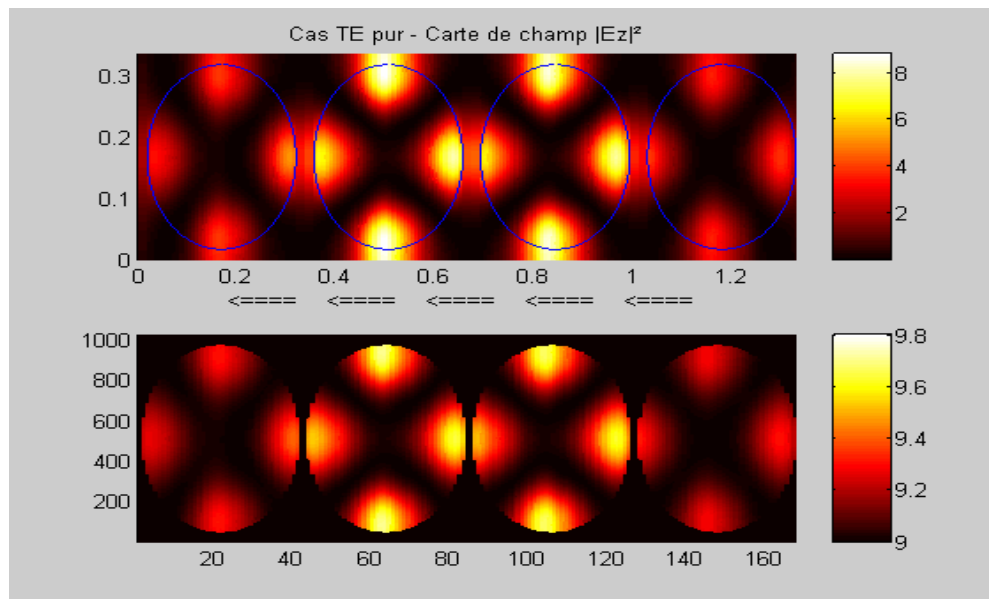


Fig. 6 : En haut la carte de champ d'une rangée de cylindres dans un CP. En bas la carte de permittivité qui en résulte par effet Kerr.

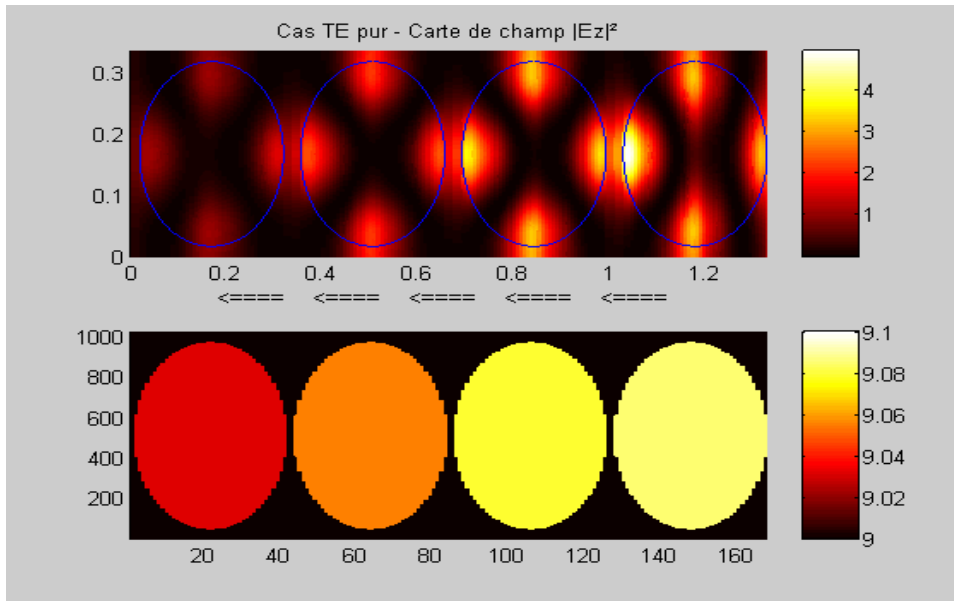


Fig. 7 : A la différence de la fig. 7, l'approximation homogène a été appliquée et les permittivités dans les cylindres sont maintenant lisses.

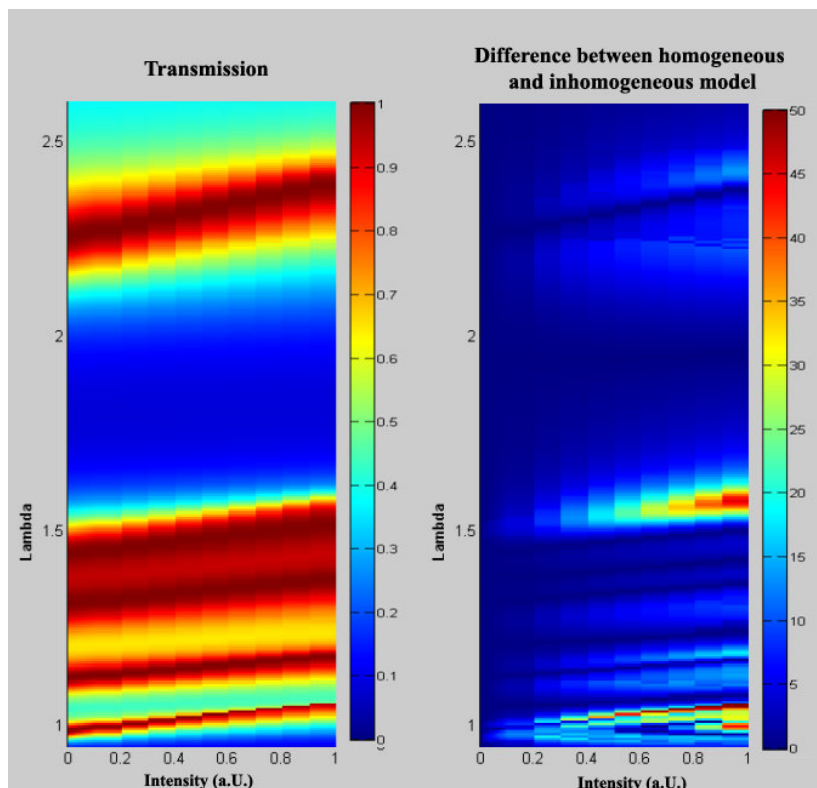


Fig. 8 : Evolution de la transmission d'un CP Kerr à fort taux de remplissage illuminé par une intensité croissante. A gauche la cartographie de la transmission selon la longueur d'onde et l'intensité incidente. A droite l'écart relatif entre les modèles homogènes et rigoureux (le rouge correspond à un écart de 100%)

Nous avons simulé avec et sans l'approximation homogène le comportement d'un CP à fort facteur de remplissage constitué de quatre rangées de cylindres. La maille est carrée, de pas 336nm. L'indice des cylindres vaut 3, ils baignent dans le vide et ont un diamètre de 300nm. Les résultats (Fig. 8) montrent pour les résultats issus de chaque méthode un comportement global identique. Les deux méthodes prédisent la même position de la bande interdite et les valeurs de transmissions sont quasi-identiques partout, même à forte intensité.

Mais de petites différences sont présentes sur les flancs de la bande interdite et dans la zone transparente située dans les hautes fréquences. Ces différences augmentent et finissent par devenir significatives lorsque l'intensité ou le rayon des tiges augmente. Elle dépasse 20% pour des cylindres de diamètre $\lambda/8$ et de plus de 50% pour des cylindres de diamètre $\lambda/3$.

Nous avons ensuite simulé, avec et sans l'approximation homogène, le comportement d'un CP à faible facteur de remplissage. Le CP est identique à celui simulé précédemment à la différence près que cette fois ci les cylindres ne font plus 300nm de diamètre mais 188. Les résultats sont présentés fig. 9.

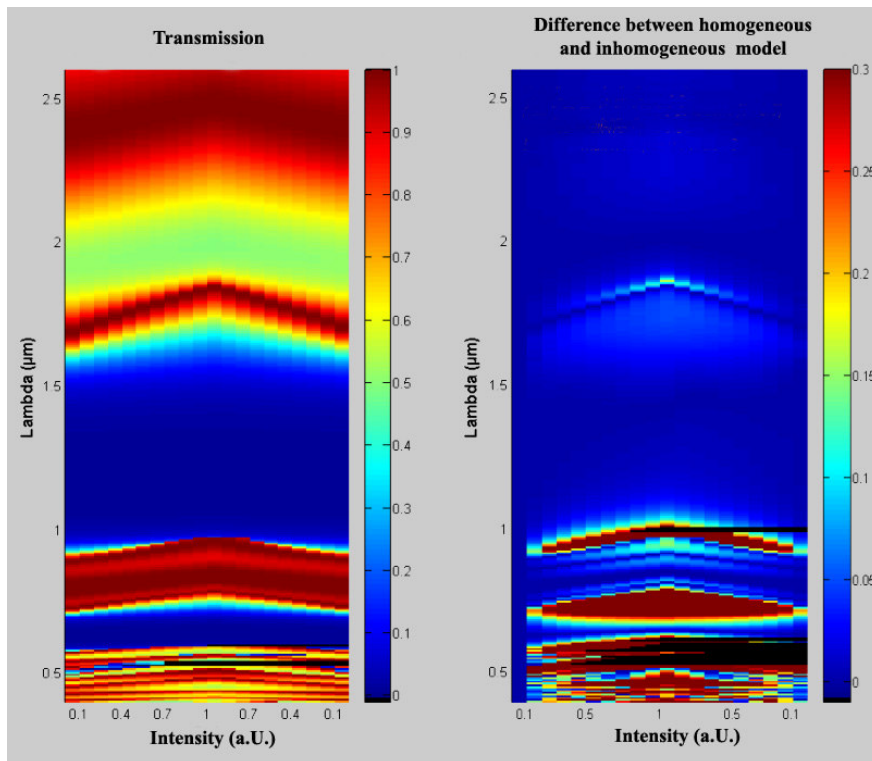


Fig. 9 : Evolution de la transmission d'un CP Kerr à faible taux de remplissage illuminé par une intensité croissante. A gauche la cartographie de la transmission selon la longueur d'onde et l'intensité incidente. A droite l'écart entre les modèles homogènes et rigoureux.

Cette fois ci les différences entre les deux méthodes sont plus importantes. La position de la bande interdite (située grossièrement entre 1,5 et 2,2 μ m) devient incorrecte, les différences de transmission calculées peuvent atteindre 10% même pour des cylindres de diamètre $\lambda/10$ et dépasser 30% pour ceux de diamètres $\lambda/5$.

Cette différence atteint même 1800% dans certaines zones (là où la position du gap diffère selon les méthodes de simulation employées. L'échelle colorée de la figure 10 ayant été limitée à une valeur max de 30%, ceci n'est pas visible sur la figure). Simplement en changeant la forme du CP, des tiges de dimension $\lambda/10$ ne se prêtent subitement plus aussi bien à l'approximation homogène. Le soupçon que la géométrie du CP doit être prise en compte en plus de la dimension des tiges lorsque l'on s'intéresse au domaine de validité de l'approximation homogène apparaît. Ce soupçon va être confirmé par l'étude d'une cavité.

Nous avons ensuite simulé une cavité dans un cristal photonique : Un cristal 5×5 à maille triangulaire où le cylindre central serait manquant (fig. 10a). Nous avons en fait volontairement repris la cavité décrite et étudiée dans la référence [154].

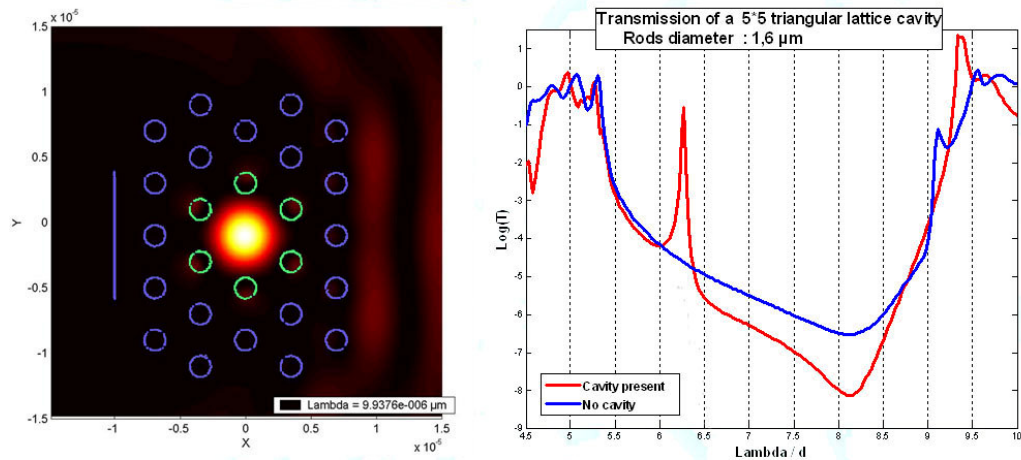


Fig. 10.a. Structure et carte de champ de la cavité. Les cercles verts représentent les cylindres Kerr. 10.b : Transmission de la structure en régime linéaire avec ou sans cavité.

La cavité est réalisée de telle façon que son mode soit situé à l'intérieur de la bande interdite du cristal (fig. 10b) permettant ainsi un mince pic de transparence et une très forte exaltation du champ électromagnétique. Les cylindres entourant directement la cavité sont constitués d'un matériau non-linéaire de type Kerr tandis que les autres cylindres ne présentent pas d'effet non-linéaires. Le champ est très exalté et de forts effets non-linéaires peuvent être atteints de cette façon avec des lasers de faible puissance : $|E|^2$ peut être 550 fois plus grand au centre de la cavité et 90 fois plus grand dans les cylindres non linéaires à la résonance que dans l'espace libre.

Tout comme il est décrit dans la réf. [154], une telle cavité non-linéaire permet des cycles d'hystérésis marqués. Mais lorsque nous les simulons par le biais de méthodes rigoureuses ou par le biais de l'approximation homogène nous observons une forte différence dans la valeur du seuil d'intensité de déclenchement du cycle d'hystérésis (Fig. 11). Alors que le cycle a la même forme quelle que soit la méthode de simulation utilisée, l'intensité de seuil pour basculer de l'état passant à l'état opaque est surestimé de 90% lorsque l'approximation homogène est utilisée (cylindres de diamètre $\lambda/16$). Lorsque l'on revient sur des cylindres de diamètre $\lambda/10$ comme utilisés dans [154] et supposés sans danger, la surestimation de l'énergie nécessaire est encore de 20%

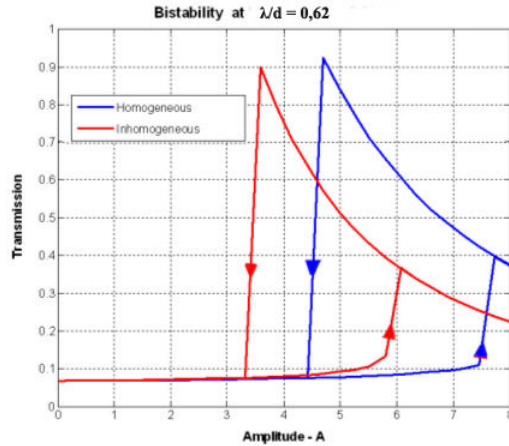


Fig. 11: Transmission de la cavité en fonction de l'intensité incidente. Illustration de l'écart de résultats entre la méthode rigoureuse et l'approximation homogène.

Notre interprétation de ces résultats est que le confinement du champ est le paramètre clef. Dans un cristal photonique dénué de cavité, l'erreur due à l'approximation homogène ne devient significative que sur les flancs de la bande interdite, là où la vitesse de groupe tend vers zéro, là où le champ est très confiné. Ce confinement est confirmé par l'inspection des cartes de champs. Dans un cristal photonique présentant une cavité, l'erreur devient significative près de la résonance, justement lorsque le champ est bien plus confiné que dans un cristal ordinaire. Le confinement est la clef.

Au final nous avons des diamètres de tiges identiques lorsque ils sont rapporté à la longueur d'onde. Des confinements de champs différents mais qui produisent au final des variations d'indice de même ordre de grandeur. Malgré ces similitudes, l'approximation homogène ne fonctionne pas aussi bien pour les uns que pour les autres. La seule différence c'est la forme du champ dans les cylindres.

Dans le cas de la cavité, la variation d'indice liée à l'effet Kerr se produit sur une petite partie du cylindre : le champ électromagnétique varie si vite que seul le bord du cylindre situé coté cavité est fortement affecté. Ces zones de plus fort indice agissent comme des murs pour la cavité. Remplacer un tel profil par un cylindre dont l'indice est « moyenné » revient à reculer légèrement ces murs. Une inspection soigneuse des cartes de champs lors du basculement entre l'état passant et l'état opaque de la cavité révèle que ce basculement est lié au très léger déplacement (moins de 100nm) du barycentre de la cavité. Si l'on prend ceci en considération il paraît logique que l'approximation homogène, en perturbant la position des « murs » de la cavité, en perturbe aussi la position du barycentre et donc du seuil de basculement entre les états transparent et opaque.

En conclusion nous dirons que nous avons sans surprise trouvé que la règle tacite du « $\lambda/10$ est assez petit pour l'approximation homogène » est largement vérifiée à l'exception de certaines situations ou elle devient insuffisante. Ces situations sont liées au confinement du champ qui produit, via l'effet Kerr, des variations brutales de permittivité à une échelle plus petite que $\lambda/10$.

En fonction de la géométrie du cristal photonique l'approximation peut donner de bons résultats pour des cylindres aussi gros que $\lambda/6$ ou de mauvais résultats pour des

cylindres aussi petit que $\lambda/10$. On trouvera dans le tableau ci-dessous les valeurs indicatives suivant les situations.

Diamètre des cylindres →	$\lambda/10$	$\lambda/8$	$\lambda/6$ et plus
Position de la bande interdite	Correcte	Correcte	Incorrecte
Transmission sur les flancs de bande interdite	Erreur < 10%	Erreur < 20%	30 < Erreur < 1800 %
Seuil de basculement à la résonance	Erreur de 20%		Erreur > 90%

Il est à noter qu'à chaque fois que le champ est fortement confiné, l'approximation homogène doit être utilisée avec précaution et que la règle du $\lambda/10$ n'est plus suffisante pour être en sécurité. Au contraire, lorsque le confinement du champ est faible, l'approximation homogène permet d'obtenir des résultats fiables et rapides même pour des objets nettement plus grands que le fatidique $\lambda/10$.

C/ Lissage des fonctions de transfert par apodisation 2D

L'augmentation du nombre de rangées d'un cristal photonique produit de fortes variations de la transmission dans les bandes permises par résonance Fabry-Pérot. On voit ci-dessous (fig. 12) qu'un élément comportant 32 rangées en épaisseur est totalement inutilisable tel quel car sa transmission en dehors de la bande interdite des transmissions varie continuellement entre 10 et 99% là où l'on doit rester au-dessus de 90% en permanence si l'on veut pouvoir l'utiliser dans un appareil optique.

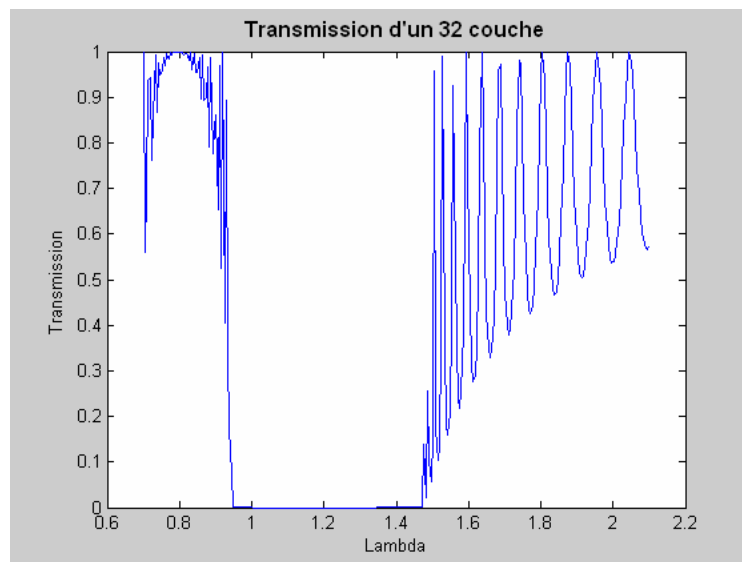


Fig. 12 : Transmission d'un cristal photonique de 32 rangées d'épaisseur rendu complètement inutilisable par les effets Fabry-Pérot ayant lieu sur son épaisseur.

Dans le milieu des télécommunications optiques, les premiers développeurs de réseaux de Bragg fibrés ont été confrontés aux mêmes handicaps. Ce défaut qui fait osciller la valeur de la transmission là où l'on voudrait un plateau transparent y porte même un nom, le « ripple ». Des solutions très efficaces y ont été apportées et sont couramment utilisées et raffinées par l'industrie, permettant l'essor que l'on sait dans le domaine des composants optiques fibrés. Le réseau de Bragg étant un cristal photonique 1D, nous nous en sommes inspirés pour trouver une solution 2D.

La solution anti-ripple appliquée au réseau de Bragg consiste en l'apodisation du contraste d'indice. Le profil du réseau de Bragg n'est plus une modulation sinusoïdale de l'indice mais une modulation sinusoïdale apodisée par une forme en cloche judicieusement choisie (Fig. 13).

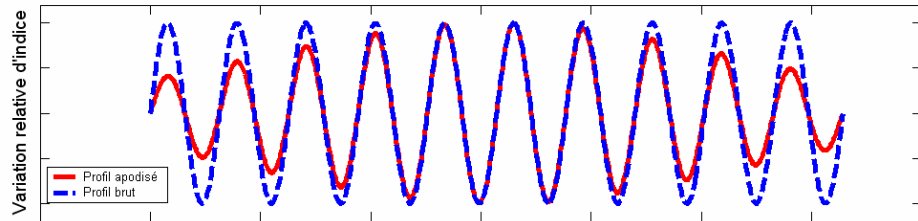


Fig. 13 : Modulation d'indice de réseaux de Bragg non apodisé et apodisé

Confronté au problème en 2D, faire varier l'indice de nos inclusions nous semblait mener à une impasse technologique : La recherche d'un matériau non-linéaire adapté à la limitation optique s'avérant déjà difficile, imposer en plus à ce matériau la possibilité de faire varier finement son indice linéaire lors de la synthèse aurait ramené le nombre de candidats potentiels à zéro.

Nous avons donc utilisé la spécificité du cristal photonique 2D à notre avantage : au lieu d'apodiser l'indice des inclusions Kerr au long du cristal photonique, nous avons apodisé la taille des inclusions selon leur profondeur (Fig. 14) grâce à une simple formule de gaussienne :

$$\exp\left(-\left(\frac{Rang - NB_Rangs}{\frac{NB_Rangs}{2}}\right)^2\right)$$

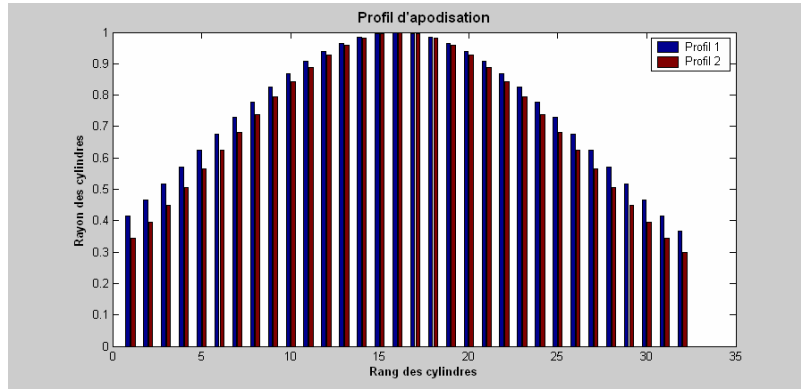
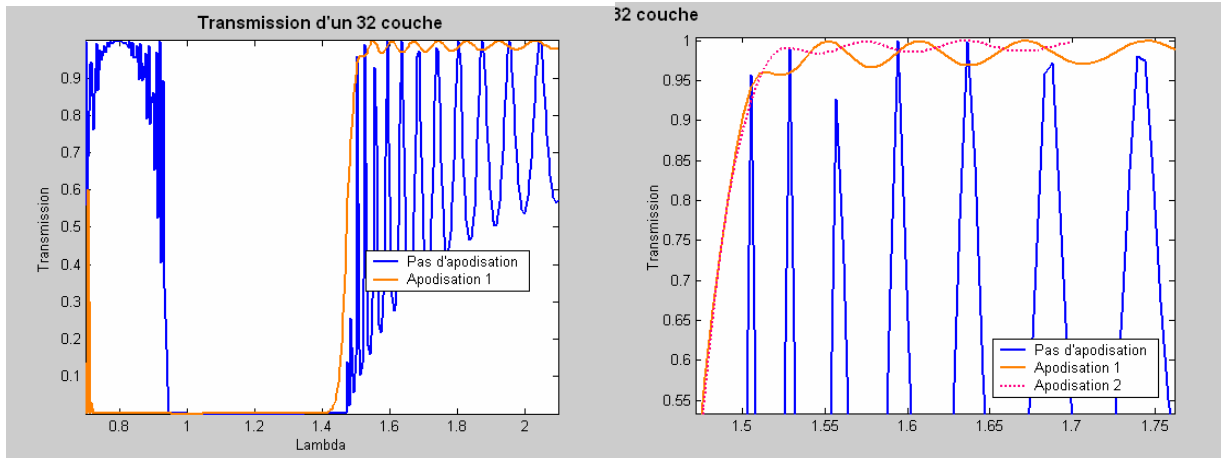


Fig. 14 : Deux profils d'apodisation retenus pour la suite. La figure représente la taille relative des inclusions en fonction de leur profondeur dans le cristal photonique pour

Les inclusions sont suffisamment petites (de l'ordre de λ ou moins) pour que l'indice effectif de la zone englobant l'inclusion soit modifié par la taille de l'inclusion elle-même. On module ainsi l'indice effectif local sans ajouter de contraintes supplémentaires dans le choix du matériau. La modulation de la taille des inclusions en 2D agit comme la modulation de l'indice en 1D.



Fi. 15 : Effet de l'apodisation sur la transmission. (L'apodisation 1 correspond à la formule présentée plus haut dans le texte. L'apodisation 2 correspond à une gaussienne de base légèrement plus large)

Une simple apodisation gaussienne des tailles de tiges sur le "32 rangées d'épaisseur" présenté précédemment réduit spectaculairement le ripple et amène la transmission dans la bande passante grande longueur d'onde au-dessus de 95 % comme on peut le voir fig. 15. Ceci se fait au prix de la perte de la bande passante courte longueur d'onde qui est totalement détruite et d'une diminution de l'opacité maximale dans la bande interdite (Fig. 16).

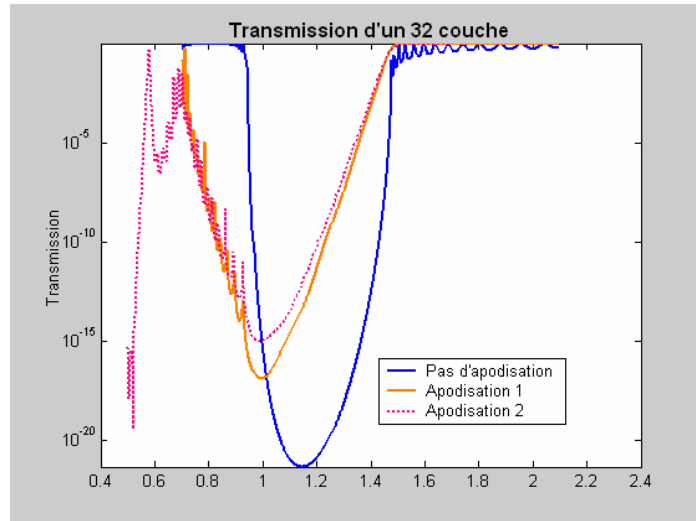


Fig 16 : Impact négatif de l'apodisation

Une autre forme d'apodisation aurait permis de supprimer le ripple à courte longueur d'onde mais aurait alors dégradé la transmission à grande longueur d'onde. Dans les faits cela n'a guère d'importance car l'on n'utilisera jamais qu'un côté ou l'autre de la bande passante et jamais les deux à la fois.

La méthode d'apodisation est donc viable et constitue une brique élémentaire de plus pour la conception d'un futur limiteur optique.

D/ Etude fine des commutations par déplacement de la bande interdite par effet Kerr. Application à la limitation optique.

1/ Modification de la forme de la transmission par effet Kerr

Lorsque qu'un cristal photonique constitué d'inclusions présentant un effet Kerr se trouve illuminé par une onde incidente, les inclusions non-linéaires changent de permittivité ce qui a pour effet de modifier la transmission du dit cristal photonique. Le comportement accepté depuis longtemps pour ce genre de phénomène est une translation de la bande interdite proportionnelle à l'intensité incidente. Nous allons voir que lorsque étudié de plus près, la translation n'en est une qu'en première approximation et les bords de la bande interdite ont un comportement différent l'un de l'autre. L'un qui favorise l'usage en limitation/commutation optique et l'autre qui ne s'y prête pas.

Etudions notre cristal photonique constitué de tiges Kerr, à maille carrée et baignant dans le vide. Ici, l'effet Kerr est positif (ie: $\chi^{(3)} > 0$) cela a cette fois son importance.

A basse intensité, le comportement d'un tel cristal est identique à celui d'un cristal linéaire. Mais petit à petit, l'intensité augmentant et renforçant les effets Kerr, l'indice des cylindres augmente. Intuitivement nous devrions anticiper un redshift (décalage vers le rouge) de la bande interdite car il est connu que pour un plus grand contraste d'indice la bande interdite se translate vers les grandes longueurs d'onde^[155].

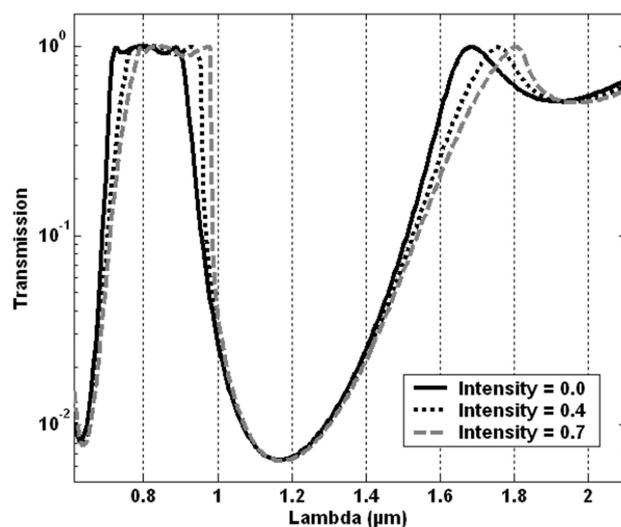


Fig. 17: Evolution du spectre de transmission d'un cristal photonique Kerr positif en fonction de l'intensité incidente.

L'étude de l'évolution du spectre de transmission en fonction de l'intensité (Fig. 17) confirme ce redshift. Mais il ne s'agit pas d'une simple translation du spectre. Le scénario où tout les cylindres changeraient d'indice en même temps n'est pas représentatif de la réalité, ici seuls les cylindres illuminés sont affectés par l'effet Kerr et voient leur indice modifié.

En conséquence, le fond de la bande interdite, là où la lumière ne pénètre pas dans le CP, n'est pas modifié par l'augmentation d'intensité. Ce fond, ce sommet inversé de parabole, ne subit pas de redshift et reste immobile lors de l'augmentation de l'intensité.

Au contraire, dans les zones transparentes du cristal photonique, tous les cylindres sont illuminés et subissent l'effet Kerr. Ces zones subissent le redshift escompté.

Sur les flancs de la bande interdite, là où le CP n'est ni totalement transparent ni opaque, seules les couches superficielles du CP sont illuminées tandis que les couches enfouies ne sont pas affectées par l'effet Kerr. Nous observons alors un redshift partiel dû à la seule modification d'indice des couches supérieures.

Il est très intéressant de noter que le flanc bleu (ce qui désigne le flanc courte longueur d'onde, même si nous sommes dans l'infrarouge) et le flanc rouge n'ont pas le même comportement au fur et à mesure que l'intensité augmente. Sur le flanc bleu, les couches superficielles basculent de l'état opaque à l'état transparent lorsque illuminées... laissant l'énergie atteindre les couches suivantes. Par effet domino, le basculement des premières couches provoque le basculement de toutes les couches.

Le basculement sur le flanc bleu est donc très abrupt, très contrasté. On voit d'ailleurs la pente du flanc bleu devenir de plus en plus raide au fur et à mesure que l'intensité incidente augmente.

Au contraire, sur le flanc rouge, les couches supérieures basculent lorsque illuminées de l'état passant vers l'état bloqué, protégeant ainsi les couches enfouies de l'énergie incidente. Dans ce cas la quasi-totalité des couches enterrées ne sont pas affectées par l'effet Kerr et les changements dans les valeurs de transmission ne proviennent que des couches superficielles et non de l'ensemble du CP. La conséquence est un basculement peu contrasté entre l'état transparent et l'état opaque et une pente du flanc rouge de la bande interdite qui s'amollit au fur et à mesure que l'intensité augmente.

Ainsi, contrairement à ce à quoi l'on s'attendait d'après l'étude du régime linéaire, l'illumination d'un cristal photonique Kerr positif ne produit pas un redshift mais une déformation de la courbe de transmission. Le fond reste fixe, la partie transparente translate vers le rouge. Ceci a pour conséquence de découpler l'évolution des flancs de la bande interdite. La pente de l'un s'accroissant tandis que celle de l'autre diminue. Cette différence de comportement des flancs est d'un grand intérêt pour toutes les applications à base de commutation entre les états transparents et opaque : le flanc bleu est bien mieux adapté à de telles applications que le flanc rouge.

Il est à noter qu'avec l'utilisation de matériaux à effet Kerr négatif, tout est inversé. Nous avons un « blueshift » et c'est le flanc rouge qui se trouve alors le mieux adapté.

2/ Recherche d'un optimum pour la commutation optique

Les premières considérations théoriques sur le décalage de la bande interdite par effet Kerr étant faites, il reste à trouver la meilleure configuration possible pour profiter au mieux de la commutation transparent/opaque. Nous cherchons le contraste maximal ainsi que la largeur de bande de commutation maximale.

Portons tout de suite l'étude sur des CP à maille triangulaire constitués de tiges Kerr baignant dans le vide. (Les mailles carrées se révélant très vite moins performante et moins intéressante du point de vue de la tolérance à l'angle d'incidence)

Nous allons balayer les formes possibles en faisant varier le diamètre des cylindres sans changer le paramètre de maille. Les résultats pour un effet Kerr Positif sont représentés* figure 18.

* Nos tests faits sur la validité de la méthode EFIE employée ici (voir II.B.2) indiquent qu'elle n'est plus fiable lorsque le diamètre des tiges dépasse 70% de la longueur d'onde. Soit 140nm de rayon pour $\lambda=0,4\mu\text{m}$ et 175nm de rayon pour $\lambda=0,5\mu\text{m}$. Une petite zone du coin inférieur droit des graphiques est donc à ignorer. Le reste du graphique n'est pas concerné.

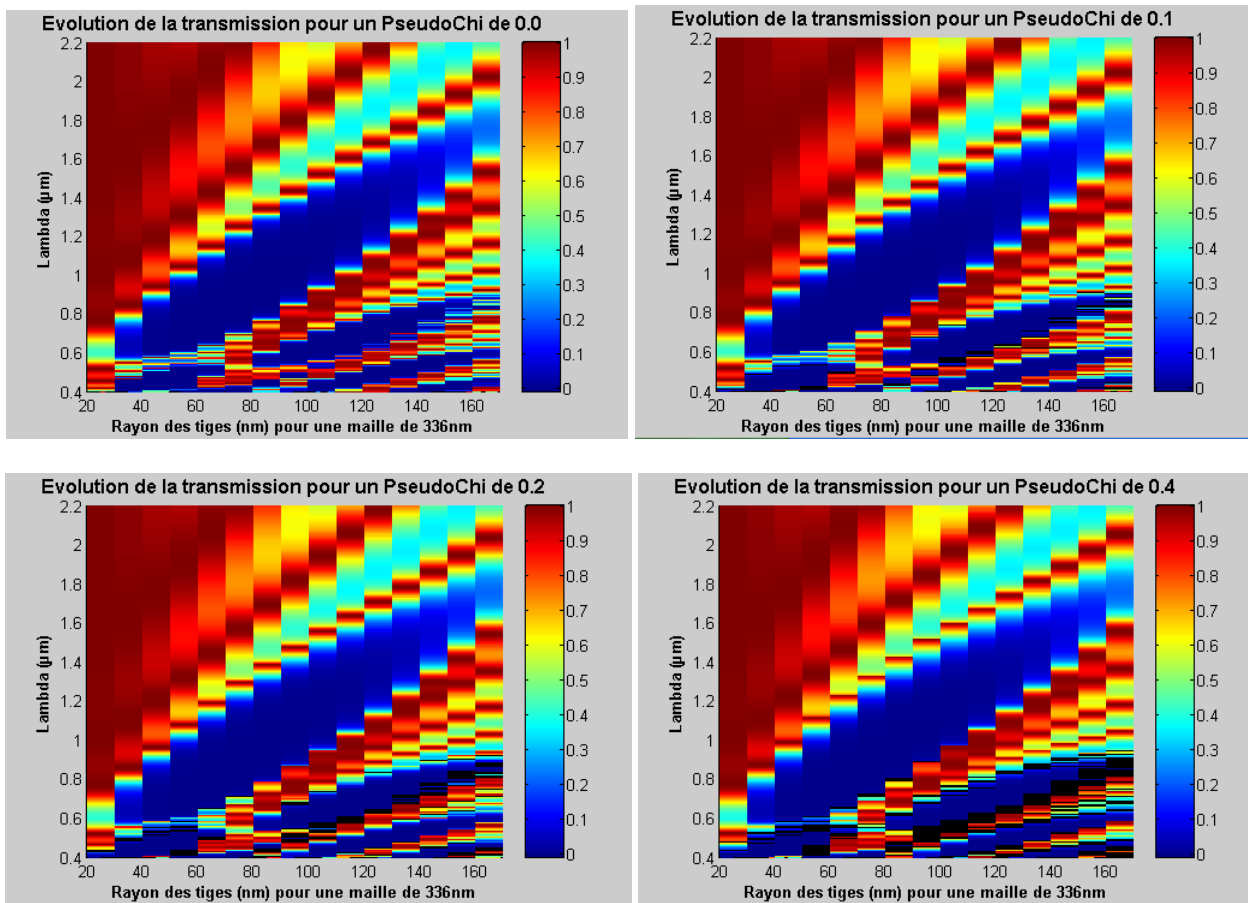


Fig. 18 : Cartographie de la transmission à quatre intensités différentes en fonction du diamètre des cylindres (abscisses) et de la longueur d'onde (ordonnées). Le terme *PseudoChi* représente une valeur proportionnelle à $\chi^{(3)}$, l'augmenter en conservant une onde incidente d'amplitude 1 revient à augmenter l'intensité lumineuse.

On observe plusieurs zones de gap dont celle que l'on connaît bien : le large ovale bleu est la première bande interdite avec laquelle il est courant de travailler. Des problèmes de convergence (en noir) polluent encore nos résultats aux courtes longueurs d'ondes.

On observe l'ouverture et la fermeture des gaps au fil de l'augmentation du rayon des tiges. Mais ce qui nous intéresse n'est pas le gap le plus large possible mais la commutation la plus contrastée et la plus large possible.

Nous allons donc inspecter l'écart entre les transmissions en régime linéaire (basse intensité) et celles à forte intensité (Fig. 19)

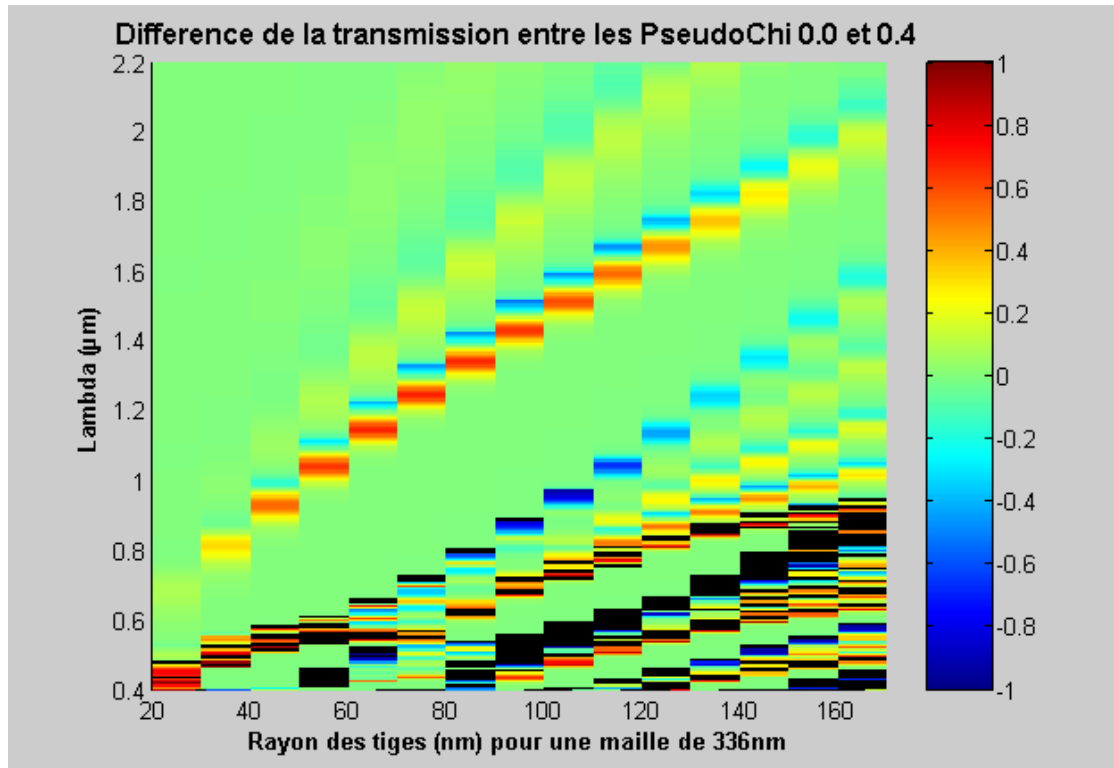
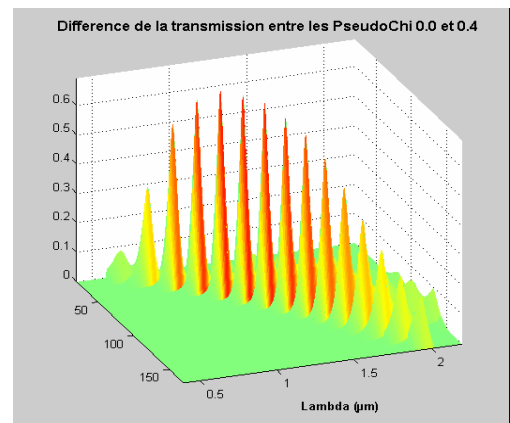


Fig. 19 : Commutation transparent/opaque des différents CPs. Les zones noires correspondent à des zones où la convergence du logiciel de simulation n'a pas été satisfaisante

Résultat intéressant : les conséquences de l'effet Kerr varient fortement avec le rayon des tiges. Si l'on considère le bord supérieur du premier gap (la grande diagonale orange sur la figure 20), on remarque que la commutation ne se fait sentir qu'à partir d'un rayon de 40nm puis disparaît au-delà de 110nm.

L'écart maximal entre la transmission à basse intensité et la transmission à forte intensité est obtenu avec des tiges de rayon 60nm. Cela est bien visible sur la figure ci contre où l'on a isolé la diagonale orange du reste de la figure (mêmes axes et échelles que fig. 19).



Reste à comparer les largeurs spectrales de ces pics oranges (fig. 20). Mais pour que la comparaison ait un sens il faut les ramener à la même longueur d'onde.

On choisit comme longueur d'onde cible de normalisation $1,5\mu\text{m}$ et l'on recentre nos pics sur cette longueur d'onde.

Comment ?

En utilisant le fait que la dilatation de notre cristal photonique, en gardant constante le rapport maille/rayon du cylindre, donne la même forme de réponse spectrale mais dilatée elle aussi.

En clair un cristal de maille $1\mu\text{m}$ illuminé à la longueur d'onde $3\mu\text{m}$ aura la même transmission qu'un cristal de maille $2\mu\text{m}$ illuminé à la longueur d'onde $6\mu\text{m}$.

Les résultats après cette normalisation par homothétie sont présentés sous forme de courbes figure 21 et sous forme de nappe colorée figure 22. L'interprétation des données n'étant pas forcément évidente on a voulu fournir deux présentations différentes des mêmes données par soucis de clarté.

Pour des tiges petites devant la taille de la maille, on obtient les commutations transparentes/opagues sur les plus larges bandes spectrales mais avec le plus faible contraste (courbes larges et écrasées). En augmentant le rapport diamètre de tige/maille on arrive à un contraste maximum puis la courbe s'abaisse tout en rétrécissant en terme de largeur spectrale.

Suivant que l'on veut la plage la plus large au-dessus d'une certaine valeur ou au contraire la plus haute valeur pic on choisira la forme adéquate.

Le meilleur compromis semble être la courbe verte (Maille de 441nm / Rayon tige 79nm . Rapport diamètre/maille de $0,35$). Elle a le plus haut pic (le plus fort contraste de commutation) et est la plus large si l'on mesure sa base à une hauteur de $0,5$ (un peu moins de 50nm).

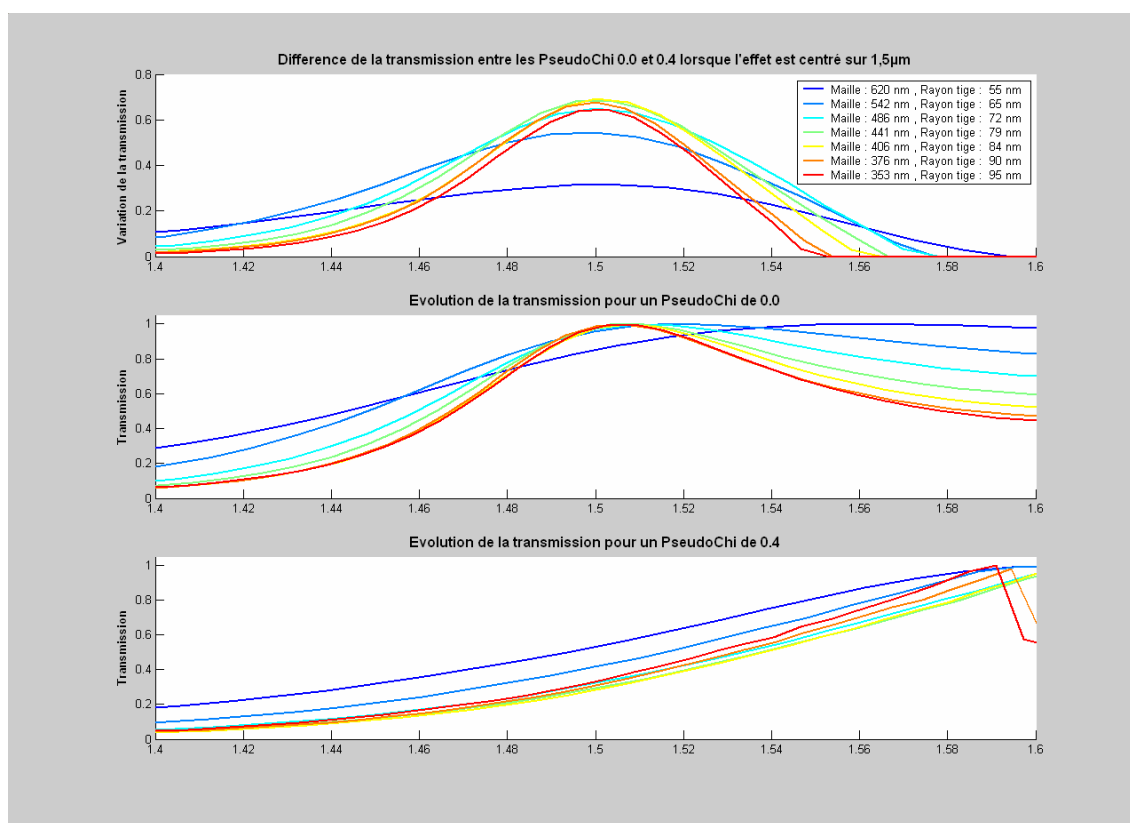


Fig. 21 a b et c : La figure a présente la différence de transmission entre l'état linéaire et l'état fortement illuminé après normalisation à $1,5\mu\text{m}$. Chaque courbe correspond à un rapport diamètre de tige/maille différent. Les figures b et c représentent les transmissions de l'état linéaire et de l'état fortement illuminé après normalisation à $1,5\mu\text{m}$. Les longueurs d'onde sont en abscisse.

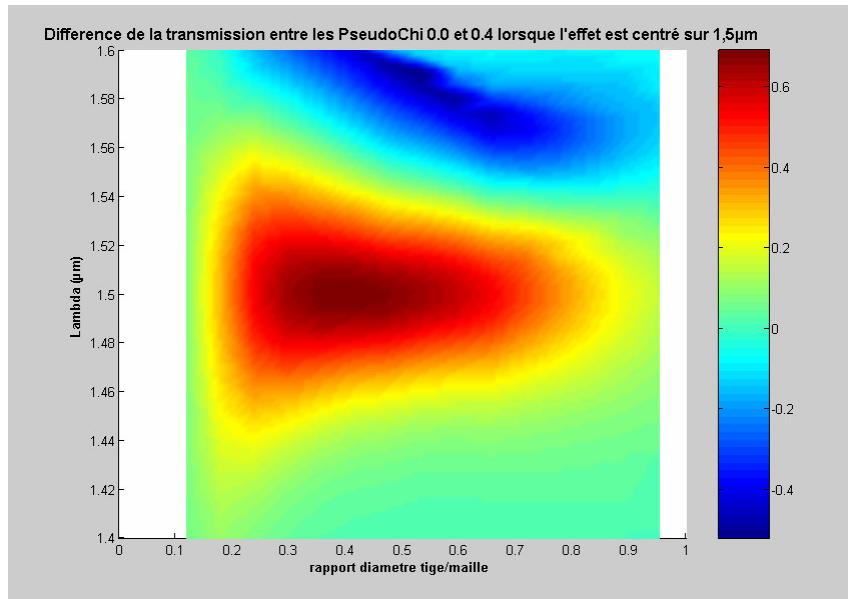


Fig. 22 : Différence relative de transmission entre l'état linéaire et l'état fortement illuminé après normalisation à $1,5\mu\text{m}$ en fonction de la longueur d'onde (ordonnée) et du rapport diamètre de tige/maille (abscisse) caractérisant la géométrie du CP.

L'étude sur la commutation transparent/opaque sur le bord grande longueur d'onde du gap amène à une diminution maximale de 70% de la transparence (valeur pic) sur une largeur spectrale de l'ordre de 40nm centrée sur $1,5\mu\text{m}$.

L'étude de la commutation sur le bord courte longueur d'onde du gap est compromise par les problèmes de convergences. On peut toutefois remarquer que le contraste est supérieur (chute de 90%) et la largeur spectrale utilisable plus grande conformément à la discussion faite en III.D.1

Le fait que le flanc courte longueur d'onde soit le plus intéressant est déroutant. D'une part nous avons du mal à le simuler pour l'étudier, d'autre part il est technologiquement moins intéressant.

En effet, en supposant que nous voulions utiliser notre CP commutateur à une longueur d'onde de $\lambda\mu\text{m}$, centrer cette longueur d'onde sur le flanc bleu de la bande interdite de notre CP amène à des tiges bien plus petites que si on le centre sur le flanc rouge. Or, plus c'est petit plus cela devient difficile à construire.

Voici deux bonnes raisons d'étudier maintenant le comportement du même genre de CP mais à effet Kerr négatif. Cette fois ci la zone intéressante sera sur le flanc rouge. Attention toutefois, le redshift devenant un blueshift l'augmentation d'intensité produira un passage opaque \rightarrow transparent. Ceci peut être compensé par une utilisation du CP en réflexion plutôt qu'en transmission.

Avec un effet Kerr négatif les résultats changent (Fig 23, 24) et le gap ne se décale plus dans le même sens que précédemment lorsque l'intensité incidente augmente.

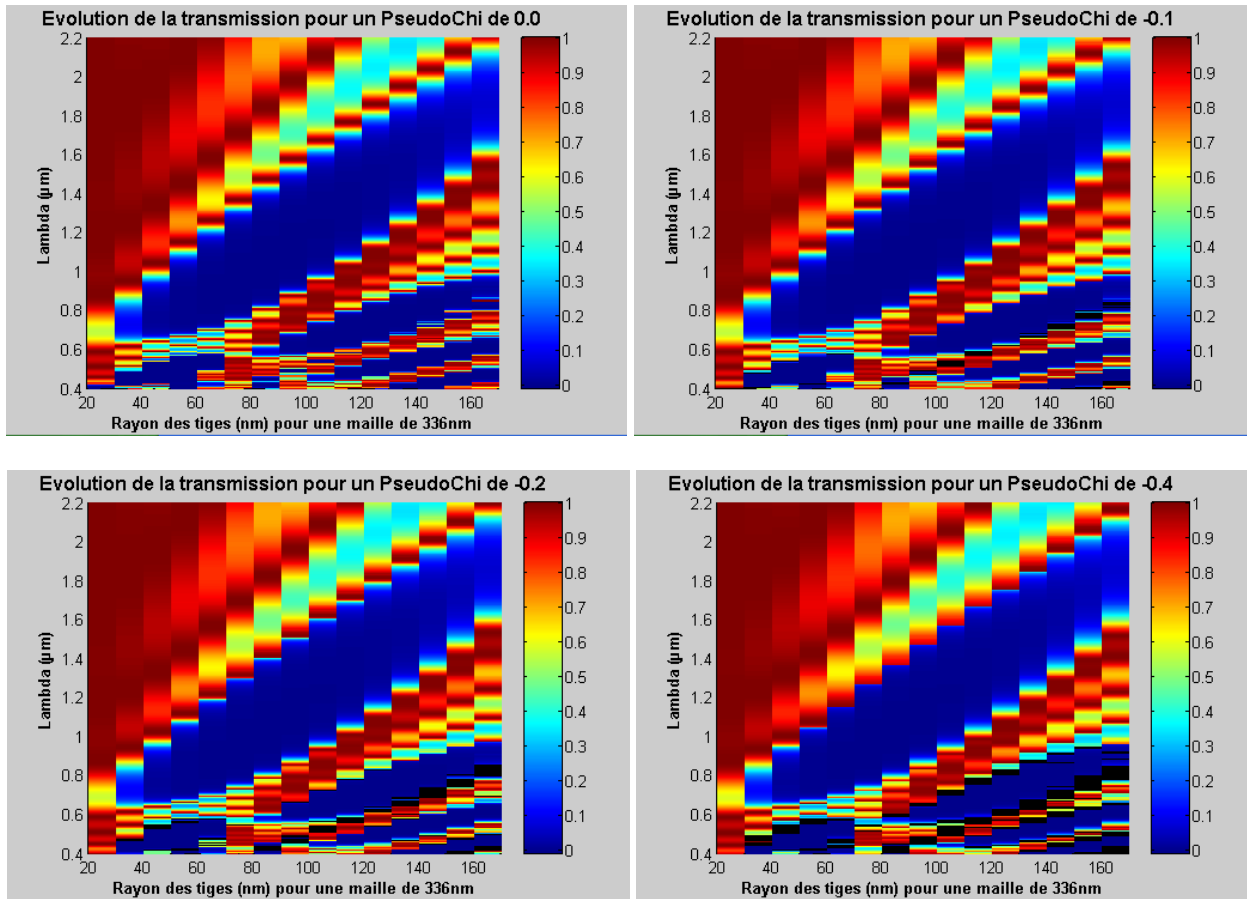


Fig. 23 : Cartographie de la transmission à quatre intensités différentes en fonction du diamètre des cylindres (abscisses) et de la longueur d'onde (ordonnées) pour un effet Kerr négatif

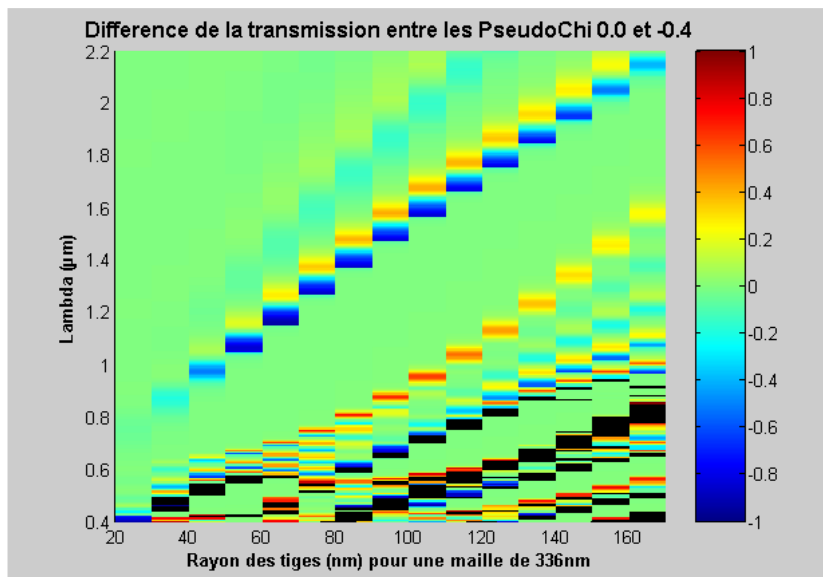
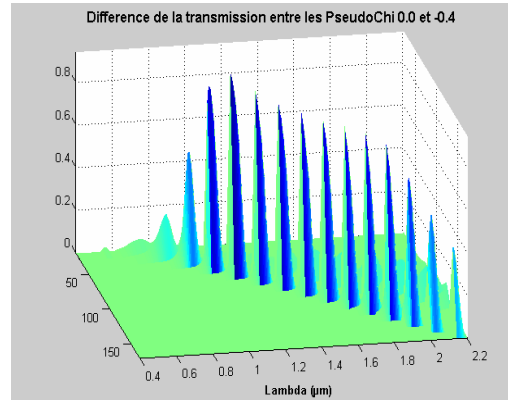


Fig. 24 : Commutation transparent/opaque des différents CPs. Les zones noires correspondent à des zones où la convergence du logiciel de simulation n'a pas été satisfaisante

Résultat intéressant : les conséquences de l'effet Kerr varient avec le rayon des tiges (mais moins fortement que lorsque n_2 était positif).

Si l'on considère le bord supérieur du premier gap (grande diagonale bleu sur la figure 24), on remarque que l'effet Kerr est toujours présent mais n'est fortement marqué que pour les rayons de tige situés entre 50 et 150nm.

L'écart maximal entre la transmission à basse intensité et la transmission à forte intensité est obtenu avec des tiges de rayon 60nm (comme pour un n_2 positif). Cela est bien visible sur la figure ci contre où l'on a isolé le bord de ce gap du reste de la figure (même figure, même échelle que la fig. 24).



Reste à voir la largeur spectrale de ces zones. Nous allons comme précédemment ramener les centres des zones de commutation à $1,5\mu\text{m}$. Les résultats sont présentés figures 25 et 26.

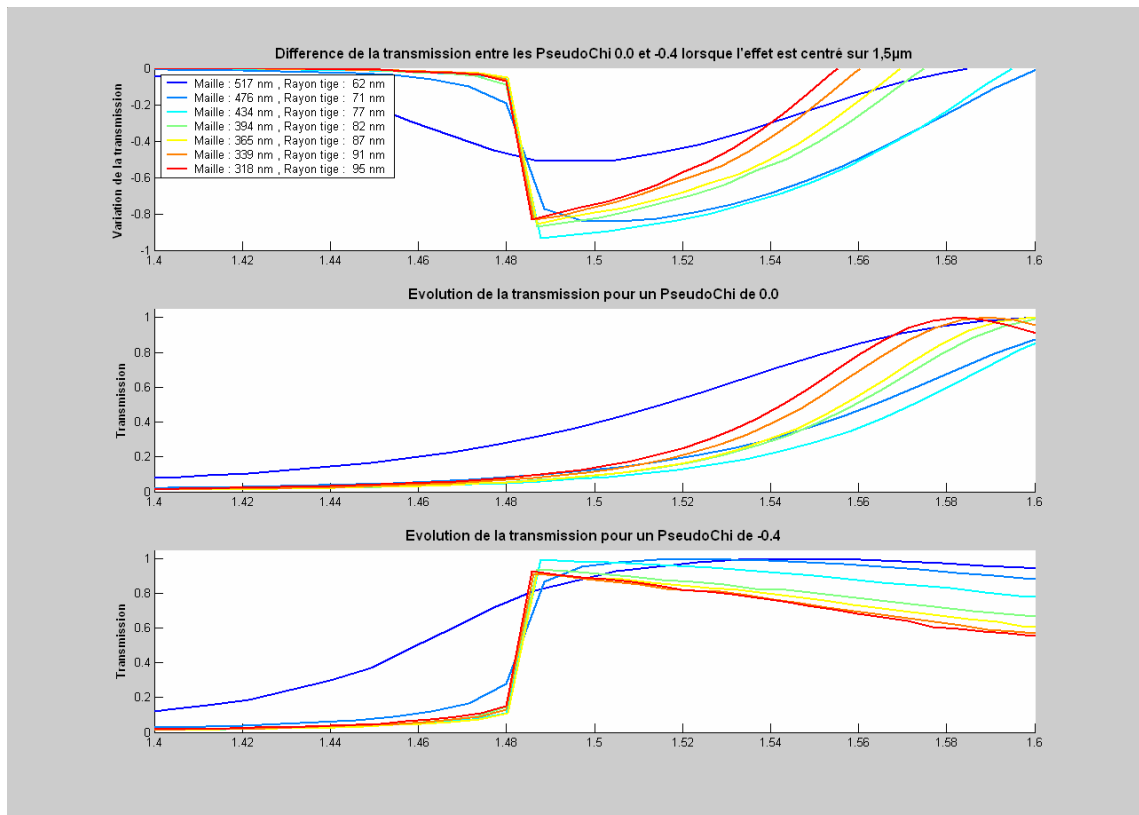


Fig. 25a b et c : La figure a présente la différence relative de transmission entre l'état linéaire et l'état fortement illuminé après normalisation à $1,5\mu\text{m}$. Chaque courbe correspond à un rapport diamètre de tige/maille différent. Les figures b et c

représentent les transmissions de l'état linéaire et de l'état fortement illuminé après normalisation à $1,5\mu\text{m}$

En augmentant le rapport rayon-tige/maille on arrive rapidement à un contraste et une largeur spectrale optimum puis les courbes s'abaissent lentement tout en rétrécissant en terme de largeur spectrale.

L'optimum semble être la courbe cyan (Maille de 434nm / Rayon tige 77nm. Rapport diamètre/maille de 0,35).

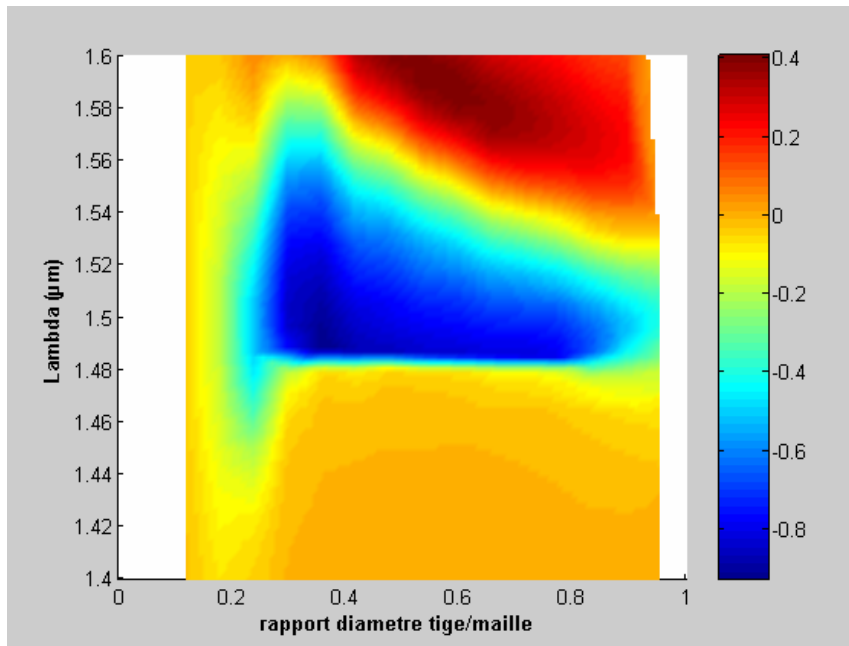


Fig. 26 : Différence relative de transmission entre l'état linéaire et l'état fortement illuminé après normalisation à $1,5\mu\text{m}$ en fonction de la longueur d'onde (ordonnée) et du rapport diamètre de tige/maille (abscisse) caractérisant la géométrie du CP

Si l'on construisait un prototype à partir de ces simulations, donc un cristal a maille triangulaire de pas 434nm, constitué de cylindres Kerr de 77nm de rayon et d'indice 3, son comportement à $1,5\mu\text{m}$ serait le suivant :

A basse intensité une réflexion de 92% qui tomberait à 1,5% à forte intensité.

Un tel prototype commence à avoir un contraste transparence/opacité suffisant pour des applications de télécommunications et pour certaines applications de protection (bien que l'on soit loin du compte en ce qui concerne la protection à vocation militaire). La bande spectrale concernée par la commutation est par contre à cheval entre la notion de bande fine ou de raie large*.

Cette largeur de raie (40 à 60nm pour une raie à $1,5\mu\text{m}$) est tout a fait acceptable voir très bonne pour de nombreuses applications (télécoms, protection contre des lasers à raie déterminée) mais incapable de répondre à la menace d'un laser agile en

* Eternel problème du verre à moitié vide ou à moitié plein. Je laisse à chacun en fonction de ses applications (télécoms ou protection) le loisir de déterminer si c'est large ou étroit, mon expérience m'ayant appris que suivant les métiers d'optique cette notion changeait très vite.

fréquence ou d'assurer à elle seule une protection sur l'une des bande optique consacrée (visible, IR1, IR2).

En conséquence la piste du cristal photonique à effet Kerr pour la commutation est prometteuse pour des applications télécoms et de protections contre des lasers à raie dans des conditions civiles (protection dans une usine ou un laboratoire) mais impropre à la protection contre des lasers à continuum ou à agilité de fréquence de type militaire (contraste insuffisant et largeur spectrale trop étroite).

Pour ce dernier point, les cristaux photoniques à base de matériaux à non-linéarité thermique apportent la solution recherchée.

Nous avons simulé grâce à nos outils (cf II.D.2) une structure non linéaire thermique basée sur la nanostructuration d'un matériau existant. Cette structure répond aux spécifications du cahier des charges du projet SHIELD et contourne plusieurs défauts majeurs des solutions non nanostructurées. Une demande de dépôt de brevet est en cours avec vraisemblablement une mise en confidentialité industrie et armement de la structure et de ses propriétés. Ceci nous empêche de développer dans ce manuscrit tout ce travail entrant dans le cadre de la thèse.

Bibliographie du chapitre III

- ¹⁵² D. Felbacq , R. Smaâli, Phys. Rev. B 67, 085105 (2003).
¹⁵³ H. Y. Ryu, M. Notomi, Phys. Rev. B 68, 045209 (2003)
¹⁵⁴ E. Centeno, D. Felbacq “Optical bistability in finite-size nonlinear bidimensional photonic crystals doped by a microcavity” Phy. Rev. B, 62(12), 2000, 7683(4)
¹⁵⁵ J. Joannopoulos, Photonic Crystals, Molding the flow of light (Princeton University Press, Princeton, 1995)

**Conclusion
et
Perspectives**

Conclusion et perspectives

Grâce au projet SHIELD supporté par la DGA / MRIS, nous avons pu concevoir et valider trois nouveaux algorithmes dédiés à l'étude des effets non linéaires dans les CPs :

- La HMSM, fusion d'une méthode des moments et de la MSM originale, permet de traiter rigoureusement les CPs constitués de cylindres à effet Kerr en nombre fini sans limitation de géométrie dans la répartition des cylindres. Des techniques permettant de s'affranchir des effets de bords liés à l'aspect finis de tels CPs ont été mises au point.
- La FFF a été adaptée à la simulation de cristaux photoniques à effet Kerr, permettant l'étude rapide de CPs infinis. Les deux atouts importants de cette méthode sont sa rapidité et sa robustesse vis-à-vis de forts contrastes d'indices (mélange diélectrique/métal réel par exemple).
- La FFF a aussi été adossée à un sous-programme thermique, l'ensemble permettant de simuler l'évolution de matériaux à changement de phase (solide->solide) nanostructurés lors d'illumination par des flash lasers courts (nanoseconde).

Ces trois nouveaux algorithmes, adossés à un cluster réalisé pour l'occasion, ont permis de balayer un grand nombre de géométries et d'aboutir à deux concepts de limiteurs optiques utilisant les CPs.

Le premier repose sur l'effet Kerr et la translation de la bande interdite lors d'une forte illumination. Traiter rigoureusement les cartes de champs et ne pas supposer que toutes les inclusions changent d'indice de concert a amené à la constatation que les deux flancs de la bande interdite avaient des comportements dissemblables. L'un est bien plus adapté à des applications de commutation optique que l'autre. Toutefois, un tel prototype basé sur l'effet Kerr ne peut être efficace (on a obtenu une variation de la transparence de 92 à 1,5%) que sur une raie spectrale. Si cette raie semble très large du point de vue des télécoms optiques elle est bien trop mince pour une application militaire qui vise à protéger des bandes telles que le visible, l'IR1 ou encore l'IR2.

L'autre prototype basé sur une classe de matériaux qui réarrange sa maille cristalline en fonction de la température (on parle d'un changement de phase solide->solide) a donné pleine satisfaction du point de vue de la protection optique à vocation militaire démontrant ainsi l'intérêt que l'on avait à nanostructurer un tel matériau : ses capacités s'en sont trouvées spectaculairement améliorées. Un dépôt de brevet et une confidentialité industrielle et armement nous empêchent pourtant d'explicitier le principe de fonctionnement et la structure géométrique associée.

Au cours de la recherche de nouvelles solutions pour la limitation optique par des CPs non linéaires, nous avons pu étudier l'impact des différentes sortes d'effets de bords dans un CPs d'un point de vue qualitatif et quantitatif.

Afin de nous assurer de la validité de nos codes nous avons dû mener des campagnes de comparaison qui ont amené à sonder en détail la validité de l'approximation dites « du cylindre homogène » (qui consiste à supposer que si l'inclusion Kerr est assez petite on considère que le changement d'indice qui l'affecte est homogène). Ceci a mené à quelques surprises : dans le cas de forts confinements de champs, comme dans des cavités ou en bords de gap, cette règle est à utiliser avec plus de prudence qu'il n'est couramment admis si l'on ne veut pas s'exposer à des erreurs importantes.

Le concept de remplacer une apodisation de l'indice optique (comme dans la fabrication des réseaux de Bragg 1D via la photoréfraction) par une apodisation de la répartition géométrique du matériau (2D) a aussi été validée : le ripple[♦] peut être éliminé efficacement de cette façon, ce qui ouvre la voie vers une utilisation pratique de tels filtres 2D ou 3D et de nouvelles applications dans le monde industriel.

Bien que ce travail n'ait pas encore été fait, nous pensons que les algorithmes conçus peuvent aussi traiter le cas de l'absorption à double photons ou tout autre cas d'absorption non linéaire : mathématiquement les programmes sont déjà écrits pour prendre en compte des valeurs complexes de permittivité et les boucles de convergences assurant le traitement de l'effet Kerr ne devraient être que très légèrement modifiées pour traiter une absorption non linéaire.

Le passage du 2D au 3D ne doit pas non plus poser de problèmes théoriques (en fait une pré version de la FFF-Thermique 3D a été écrite par nos soins) mais consomme beaucoup de mémoire vive. Ceci ne devrait pas rester longtemps un obstacle : si le travail de cette thèse a été effectué avec des capacités mémoires variant entre 256 et 512Mo^{*} qui étaient la norme il y a trois ans, au moment où j'écris ces lignes les 2Go de mémoire vives sont courants et les 4Go pour un poste de travail de chercheur ne sont plus seulement l'apanage des riches bureaux d'études. De telles capacités permettraient sans doute d'étudier de vrais prototypes 3D complexes et détaillés.

D'un point de vue moins calculatoire et plus expérimental, la fabrication de prototypes est nécessaire à la validation définitive de notre invention. Nous espérons que ce pas sera franchi dans un futur proche en liaison avec Thalès Optronique.

[♦] Nom donné dans le domaine des filtres de Bragg aux ondulations qui éloignent la réponse d'un filtre de son gabarit rectangulaire idéal.

^{*} et beaucoup de soins dans l'optimisation des programmes pour compenser.

Publications

Revues internationales

“A new Multiple Scattering Method application: Simulating an infinite 2D Photonic Crystal by analyzing, sorting and suppressing the border effects”, J.J. Bonnefois, G. Guida, A. Priou, **Optics Communications** 251 (2005) 64-74

“Simulation of 2D Kerr Photonic Crystals via the Fast Fourier Factorisation”
J.J. Bonnefois, Géraldine Guida, Alain Priou, Michel Nevière, Evgueny Popov, **J. Opt. Soc. Am. A** 23, 842-847 (2006)

“Modeling Kerr effect in a 2D nonlinear photonic crystal and studying the “Homogeneous Cylinder” approximation validity domain”, J.J. Bonnefois, G. Guida and A. Priou, **Optic Express**, soumis.

Conférences internationales

“Adapting MSM to the rigorous simulation of Kerr effects in a 2D Photonic Crystal”, J-J. Bonnefois, G. Guida, A. Priou, **OWTNM Grenoble 2005**, communication orale.

« Difference between homogeneous and inhomogeneous methods while simulating nonlinear Kerr type Photonic Crystals », J-J. Bonnefois, G. Guida, A. Priou, **PIERS 2005 Hangzhou**, communication orale

Conférences nationales

« Nouvelle méthode hybride permettant la modélisation de l’effet Kerr dans un cristal photonique », J-J. Bonnefois, G. Guida, A. Priou, **GDR Ondes 2004**, Poster.

« Nouvelle méthode HMSM adaptée aux effets Kerr 2D, Modèle "Homogène" vs "Inhomogène sans approximation" », J-J. Bonnefois, G. Guida, A. Priou, **GDR Ondes 2005**, Poster.

« Simulation d’effets non-linéaires d’origine thermique dans un cristal photonique », J-J. Bonnefois, G. Guida, A. Priou, G. Berginc, **Journées nationales cristaux photoniques 2006**, Poster.

Brevet

Brevet référence 64221 (X9506). Dépôt Novembre 2006.