



HAL
open science

Étude de résonateurs électromagnétiques ouverts par approche modale. Application au filtrage multispectral dans l'infrarouge.

Benjamin Vial

► **To cite this version:**

Benjamin Vial. Étude de résonateurs électromagnétiques ouverts par approche modale. Application au filtrage multispectral dans l'infrarouge.. Optique [physics.optics]. Ecole Centrale Marseille, 2013. Français. NNT: . tel-00918651

HAL Id: tel-00918651

<https://theses.hal.science/tel-00918651>

Submitted on 13 Dec 2013

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

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



THÈSE

présentée à

l'ÉCOLE CENTRALE MARSEILLE

pour obtenir le grade de Docteur

École doctorale : Physique et Sciences de la Matière

Spécialité : Optique, Photonique et Traitement d'Image

Étude de résonateurs électromagnétiques ouverts par approche modale. Application au filtrage multispectral dans l'infrarouge.

Benjamin Vial

Institut Fresnel
Silios Technologies

Soutenue publiquement le 11 avril 2013

Membres du jury :

Anne-Sophie BONNET BENDHIA	Rapporteur	DR CNRS, ENSTA ParisTech
Françoise LOZES DUPUY	Rapporteur	DR CNRS, LAAS Toulouse
Adel RAZEK	Examineur	DR émérite CNRS, SUPELEC
André NICOLET	Examineur	Pr. Aix Marseille Université
Frédéric ZOLLA	Examineur	Pr. Aix Marseille Université
Stéphane TISSERAND	Responsable industriel	Dr., Silios Technologies
Mireille COMMANDRÉ	Directeur de thèse	Pr. École Centrale Marseille

THÈSE
présentée à
l'ÉCOLE CENTRALE MARSEILLE
pour obtenir le grade de Docteur
École doctorale : Physique et Sciences de la Matière
Spécialité : Optique, Photonique et Traitement d'Image

**Étude de résonateurs
électromagnétiques ouverts
par approche modale.
Application au filtrage multispectral
dans l'infrarouge.**

Benjamin Vial

Institut Fresnel
Slios Technologies

Soutenue publiquement le 11 avril 2013

Membres du jury :

Anne-Sophie BONNET BENDHIA	Rapporteur	DR CNRS, ENSTA ParisTech
Françoise LOZES DUPUY	Rapporteur	DR CNRS, LAAS Toulouse
Adel RAZEK	Examineur	DR émérite CNRS, SUPELEC
André NICOLET	Examineur	Pr. Aix Marseille Université
Frédéric ZOLLA	Examineur	Pr. Aix Marseille Université
Stéphane TISSERAND	Responsable industriel	Dr., Slios Technologies
Mireille COMMANDRÉ	Directeur de thèse	Pr. École Centrale Marseille

À Sofia.

Remerciements

*À périr tout entier, que servirait-il de naître !
Dieu, qui voit si loin, ne nous forgea pas pour rien :
En mourant nous regermons ; l'homme, quand il disparaît,
Va peupler les étoiles au fond du firmament !*

— Victor Gelu, Le credo de Cassien [47]

*A perir tot entier, que serviria de nàisser !
Dieu, que li vei tant luench, nos forgèt pas per ren :
En morent regrilham ; l'òme, quand dispareisse
Va puplar lei estèlas au fons dau firmament !*

— Victor Gelu, Lo Credo de Cassien [47]

Cette thèse, qui s'est déroulée dans le cadre d'une convention CIFRE, repose sur la collaboration entre deux acteurs de la photonique en PACA : l'Institut Fresnel (Marseille) et Silios Technologies (Peynier).

Je tiens en premier lieu à remercier Mireille Commandré (directeur de thèse à l'Institut Fresnel, équipe ILM, et Professeur à Centrale Marseille) et Stéphane Tisserand (responsable industriel à Silios), sans qui cette bourse de thèse CIFRE n'aurait jamais existé. Mireille m'a donné l'opportunité de travailler dans les meilleures conditions en m'accueillant au laboratoire et a su m'aiguiller dans les bonnes directions tout au long de la thèse. Je lui suis profondément reconnaissant de m'avoir encadré et encouragé pendant ces trois années, tout en me laissant une large liberté d'action et de réflexion. Je remercie vivement Stéphane de m'avoir accueilli au sein de Silios ainsi que pour ses conseils avisés en matière de composants technologiquement réalisables, en réponse à mes extravagances en terme de structures diffractives fantaisistes. Je les remercie aussi tout les deux pour leur patience et leur disponibilité malgré des emplois du temps quelque peu surchargés.

Cette thèse a également permis de poursuivre une collaboration fructueuse entre les équipes ILM et CARTE de l'Institut Fresnel démarrée lors de la thèse de Guillaume Demésy. Je suis infiniment reconnaissant aux deux Professeurs des hautes sphères du troisième étage de m'avoir pris sous leur aile durant ces trois années de thèse, et pour le postdoc qui a suivi. J'ai pu aborder de manière saine les problèmes physiques qui m'étaient posés grâce à l'aide inestimable de Frédéric Zolla, qui a su m'apprendre avec éloquence à manipuler des concepts mathématiques pour les appliquer aux problèmes électromagnétiques que j'ai traité. J'ai pu comprendre les fondements de l'Analyse Spectrale et de la Méthode des Éléments Finis grâce à André Nicolet qui, tout en s'adonnant à la pratique du jeu de mots incongru, m'a donné les bases sur les méthodes mathématiques et numériques sans lesquelles ce travail de thèse n'aurait pas existé. Je leur suis profondément reconnaissant de m'avoir encadré et leur assure que je n'oublierai rien de leurs précieux enseignements sur le plan scientifique et humain. Je leur suis gré de m'avoir laissé, avec toute la liberté académique indispensable au bon travail de chercheur, sur les réseaux résonants, raisonner !

Comment ne pas remercier Guillaume Demésy de m'avoir passé le flambeau au début de ma thèse en me fournissant ses codes et les explications qui vont avec. De retour dix-huit mois plus tard et ayant pris du galon, il a m'a aidé constamment sur les aspects numériques plus particulièrement. Je lui suis reconnaissant pour sa disponibilité dont j'ai sans doute parfois abusé et lui témoigne ici mon amitié.

Je tiens de plus à témoigner mes remerciements à Christophe Hecquet, ingénieur de recherche et à Thomas Begou, Maître de Conférences de l'équipe RCMO pour leur aide inestimable sur l'achat, l'installation et l'utilisation du FTIR, ainsi que pour les dépôts sur leur nouvelle machine qui pourra bientôt je l'espère rejoindre le très attendu Espace Phonotonique de l'Institut Fresnel.

Cette thèse a aussi permis de lancer une collaboration entre deux laboratoires situés aux deux extrémités de la cité phocéenne. Je remercie Hervé Dallaporta et Frédéric Bedu du CINAM à Luminy pour la fabrication ô combien longue et délicate des réseaux d'ouvertures annulaires. Les rendez vous insolites avec Hervé au Prado pour m'éviter un trajet dantesque jusqu'aux calanques resteront comme un bon souvenir et j'espère que cette collaboration se poursuivra dans le futur.

Du côté de Silios, mes collègues ont su me mettre à l'aise dans mon travail et m'aider sur de nombreux points. Je tiens à remercier Sophie Gautier et Julie Ganne travaillant en salle blanche pour les dépôts et la gravure des filtres en réflexion. Je remercie aussi mon ex camarade de Centrale Vincent Sauget que j'ai retrouvé à Silios pour son aide sur le design des masques de photolithographie. Je salue également Marc Hubert, ingénieur et Aurélien Faiola, technicien, qui ont su contribuer à la bonne ambiance au sein du bureau, en réponse aux extravagances de Thierry « l'Anaconda » Bertoux, commercial de son état et spécialiste international du plasmon de surface et de la vanne. Mon passage à Silios fut des plus agréables et ces personnes y sont pour beaucoup.

J'adresse également de chaleureux remerciements à tous les collègues de l'Institut Fresnel, anciens et nouveaux que j'ai pu croiser et avec qui j'ai collaboré parfois, ou simplement discuté autour d'un café, d'une clope, d'un sandwich... En vrac : Pascal, Stéphanne, Brice, Xavier, Céline, Benoît, Olivier, Vincent D., Reda, Pierre, les Guillaumes (D. et B.), Aurore, Jessica, Nicolas, Yoann...

Les lignes qui suivent sont plus personnelles mais ce travail aurait été inachevable sans les personnes citées ci après.

Je remercie tendrement Marie d'être à mes côtés, de sa compréhension, notamment durant la phase de rédaction, malgré les doutes et l'angoisse que provoque une possible carrière universitaire... Ce travail n'aurait pas abouti sans elle et je lui en suis pour toujours affectueusement reconnaissant.

Je veux ici témoigner ma gratitude envers mes parents, mon frère, et ma famille plus généralement, pour leur soutien indéfectible durant cette thèse et tout au long de mes études. Je suis heureux qu'ils soient fier de ce que j'ai accompli et du travail réalisé, qui est un peu le leur.

Mes amis ne sont pas en reste. Je tiens à remercier tous mes collègues - au sens marseillais du terme - de m'avoir soutenu et d'avoir contribué à mon épanouissement en dehors de la vie scientifique. Que ce soit autour d'un pastis, d'un barbecue, d'une guitare ou d'autres réjouissances, leur compagnie et leur amitié fut des plus importantes. En premier lieu Johann, camarade de maternelle toujours présent, et qui m'a donné, avec Géraldine, la plus belle des filleules ! Jako, contrebassiste-percussionniste occitan et compare physicien ex-fresnelien et Sitraka, biologiste multi-instrumentiste et violoniste virtuose, (U're Rasta !), pour des bœufs mémorables. Tom globe-trotter effréné, Fabrice, Papa du reggae marseillais et ses frères Romain et Jauffrey, Marie et le dernier né Élio, Greg G. et Zaïda (et Leonardo) les racailles cubaines, Karim, Carla, Anais, Bab, Devin, Greg H., Gaby et Selva, Dédé, Benni, Zazou, Alix... Les colocs/squatteurs du Chateau de la Plaine, les amis de l'Ostau dau País Marselhés, les copains du groupe de reggae Bongoaï que j'ai abandonné, débordé que j'étais par la rédaction de la thèse, et tous ceux que j'oublie...

Table des matières

1	Contexte : imagerie infrarouge et filtrage spectral résonant	5
1.1	Le rayonnement infrarouge	7
1.2	Absorption de l'atmosphère	8
1.3	Détection infrarouge	9
1.3.1	Principe de fonctionnement des détecteurs quantiques	10
1.3.2	Principe de fonctionnement des détecteurs thermiques	10
1.4	Spectrométrie	12
1.5	Imagerie multispectrale	12
1.6	Les réseaux de diffraction	15
1.6.1	Généralités	15
1.6.2	Le filtrage spectral diffractif	17
1.6.3	Méthodes numériques pour la modélisation des réseaux	18
1.7	Phénomène de résonance	19
1.7.1	Généralités	19
1.7.2	Systèmes ouverts et modes à fuites	19
1.7.3	Comment calculer les modes à fuites ?	22
I	Théorie et développements numériques pour l'étude des réseaux de diffraction	25
2	Diffraction par des réseaux mono-dimensionnels : formulation FEM scalaire	27
2.1	Diffraction	28
2.1.1	Description du problème et notations	28
2.1.2	Découplage des champs et z-anisotropie	30
2.1.3	Problème radiatif équivalent	30
2.1.4	Couches Parfaitement Adaptées (PML)	32
2.1.5	Formulation faible	34
2.1.6	Maillage et éléments finis	35
2.1.7	Considérations énergétiques	35
2.1.8	Anomalies de Wood	37
2.2	PML adaptatives pour les anomalies de Wood	37
2.2.1	Développements théoriques	37
2.2.2	Exemple numérique	40
3	Étude des propriétés spectrales de réseaux mono-périodiques	45
3.1	Le problème spectral sans dispersion	46
3.1.1	Problème spectral	46
3.1.2	Tétrachotomie	57
3.2	Validation de la méthode	58
3.2.1	Exemple d'un empilement multicouche	58
3.2.2	Exemple d'un réseau de fentes	60

3.3	Le problème spectral en présence de dispersion	65
3.3.1	Modèle de permittivité	65
3.3.2	Formulation du problème aux valeurs propres	66
3.3.3	Exemples d'application	68
4	Méthode de décomposition modale	81
4.1	Développements théoriques de la méthode	82
4.1.1	Choix d'un produit interne et problème spectral adjoint	82
4.1.2	Décomposition d'un champ diffracté sur la base des vecteurs propres	84
4.2	Exemple numérique d'un réseau de fentes	86
4.2.1	Cas <i>TM</i>	86
4.2.2	Cas <i>TE</i>	89
5	Généralisation au cas vectoriel	95
5.1	Problème de diffraction	95
5.1.1	Définition du problème vectoriel et notations	95
5.1.2	Problème radiatif équivalent à sources localisées	97
5.1.3	Quasi-périodicité et formulation faible	98
5.1.4	Considérations énergétiques	99
5.2	Problème spectral	101
5.2.1	Formulation du problème.	101
5.2.2	Structure du spectre de l'opérateur de Maxwell	102
5.3	Méthode modale	103
5.3.1	Produit interne et problème spectral adjoint	103
5.3.2	Décomposition d'un champ diffracté sur les modes propres	103
II	Application à la conception de filtres diffractifs dans l'infrarouge	107
6	Solutions de filtrage spectral diffractif : étude numérique	109
6.1	Réseaux de plots métalliques sur substrat	110
6.2	Réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique	113
6.3	Réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique métal	117
6.3.1	Description	117
6.3.2	Accordabilité de la résonance	117
6.3.3	Tolérance angulaire	118
6.3.4	Effets de la polarisation	119
6.4	Réseaux d'ouvertures coaxiales sur substrat	122
7	Fabrication et caractérisation de filtres diffractifs pour l'infrarouge	127
7.1	Réseaux absorbeurs	127
7.1.1	Couche résonante en germanium	127
7.1.2	Couche résonante en silicium	132
7.2	Réseaux coaxiaux	133
7.2.1	Fabrication	133
7.2.2	Caractérisation.	134
	Annexes.	149
A	Notions d'analyse complexe.	151
A.1	Fonctions de \mathbb{C} dans \mathbb{C} , \mathbb{C} -dérivabilité et holomorphie	151

A.2	Intégration sur une courbe dans \mathbb{C}	152
A.3	Théorème de Cauchy	152
A.4	Théorème des résidus	153
B	Banc de caractérisation.	155
	Bibliographie	157
	Index.	167

Le phénomène de résonance intervient dans tous les domaines de la physique où la notion d'onde entre en jeu. Les notes issues des vibrations des cordes d'une guitare et amplifiées dans sa caisse de résonance, l'enfant qui fait en sorte instinctivement d'exciter le mode fondamental d'une balançoire pour aller le plus haut possible, les aliments réchauffés au four à micro-ondes en agitant les molécules d'eau qu'ils contiennent, les progrès de la médecine à travers l'imagerie par résonance magnétique nucléaire (RMN), la rupture du pont de Tacoma en 1940 à cause d'un vent faible mais néanmoins amplifiant ses oscillations, les vagues scélérates *etc.*, tous ces exemples ont en commun la notion de résonance, qu'elle soit voulue, provoquée, ou subie, indésirable. Ces exemples de la vie de tous les jours montrent à quel point le phénomène est important ainsi que la nécessité de le comprendre pour mieux l'appivoiser, afin de le mettre à profit ou au contraire de l'éviter.

Dans le domaine de l'optique ce phénomène peut être utilisé pour concevoir des filtres sélectionnant de manière préférentielle une bande de fréquences, pouvant être utilisé par exemple pour filtrer la lumière dans ces composantes Verte, Rouge et Bleue dans les pixels des appareils photo numériques pour pouvoir reconstruire une image en couleurs à partir de ces trois couleurs fondamentales.

La volonté de détecter des informations non visibles par l'œil humain a motivé le développement de capteurs d'image dans d'autres domaines spectraux que le visible. Le domaine *infrarouge* (longueurs d'ondes au dessus du rouge, entre 800 nm et 1 mm environ) est particulièrement intéressant dans la mesure où, selon la loi de Planck, les corps à température ambiante émettent un rayonnement dont la longueur d'onde se situe autour de 10 μm . Il est donc possible de détecter un objet chaud dans un fond plus froid et ainsi concevoir des dispositifs de vision nocturne. C'est ainsi que certains serpents repèrent leurs proies dans l'obscurité grâce à des capteurs thermiques.

La détection du rayonnement infrarouge intéresse bien sûr le secteur militaire, pour les combats de nuit ou le guidage de missiles. Mais ses applications sont également civiles : contrôle de procédé de fabrication industriel, cartographie des zones de turbulence en météo, astrophysique, diagnostic d'isolation thermique des bâtiments, *etc.*. Aussi, l'imagerie infrarouge est-elle en plein développement. Deux grands types de détecteurs se partagent le marché : les détecteurs quantiques fonctionnant par effet photo électrique, et les détecteurs thermiques fondés sur la variation de température d'un matériau absorbant.

De manière analogue aux dispositifs fonctionnant dans le visible, l'assemblage en matrice de pixels des détecteurs permet de réaliser des imageurs infrarouges capables de recréer une image qui est le reflet des variations de température de la scène observée. De génération en génération, les fabricants proposent des microbolomètres de plus en plus performants et dont la résolution spatiale augmente de par la diminution de la taille transverse des pixels qui atteint aujourd'hui 17 μm .

En plus de détecter le rayonnement infrarouge, certaines applications nécessitent de déterminer le spectre de la scène observée, c'est à dire la part des différentes longueurs d'ondes dans le flux détecté, de la même façon que l'œil est capable de discriminer différentes couleurs. Ainsi, l'*imagerie multispectrale* consiste à filtrer la lumière incidente sur

plusieurs bandes spectrales en amont du détecteur. Cela étant, la majorité des détecteurs infrarouges du commerce ne produisent que des images de flux même si les développements actuels vont dans le sens d'une intégration de fonctionnalités de filtrage spectral dans le but de « voir les couleurs infrarouges ».

Le choix de la technologie de filtrage est un point crucial. Les filtres interférentiels basés sur des empilements multicouches sont largement utilisés dans le domaine du visible. L'épaisseur des couches doit être de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de filtrage, et devient donc de quelques microns dans l'infrarouge, ce qui est complexe à réaliser par des procédés de dépôts conventionnels et peut engendrer de fortes contraintes mécaniques. Il en résulte que cette approche pose un réel problème de coût et de possible industrialisation. En revanche, le filtrage fondé sur l'utilisation de *structures diffractives*, composées typiquement d'une couche métallique microstructurée périodiquement à l'échelle de la longueur d'onde, est tout à fait réalisable par des techniques de gravure standard, en photolithographie ou en *lift off*.

Pour réaliser les fonctions de filtrage adéquates, il est nécessaire de mettre à profit des phénomènes de *résonance* dans les structures diffractives. Par résonant, nous entendons qu'une faible modification de la longueur d'onde incidente modifie grandement la réponse de la structure. Cela est nécessaire pour obtenir des gabarits de filtres abrupts. Pour observer de tels effets, les dimensions caractéristiques des structures doivent être de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde d'utilisation. Aussi les lois de l'optique géométrique de Snell-Descartes deviennent-elles inapplicables et il est alors nécessaire de résoudre les équations de Maxwell de manière rigoureuse pour modéliser correctement de telles structures. Il est donc essentiel d'étudier les résonances électromagnétiques des réseaux de diffraction pouvant être utilisés pour le filtrage spectral.

C'est dans ce contexte que s'inscrit cette thèse, fondée sur une collaboration entre Silios Technologies et l'Institut Fresnel dans le cadre d'une convention CIFRE. Elle porte sur la modélisation de réseaux de diffraction dans le but de réaliser des filtres optiques adaptés à l'imagerie multispectrale dans l'infrarouge. Ces filtres doivent être larges spectralement pour obtenir un flux suffisant sur le détecteur, dotés d'une tolérance angulaire de 30° et indépendants de la direction de polarisation incidente. Pour déterminer les caractéristiques opto-géométriques des structures diffractives candidates, nous employons une formulation de la méthode des éléments finis (*Finite Element Method*, FEM) adaptée aux géométries les plus variées et aux matériaux à pertes. Nous avons développé une méthode de recherche des modes propres et des fréquences propres desdites structures, elle aussi basée sur la FEM, permettant d'étudier leurs résonances. Enfin nous avons élaboré une procédure permettant de prédire les conditions d'excitation de ces résonances.

Ce manuscrit est composé de sept chapitres. Dans le **chapitre 1**, nous commençons par des généralités sur le rayonnement infrarouge et les détecteurs existants dans ce domaine. Une étude bibliographique sur les solutions de filtrage diffractif est ensuite menée, indépendamment du contexte des imageurs thermiques et de l'infrarouge. Enfin, nous introduisons la notion de résonance et ses applications dans le domaine du filtrage spectral.

Les aspects liés à la modélisation des réseaux périodiques et à la compréhension des phénomènes de résonance dans ces structures sont regroupés dans la **Partie I** constitués des chapitres 2 à 5, et sont séparés d'une étude plus applicative concernant leur conception, leur fabrication et leur caractérisation expérimentale (**Partie II**, chapitres 6 et 7).

Au **chapitre 2**, nous exposons la méthode utilisée dans cette thèse pour la modélisation

de la diffraction d'une onde plane par des réseaux mono-périodiques. Cette formulation scalaire des cas Transverse Électrique (TE) et Transverse Magnétique (TM) repose sur le traitement par la FEM d'un problème équivalent de radiation, couplé à l'utilisation de couches absorbantes parfaitement adaptées (*Perfectly Matched Layers*, PML) permettant de se ramener à une cellule de calcul de taille finie. Dans ce contexte, nous avons développé des PML adaptatives permettant de traiter le cas d'ordres de diffraction rasants, les anomalies de Wood, où les PML classiques sont inefficaces.

Le [chapitre 3](#) est consacré à la mise en place d'une méthode permettant de résoudre un *problème spectral* par la FEM, autrement dit à chercher les fréquences propres et les modes propres de l'opérateur de Maxwell pour des structures périodiques ouvertes, dans le cas scalaire et pour des matériaux non dispersifs. Elle repose sur le traitement d'un problème fermé grâce à l'utilisation de PML dont nous étudions les différents paramètres et leur influence sur la structure du spectre de l'opérateur en question. Cette approche est validée en la comparant avec une méthode baptisée *tétrachotomie* permettant de trouver les pôles des coefficients de Fresnel (qui sont aussi les valeurs propres du problème) au travers d'exemples numériques simples. En outre, nous étendons la formulation du problème spectral au cas de matériaux dispersifs en utilisant un modèle de permittivité qui nous conduit à résoudre un problème aux valeurs propres quadratique. Cette formulation est appliquée à un exemple d'un réseau de diffraction.

Dans le [chapitre 4](#), nous présentons une *méthode modale* qui nous permet de décomposer un champ solution du problème de diffraction sur la base des modes propres. Cette formulation, reposant sur le traitement d'un problème spectral adjoint, nous donne les coefficients de cette décomposition traduisant le couplage d'un mode propre donné avec une onde plane incidente, révélant comment ce mode est excité. La méthode est comparée dans les deux cas de polarisation aux résultats obtenus par la formulation exposée au [chapitre 2](#) sur l'exemple d'un réseau de fentes.

Le [chapitre 5](#) constitue une généralisation des chapitres 2 à 4 au cas vectoriel tridimensionnel de réseaux croisés. Nous posons les bases théoriques du problème de diffraction, du problème spectral et de la méthode modale dans le cas 3D. Les concepts généraux restent les mêmes que dans le cas scalaire, nous rentrons moins dans les détails et réservons les exemples numériques d'application pour la suite.

En effet, nous étudions au [chapitre 6](#) quatre types de réseaux de diffraction possiblement utilisables pour réaliser des filtres dans l'infrarouge. Nous appliquons sur ces exemples les méthodes présentées au [chapitre 5](#) pour étudier leur propriétés spectrales. Nous étudions l'influence des paramètres opto-géométriques sur les résonances et dégagements dans chaque cas un jeu de paramètres intéressant pour réaliser diverses fonctions de filtrage spectral. Les avantages et inconvénients en terme de fabrication et d'utilisation de chaque type de filtre sont mis en évidence.

Enfin les premières fabrications et caractérisations expérimentales des deux types de filtres définis au [chapitre 6](#) comme susceptibles de répondre aux exigences du filtrage pour l'imagerie multispectrale sont exposées dans le [chapitre 7](#). Le premier d'entre eux est un réseau de plots cylindriques métalliques sur un bicouche métal/diélectrique, réalisant des filtres coupe bande en réflexion. Le deuxième est un réseau d'ouvertures annulaires dans une couche métallique qui permet d'obtenir des filtres passe bande en transmission.

Contexte : imagerie infrarouge et filtrage spectral résonant

Sommaire

1.1	Le rayonnement infrarouge	7
1.2	Absorption de l'atmosphère	8
1.3	Détection infrarouge.	9
1.3.1	<i>Principe de fonctionnement des détecteurs quantiques.</i>	10
1.3.2	<i>Principe de fonctionnement des détecteurs thermiques.</i>	10
1.4	Spectrométrie	12
1.5	Imagerie multispectrale	12
1.6	Les réseaux de diffraction	15
1.6.1	<i>Généralités</i>	15
1.6.2	<i>Le filtrage spectral diffractif</i>	17
1.6.3	<i>Méthodes numériques pour la modélisation des réseaux</i>	18
1.7	Phénomène de résonance	19
1.7.1	<i>Généralités</i>	19
1.7.2	<i>Systèmes ouverts et modes à fuites</i>	19
1.7.3	<i>Comment calculer les modes à fuites ?</i>	22

DEPUIS le début des années 1990, l'imagerie infrarouge a profité d'une évolution majeure avec le développement et la commercialisation de matrices de détection infrarouge non refroidies. L'imagerie infrarouge était jusque là réservée aux domaines de pointe (militaire, spatial...). En effet, les détecteurs utilisés étaient de type quantique, ce qui nécessite un matériau semi-conducteur dont la largeur de bande interdite est adaptée à la longueur d'onde à détecter. Dans l'infrarouge, les énergies mises en jeu sont plus faibles que dans le visible (environ 0.1 eV pour la bande spectrale centrée à 10 μm). Ceci a pour conséquence, qu'à la température ambiante, le courant photonique engendré dans la structure de détection (photodiode) est complètement masqué par le courant thermique. La seule issue est donc de refroidir le photodétecteur pour diminuer le courant thermique jusqu'à pouvoir lire le courant photonique. Ces contraintes font que les détecteurs infrarouge refroidis sont chers, à la conception, à la production et à l'utilisation.

En revanche, la détection infrarouge fondée sur la mesure de l'élévation thermique d'un matériau absorbant ne nécessite pas de refroidissement. La difficulté est alors l'intégration

des fonctions nécessaires à ce type de détection dans des pixels qui soient suffisamment petits pour réaliser des matrices adaptées aux applications d'imagerie. Cela a été rendu possible par le développement des technologies de la microélectronique, permettant de réaliser des composants en grande série et à bas coût.

Ainsi, à l'instar du radar ou du GPS par exemple, une technologie initialement réservée aux applications de défense se retrouve-t-elle dans le domaine civil : de la vision de nuit équipant les voitures à l'imagerie médicale, en passant par la lutte contre les incendies et le diagnostic d'isolation thermique des bâtiments, les applications se font de plus en plus nombreuses.

Le composant de base d'un imageur infrarouge non refroidi est son détecteur thermique : le microbolomètre (un bolomètre spécial opérant dans la bande III de l'infrarouge, entre 8 et 14 μm). Il consiste en une matrice de pixels, chaque pixel étant composé d'une résistance faite d'un matériau absorbant présentant un coefficient de température élevé, sur une large surface de silicium possédant une faible capacité thermique et dotée d'une bonne isolation thermique. Lorsque le rayonnement infrarouge situé dans une certaine bande de longueur d'onde atteint le matériau absorbant, cela modifie la résistance électrique de ce dernier. Toute variation de température dans la scène observée provoque une variation de la température du bolomètre. Cette variation est convertie en un signal électrique pour chaque pixel, qui permet lui-même de composer l'image. Contrairement au capteur qu'est l'œil humain dans le visible, lequel est capable de discriminer les couleurs, la grande majorité des microbolomètres du commerce ne « voient » que des images de flux. En filtrant spectralement la lumière incidente en amont du détecteur, on peut faire de l'imagerie multi-spectrale infrarouge, permettant d'extraire différentes informations dans la scène observée. Les futures évolutions des microbolomètres, outre la réduction de la taille transverse des pixels, iront probablement dans le sens d'une plus grande intégration de fonctionnalités au sein du pixel. On peut dès à présent imaginer un filtrage avec des motifs analogues aux motifs de Bayer [2] dans le visible, et ainsi entrevoir la possibilité de « caméras couleurs » dans l'infrarouge.

Pour parvenir à ces fonctions de filtrage, plusieurs possibilités sont envisageables. La plus répandue est le filtrage interférentiel, basé sur des empilements multicouche. Mais cette technique présente le désavantage d'être complexe et onéreuse à mettre en œuvre dans l'infrarouge lointain de par l'épaisseur importante des couches nécessaires et leur nombre (plusieurs dizaines). Une alternative potentielle repose sur un filtrage réalisé grâce à des matériaux microstructurés. En effet, les progrès des technologies de micro-structuration permettent désormais de graver la matière à des échelles nanométriques. Ces résolutions atteignables depuis quelques années permettent de transposer les structures de filtrage réservées jadis aux domaines de grande longueur d'onde comme les micro-ondes aux domaines de l'infrarouge et du visible. En particulier, un intérêt croissant est porté aux structures périodiques dans une, deux ou trois dimensions de l'espace. Dénommés *cristaux photoniques*, ces analogues des semi-conducteurs pour l'électromagnétisme car ils présentent une bande interdite photonique, ont des propriétés optiques spectaculaires et sans équivalent naturel (réfraction négative par exemple). Cette nouvelle classe de matériaux artificiels porte le nom de *métamatériaux*. Notons que les *réseaux de diffraction*, constitués typiquement d'un substrat et d'une couche d'un matériau structurée périodiquement dans une ou deux dimensions, sont une sous-branche de cette catégorie, ils peuvent être en effet considérés comme des « tranches » de cristaux photoniques. Bien que connus et étudiés depuis plus de deux siècles, les réseaux de diffraction font encore aujourd'hui l'objet d'intenses recherches théoriques et sont utilisés dans un large panel d'applications. Ils seront le sujet d'étude principal de ce travail de thèse.

D'un point de vue pratique, ces structures diffractives sont encore coûteuses à réaliser, si bien qu'il est essentiel de modéliser leur comportement et tester leurs performances *in silico* plutôt que de fabriquer un grand nombre d'échantillons et de les caractériser. Le

fait que leurs dimensions caractéristiques soient de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde d'utilisation leur confère des propriétés de *résonance*, et il est alors nécessaire de résoudre les équations de Maxwell de manière rigoureuse pour appréhender correctement ce phénomène. Par résonance nous entendons qu'une petite variation des causes peut engendrer une grande variation des effets. Dans notre cas, une petite variation de la longueur d'onde du champ incident sera susceptible de provoquer une grande variation du champ diffracté, et par conséquent de la répartition de l'énergie transmise, réfléchie et absorbée par le composant. Ces variations rapides pourront donc être mises à profit pour réaliser diverses fonctions de filtrage spectral. Il est donc essentiel d'étudier les résonances des structures candidates, et donc de calculer leurs fréquences propres.

L'objectif de ce chapitre est de situer le contexte et les objectifs de cette étude. Nous commençons par des généralités sur le rayonnement infrarouge, avant d'étudier un procédé de détection de la lumière dans ce domaine spectral, avec notamment son bloc de base, le microbolomètre, puis nous exposerons les principes de l'imagerie multispectrale. Nous passerons ensuite en revue différentes solutions de filtrage spectral diffractif existantes. Enfin, nous nous intéresserons au phénomène de résonance mis à profit pour obtenir des fonctions de filtrage.

1.1 Le rayonnement infrarouge

La matière émet et absorbe en permanence du rayonnement électromagnétique. Le processus d'émission est lié à l'agitation moléculaire interne de la matière, agitation des molécules qui dépend du matériau mais surtout de la température. La théorie de l'électromagnétisme classique nous montre que la nature du rayonnement émis dépend de l'accélération subie par les particules. Comme *a priori* toutes les valeurs d'accélération sont possibles, chaque molécule fournit une certaine énergie radiative dont les niveaux d'énergie statistiques prennent toutes les valeurs : le rayonnement est dit à spectre continu. L'émission thermique des solides est référencée à la notion théorique de « corps noir », défini comme un objet capable d'absorber totalement tout rayonnement incident, quelle que soit sa longueur d'onde. L'émission spectrale du corps noir est décrite par la loi de Planck bâtie sur des considérations thermodynamiques statistiques. La loi de Planck définit la distribution de luminance énergétique spectrique du rayonnement thermique du corps noir en fonction de la température thermodynamique.

La luminance énergétique spectrique est un flux énergétique par unité de surface, par unité d'angle solide et par unité de longueur d'onde (elle s'exprime donc en $W \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1} \cdot m^{-1}$) et est définie par :

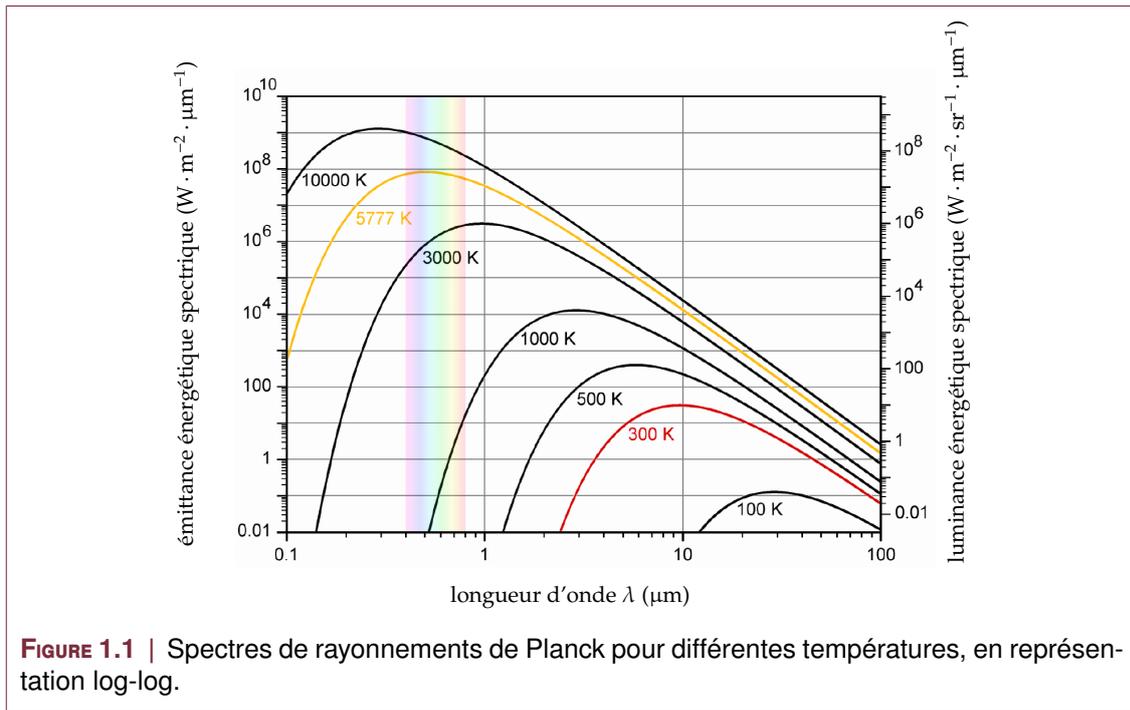
$$L_{\lambda} = \frac{2hc_{\lambda}^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc_{\lambda}}{k\lambda T}\right) - 1},$$

où $c_{\lambda} = c/n_{\lambda}$ est la vitesse du rayonnement électromagnétique dans le milieu où se propage le rayonnement, n_{λ} est l'indice de réfraction du milieu à la longueur d'onde λ , $c = 299\,792\,458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ est la vitesse de la lumière dans le vide, $h = 6.626\,069\,57 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ est la constante de Planck, $k = 1.380\,661 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ est la constante de Boltzmann et T est la température de la surface du corps noir en K.

La loi de Wien, qui est obtenue par dérivation de la loi de Planck, décrit le déplacement du maximum de l'émission spectrale du corps noir en fonction de la température :

$$\lambda_{\max} = \frac{2898}{T},$$

où λ_{\max} est la longueur d'onde du maximum (en μm) et T est la température du corps noir en K. Ainsi un corps noir à la température ambiante $T = 300 \text{ K}$, a son maximum d'émission



spectrale pour une longueur d'onde de $10 \mu\text{m}$, alors que le soleil dont la température apparente est de 5777 K , donne un maximum à $0,5 \mu\text{m}$ (cf. **Figure 1.1**). Cette loi de Wien explique bien le déplacement vers les courtes longueurs d'onde de l'émission des corps noirs de plus en plus chauds. Le rayonnement infrarouge correspond au domaine d'émission de la matière dont les températures sont celles trouvées généralement à la surface de la Terre. Les objets naturels ne sont, en général, pas des corps noirs : on dit qu'ils sont « gris ». Par là, il est entendu qu'ils n'absorbent pas totalement le rayonnement qu'ils reçoivent, ils n'émettent pas non plus autant de rayonnement qu'un corps noir. On définit un coefficient spectral, l'émissivité, notée ϵ , toujours inférieure à 1, qui caractérise la proportion du flux émis par l'objet par rapport au corps noir théorique. La conservation de l'énergie implique que le flux absorbé est égal au flux émis : l'émissivité est donc égale à l'absorption.

1.2 Absorption de l'atmosphère

L'atmosphère terrestre n'est pas transparente pour toutes les longueurs d'onde. La transmission du rayonnement optique à travers l'atmosphère dépend de deux phénomènes essentiels :

- l'absorption propre des constituants gazeux de l'atmosphère, en particulier H_2O et CO_2 ,
- l'absorption par diffusion due à la présence des particules qu'elle contient, molécules ou aérosols.

Lorsque le rayonnement traverse l'atmosphère, il apparaît des bandes d'absorption dues notamment à la présence de vapeur d'eau. C'est ce constituant qui détermine l'absorption la plus importante dans l'infrarouge, d'autres gaz comme le gaz carbonique (CO_2) et les gaz à « effet de serre » interviennent avec moins d'intensité. Nous constatons donc l'existence d'un certain nombre d'intervalles transparents, les « fenêtres de transmission », c'est-à-dire de bandes spectrales à l'intérieur desquelles l'absorption est très faible (**Figure 1.2**). Ces fenêtres sont situées aux intervalles de longueurs d'onde :

- $0,4$ à $1,0 \mu\text{m}$: la bande visible,

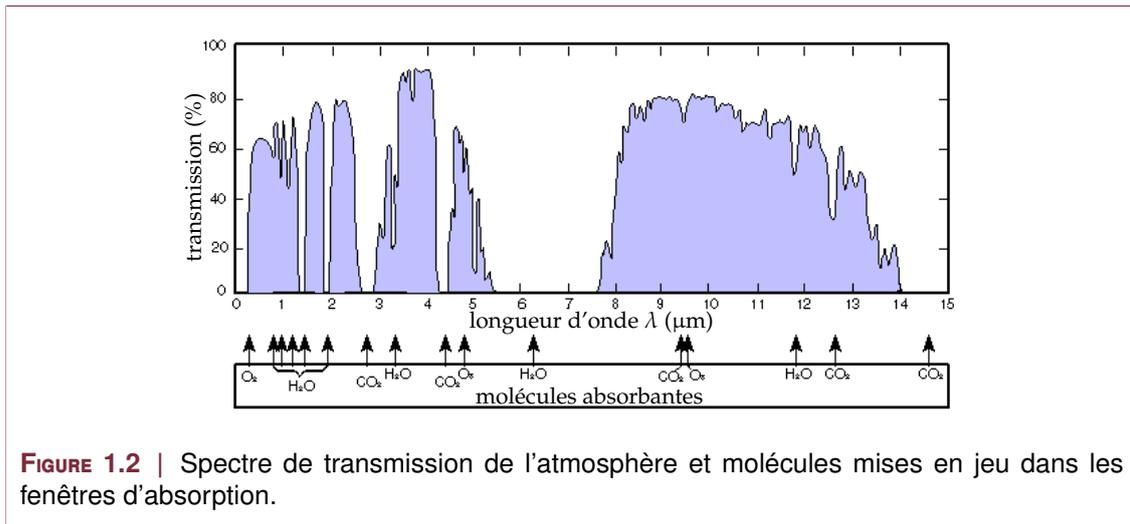


FIGURE 1.2 | Spectre de transmission de l'atmosphère et molécules mises en jeu dans les fenêtres d'absorption.

- 1.2 à 2.5 μm : la bande IR I, dite aussi infrarouge proche,
- 3.0 à 5.0 μm : la bande IR II, dite aussi infrarouge moyen,
- 8.0 à 14.0 μm : la bande IR III, dite aussi infrarouge lointain.¹

Cette dernière fenêtre est d'une grande importance, car elle correspond, on l'a vu, aux longueurs d'onde du maximum d'émission thermique du corps noir à la température ambiante. C'est donc ici que devront fonctionner les systèmes destinés à détecter les objets par leur émission propre. Il est souvent intéressant d'utiliser aussi la fenêtre 3 à 5 μm pour la mise en évidence de corps plus chauds.

1.3 Détection infrarouge

Nous présentons ici les principes de la détection infrarouge, et plus particulièrement les détecteurs non refroidis. Une étude complète est en dehors du cadre de ce travail, et nous laissons le soin au lecteur intéressé de se reporter par exemple à la référence [113].

Deux types de détecteurs infrarouges coexistent : les détecteurs quantiques et les détecteurs thermiques. Les détecteurs de type quantique mettent à profit l'effet photo-électrique et sont fondés sur la mesure d'un courant engendré par la création de paires électron-trou due à l'absorption du rayonnement infrarouge dans un matériau semi-conducteur adapté à la longueur d'onde à détecter. Les détecteurs thermiques sont quant à eux fondés sur la mesure de l'élévation de température d'un matériau absorbant le rayonnement infrarouge.

Bien que les effets de la concentration du rayonnement solaire avec des miroirs et des lentilles soient connus depuis la plus haute antiquité, ce n'est que beaucoup plus tard que les premières expérimentations sur le rayonnement infrarouge ont été menées. En effet l'italien Giovanni Battista Della Porta (1535-1615), à la fin du XVI^e siècle, a détecté avec son visage la concentration par un miroir convexe de la chaleur issue d'une bougie et du froid issu d'un bloc de glace. C'est ensuite au début du XVI^e siècle que des savants ont remplacé la sensibilité du visage ou de la main par un instrument de mesure : l'ancêtre du thermomètre à colonne de liquide. De nombreuses études théoriques et expérimentales font suite aux travaux de ces pionniers. Enfin au début du XIX^e siècle, Sir Frederick William Herschel (1738–1822) mesura la température des différentes couleurs issues de

1. Ce découpage de l'infrarouge n'est pas vraiment normalisé et les différentes bandes et leurs limites peuvent varier selon les ouvrages, les applications...

la lumière décomposée par un prisme et se rendit compte qu'elle augmentait du bleu vers le rouge. En allant au delà du rouge, il mit en évidence l'existence d'un rayonnement invisible à l'œil humain dont la température associée était encore plus grande et qu'il nomme *calorific rays* [111].

L'avènement de l'électronique et les progrès technologiques ont permis de mettre au point des détecteurs thermiques de plus en plus performants, l'essentiel des progrès ayant été réalisé dans la fin du XX^e siècle avec le développement de la microélectronique sur silicium. Jusqu'alors, les détecteurs thermiques n'ont été que très peu utilisés pour l'imagerie à cause de leurs trop grandes dimensions et d'un temps de réponse trop long. En revanche depuis les années 1980, les développements technologiques de la microélectronique permettent d'une part la réalisation de structures de détection de très faible masse thermique, donc de constante de temps réduite et de plus grande sensibilité, et d'autre part la conception et la fabrication de circuits de lecture matriciels avec des technologies CMOS de plus en plus performants. Ces deux points font que les développements de matrices de détecteurs thermiques permettent actuellement de réaliser des caméras d'imagerie infrarouge de hautes performances à partir de détecteurs non refroidis. Longtemps classifiés, les premiers résultats ont été publiés au début des années 1990, et depuis les progrès technologiques ont permis d'adresser des marchés de plus en plus importants qui dépassent aujourd'hui en chiffre d'affaire le marché accessible aux détecteurs infrarouge refroidis [132].

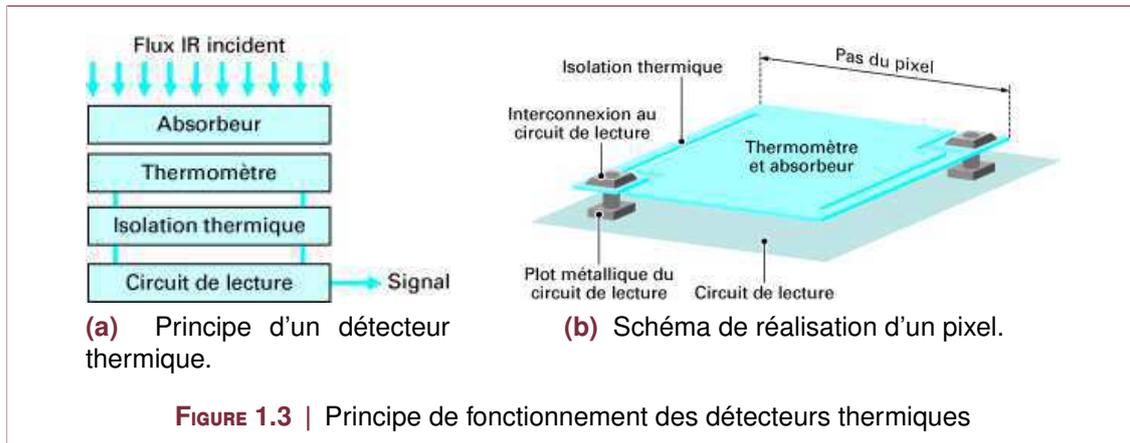
1.3.1 Principe de fonctionnement des détecteurs quantiques

Les détecteurs infrarouges quantiques de hautes performances utilisent comme matériaux de détection des semi-conducteurs dont l'élaboration et la technologie de réalisation des structures de détection sont complexes et donc coûteuses. Leur faible largeur de bande interdite (environ 0.1 eV), adaptée à la longueur d'onde à détecter (10 μm), fait que ces détecteurs présentent un courant d'obscurité tellement important à la température ambiante qu'il masque le signal utile délivré. Vu que le courant d'obscurité croît exponentiellement avec la température absolue, cela oblige à refroidir ces détecteurs pour pouvoir lire le signal utile, ce qui en limite l'utilisation aux domaines militaire et professionnel de haut de gamme à cause de leurs coûts élevés d'acquisition et de maintenance. Ces difficultés technologiques et les coûts d'utilisation importants motivent depuis le début des années 1980, le développement de détecteurs infrarouge non refroidis fondés sur le principe de la détection thermique.

1.3.2 Principe de fonctionnement des détecteurs thermiques

Dans le cas d'un détecteur thermique, le flux infrarouge incident est détecté non plus par un effet photoélectrique, mais par la mesure de l'élévation de température d'un absorbeur du flux infrarouge. Tout détecteur thermique est alors constitué de l'assemblage des fonctions d'absorption, de mesure de température et d'isolation thermique, associées à un circuit de lecture du signal issu du thermomètre selon le schéma représenté sur la [Figure 1.3a](#).

Le thermomètre doit avoir une grande sensibilité (variation importante de la grandeur mesurée pour une variation donnée de la température) et un faible bruit. Le choix du thermomètre est très large car la plupart des phénomènes physiques sont thermiquement activés. On peut ainsi considérer des thermomètres électriques (résistifs, pyroélectriques, ferroélectriques, thermoélectriques...) ou mécaniques (bilames...) voire optiques (variation de polarisation ou de réflexion de la lumière en fonction de la température). Le choix du type de thermomètre et du matériau le composant, est important car il entraîne des contraintes d'une part au niveau de l'intégration du matériau dans l'empilement



technologique et d'autre part au niveau du système.

Les éléments sensibles constitutifs de l'imager sont organisés en matrice d'éléments sensibles appelés pixels pour picture element (cf. Figure 1.3b) dont chacun est relié à une entrée d'un circuit intégré chargé de lire chaque thermomètre et de multiplexer les signaux vers une sortie vidéo.

Par principe, la réponse de ce type de détecteur est peu dépendante de la longueur d'onde, contrairement à celle du détecteur quantique qui dépend de la largeur de bande interdite ou des niveaux d'impureté du semi-conducteur utilisé. En effet, les propriétés en longueur d'onde ne sont gouvernées que par les caractéristiques spectrales de l'absorbeur. Dans la réalité, les détecteurs destinés à l'imagerie thermique sont optimisés pour détecter les longueurs d'onde comprises entre 8 et 14 μm qui correspondent, comme nous l'avons vu, au maximum d'émission du corps noir à la température ambiante et, fort heureusement, à une large fenêtre de transparence atmosphérique.

Nous considérons maintenant un type particulier de détecteur non refroidi, les détecteurs thermiques résistifs, car ils sont désormais les plus employés pour les applications d'imagerie. On nomme *bolomètre* un détecteur thermique utilisant une thermistance comme matériau thermomètre. On mesure alors la variation de résistance de chaque pixel pour remonter à l'énergie infrarouge incidente sur chaque pixel. On peut ainsi présenter une image qui est le reflet des différences de température et d'émissivité présents sur la scène. La version pixellisée et adaptée à fonctionner dans la bande IR III d'un bolomètre est communément appelée microbolomètre.

Une modélisation complète d'un microbolomètre est extrêmement complexe à cause du nombre important de paramètres qui entrent en jeu et de leurs influences mutuelles. Le modèle le plus simple ne tient pas compte de l'effet Joule induit par la lecture de la résistance électrique qui constitue le bolomètre. On retiendra que le signal est directement proportionnel, d'une part, à la résistance thermique existante entre l'absorbeur, le thermomètre et le circuit de lecture (considéré comme un puits thermique) que l'on est capable de réaliser avec l'empilement technologique retenu et, d'autre part, au courant qui traverse le bolomètre [132].

Le choix du matériau thermomètre est essentiel. En effet celui-ci ne doit pas être seulement performant (rapport signal à bruit élevé) mais aussi compatible avec les procédés technologiques de dépôt et gravure de type monolithique, c'est-à-dire assemblé directement sur un substrat comportant déjà les structures CMOS d'adressage et de lecture. Ces deux caractéristiques fondamentales orientent les choix soit vers des matériaux déjà utilisés dans les technologies silicium comme le titane, soit vers des matériaux compatibles de la technologie silicium comme le silicium amorphe ou, dans une moindre mesure,

l'oxyde de vanadium.

La réalisation de la fonction absorption est fondée, d'une part, sur un couplage de l'onde électromagnétique incidente avec une structure comportant des électrodes métalliques de résistivité adaptée à l'impédance du vide, et d'autre part sur la réalisation d'une cavité quart d'onde centrée sur la longueur d'onde λ_p à absorber. Cette cavité quart d'onde, qui améliore l'absorption du rayonnement à $10\ \mu\text{m}$ caractéristique de l'émission des corps à la température ambiante, a très rapidement été introduite dans les développements des microbolomètres IR non refroidis quelle qu'en soit leur structure [79]. En pratique cette cavité résonante est composée du vide et des couches, plus ou moins épaisses selon les technologies, constituées du thermomètre, de l'absorbeur et éventuellement des couches supports ou de protection qui peuvent être employées dans l'assemblage.

1.4 Spectrométrie

La spectrométrie d'une scène consiste en l'étude de son spectre. Pour être plus précis, il s'agit de déterminer les différentes longueurs d'onde qui composent la scène observée et de déterminer la part de chacune d'entre elles dans le flux total que l'on détecte. Un spectromètre permet donc d'obtenir une signature spectrale caractéristique de l'image, qui informe sur la nature des objets observés. On pourra par exemple différencier tel ou tel type de végétal ou de minéral grâce à son empreinte spectrale, souvent dans le proche infrarouge pour ce type d'objet. La spectrométrie concerne également le domaine de la détection des gaz. En effet, un gaz particulier possède des raies d'absorption caractéristiques qui dépendent de la structure de la molécule. Par exemple, la liaison C-H présente une raie d'absorption vers $3.4\ \mu\text{m}$, cette raie sera donc présente dans le spectre de tous les hydrocarbures. Dans la bande IR III, les raies d'absorption vont être une signature d'un hydrocarbure particulier.

Il existe différentes catégories de spectromètres. On citera par exemple :

- *Les spectromètres à prisme* se servent de la relation de dispersion d'un matériau : les rayons incidents sont réfractés dans le prisme et en émergent avec un angle dépendant de leur longueur d'onde.
- *Les spectromètres à fentes* sont basés sur la diffraction du rayonnement à analyser à travers une fente fine. En fonction de la longueur d'onde, les rayons seront transmis avec un angle différent pourront être étudiés séparément.
- *Les spectromètres à réseaux de diffraction* profitent de la diffraction en différents ordres de la lumière sur un réseau. La loi fondamentale des réseaux, résultant des interférences entre les ondes diffractées par chacune des fentes, va donner l'angle des rayons diffractés par le réseau en fonction de leur longueur d'onde.
- *Les spectromètres à transformée de Fourier*. Deux répliques du faisceau à analyser sont obtenues classiquement grâce à un interféromètre de Michelson dont l'un des miroirs est mobile, faisant ainsi varier la différence de marche entre les deux répliques. On obtient alors un interférogramme permettant de remonter, à l'aide d'une transformée de Fourier, au spectre de la scène.

Le choix du spectromètre est à faire en fonction de son utilisation (gamme spectrale, résolution spectrale, flux disponible, encombrement...)

1.5 Imagerie multispectrale

De nos jours, on cherche à réaliser des imageurs permettant de résoudre spectralement une scène pour en extraire une information sur quelques bandes : c'est l'imagerie multispectrale [133]. Les applications sont nombreuses et variées, de l'observation du

spectre des galaxies afin de remonter à leur composition chimique, jusqu'à la microscopie multispectrale de cellules vivantes [62], permettant de mieux comprendre leurs fonctions et interactions. Les dispositifs se doivent donc de combiner les aspects d'imagerie et de spectrométrie.

Plusieurs possibilités ont été envisagées pour associer à des détecteurs (thermiques ou quantiques) des fonctions permettant de faire de la spectrométrie. Notons par exemple deux dispositifs compacts développés récemment à l'ONERA basés sur un spectromètre à transformée de Fourier. Le premier d'entre eux consiste en un prisme d'épaisseur continument variable assurant la variation de la différence de marche, et déposé sur la matrice de détection [116]. En plaçant une lentille devant le dispositif, on peut faire de l'imagerie, mais un balayage spatial de la scène est nécessaire pour faire une image complète. Un autre dispositif utilisant un dièdre à la place du prisme a été testé [43], mais là encore il faut un mouvement mécanique, soit de l'appareil, soit du dièdre, pour pouvoir faire de la spectro-imagerie. D'autres dispositifs utilisent une roue à filtres placée devant le détecteur, chaque filtre laissant passer une bande de fréquences [4, 95]. Là encore, il faut une pièce mécanique mobile. Dans tous les cas, les images à différentes longueurs d'onde ne sont pas prises simultanément, et cela peut être un problème si la scène varie rapidement. L'absence de mouvement mécanique permettrait aussi d'augmenter la vitesse d'acquisition ouvrant la voie à des applications qui nécessitent un nombre élevé d'images par seconde comme les applications embarquées.

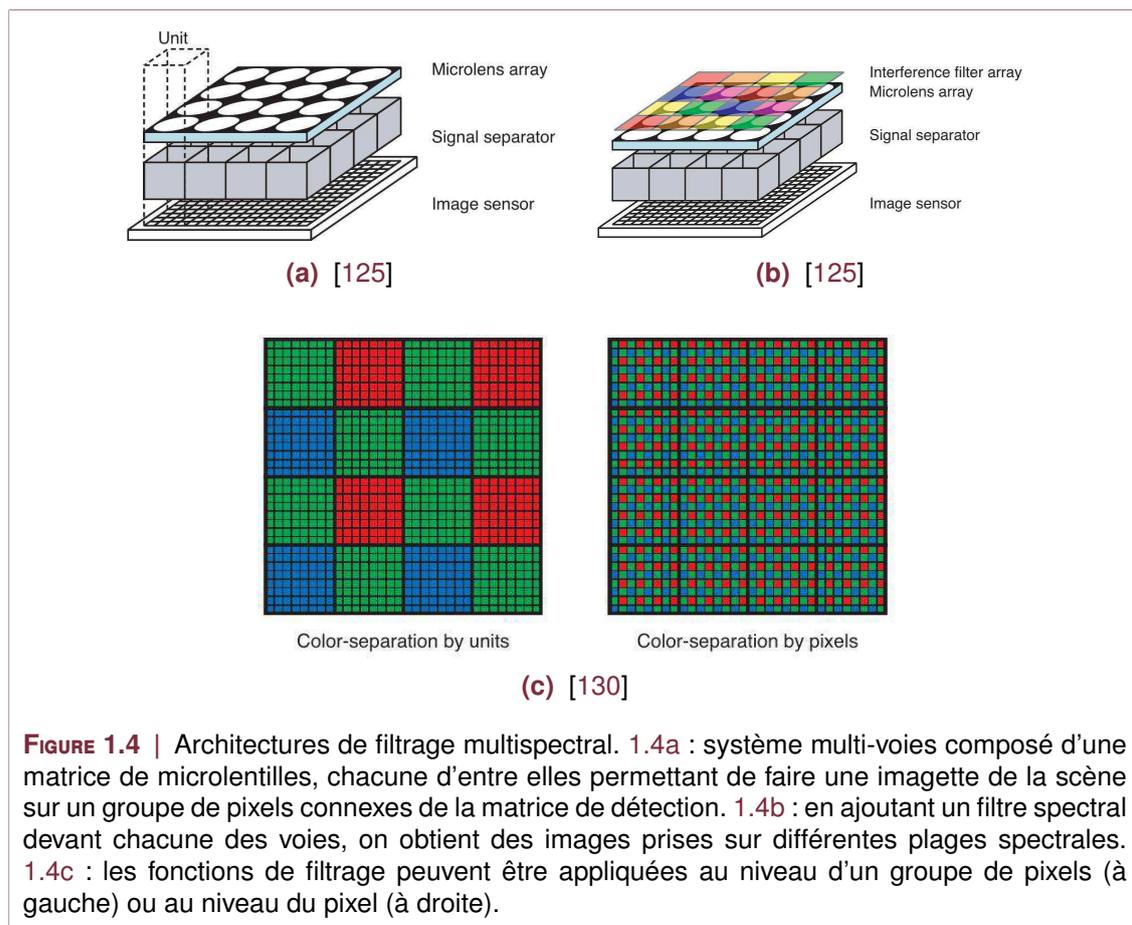


FIGURE 1.4 | Architectures de filtrage multispectral. 1.4a : système multi-voies composé d'une matrice de microlentilles, chacune d'entre elles permettant de faire une imagerie de la scène sur un groupe de pixels connexes de la matrice de détection. 1.4b : en ajoutant un filtre spectral devant chacune des voies, on obtient des images prises sur différentes plages spectrales. 1.4c : les fonctions de filtrage peuvent être appliquées au niveau d'un groupe de pixels (à gauche) ou au niveau du pixel (à droite).

S'inspirant du système de vision de certains insectes [118], plusieurs équipes ont proposé des systèmes multi-voies afin de capturer plusieurs images de la même scène en un seule acquisition [130, 33]. La plupart des systèmes sont basés sur une matrice de microlentilles, chacune d'entre elles permettant de faire une imagerie de la scène

sur une petite zone de la matrice de détection (cf. Fig. 1.4a). Ce type de système multivoies permet d'ajouter une fonction optique devant chaque voie (cf. Figs. 1.4b et 1.4c, à gauche). Dans le domaine du visible, le filtrage colorimétrique dans les imageurs est assuré classiquement par des résines colorées[10]. Des réalisations ont été conduites avec des filtres interférentiels [125] placés devant chacune des voies. Une autre solution consiste en des filtres constitués de cavités Fabry Péroต์ accordables grâce à des systèmes microélectromécaniques (*MicroElectroMechanical Systems* en anglais, MEMS) [56]. En appliquant une tension on peut régler la longueur de la cavité et ainsi déplacer la fréquence de résonance du filtre de manière continue. Les filtres peuvent aussi être réalisés par des structures diffractives. Notons par exemple une réalisation dans le moyen infrarouge d'un spectro-imageur statique avec des filtres à réseaux métalliques suspendus [57, 141], avec détection refroidie. Ce type de structure mono-dimensionnelle est néanmoins dépendant de la polarisation de l'onde incidente, et le caractère suspendu des réseaux de tiges rend complexe sa fabrication. Ceci dit, des approches de filtrage par des bi-réseaux de diffraction sub-longueur d'onde ont été conçues et démontrées expérimentalement [146].

Une autre approche prometteuse consiste à intégrer les fonctions de filtrage directement au niveau du pixel (cf. Fig. 1.4c, à droite) [130]. Plusieurs réalisations ont été conduites, avec différentes solutions pour obtenir la sélectivité spectrale incluant des empilement multicouches, des structures diffractives, des cristaux photoniques, des micro-antennes, etc... [128]. Retenons notamment des microbolomètres multispectraux dont la fonction d'absorption a été modifiée pour restreindre leur détection à un domaine de longueur d'onde. Ceci est réalisé par exemple avec des réseaux de plots déposés sur un empilement métal/diélectrique, provoquant un pic de résonance d'absorption dans la structure que l'on peut accorder en faisant varier les dimensions transverses du réseau [84, 85]. D'une manière générale, on peut pressentir que l'évolution des détecteurs infrarouge thermiques ira dans le sens d'une plus grande intégration de fonctionnalités comme la sélectivité spectrale au niveau du pixel [114].

Notre objectif est de concevoir des filtres optiques pour obtenir des fonctions de sélectivité spectrale dans la bande III de l'infrarouge, un filtre pouvant correspondre à un groupe de pixels ou à un pixel unique. Nous avons exposé jusqu'ici un filtrage en transmission, mais un filtrage en réflexion est tout à fait possible et sera étudié, bien que cela complique l'architecture du système optique d'imagerie. Comme nous l'avons vu il existe pléthore de solutions pour réaliser les fonctions de filtrage. La plus utilisée et mature est le filtrage interférentiel. Cela étant, l'épaisseur des couches à déposer est de l'ordre de l'épaisseur optique, c'est-à-dire plusieurs microns dans la bande spectrale d'intérêt. Il en résulte donc une très grande difficulté technologique de réalisation que ce soit en technologie de gravure ou en technologie *lift-off*, ainsi que des problèmes de contraintes mécaniques dus à la grande épaisseur des couches. De plus, le grand nombre de couches à déposer multiplie les étapes de fabrication, complexifiant le procédé et accroissant son coût. En conséquence, la technologie de filtrage interférentiel pose un réel problème de faisabilité. Elle pose également un problème d'industrialisation future, de par le nombre d'étapes mis en jeu, et de coût. Nous nous orientons donc vers une technologie de filtrage diffractif potentiellement plus simple à mettre en œuvre. Ces structures sont typiquement constituées d'une couche structurée dont les motifs ont des dimensions critiques inférieures à la longueur d'onde. Dans la bande que l'on veut adresser, les dimensions critiques sont alors de l'ordre de quelques microns, ce qui est tout à fait réalisable par les microtechnologies actuelles.

1.6 Les réseaux de diffraction

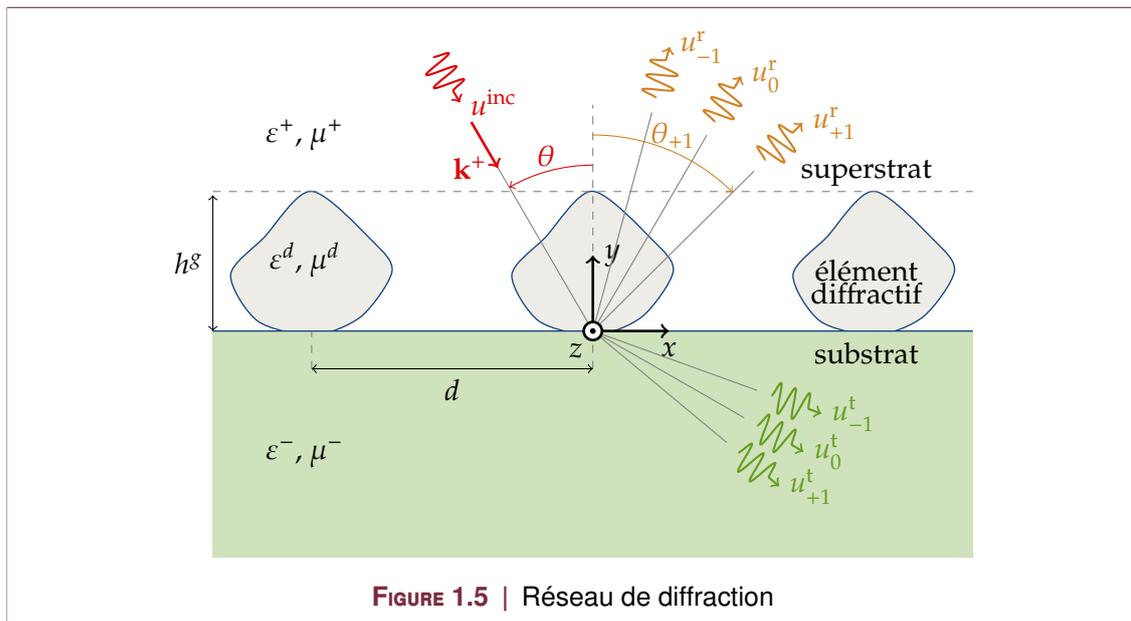
1.6.1 Généralités

Au début du XIX^e siècle, T. Young et J. Fraunhofer construisirent le premier réseau de diffraction optique et montrèrent le rôle de la diffraction dans le comportement de ce type de structure. Depuis lors, les réseaux ont été utilisés dans un très large champ d'applications technologiques, depuis les premiers spectromètres jusqu'aux récents éléments d'optique intégrée, et ce dans tous les domaines de longueur d'onde, des rayons X aux micro-ondes. Dans ce contexte, les réseaux de diffraction ont été l'objet de nombreuses publications depuis environ deux siècles. De manière surprenante, le sujet est encore aujourd'hui d'actualité.

De manière générale, les réseaux de diffraction mono-dimensionnels sont constitués par la répétition périodique d'un motif diffractant, comme par exemple une fente, et séparent un faisceau monochromatique incident en plusieurs faisceaux, dits ordres de diffraction transmis et réfléchis. Les directions privilégiées sont données par la formule des réseaux de l'optique géométrique :

$$k \sin \theta_n = k \sin \theta + n \frac{2\pi}{d}, \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (1.1)$$

où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est la constante de propagation et d la période du réseau (cf. Figure 1.5).



Les réseaux de diffraction ont donc une nature dispersive, leur réponse (soit le nombre d'ordres propagatifs, les directions et efficacités associées à ces ordres) étant dépendante de la longueur d'onde incidente, à paramètres opto-géométriques fixés. Les efficacités des ordres de diffraction, c'est à dire la part de l'énergie incidente redistribuée dans les différentes directions privilégiées de l'espace, résultent des interférences produites par les contributions cohérentes diffusées par chaque motif. Leur détermination précise passe par la prise en compte du caractère vectoriel de la lumière et des équations de Maxwell. Lorsque la période d est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde, l'énergie incidente est répartie dans les ordres de diffraction dans des quantités très sensibles à la polarisation incidente. La polarisation de la lumière émanant d'une scène quelconque

pouvant être considérée comme une superposition de toutes les directions possibles de polarisation, l'utilisation de réseaux sub-longueur d'onde mono-dimensionnels pour le filtrage spectral est fortement compromise.

En 1902, R. W. Wood observa de rapides et inhabituelles variations d'intensité dans le spectre d'un réseau de diffraction [145]. Ces effets non expliqués à l'époque par la théorie classique des réseaux furent nommés « Anomalies de Wood ».

En 1907, Lord Rayleigh proposa une explication à ces anomalies [112]. La direction de propagation d'un ordre de diffraction peut être tangente à la surface du réseau quand la longueur d'onde ou l'incidence augmente. Cet ordre devient ensuite évanescent et l'énergie qu'il transportait est redistribuée entre les autres ordres propagatifs, provoquant de rapides variations d'intensité.

Vers 1938, U. Fano avança une autre explication selon laquelle ces anomalies sont reliées à des effets de résonances [38, 37].

D'un point de vue expérimental, les spectres produits par des réseaux sont complexes et leur interprétation est souvent difficile si l'on ne s'en remet pas aux équations de Maxwell. De plus, même pour des géométries simples, la résolution de ces équations devient rapidement une tâche compliquée. Mis à part certains traitements analytiques, il fallut attendre les années 1960 et les débuts du calcul numérique sur ordinateur pour obtenir des avancées dans la compréhension des comportements résonants des réseaux. On peut par exemple citer les résultats fondamentaux d'Hessel et Oliner [61], qui ont montré le rôle clé des résonances dues à l'excitation des modes propres des réseaux dans leur propriétés spectrales. Maystre et Nevière [88, 90] ont étudié des cas spécifiques d'anomalies de résonance. Ils ont présenté une étude approfondie relative aux anomalies plasmoniques, qui entrent en jeu quand les plasmons de surface d'un réseau métallique sont excités. Ils ont aussi considéré les anomalies apparaissant quand une couche de diélectrique est déposée sur un réseau métallique et les ont reliés à l'excitation d'un mode guidé dans la couche diélectrique.

En 1998, Ebbesen *et al.* ont reporté une transmission qualifiée d'extraordinaire à travers un bi-réseau de trous percés dans une couche de métal déposé sur un substrat de verre [34]. Ces expériences ont renouvelé l'intérêt porté aux réseaux et ont conduit à de nombreuses études théoriques et expérimentales sur les matériaux structurés à l'échelle de la longueur d'onde durant ces quinze dernières années [46, 48]. Pour ces réseaux métalliques, le rôle des plasmons de surface a été mis en exergue pour expliquer les pics de transmission observés et leur position spectrale [87]. Un plasmon de surface d'un dioptre plan est un mode électromagnétique non-radiatif associé à l'excitation collective des électrons à l'interface entre un conducteur et un isolant. Ces modes ne peuvent pas directement être excités par la lumière, mais le couplage peut être réalisé grâce à une structuration de l'interface comme c'est le cas pour un réseau.

Par la suite, l'observation théorique et expérimentale de transmission exaltée dans des réseaux diélectriques [75], ou d'autres considérés comme parfaitement conducteurs [109], où les plasmons de surface ne peuvent pas exister, ont conduit à attribuer les caractéristiques spectrales à d'autres types de modes. Ainsi, d'une manière générale, les résonances dans des structures optiques peuvent être attribuées à l'excitation de modes propres de ces structures. La nature de ces modes varie selon la nature des matériaux et la configuration géométrique : plasmons de surface pour les métaux, phonon-polaritons de surface [66] pour les matériaux polaires, modes guidés de type Fabry-Pérot [55], modes de Brewster-Zennek [119], etc...

Nous voyons donc que les propriétés spectrales des réseaux de diffraction sont intimement liées à l'excitation de modes de résonance. Il est donc essentiel de pouvoir comprendre et modéliser les états propres de structures diffractives ainsi que leur cou-

plage avec une onde électromagnétique excitatrice. C'est un des objectifs de ce travail de thèse. Nous décrivons plus en détail le phénomène de résonance en partie 1.7, et mettrons en place des outils théoriques pour la modélisation et l'étude des propriétés spectrales des réseaux dans la partie I. Comme nous l'avons vu, le spectre des réseaux de diffraction peut présenter un comportement riche et complexe, qui peut être mis à profit pour réaliser différentes fonctions de filtrage. Nous allons dans la partie suivante présenter quelques réalisations récentes qui permettent de rendre compte du potentiel des réseaux de diffraction pour le filtrage spectral.

1.6.2 Le filtrage spectral diffractif

Les réseaux dits séparateurs de couleur en transmission (en anglais *Color Separation Gratings*, CSG), introduits par Damman en 1978 [17] exploitent par exemple le caractère dispersif angulaire de réseaux de diffraction diélectriques *en escaliers*. Leur période, typiquement de 20λ [32] les prémunit des effets néfastes de la polarisation incidente et les classe dans la gamme des éléments dits de *micro-optique*. Nous nous intéresserons quant à nous à des réseaux dont les dimensions sont de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde du champ incident, c'est à dire à des systèmes destinés à fonctionner dans le domaine de résonance.

Matériaux diélectriques ou semi-conducteurs

Les réseaux de diffraction vus comme des guides d'ondes périodiques peuvent présenter des pics étroits dans leur spectre réfléchi ou transmis, grâce à l'excitation d'un mode propre de la structure. Cette propriété peut servir à l'élaboration de filtres à bande étroite. Ils requièrent beaucoup moins de couches qu'un multi-couches à bande étroite. Cependant, les résonances sont très sensibles à l'angle et à la polarisation incidente. Fehrembach *et al.* sont parvenus à contourner cet obstacle modifiant les motifs de telle sorte qu'il soit possible d'exciter plusieurs modes propres en même temps [39, 41, 121]. Si la bande transmise ou réfléchie par ces filtres est, dans ce cas, bien trop étroite pour des applications multispectrales dans l'infrarouge, cet exemple montre la possibilité de réaliser des filtres passe-bandes indépendants de la polarisation.

D'autres études théoriques et expérimentales ont été menées sur ce type de filtre utilisant des résonances (dites en anglais *Guided-Mode Resonances* [143], GMR) pour des applications nécessitant un filtrage à bande étroite tolérant à l'incidence et à la polarisation [60, 40, 11].

Magnusson *et al.*, en utilisant ce type de résonances, ont conçu des réseaux accordables au moyen de systèmes micro-mécaniques (MEMS) modifiant les caractéristiques opto-géométriques de la structure [83]. En utilisant des réseaux mono-dimensionnels, ces auteurs sont parvenus à concevoir des filtres spectraux avec différents profils [29, 28, 126] dont les caractéristiques sont fondées sur l'excitation des modes de la structure [30].

Matériaux métalliques

Dans le domaine des micro-ondes, les réseaux périodiques d'ouvertures dans des couches métalliques sont utilisés depuis longtemps comme filtres spectraux [94]. Ils sont communément appelés *Frequency Selective Surfaces* car leur fonction optique est en général de réfléchir ou transmettre sélectivement une ou plusieurs bandes de fréquence. Notons par exemple la conception et la réalisation de ce type de surfaces sélectives en fréquence à base de structures métallo-diélectriques avec des matrices de plots réalisant des formes complexes sur une période, optimisées par un algorithme génétique [7]. Ces grilles métalliques sont peu à peu transposées dans les domaines de l'infrarouge et du visible grâce à la résolution de plus en plus précise des techniques de micro structuration.

Différentes formes d'ouvertures dans des couches métalliques sont utilisées pour réaliser des filtres : rectangulaires [80] ou cylindriques, en forme de croix [15], coaxiales [36, 24], en forme de « nœud papillon » (*bowtie*, [65]), et d'autres formes plus ou moins biscornues... Ces couches métalliques gravées sont généralement déposées directement sur un substrat, mais il est possible de rajouter des couches minces entre le substrat et le réseau [106]. Les recherches autant théoriques qu'expérimentales sur ce type de matrices d'ouvertures périodiques sont très actives et il est illusoire de prétendre en donner une revue exhaustive. Retenons que ces structures diffractives peuvent être utilisées en tant que filtres spectraux, et il est naturel de s'en inspirer pour la conception de nos filtres.

1.6.3 Méthodes numériques pour la modélisation des réseaux

Il existe plus d'une douzaine de méthodes reconnues et dédiées au calcul scalaire du champ électromagnétique diffracté par un réseau mono-dimensionnel. Certaines d'entre elles peuvent être appliquées au calcul vectoriel tri-dimensionnel du champ diffracté par un réseau bi-dimensionnel. On peut citer notamment la méthode des ondes couplées (*Rigorous Coupled Wave Method* en anglais, RCWA [91, 115]) aussi connue sous le nom de méthode modale de Fourier (*Fourier Modal Method* en anglais, FMM [76]), la méthode de Chandezon (ou méthode C, [63, 77]), la méthode différentielle [144], la méthode intégrale [89], la méthode des différences finies dans le domaine temporel (*Finite Difference Time Domain* en anglais, FDTD [149, 117]), la méthode des éléments finis (*Finite Element Method* en anglais, FEM [20, 147, 45, 23]), la méthode des sources fictives (*Method of Fictitious Sources* en anglais, MFS [152]) . . .

La RCWA (ou FMM), la méthode différentielle (proche de la RCWA) et la méthode C sont des méthodes couramment employées pour la caractérisation de réseaux mono-dimensionnels. Le problème consistant à résoudre les équations de Maxwell (introduites en Éq. (2.3)) en régime harmonique est réduit à un problème aux valeurs propres dans l'espace de Fourier discret. L'opérateur matriciel est établi en deux étapes. Le champ électromagnétique quasi-périodique est décomposé en série de Rayleigh et les coefficients périodiques des équations de Maxwell sont décomposés en série de Fourier. Dans le cas de la FMM et de la méthode différentielle, on choisit comme coefficients périodiques des équations de Maxwell la fonction permittivité, tandis que dans celui de la méthode C, on choisit la dérivée de la fonction définie par le profil géométrique du réseau. Dès lors que ces fonctions sont discontinues, ces méthodes convergent plus difficilement et plus lentement. Des problèmes de continuité surgissent en effet dans le cas TM avec un fort contraste de permittivité dans le cas de la FMM et avec des motifs diffractifs présentant des bords droits ou non descriptibles par une fonction dans le cas de la méthode C. Des méthodes [78, 52] existent pour contourner ces problèmes de discontinuité mais nécessitent des étapes de programmation supplémentaires.

La FDTD repose sur la propagation d'une impulsion le long d'une grille spatiale. Le champ électrique est calculé à un instant donné, et le champ magnétique à l'instant suivant grâce à l'utilisation d'une grille temporelle et à partir des équations de Maxwell en régime temporel. Cette méthode est largement utilisée pour la résolution des équations de Maxwell. Cependant, il est apparu que pour la recherche de phénomènes résonnants comme ceux que nous cherchons à mettre en œuvre pour concevoir des filtres diffractifs, elle nécessite des maillages spatial et temporel très raffinés alourdissant sa résolution. Il s'agit de plus d'une méthode temporelle. Son emploi pour la résolution de problèmes purement harmoniques s'avère donc quelque peu contre-nature.

La FEM présente l'avantage d'être une méthode très générale qui peut s'adapter à la résolution de problèmes physiques variés faisant intervenir des équations aux dérivées partielles. Une description plus précise en est faite au chapitre 2 dans le cas scalaire. Elle est largement utilisée dans des domaines tels que la mécanique (pour le calcul de contraintes par exemple) ou la mécanique des fluides (écoulements). Cependant sa mise

en œuvre pour la modélisation de phénomènes électromagnétiques dans le domaine infrarouge restait rare. Il s'agit d'une méthode précise et rigoureuse grâce à la formulation qui en a été faite par G. Demésy lors d'une précédente thèse à l'Institut Fresnel [24], et dont nous expliquons les principes au [chapitre 2](#) pour des réseaux mono-dimensionnels. De plus, elle est adaptée à la résolution de problème aux valeurs propres tels que ceux que nous voulons résoudre pour étudier les résonances des réseaux de diffraction. Ce point fera l'objet du [chapitre 3](#). Nous étendrons la formulation scalaire du problème de diffraction et du problème spectral au cas vectoriel tri-dimensionnel d'un réseau bi-périodique dans le [chapitre 5](#).

1.7 Phénomène de résonance

1.7.1 Généralités

La notion de résonance intervient dans tous les domaines de la physique ondulatoire, comme l'optique, l'acoustique, la mécanique ou l'électronique. Elle correspond à une importante augmentation de l'amplitude des oscillations d'une grandeur physique caractéristique du système étudié, sous l'influence d'impulsions régulières dont la fréquence est appelée fréquence de résonance.

Prenons un exemple simple. Considérons un résonateur mécanique : celui-ci peut être formé d'un ressort de raideur k dont une extrémité est fixe et l'autre accrochée à un objet de masse m reposant sur un plan horizontal. L'étude des oscillations libres de la masse (sans force extérieure appliquée) montre l'existence d'une solution particulière, appelée mode propre d'oscillation du système, de pulsation propre $\omega^p = \sqrt{k/m}$, si l'on néglige les frottements de la masse sur le plan. Lorsque ce système est soumis à une excitation mécanique de pulsation proche de ω^p (oscillations forcées), l'amplitude du mouvement de la masse devient immense et tend vers l'infini en théorie. En pratique, la masse est soumise à une force de frottement, qui amortit l'amplitude des oscillations à la résonance.

En électronique, un circuit composé d'une bobine d'inductance L de résistance négligeable et d'un condensateur de capacité C en série constitue également un résonateur, de pulsation $\omega^p = 1/\sqrt{LC}$. Lorsqu'une tension alternative de pulsation ω^p est appliquée aux bornes du circuit, la tension du condensateur devient très grande. Cependant, l'existence dans le circuit d'une résistance non nulle limite en pratique l'amplitude des oscillations à la résonance. Notons que la plupart des filtres électroniques sont basés sur ce phénomène. Il paraît donc naturel d'utiliser les résonances en optique pour réaliser des filtres spectraux.

En électromagnétisme, la propagation des champs électriques et magnétiques est régie par les équations de Maxwell. Ainsi, l'étude des résonances en optique se ramène-elle à l'étude des modes propres et des fréquences propres d'un opérateur de Maxwell qui dépend du problème à traiter. Cette étude se fait dans le cadre de la théorie spectrale, un outil mathématique puissant permettant de connaître la structure du spectre de l'opérateur en jeu. Le problème spectral consiste alors à trouver les solutions non triviales des équations de Maxwell *sans sources*.

1.7.2 Systèmes ouverts et modes à fuites

Pour des systèmes conservatifs, c'est à dire ne présentant pas de pertes d'énergie par effet Joule ou par propagation en espace libre, le problème spectral est dit *auto-adjoint* (ou encore Hermitien même si ce terme est plutôt réservé aux problèmes de dimension

finie). C'est le cas en Mécanique s'il n'y a pas de frottements, et en Électronique pour une résistance nulle. La théorie spectrale stipule alors qu'il existe un infini dénombrable de valeurs propres *réelles* (une seule dans le cas de notre simple problème de résonateur mécanique), et les modes propres correspondants sont d'énergie finie et forment une base orthonormée de l'espace des solutions.

Mais le type de problème qui nous intéresse revêt un tout autre aspect : il est dissipatif par nature. En effet, le fait que nous étudions non pas une structure confinée où l'énergie est conservée mais une structure ouverte capable de rayonner l'énergie vers l'espace libre fait que l'opérateur associé est non auto-adjoint, même si les matériaux en jeu ne présentent pas de pertes. Il advient donc que les fréquences propres associées sont complexes, la partie imaginaire donnant accès aux pertes d'énergie vers le reste de l'univers (que l'on appelle communément les fuites). Il faut alors inexorablement considérer des modes d'un genre particulier associés à ces fréquences propres complexes : les *modes à fuites* (*leaky modes* [86, 153]). Dans la littérature, ces modes sont aussi appelés *quasimodes*, *quasi-normal modes* [123, 122], *decaying states* [92], ou encore *resonant states* [31]. En Électromagnétisme, ils jouent un rôle majeur dans les propriétés de diffraction de guides d'ondes ouverts [59, 30, 151] et en particulier de réseaux de diffraction [96, 129]. Ces *modes à fuites* peuvent être quasi confinés dans la structure si la fréquence associée a une faible partie imaginaire comparée à la partie réelle, ou bien au contraire rayonner d'avantage vers l'infini, on parle alors de modes à fuites. En outre, en plus de valeurs propres discrètes, le spectre de l'opérateur présente une partie continue caractérisant la propagation de l'énergie de la structure vers l'infini, et les vecteurs propres associés sont des modes de radiation. Enfin, l'ensemble de ces modes propres ne constitue plus une base orthonormale de l'espace des solutions, et nous ne pouvons plus appliquer les résultats bien établis sur les problèmes auto-adjoints. Aussi voyons-nous que le fait d'avoir à faire à une structure ouverte rend l'étude spectrale bien plus délicate.

Les modes propres en Optique sont comme en Mécanique et en Électronique caractérisés par une pulsation temporelle ω^p . Rappelons que ω est reliée à la longueur d'onde dans le vide λ par : $\omega = k_0 c = 2\pi c / \lambda$. On peut donc parler de longueur d'onde propre du mode $\lambda^p := 2\pi c / \omega^p$. La dérivée spatiale présente dans les équations de Maxwell implique en plus l'existence d'une pulsation spatiale propre α^p . *A priori*, ces deux pulsations peuvent être complexes. Ceci revient à étendre la notion d'amplitude complexe au plan complexe ! On notera $\omega^p = \omega^{p'} + i\omega^{p''}$, où $\omega^{p'}$ est la pulsation de résonance réelle et $\omega^{p''}$ l'amortissement. Le signe de $\omega^{p''}$ dépend du signe utilisé pour la transformée de Fourier. Notre choix de définition² est le suivant : pour toute fonction f intégrable sur \mathbb{R} la transformée de Fourier $\mathcal{F}(f)$ de f est

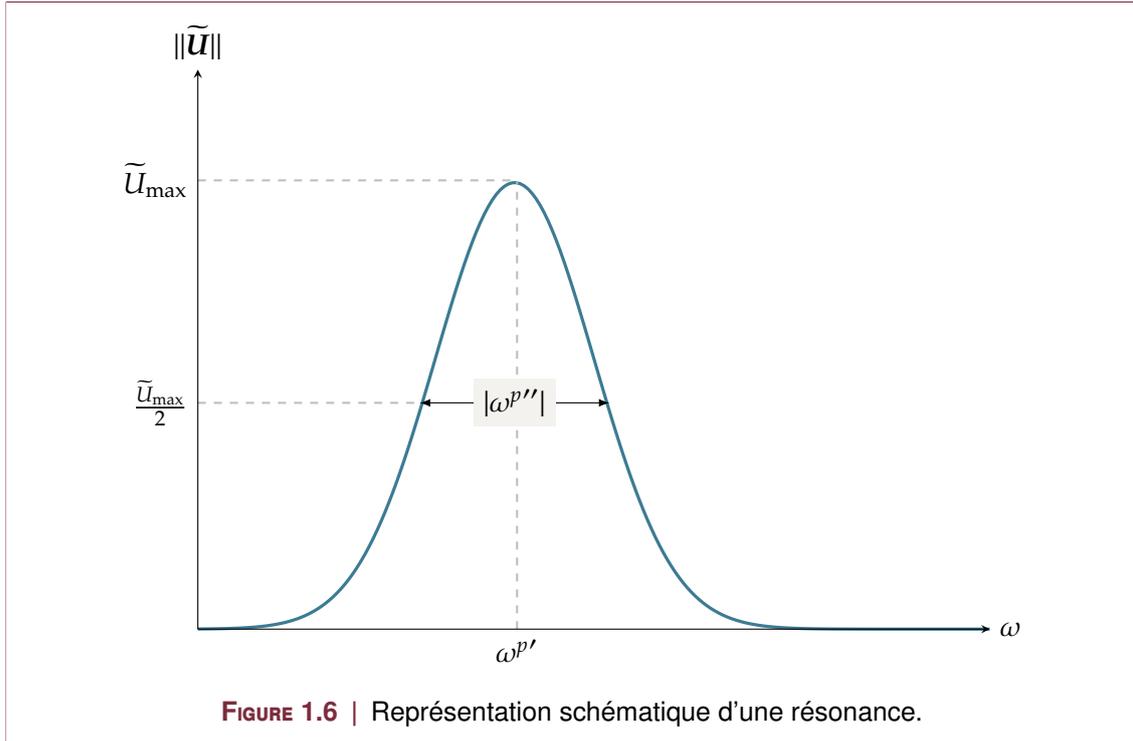
$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (1.2)$$

Cette convention impose la disposition des pulsations dans le plan complexe : on a $\omega^{p'} > 0$ et $\omega^{p''} < 0$. De manière analogue, la pulsation spatiale propre sera notée $\alpha^p = \alpha^{p'} + i\alpha^{p''}$. Considérons une grandeur physique (dans notre cas le champ électrique ou magnétique) représentée par un champ vectoriel $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ fonction des variables d'espace $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ et du temps t , et $\widetilde{\mathbf{U}}(\mathbf{r})$ son amplitude complexe. On peut alors écrire pour un mode propre $\mathbf{U}^p(\mathbf{r}, t)$, en régime harmonique de convention $e^{-i\omega t}$:

$$\mathbf{U}^p(\mathbf{r}, t) = \Re \left\{ \widetilde{\mathbf{U}}^p(\mathbf{r}) e^{-i\omega^p t} \right\} = \Re \left\{ \widetilde{\mathbf{U}}^p(\mathbf{r}) \right\} \cos(\omega^{p'} t + \phi) e^{\omega^{p''} t} \quad (1.3)$$

Ainsi voit-on que le mode propre, en suivant la flèche naturelle du temps (t croissant) est caractérisé par des oscillations amorties de fréquence $\omega^{p'}$ de constante de temps

2. en toute rigueur il faut étendre cette définition au sens des distributions.



$\tau^p = 2\pi/\omega^{p''}$ (le temps de vie d'un photon couplé avec ce mode). Supposons que le système à l'étude ne possède que ce mode propre, et considérons une onde incidente de fréquence réelle ω éclairant la structure. Le phénomène de résonance est alors caractérisé par une augmentation importante d'une grandeur caractéristique du système, par exemple la norme du champ vectoriel en question définie par $\|\tilde{\mathbf{U}}\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\mathbf{U}}^p(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$, se produisant autour de $\omega = \omega^{p'}$. Nous avons représenté une courbe de résonance typique sur la Figure 1.6. En faisant varier ω on obtiendra un maximum \tilde{U}_{\max} de $\|\tilde{\mathbf{U}}\|$ pour $\omega = \omega^{p'}$. La largeur du pic à mi-hauteur (à $\tilde{U}_{\max}/2$) est alors donnée par $\Delta\omega = |\omega^{p''}|$. La résonance sera plus prononcée si $|\omega^{p''}| \ll |\omega^{p'}|$, et quasiment inexistante si $|\omega^{p''}|$ est grand devant $|\omega^{p'}|$. On définit le facteur de qualité $Q = \frac{\omega^{p'}}{|\omega^{p''}|}$, qui rend compte du même phénomène : plus le facteur Q est grand, plus le pic est étroit.

Étudions à présent le comportement spatial d'un mode. Supposons que notre système résonant soit dans le vide, que l'on puisse écrire un mode à fuite sous la forme d'une onde plane et que, sans perte de généralité, le vecteur d'onde \mathbf{k} est porté par Oz . On peut alors écrire :

$$\tilde{\mathbf{U}}^p = \tilde{\mathbf{A}}^p e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \tilde{\mathbf{A}}^p \exp\left(i\frac{\omega^p}{c}z\right) = \tilde{\mathbf{A}}^p \exp\left(i\frac{\omega^{p'}}{c}z\right) \exp\left(-\frac{\omega^{p''}}{c}z\right). \quad (1.4)$$

On voit ainsi que, vu que $\omega^{p''} < 0$ le champ spatial associé au mode diverge exponentiellement quand $z \rightarrow +\infty$. Ce comportement va *a priori* à l'encontre du sens physique. Mais, étant donné que nous sommes en régime harmonique, cette croissance peut s'interpréter comme une accumulation de contributions venant des instants précédents.

Comme indiqué précédemment, les pulsations temporelles et spatiales sont complexes. En général, on fixe l'une réelle et on cherche l'autre complexe, mais les deux formulations ne sont pas complètement équivalentes [127, 53, 1]. Le choix dépend essentiellement du problème à traiter... Si l'on travaille à fréquence fixée, pour des problèmes de propagation dans les fibres optiques par exemple, on fixe ω réelle et on cherche la

constante de propagation complexe, ce qui traduit que l'onde décroît spatialement dans la direction de propagation. Dans notre cas, nous voulons des filtres spectraux et donc qui résonnent en fréquence, nous fixerons donc la pulsation spatiale α (ce qui revient, dans le cas de notre problème périodique, à fixer les conditions de Bloch sur les frontières latérales du domaine) et chercherons les pulsations propres complexes ω^p , ce qui implique, comme on l'a vu, une décroissance temporelle de l'amplitude de l'onde.

1.7.3 Comment calculer les modes à fuites ?

Il est connu depuis longtemps que les modes propres et fréquences propres, solutions d'un problème *homogène* (i. e. sans source), correspondent aux pôles de la matrice de diffraction ou matrice S (*scattering matrix* ou S -matrix en anglais), qui peut être vue comme une fonction de transfert reliant champs incident et diffracté (voir par exemple [96]). Dans le cas de structures périodiques, il est possible de relier les champs incident $\tilde{\mathbf{U}}^0$ et diffracté (champs transmis $\tilde{\mathbf{U}}^t$ et réfléchi $\tilde{\mathbf{U}}^r$) par les coefficients de Fresnel. Ainsi, le coefficient de réflexion en amplitude est défini par $r(\omega, \alpha) = \tilde{\mathbf{U}}^r / \tilde{\mathbf{U}}^0$ et le coefficient de transmission par $t(\omega, \alpha) = \tilde{\mathbf{U}}^t / \tilde{\mathbf{U}}^0$. Les modes propres étant des solutions non nulles des équations de Maxwell sans champ incident, on voit qu'ils correspondent aussi à des pôles des coefficients de réflexion et de transmission ([153]). Le calcul numérique de ces pôles est une tâche compliquée, et plusieurs approches ont été développées. Il s'agit tout d'abord de calculer la matrice S ou les coefficients de Fresnel. Cette étape peut être accomplie grâce à différentes méthodes numériques de calcul du champ diffracté passées en revue dans la partie 1.6.3. Il s'agit ensuite de calculer les pôles de cette matrice. Plusieurs approches ont été adoptées : calculer les pôles de son déterminant [13], les pôles de sa valeur propre maximale [42], ou bien encore d'autres techniques fondées sur la linéarisation de l'inverse de la matrice S [49]. En dépit de nombreuses techniques pour améliorer la convergence de ces méthodes, la dimension de la matrice S doit souvent être très élevée pour garantir une précision suffisante des résultats, ce qui peut rendre ces méthodes numériquement instables. Plus récemment, une nouvelle approche reposant sur une technique itérative a été proposée pour le calcul de ces pôles [12].

Une autre méthode permet de trouver un nombre arbitraire de pôles dans une région donnée du plan complexe [42, 153]. Elle est basée sur le calcul d'intégrales de Cauchy le long d'un chemin fermé dont les valeurs indiquent la présence, dans le domaine contenu à l'intérieur du chemin, d'un seul pôle et donnent sa valeur, la présence de plusieurs pôles ou bien l'absence de pôles. En subdivisant de manière itérative le domaine initial en quatre parties, on est capable d'encercler et de calculer chacun d'entre eux. Cette « chasse aux pôles » et a été baptisée *tétrachotomie* [103], par analogie avec la dichotomie pour des fonctions d'une variable réelle. Nous reprendrons à notre compte cette méthode dans la partie 3.1.2 pour calculer les pôles de multicouches et de réseaux de diffraction. La méthode des éléments finis a été déjà utilisée pour le calcul des modes à fuites dans différentes configurations [98, 35, 150]. Cependant, il est primordial pour approcher correctement les champs divergents associés à ces modes d'utiliser des conditions aux limites absorbantes adéquates. La solution ayant attiré le plus d'intérêt est l'emploi de couches parfaitement adaptées (*Perfectly Matched Layers*, PML [3]) qui amortissent les champs dans l'espace libre [104, 110, 5]. C'est cette option que nous choisissons dans notre travail. L'approche que nous adoptons consiste à résoudre un problème aux valeurs propres (équations de Maxwell homogènes). On se ramène à un problème numérique sur une cellule de taille finie en utilisant des PML pour simuler l'espace libre ainsi que des conditions aux limites de Bloch pour prendre en compte la quasi périodicité des champs solutions [140]. Une fois discrétisé par la méthode des éléments finis, on obtient un problème aux valeurs propres sous forme matricielle du type $A v = \lambda v$. Les progrès en

algèbre de matrices creuses associés à l'augmentation des capacités de calcul des ordinateurs font que ce type de problème peut être traité avec un coût numérique raisonnable. On obtient finalement un nombre arbitraire de valeurs propres autour d'un point ω^s fixé. Les développements et la mise en œuvre pratique de cette méthode seront détaillés au chapitre 3.

Conclusion partielle

Dans cette partie introductive, nous avons tout d'abord expliqué les principes de la détection du rayonnement infrarouge. Nous avons vu que de nouvelles fonctions de filtrage optique sont à développer pour mettre en œuvre des techniques d'imagerie multispectrale. Ces filtres peuvent être réalisés par des structures diffractives dont les motifs ont des tailles comparables à la longueur d'onde, ce qui leur confère des propriétés de résonance. Il est alors essentiel de résoudre les équations de Maxwell dans ce type de structure, pour appréhender correctement leurs propriétés électromagnétiques. Le développement de méthodes numériques fiables pour le calcul de la diffraction par ce genre de micro-résonateurs ouverts, ainsi que pour chercher leurs modes propres et fréquences propres, est indispensable. Le développement de ces outils est l'objet de la **Partie I**, constituée des chapitres 2 à 5.

Première partie

Théorie et développements numériques pour l'étude des réseaux de diffraction

Problème de diffraction par des réseaux mono-dimensionnels : formulation scalaire de la FEM

Sommaire

2.1	Diffraction	28
2.1.1	<i>Description du problème et notations</i>	28
2.1.2	<i>Découplage des champs et z-anisotropie</i>	30
2.1.3	<i>Problème radiatif équivalent</i>	30
2.1.4	<i>Couches Parfaitement Adaptées (PML)</i>	32
2.1.5	<i>Formulation faible</i>	34
2.1.6	<i>Maillage et éléments finis</i>	35
2.1.7	<i>Considérations énergétiques</i>	35
2.1.8	<i>Anomalies de Wood.</i>	37
2.2	PML adaptatives pour les anomalies de Wood	37
2.2.1	<i>Développements théoriques</i>	37
2.2.2	<i>Exemple numérique.</i>	40

La formulation de la FEM utilisée dans cette étude est celle développée lors d'une précédente thèse à l'institut Fresnel par Guillaume Demésy [24]. Elle permet le calcul du champ électromagnétique diffracté par des réseaux mono [22] ou bi-périodiques [23] de géométries arbitraires imbriqués dans un empilement multicouche, éclairés par une onde plane d'incidence et de polarisation quelconques [25, 21]. Nous exposons dans ce chapitre cette formulation adaptée à l'étude de la diffraction d'une onde plane par un réseau mono-périodique. Elle repose sur la levée des problèmes d'infini grâce à l'emploi de conditions de Bloch selon la direction de périodicité, à l'utilisation de PMLs pour tronquer les domaines semi-infinis ainsi qu'au traitement d'un problème de radiation équivalent dont les sources sont localisées dans l'obstacle diffractif. Cette étape 2D scalaire nous a paru être une étape indispensable pour appréhender l'étude 3D vectorielle de bi-réseaux. Nous en rappelons donc ici les différentes étapes.

Une contribution originale de cette étude est le développement de PMLs adaptatives pour traiter le cas d'ordres de diffraction rasants. Dans cette situation, connue sous le nom d'anomalie de Wood, la longueur d'onde apparente de l'ordre rasant devient très

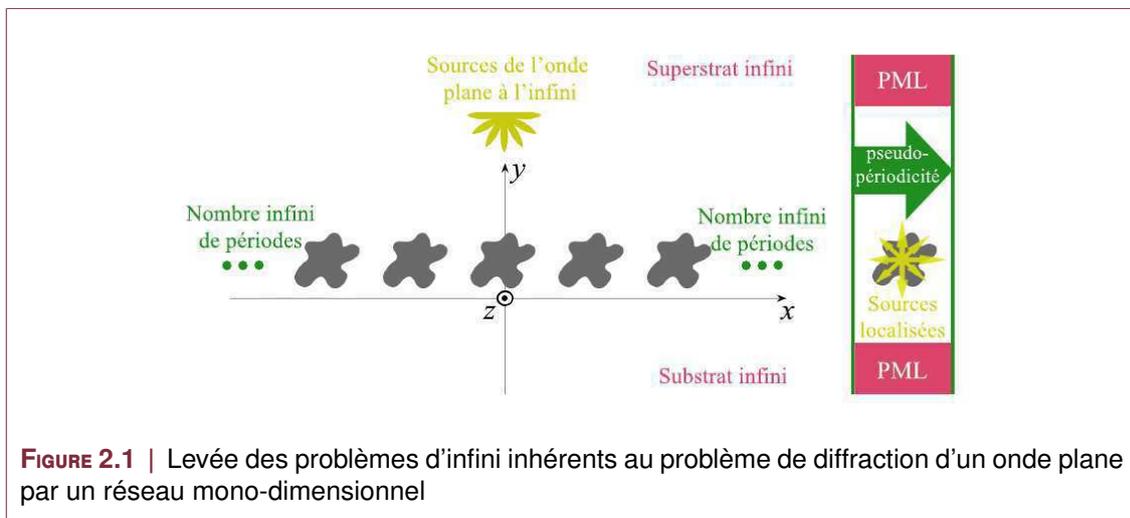
grande et les PMLs classiques à coefficients d'absorption constant deviennent inefficaces. De ce fait, le résultat numérique est pollué par la réflexion de l'onde en bout de PML. Les PMLs adaptatives développées dans ce chapitre permettent d'absorber efficacement cet ordre rasant (et tous les autres) grâce à une transformation géométrique *ad hoc*.

2.1 Diffraction

La résolution du problème de diffraction d'une onde plane par un réseau avec la FEM implique de résoudre les « problèmes d'infini » (cf. Figure 2.1) puisque cette dernière repose sur le maillage d'une cellule de dimensions finies.

- Selon Oz : c'est l'axe d'invariance du système.
- Selon Ox : un réseau mono-dimensionnel « idéal » présente un nombre infini de périodes. L'onde plane incidente étant elle-même pseudo-périodique¹, il est possible de borner la cellule de calcul en ne considérant qu'une seule période du réseau.
- Selon Oy : le substrat et le superstrat sont des domaines non bornés. Par une transformation géométrique complexe bien choisie, on peut « ramener » ces infinis à distance finie grâce à l'utilisation de couches parfaitement adaptées (*Perfectly Matched Layers* en anglais, PML) et donc de borner ces deux régions selon Oy .
- Selon Oy : les sources de l'onde plane incidente étant à l'infini, on doit les « rapprocher », en se ramenant à un problème radiatif où les sources sont contenues dans la cellule de calcul.

On se restreindra dans cette partie au cas mono-dimensionnel. Le lecteur pourra se reporter à [24] pour l'exposé détaillé de la méthode.



2.1.1 Description du problème et notations

On note x , y et z les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonal $Oxyz$, et le problème est considéré comme invariant selon Oz . Seul le régime harmonique sera ici abordé et les champs électriques et magnétiques seront par conséquent représentés par des vecteurs complexes notés E et H avec une dépendance temporelle choisie en $e^{-i\omega t}$, on note de plus $k_0 := \omega/c$. On suppose dans cette partie que les champs de tenseurs de permittivité relative ϵ et de perméabilité relative μ peuvent s'écrire comme il suit :

1. Une fonction u est quasi-périodique de période d et de coefficient de quasi-périodicité α selon x s'il existe $u_{\#}$ tel que $u(x, y) = u_{\#}(x, y)e^{i\alpha x}$ où $u_{\#}(x, y) = u_{\#}(x + d, y)$ est une fonction d -périodique.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \bar{\varepsilon}_a & 0 \\ \varepsilon_a & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \text{ et } \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \bar{\mu}_a & 0 \\ \mu_a & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

où les coefficients $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{aa}, \dots, \mu_{zz}$ sont des fonctions éventuellement complexes de x et y , et où $\bar{\varepsilon}_a$ (resp. $\bar{\mu}_a$) est le conjugué de ε_a (resp. μ_a). Ces matériaux sont dits z -anisotropes puisque dans les cas TE et TM, l'anisotropie n'est effective que selon x et y . De plus, ce formalisme permet l'étude de matériaux à pertes, les matériaux sans pertes étant associés à des tenseurs dont les termes diagonaux sont réels, représentés par des matrices hermitiennes.

Le type de structure d -périodique étudiée est décomposable en plusieurs sous-domaines (cf. Figure 2.2) :

- la *superstrat* ($y > y_0$) supposé homogène, isotrope et sans pertes, de permittivité diélectrique relative ε^+ et de perméabilité magnétique relative μ^+ . On note $k^+ := k_0 \sqrt{\varepsilon^+ \mu^+}$ le module du vecteur d'onde.
- l'*empilement multi-couches* ($y_0 < y < y_N$) constitué de N couches supposées homogènes et isotropes, caractérisées par leur permittivité diélectrique relative ε_n , leur perméabilité magnétique relative μ_n et leur épaisseur e_n . Les vecteurs d'onde associés à la couche n sont notés $k_n := k_0 \sqrt{\varepsilon_n \mu_n}$.
- la *région des sillons* ($y_{g-1} < y < y_g$) imbriquée dans la g^e couche (ε_g, μ_g). Elle peut être hétérogène et anisotrope et est donc décrite par deux champs de tenseurs $\varepsilon_g'(x, y)$ et $\mu_g'(x, y)$. La périodicité des sillons est notée d .
- la *substrat* ($y < y_N$) supposé homogène et isotrope, de permittivité diélectrique relative ε^- et de perméabilité magnétique relative μ^- . On note $k^- := k_0 \sqrt{\varepsilon^- \mu^-}$.

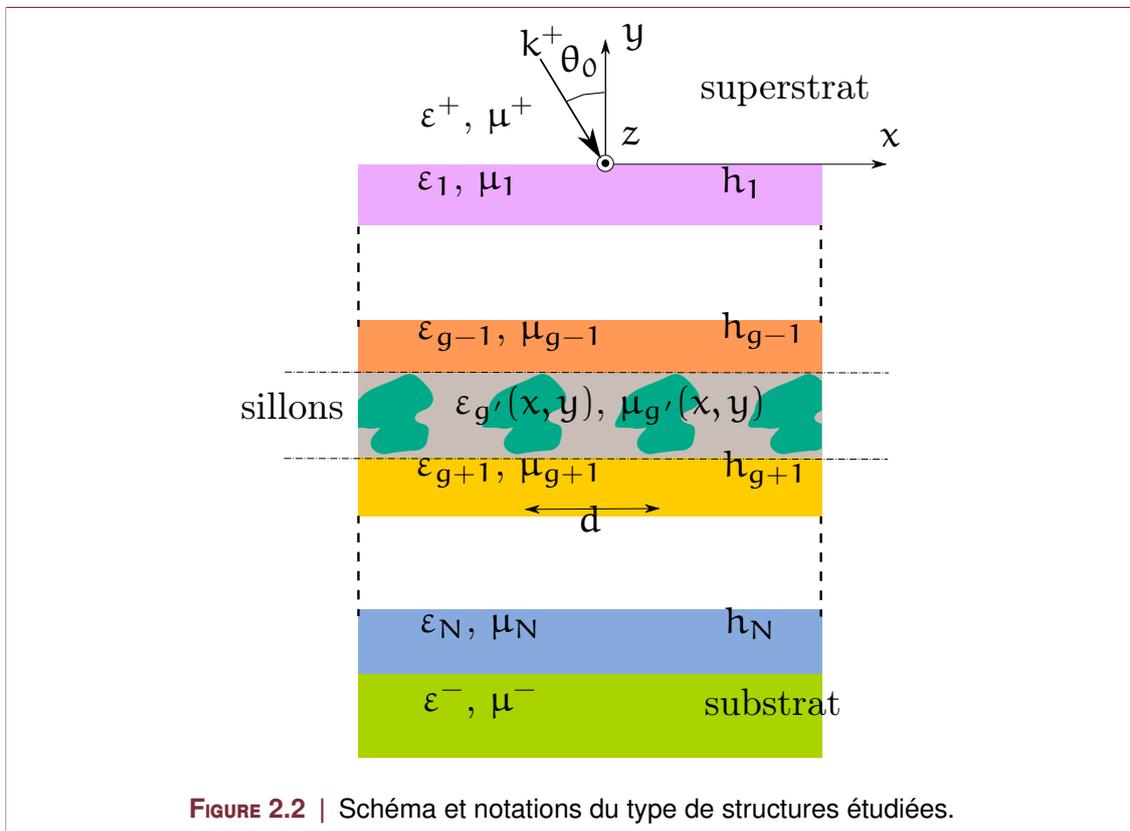


FIGURE 2.2 | Schéma et notations du type de structures étudiées.

Cette structure est éclairée par une onde plane de vecteur d'onde $\mathbf{k}^+ = \alpha x + \beta^+ \mathbf{y} = k^+(\sin \theta_0 x - \cos \theta_0 \mathbf{y})$ dont le champ électrique (Transverse Électrique, TE ou polarisation- s) (resp. champ magnétique (Transverse Magnétique, TM ou polarisation- p)) est polarisé linéairement selon l'axe des z :

$$\mathbf{E}_e^0 = A_e^0 e^{(ik^+ \cdot \mathbf{r})} \mathbf{z} \quad (\text{resp. } \mathbf{H}_m^0 = A_m^0 e^{(ik^+ \cdot \mathbf{r})} \mathbf{z}), \quad (2.2)$$

où A_e^0 (resp. A_m^0) est un nombre complexe quelconque. Le champ électromagnétique associé au champ incident est noté $(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)$ et vaut $(\mathbf{E}_e^0, \mathbf{H}_e^0)$ (resp. $(\mathbf{E}_m^0, \mathbf{H}_m^0)$). Le problème de diffraction à résoudre consiste à trouver l'unique couple (\mathbf{E}, \mathbf{H}) solution des équations de Maxwell en régime harmonique :

$$\mathbf{rot} \mathbf{E} = i\omega \mu_0 \mu \mathbf{H} \quad (2.3a)$$

$$\mathbf{rot} \mathbf{H} = -i\omega \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2.3b)$$

tel que le champ diffracté satisfait une Condition d'Onde Sortante (COS) et où \mathbf{E} et \mathbf{H} sont des fonctions quasi-périodiques selon x .

2.1.2 Découplage des champs et z -anisotropie

Pour des matériaux z -anisotropes, dans le cas non conique, le problème de diffraction peut être décomposé en deux cas fondamentaux TE et TM. Il faut donc rechercher un champ électrique (resp. magnétique) polarisé linéairement selon l'axe des z : $\mathbf{E} = e(x, y)z$ (resp. $\mathbf{H} = h(x, y)z$). En notant

$$\tilde{\delta} = \begin{pmatrix} \delta_{xx} & \bar{\delta}_a \\ \delta_a & \delta_{yy} \end{pmatrix}, \quad \text{pour } \delta = \{\varepsilon, \mu\}, \quad (2.4)$$

la matrice 2×2 extraite de δ , les fonctions e et h sont solution d'équations différentielles semblables, le problème de diffraction revient à trouver u tel que :

$$\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u) := \text{div}(\xi \mathbf{grad} u) + k_0^2 \chi u = 0 \quad (2.5)$$

avec

$$u = e, \quad \xi = \tilde{\mu}^T / \det(\tilde{\mu}), \quad \chi = \varepsilon_{zz} \quad (2.6)$$

dans le cas TE,

$$u = h, \quad \xi = \tilde{\varepsilon}^T / \det(\tilde{\varepsilon}), \quad \chi = \mu_{zz} \quad (2.7)$$

dans le cas TM.

2.1.3 Problème radiatif équivalent

Sous sa forme brute, le problème de diffraction associé à l'équation (2.5) n'est pas adapté à la FEM. Pour contourner cette difficulté, on décompose la fonction inconnue u en une somme de deux fonctions :

- u_1 correspondant au problème du simple empilement multicouche, donc supposée connue analytiquement,
- u_2^d solution d'un problème radiatif dont les sources sont localisées dans l'élément diffractif.

En notant ξ_1 et χ_1 le champ de tenseur et la fonction décrivant le cas de l'empilement multicouche, et u_0 la restriction de u_{inc} au superstrat, le problème peut s'écrire :

$$\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u) = 0 \quad \text{tel que } u^d := u - u_0 \quad \text{satisfait une COS.} \quad (2.8)$$

La fonction intermédiaire u_1 est alors définie comme l'unique solution de :

$$\mathcal{L}_{\xi_1, \chi_1}(u_1) = 0 \text{ tel que } u_1^d := u_1 - u_0 \text{ satisfait une COS.} \quad (2.9)$$

L'expression de cette fonction peut se trouver classiquement par un formalisme matriciel dont on ne donnera pas les développements ici. La fonction inconnue u_2^d est alors donnée par :

$$u_2^d = u - u_1 = u^d - u_1^d \quad (2.10)$$

qui, en tant que différence de deux champs diffractés, vérifie aussi une COS. Ainsi, le problème équivaut à résoudre :

$$\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_2^d) = -\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_1) \quad (2.11)$$

Le membre de droite peut être considéré comme un terme source connu $-\mathcal{S}_1 := -\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_1)$ dont le support est borné par l'élément diffractif. En effet, on a

$$\mathcal{S}_1 := \mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_1) = \mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_1) - \underbrace{\mathcal{L}_{\xi_1, \chi_1}(u_1)}_{=0} = \mathcal{L}_{\xi - \xi_1, \chi - \chi_1}(u_1) \quad (2.12)$$

et puisque ξ et ξ_1 d'une part, et χ et χ_1 d'autre part, sont égaux partout en dehors de l'objet diffractif, on voit bien que le support des sources est l'obstacle lui même.

Détaillons à présent l'expression de ce terme source. Des calculs classiques utilisés en couches minces (voir par exemple [107]) permettent d'exprimer u_1 sous la forme suivante pour $1 < n < N$:

$$u_1(x, y) = u_0(x, y) + \exp(i\alpha x) \begin{cases} r \exp(-i\beta^+ y) & \text{pour } y > 0 \\ v_n^c + v_n^p & \text{pour } y_n < y < y_{n-1} \\ t \exp(i\beta^+ y) & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad (2.13)$$

où

$$\begin{aligned} v_n^p &= u_n^p \exp(-i\beta_n(y - y_n)) \\ v_n^c &= u_n^c \exp(i\beta_n(y - y_n)) \end{aligned} \quad (2.14)$$

avec $\beta_n^2 = k_n^2 - \alpha^2$. Le formalisme de matrice de transfert permet d'obtenir les coefficients complexes u_n^p et u_n^c ainsi que les coefficients de transmission t et de réflexion r de l'empilement. Les exposants p et c indiquent la nature propagative ou contra-propagative des ondes planes v_n^p et v_n^c .

Au vu de l'expression de u_1 dans la région des sillons (indiquée g) et de la linéarité de l'opérateur $\mathcal{L}_{\xi, \chi}$, le terme source peut être décomposé en deux contributions :

$$\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_1^p + \mathcal{S}_1^c \quad (2.15)$$

où

$$\mathcal{S}_1^p = \mathcal{L}_{\xi - \xi_1, \chi - \chi_1}(v_g^p) \quad (2.16)$$

et

$$\mathcal{S}_1^c = \mathcal{L}_{\xi - \xi_1, \chi - \chi_1}(v_g^c) \quad (2.17)$$

En détaillant ces termes sous une forme plus explicite on obtient :

$$\mathcal{S}_1^p = u_g^p \left\{ i \operatorname{div} \left[(\xi^{g'} - \xi^g) k^{g,p} \exp(ik^{g,p} \cdot \mathbf{r}) \right] + k_0^2 (\chi^{g'} - \chi^g) \exp(ik^{g,p} \cdot \mathbf{r}) \right\} \quad (2.18)$$

et

$$\mathcal{S}_1^c = u_g^c \left\{ i \operatorname{div} \left[(\xi^{g'} - \xi^g) \mathbf{k}^{g,c} \exp(ik^{g,c} \cdot \mathbf{r}) \right] + k_0^2 (\chi^{g'} - \chi^g) \exp(ik^{g,c} \cdot \mathbf{r}) \right\} \quad (2.19)$$

où $\mathbf{k}^{g,p}$ (resp. $\mathbf{k}^{g,c}$) est le vecteur d'onde associé à l'onde propagative (resp. contra-propagative) qui se propage dans la couche g comme définie par les équations (2.13) et (2.14).

Ce problème radiatif équivalent donne alors tout son sens à l'utilisation des PML pour borner le substrat et le superstrat : leur rôle est de capter le champ rayonné par les sources depuis l'objet diffractif vers les milieux semi-infinis. En absorbant parfaitement les sources (sans aucune réflexion à l'interface milieu tronqué/PML), elles laissent invariant le champ dans la région que nous désignons par *zone d'intérêt* ($Y_*^- < y < Y_*^+$, cf. Figure 2.3), enserrée entre les PML du bas et du haut.

2.1.4 Couches Parfaitement Adaptées (PML)

L'emploi de la FEM dans l'étude des réseaux se heurte au fait que les ordres transmis et réfléchis ne s'atténuent pas dans les cas de matériaux sans pertes. Les PML ont été introduites par Bérenger [3] dans le cadre de la résolution des équations de Maxwell pour s'affranchir de ce problème. Depuis, cette technique est devenue très populaire pour la simulation numérique de la propagation d'ondes dans des structures ouvertes par des méthodes basées sur une cellule de calcul de taille finie comme la FEM ou la FDTD. L'Optique de Transformation a récemment unifié différentes techniques telles que le traitement de problèmes ouverts qui nous intéressent ici, de géométries hélicoïdales ou encore le *design* de capes d'invisibilité [97]. Ces problèmes *a priori* différents partagent le même concept de transformation géométrique, se traduisant par des propriétés matérielles équivalentes [73, 72, 100]. Une règle simple et pratique peut être énoncée [153] : quand on change de système de coordonnées, il suffit de remplacer les propriétés matérielles initiales par ε et μ par des propriétés matérielles équivalentes ε_s et μ_s données par :

$$\delta_s = J_s^{-1} \delta J_s^{-T} \det(J_s) \text{ pour } \delta = \{\varepsilon, \mu\} \quad (2.20)$$

où J_s est appelée matrice jacobienne étirée constituée des dérivées partielles des nouvelles coordonnées par rapport aux anciennes, et J_s^{-T} est la transposée de son inverse.

Dans ce cadre, la façon la plus naturelle de définir les PMLs est de les considérer comme une application sur un espace complexe \mathbb{C}^3 . Les différents systèmes de coordonnées utilisés sont détaillés ci-dessous.

- (x, y, z) sont les coordonnées cartésiennes initiales.
- (x_s, y_s, z_s) sont les coordonnées complexes étirées. Un sous-espace adéquat $\Gamma \subset \mathbb{C}^3$ est choisi (avec trois dimensions réelles) tel que (x_s, y_s, z_s) sont les coordonnées à valeurs complexes d'un point sur Γ (par exemple $x = \Re(x_s)$, $y = \Re(y_s)$, $z = \Re(z_s)$).
- (x_c, y_c, z_c) sont trois coordonnées réelles correspondant à une paramétrisation réelle de $\Gamma \subset \mathbb{C}^3$.

On présente ici le choix des PML utilisées dans notre méthode, pour tronquer un substrat et un superstrat isotropes avec des PML rectangulaires (dites aussi cartésiennes). Dans notre cas, le changement de coordonnées affecte seulement la variable y , la matrice Jacobienne est donnée par $J_s = \operatorname{diag}(1, s_y(y), 1)$, où $s_y(y)$ est une fonction à valeurs complexes telle que :

$$y_s(y) = \int_0^y s_y(y') dy'. \quad (2.21)$$

On obtient donc l'expression des tenseurs de permittivité et perméabilité équivalents :

$$\delta_s = \begin{pmatrix} s_y \delta_{xx} & \bar{\delta}_a & 0 \\ \delta_a & s_y^{-1} \delta_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \delta_{zz} \end{pmatrix}, \quad \text{pour } \delta = \{\varepsilon, \mu\}. \quad (2.22)$$

Remarquons que le milieu équivalent et le milieu initial ont la même impédance, ce qui garantit le fait que la PML est parfaitement adaptée, c'est à dire sans aucune réflexion à l'interface avec le milieu tronqué.

Nous pouvons à présent introduire le champ substitué $F_s = (E_s, H_s)$, solution de (2.3) avec $\xi = \xi_s$ et $\chi = \chi_s$, qui est égal au champ F dans la région $Y_*^- < y < Y_*^+$, pourvu que $s_y(y) = 1$ dans cette région (cf. Figure 2.3). Dans les PML, on peut montrer que si l'on choisit s_y tel que $\Im m(s_y) > 0$, le champ F_s converge exponentiellement vers 0 quand $y \rightarrow \pm\infty$, contrairement à la solution mathématique F . Le champ F_s est alors d'énergie finie, ce qui est une condition nécessaire pour pouvoir lui associer une formulation faible dans le cadre de la FEM. Par le changement de coordonnées complexe, les ondes planes propagatives dans l'espace libre (substrat ou superstrat) deviennent donc évanescentes dans la PML.

Dans notre étude, on utilisera la fonction d'étirement suivante :

$$s_y(y) = \begin{cases} \zeta^- & \text{si } y < Y_*^- \\ 1 & \text{si } Y_*^- < y < Y_*^+ \\ \zeta^+ & \text{si } y > Y_*^+ \end{cases} \quad (2.23)$$

Dans ce cas, la fonction à valeurs complexes $y(y_c)$ définie par l'Équation 2.21 est donnée explicitement par :

$$y(y_c) = \begin{cases} Y_*^- + \zeta^-(y_c - Y_*^-) & \text{si } y_c < Y_*^- \\ y_c & \text{si } Y_*^- < y_c < Y_*^+ \\ Y_*^+ + \zeta^+(y_c - Y_*^+) & \text{si } y_c > Y_*^+ \end{cases}, \quad (2.24)$$

Considérons un ordre de diffraction se propageant dans le substrat². Son expression dans le système de coordonnées étiré est :

$$u_{n,s}^-(y_c) = u_n^-(y(y_c)) = t_n e^{-i\beta_n^-[Y_*^- + \zeta^-(y_c - Y_*^-)]}.$$

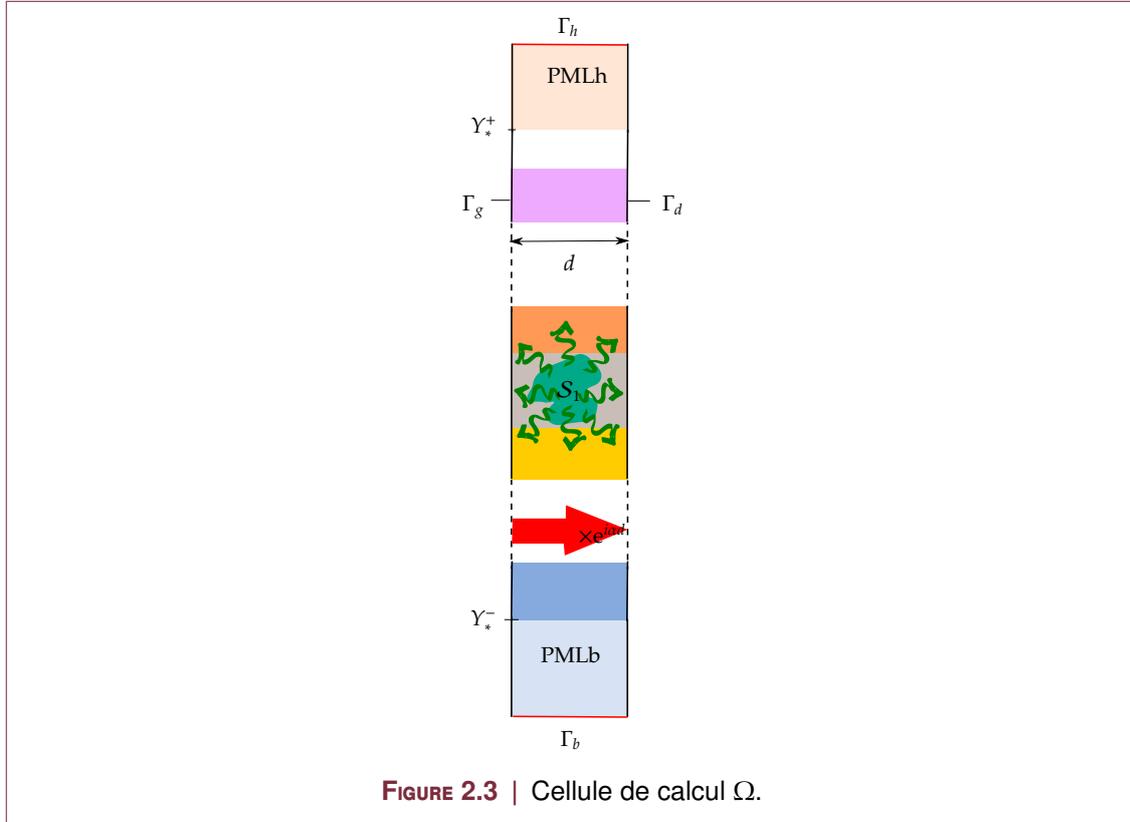
La partie non oscillante de cette fonction est :

$$U_n^-(y) = t_n \exp\left(\left(\beta_n'^- \zeta''^- + \beta_n''^- \zeta'^-\right) y_c\right),$$

où $\beta_n^- = \beta_n'^- + i\beta_n''^-$. Pour un ordre propagatif, nous avons $\beta_n'^- > 0$ et $\beta_n''^- = 0$, tandis que pour un ordre évanescent $\beta_n'^- = 0$ et $\beta_n''^- > 0$. Il suffit alors de prendre ζ^- et ζ^+ dans $\mathbb{C}^+ = \{z \in \mathbb{C}, \Re(z) > 0 \text{ et } \Im(z) > 0\}$ pour assurer la décroissance exponentielle vers 0 de la solution dans une PML infinie. Dans toute la suite (sauf indication contraire), on prendra $\zeta^\pm = \zeta^- = a + ib$, avec $a = b = 1$. La décroissance exponentielle du champ nous autorise à la tronquer sagement la PML à distance finie, à condition que cette distance soit suffisante pour que l'ordre en question ait suffisamment décré. On peut prendre comme référence l'épaisseur de peau de l'ordre de diffraction n dans le milieu PML

2. des conclusions analogues sont valables pour le superstrat

donnée par $l_n^- = (\beta_n'^- \zeta''^- + \beta_n''^- \zeta'^-)^{-1}$. Il suffit alors de tronquer à une distance supérieure à la valeur maximale des l_n parmi tous les ordres propagatifs. On notera \hat{h}^+ (resp. \hat{h}^-) l'épaisseur de la PML associée au superstrat (resp. substrat). La cellule élémentaire de calcul est donc $\Omega = [-d/2; d/2] \times [Y^-; Y^+]$, avec $Y^- = Y_*^- - \hat{h}^-$ et $Y^+ = Y_*^+ + \hat{h}^+$.



2.1.5 Formulation faible

La formulation faible (ou variationnelle) associée à notre problème est construite en multipliant l'équation (2.5) par la conjuguée d'une fonction test u' et intégrée par partie :

$$\mathcal{R}_{\xi, \chi}(u, u') := - \int_{\Omega} (\xi \mathbf{grad} u) \mathbf{grad} \bar{u}' + k_0^2 \chi u \bar{u}' \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \bar{u}' (\xi \mathbf{grad} u) \mathbf{n} \, dS \quad (2.25)$$

Soit $D(\Omega, d, \alpha)$ l'ensemble des fonctions quasi-périodiques de période d , de coefficient de quasi-périodicité α et d'énergie finie dans Ω .

Le problème revient donc à trouver $u \in L^2(\mathbf{grad}, d, \alpha)$ tel que :

$$\mathcal{R}_{\xi, \chi}(u, u') = 0, \quad \forall u' \in D(\Omega, d, \alpha). \quad (2.26)$$

L'existence et l'unicité d'une solution est garantie par le théorème de Lax-Milgram [54] (selon les signes de ε et μ , point non abordé ici).

Le terme de bord introduit par l'intégration par parties est nul si on impose sur les frontières une des conditions aux limites suivantes :

- imposer u directement sur les frontières concernées de $\partial\Omega$ (conditions de Dirichlet) : la fonction de poids peut être choisie nulle sur ces frontières (frontières intérieures)
- imposer $(\xi \mathbf{grad} u) \mathbf{n} = 0$ (conditions de Neumann homogènes). La fonction u est alors une inconnue à déterminer sur les frontières concernées (Γ_h et Γ_b sur la Figure 2.3).

- imposer des conditions de Bloch (Γ_g et Γ_d sur la **Figure 2.3**). La quasi-périodicité et le sens des normales sur Γ_g et Γ_d assurent la nullité du terme de bord. En pratique, on considère u inconnue sur Γ_g , et la valeur de u en un point de Γ_d est imposée égale à la valeur du point lui correspondant sur Γ_g multipliée par le déphasage $e^{i\alpha d}$.

2.1.6 Maillage et éléments finis

La méthode des éléments finis est basée sur cette formulation faible. la solution recherchée u_2^d est projetée sur une base composée de fonctions $w_i \in L^2(\Omega, \text{div}, d, \alpha)$ associées au maillage. Ainsi, la fonction $u_2^{d,I}$ définie par :

$$u_2^{d,I}(x, y) = \sum_{i \in I} z_i w_i(x, y) \quad (2.27)$$

est une approximation de u_2^d où I est un ensemble d'entiers définis à partir du maillage de Ω . Les z_i sont des scalaires à déterminer tandis que les w_i sont les fonctions de base du maillage, qui vérifient :

- à chaque nœud noté M_i est associée une fonction w_i .
- $|w_i| = 1$ au nœud M_i et $w_i = 0$ sur tous les autres nœuds
- w_i décroît linéairement de M_i aux nœuds voisins
- w_i est continue et à support borné

Les éléments w_i sont appelés éléments de Lagrange d'ordre 1. Les éléments d'ordre 2 sont construits de la même manière mais l'interpolation entre nœuds du maillage est réalisée par des polynômes d'ordre 2. Ce sont ces éléments qui sont utilisés dans les simulations qui suivent. En introduisant la décomposition (2.27) dans (2.26), on obtient le système algébrique final. Le nombre N_{DDL} de scalaires z_i à déterminer est appelé nombre de Degrés De Liberté (DDL) du système, et correspond au rang de la matrice finale, qui est très creuse puisque les fonctions de base du maillage sont nulles partout sauf au nœud auquel elles sont associées. Dans les simulations numériques qui suivent nous utilisons un solveur direct (PARDISO [120]).

2.1.7 Considérations énergétiques

Le résultat immédiatement accessible, après calcul, est la carte du champ électromagnétique diffracté u^d , dans la zone d'intérêt. Si l'on veut avoir accès aux efficacités associées aux champs propagatifs, voici comment on peut s'y prendre. D'une part, u_d est quasi-périodique selon Ox , et est donc décomposable en série de Rayleigh :

$$\text{pour } y < y_N \text{ et } y > 0, \quad u^d(x, y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n^d(y) e^{i\alpha_n x}, \quad (2.28)$$

où

$$u_n^d(y) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} u^d(x, y) e^{-i\alpha_n x} dx, \quad \text{avec } \alpha_n = \alpha + \frac{2\pi}{d} n. \quad (2.29)$$

D'autre part en injectant (2.28) dans l'équation de Helmholtz on obtient, en notant $\beta_n^{\pm 2} = k^{\pm 2} - \alpha_n^{\pm 2}$:

$$u_n^d(y) = \begin{cases} s_n e^{-i\beta_n^+ y} + r_n e^{i\beta_n^+ y} & \text{pour } y > 0, \\ u_n e^{i\beta_n^- y} + t_n e^{-i\beta_n^- y} & \text{pour } y < y_N. \end{cases} \quad (2.30)$$

Avec une convention de dépendance temporelle en $e^{-i\omega t}$, les COS imposent $s_n = u_n = 0$, et on obtient à une altitude y_c fixée :

$$\begin{cases} r_n = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} u^d(x, y_c) e^{-i(\alpha_n x + \beta_n^+ y_c)} dx & \text{pour } y_c > 0 \\ t_n = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} u^d(x, y_c) e^{-i(\alpha_n x - \beta_n^- y_c)} dx & \text{pour } y_c < y_N \end{cases} \quad (2.31)$$

On en déduit immédiatement les efficacités de diffraction des ordres propagatifs transmis et réfléchis (R_n et T_n) :

$$\begin{cases} R_n := r_n \frac{\beta_n^-}{\beta_n^+} & \text{pour } y_c > 0 \\ T_n := t_n \frac{\beta_n^-}{\beta_n^+} \frac{\gamma^+}{\gamma^-} & \text{pour } y_c < y_N \end{cases} \quad \text{avec } \gamma^\pm = \begin{cases} \mu^\pm & \text{dans le cas TE} \\ \varepsilon^\pm & \text{dans le cas TM} \end{cases} \quad (2.32)$$

Le résultat théorique ne dépend évidemment pas de « l'altitude » y_c . En pratique, les efficacités sont calculées numériquement par intégration avec la méthode des trapèzes pour un nombre N_{int} d'altitudes dans le substrat et le superstrat. Dans la suite on présentera une moyenne de ces valeurs pour $N_{\text{int}} = 20$.

Reste à calculer les pertes par effet Joule. La puissance incidente est donnée par la partie réelle du flux du vecteur de Poynting complexe $\Pi^0 = \frac{1}{2} \mathbf{E}^0 \times \overline{\mathbf{H}^0}$ à travers la surface $\Sigma_0 := \{y = Y_*^+\}$:

$$P^0 = \int_{\Sigma_0} \Pi^0 \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.33)$$

où \mathbf{n} est la normale sortante à Σ_0 . En notant $\nu = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu^+}{\varepsilon_0 \varepsilon^+}}$, il vient :

$$P^{0'} = \Re(P^0) = -\frac{1}{2} \eta d \cos \theta_0, \quad \text{avec } \eta = \begin{cases} |A_e^0|^2 \nu^{-1} & \text{dans le cas TE,} \\ |A_m^0|^2 \nu & \text{dans le cas TM.} \end{cases} \quad (2.34)$$

La puissance dissipée dans les domaines à pertes Ω_p en régime harmonique, en l'absence de courant, se calcule en intégrant la densité d'énergie électromagnétique W_{em} :

$$P^d = \int_{\Omega_p} W_{\text{em}} dS = i \frac{\omega}{2} \int_{\Omega_p} (\mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{D}} + \mathbf{B} \cdot \overline{\mathbf{H}}) dS \quad (2.35)$$

En supposant que les milieux à pertes sont homogènes, isotropes, non magnétiques, de permittivité relative $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$, on obtient :

$$P^{d'} = \Re(P^d) = \frac{\omega}{2} \varepsilon_0 \int_{\Omega_p} \varepsilon'' |\mathbf{E}|^2 dS \quad (2.36)$$

Les pertes par effet Joule sont alors données par le rapport des deux quantités calculées précédemment :

$$P = \frac{P^{d'}}{P^{0'}}. \quad (2.37)$$

Enfin, nous nous intéressons au bilan d'énergie global entre les différents ordres transmis et réfléchis et les pertes, ce qui constitue une vérification de nos calculs :

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} R_n + \sum_{n \in \mathbb{Z}} T_n + P = R + T + P = 1. \quad (2.38)$$

2.1.8 Anomalies de Wood

Dans un réseau de diffraction, la structuration périodique selon Ox impose une quantification des vecteurs d'onde :

$$\alpha_n = \alpha + \frac{2\pi}{d}n \quad (2.39)$$

La constante de propagation selon y de l'ordre diffracté n s'exprime alors comme suit :

$$\beta_n^{\pm 2} = k^{\pm 2} - \alpha_n^2 \quad (2.40)$$

L'anomalie de Wood [145, 112] se trouve au voisinage d'une longueur d'onde ou d'une incidence pour laquelle il existe un n_0 tel que $\beta_{n_0}^{\pm} = 0$. Ainsi pour $\alpha_{n_0} \geq k^{\pm}$, $\beta_{n_0}^{\pm}$ est nul ou imaginaire pur. En d'autres termes, l'ordre n'est plus propagatif, il devient évanescent. La condition de disparition de l'ordre n_0 transmis (exposant $-$) ou réfléchi (exposant $+$) est donc :

$$\lambda = \frac{d}{n_0}(\sqrt{\varepsilon^{\pm}} - \sin(\theta_0)) \quad (2.41)$$

Il apparaît alors qu'au voisinage d'une anomalie de Wood, l'angle de diffraction de l'ordre considéré devient rasant. L'efficacité des PMLs classiques présentées en 2.1.4 n'est alors plus assurée pour ces ordres là. La raison en est que la longueur d'onde apparente $\lambda/\cos\theta_n$ devient dans ce cas très grande puisque $\theta_n \simeq \pi/2$. En considérant la PML adaptée au substrat (des conclusions similaires peuvent être faites pour la PML du haut), pour une épaisseur de cette PML fixée \hat{h}^- , si l'absorption $\zeta''^- = \Im(\zeta^-)$ est trop faible, l'atténuation dans la PML est insuffisante et l'onde est réfléchi sur la frontière extérieure, perturbant ainsi le calcul. Pour compenser ceci, on pourrait augmenter la valeur de ζ''^- , mais ceci donne lieu à des réflexions numériques parasites dues à un amortissement trop élevé. Il apparaît alors nécessaire de développer une PML adaptée à ces cas pathologiques, ce qui fait l'objet de la partie suivante.

2.2 PML adaptatives pour les anomalies de Wood

Pour surmonter les problèmes exposés dans la partie 2.1.8, nous proposons un changement de coordonnées complexe capable de s'affranchir des problèmes numériques liés aux anomalies de Wood. Le développement est mené pour la PML adaptée au substrat, et peut être étendu sans difficulté à la PML adaptée au superstrat. L'idée principale derrière cette PML adaptée (*Adaptive Perfectly Matched Layer*, APML) est de traiter les différents ordres de diffraction au fur et à mesure que l'on progresse dans le milieu absorbant [134].

2.2.1 Développements théoriques

Considérons un changement de coordonnées réel $y_d(y)$, le changement final complexe sera donné par $y_c(y) = \zeta^- y_d(y)$, où le nombre complexe ζ^- , avec $\zeta'^{-} > 0$ et $\zeta''^{-} > 0$, prend en compte l'amortissement du milieu PML.

Nous commençons par transformer l'Équation 2.40, $n \mapsto \beta_n^-$ une fonction d'argument entier en une fonction d'argument réel interpolée continument entre les valeurs entières imposées. En effet, la transformation géométrique associée à la PML doit être continue et dérivable pour pouvoir calculer le Jacobien. Pour y parvenir nous choisissons le paramétrage :

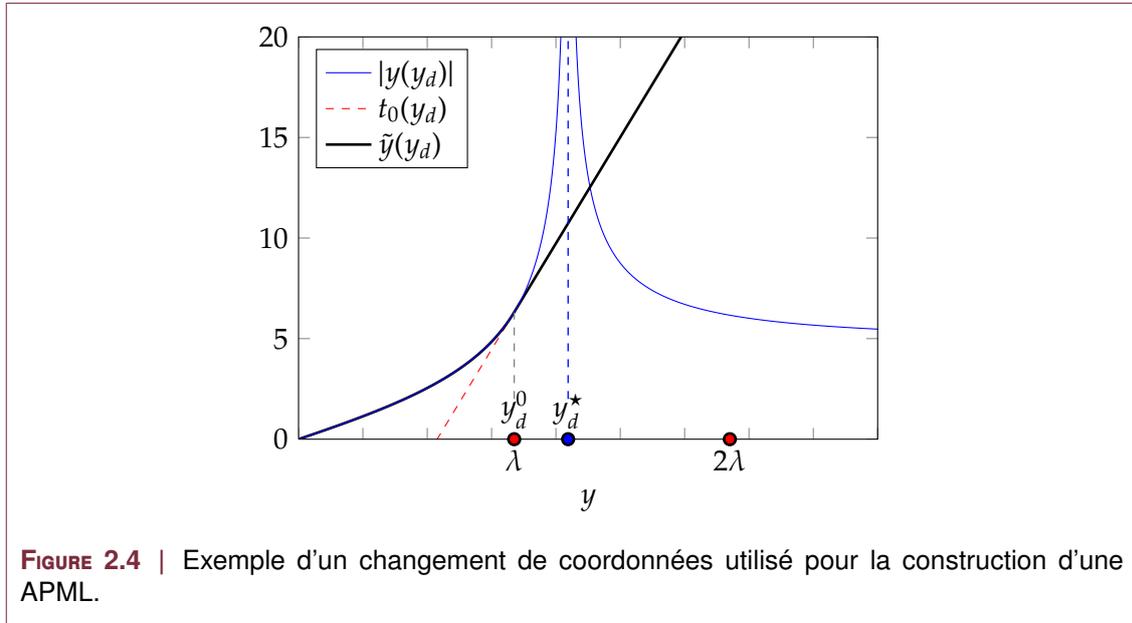
$$\alpha(y_d) = \alpha + \frac{2\pi}{d} \frac{y_d}{\lambda}, \quad (2.42)$$

tel que l'application β^- définie par $\beta^-(y_d)^2 = k_0^2 \varepsilon^- - \alpha(y_d)^2$ soit continue. La constante de propagation du n^e ordre transmis est donnée par $\beta_n^- = \beta^-(n\lambda)$. L'idée centrale de la méthode est de combiner un étirement complexe avec une contraction réelle non uniforme (donnée par la fonction continue $y(y_d)$, Équation 2.44). Cette contraction est choisie telle que pour un ordre n il existe une profondeur y_d^n telle que au voisinage de cette profondeur, la longueur d'onde apparente correspondant à l'ordre en jeu est contractée à une valeur proche de λ . À cet endroit de la PML, cet ordre est parfaitement absorbé grâce à l'étirement complexe. Nous éliminons donc d'abord les ordres diffractés avec un angle quasi normal aux profondeurs les plus faibles jusqu'aux ordres rasants (proche des anomalies de Wood) qui sont absorbés à des profondeurs plus importantes. La traduction en termes mathématiques des considérations précédentes peut être exprimée de la sorte :

$$\exp[-i\beta^-(y_d)y(y_d)] = \exp(-ik_0 y_d). \quad (2.43)$$

La contraction $y(y_d)$ est donc :

$$y(y_d) = \frac{k_0 y_d}{\beta^-(y_d)} = \frac{y_d}{\sqrt{\varepsilon^- - (\sin \theta_0 + y_d/d)^2}}. \quad (2.44)$$



La fonction $y(y_d)$ a deux pôles notés $y_{d,\pm}^* = d(\pm \sqrt{\varepsilon^- - \sin^2 \theta_0})$. Quand $y_{d,\pm}^* = \pm n\lambda$ avec $n \in \mathbb{N}^*$, $\beta^-(y_{d,\pm}^*) = \beta^-(\pm n\lambda) = \beta_{\pm}^- = 0$, i.e. on se trouve sur l'anomalie de Wood associée à l'apparition/disparition du $\pm n^e$ ordre diffracté. Nous recherchons maintenant le point le plus proche de $y_{d,\pm}^*$ associé à une anomalie. En notant

$$\begin{cases} n_+^* / D_+ = \min_{n_+^* \in \mathbb{N}^*} |y_{d,+}^* - n_+^* \lambda| \\ n_-^* / D_- = \min_{n_-^* \in \mathbb{N}^*} |y_{d,-}^* + n_-^* \lambda|, \end{cases}$$

on cherche dans un second temps $y_d^0 = n^* \lambda$ tel que :

$$n^* / D = \min_{n^* \in \{n_+^*, n_-^*\}} (D^+, D^-). \quad (2.45)$$

Pour éviter le comportement singulier en $y_d = y_{d,\pm}^*$, nous continuons la fonction $y_d(y)$ par sa droite tangente en y_d^0 , dont l'équation est $t_0(y_d) = s(y_d^0)(y_d - y_d^0) + y(y_d^0)$, où $s(y_d) = \frac{\partial y}{\partial y_d}(y_d)$ est le coefficient d'étirement. Le changement de coordonnées final est donné par :

$$\tilde{y}(y_d) = \begin{cases} y(y_d) & \text{pour } y_d \leq y_d^0 \\ t_0(y_d) & \text{pour } y_d > y_d^0. \end{cases} \quad (2.46)$$

La figure 2.4 illustre un exemple de ce changement de coordonnées. Enfin, l'étirement complexe s_y utilisé dans l'Équation 2.22 est donné par :

$$s_y(y_d) = \zeta^- \frac{\partial \tilde{y}}{\partial y_d}(y_d). \quad (2.47)$$

Équipés de cette formulation mathématique nous sommes capables de concevoir une PML qui est doublement parfaitement adaptée :

- à un milieu donné, ce qui est l'essence même de la méthode des PML, à travers l'Équation 2.20,
- à tous les ordres de diffraction à travers le coefficient s_y , qui dépend des caractéristiques de l'onde incidente et des paramètres opto-géométriques du réseau.

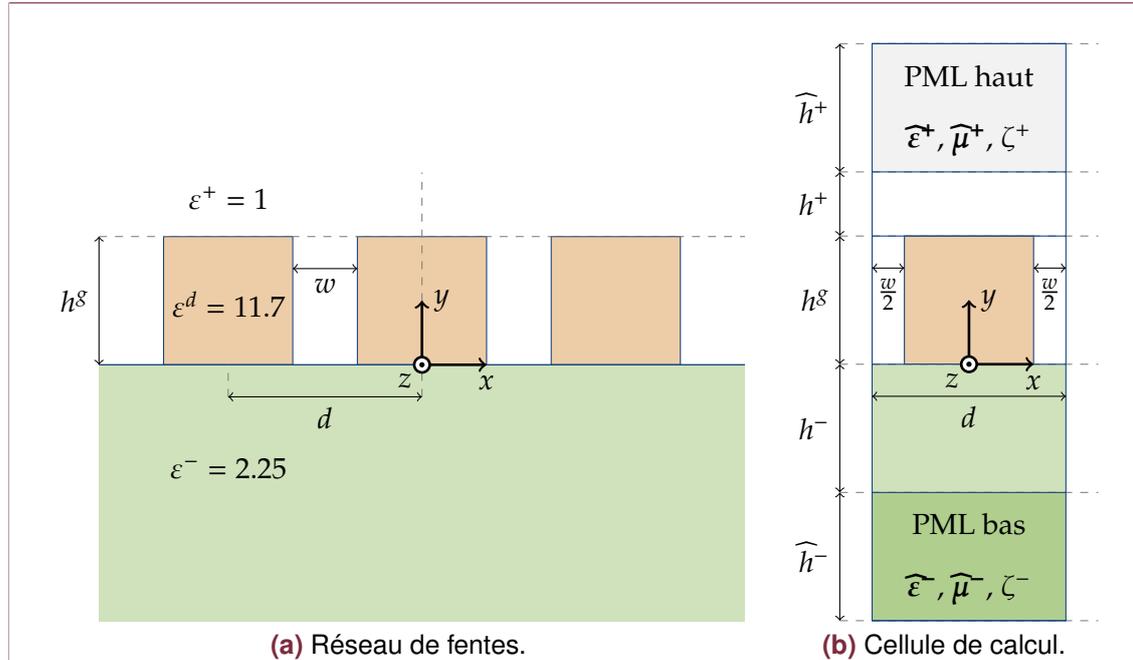


FIGURE 2.5 | Configuration du problème du réseau de fentes étudié. **Figure 3.1a** : réseau de fentes de largeur $w = 1 \mu\text{m}$ et de hauteur $h^s = 1.5 \mu\text{m}$ gravées dans un matériau de permittivité $\varepsilon^s = 11.7$ déposé sur un substrat de permittivité $\varepsilon^- = 2.25$ éclairé par une onde plane de polarisation TM, d'incidence $\theta_0 = 10^\circ$ et de longueur d'onde proche d'une anomalie de Wood associée à l'ordre +1 transmis, $\lambda = 0.999 y_{d,+}^*$. Le superstrat est l'air ($\varepsilon^+ = 1$) et la période du réseau est $d = 4 \mu\text{m}$ **Figure 3.1b** : cellule de calcul et paramètres en jeu pour la résolution du problème de diffraction. Les PML du haut (+) et du bas (-) ont pour coefficient d'étirement $\zeta^\pm = 1 + i$ et pour hauteur $\widehat{h}^\pm = 1.1 y_{d,+}^*$. On applique des conditions de quasi-périodicité sur les frontières latérales et des conditions de Neumann ou de Dirichlet homogènes sur les frontières extérieures des PML. La taille maximale d'un élément de maillage est $\lambda^{\text{mesh}} / (N_m \sqrt{\varepsilon})$, où $\lambda^{\text{mesh}} = 11 \mu\text{m}$ et $N_m = 10$.

2.2.2 Exemple numérique

Nous appliquons maintenant la méthode développée précédemment pour construire une APML pour le substrat, sur un exemple numérique. Il s'agit d'un réseau de fentes (cf. Figure 2.5) de largeur $w = 1 \mu\text{m}$ et de hauteur $h^s = 1.5 \mu\text{m}$ gravées dans du silicium ($\varepsilon^s = 11.7$), déposé sur un substrat de permittivité $\varepsilon^- = 2.25$. Le réseau de période $d = 4 \mu\text{m}$ est éclairé par une onde plane de polarisation TM, d'incidence $\theta_0 = 10^\circ$ et de longueur d'onde proche d'une anomalie de Wood associée à l'ordre +1 transmis, $\lambda = 0.999 y_{d,+}^*$, ce qui correspond à une longueur d'onde de $3.5 \mu\text{m}$ dans le substrat et une longueur d'onde apparente associée à l'ordre +1 transmis de $84 \mu\text{m}$! Le milieu incident est l'air ($\varepsilon^+ = 1$) et tous les matériaux sont non magnétiques ($\mu = 1$). De plus, nous fixons la hauteur des PML $\hat{h}^\pm = 1.1 y_{d,+}^*$ et le coefficient d'absorption $\zeta^\pm = 1 + i$.

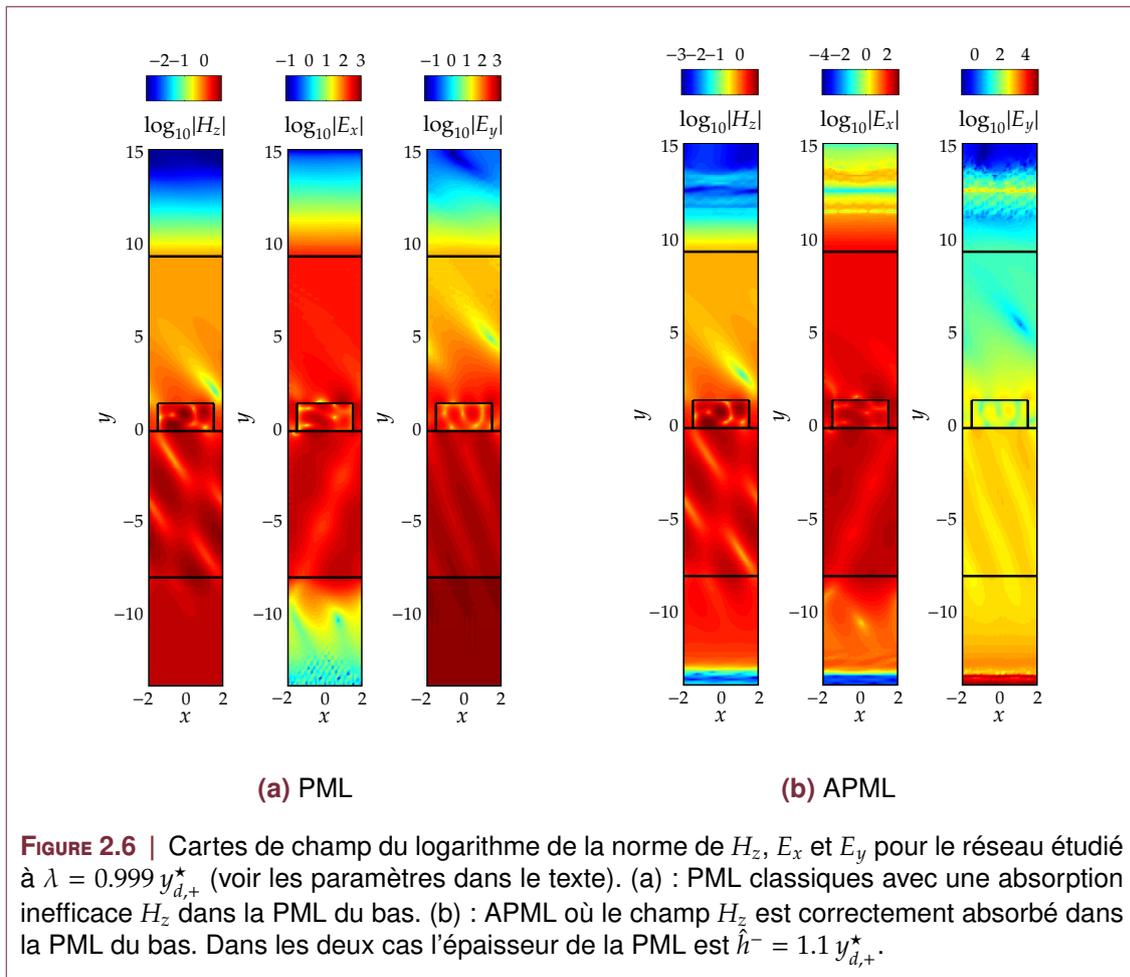
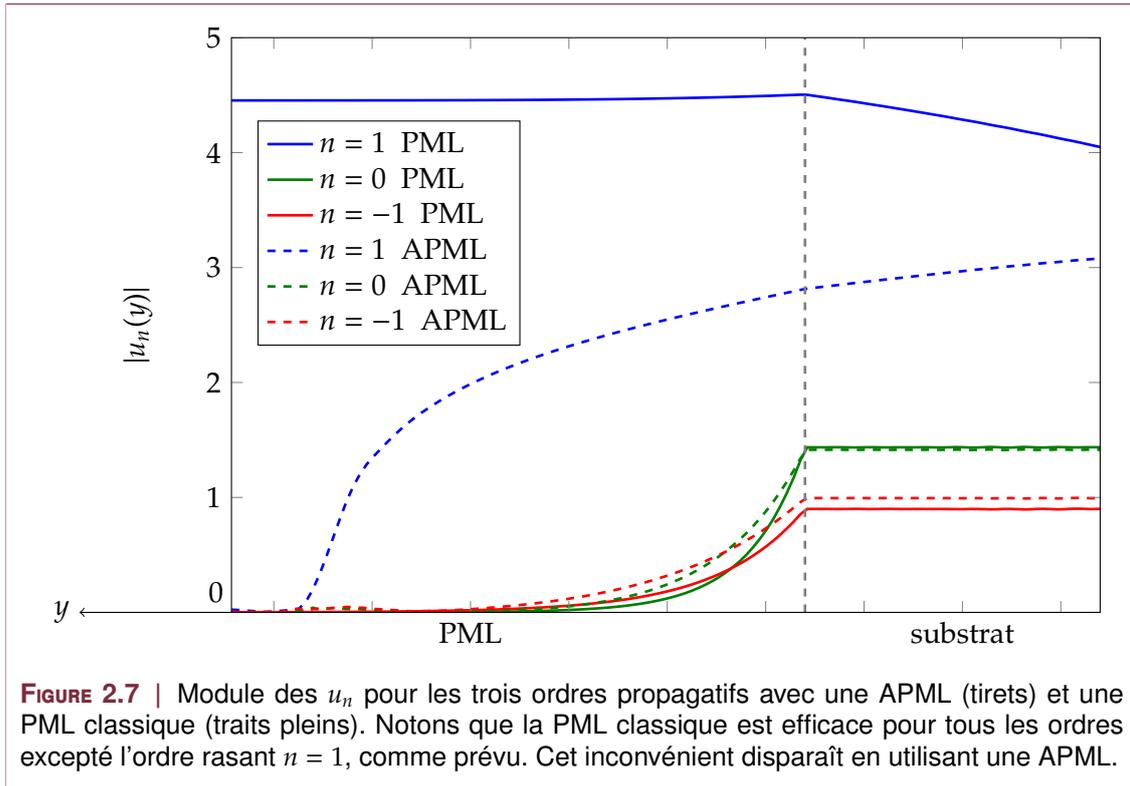


FIGURE 2.6 | Cartes de champ du logarithme de la norme de H_z , E_x et E_y pour le réseau étudié à $\lambda = 0.999 y_{d,+}^*$ (voir les paramètres dans le texte). (a) : PML classiques avec une absorption inefficace H_z dans la PML du bas. (b) : APML où le champ H_z est correctement absorbé dans la PML du bas. Dans les deux cas l'épaisseur de la PML est $\hat{h}^- = 1.1 y_{d,+}^*$.

Les cartes de champ de la norme de H_z , E_x et E_y sont tracées en échelle logarithmique en Fig. 2.6, pour le cas de la PML classique et de notre PML adaptative. On constate que le champ H_z qui est calculé en pratique décroît clairement dans la APML du bas (carte la plus à gauche sur la Fig. 2.6(b)) tandis que ce n'est pas le cas pour la PML classique (carte la plus à gauche sur la Fig. 2.6(a)), causant des réflexions parasites sur la frontière extérieure. Les champs E_x et E_y sont déduits de H_z grâce aux équations de Maxwell. La forte valeur de E_y en bout de la APML du bas (carte la plus à droite sur la Fig. 2.6(b)) est due aux fortes valeurs des propriétés matérielles équivalentes, dues elles-mêmes aux fortes valeurs de s_y , ce qui n'affecte pas la précision du champ calculé dans la zone d'intérêt

Une autre caractéristique de notre approche est que l'ordre de diffraction rasant est bien absorbé, comme illustré sur la figure 2.7 : l'ordre +1 transmis ne décroît pas dans la PML

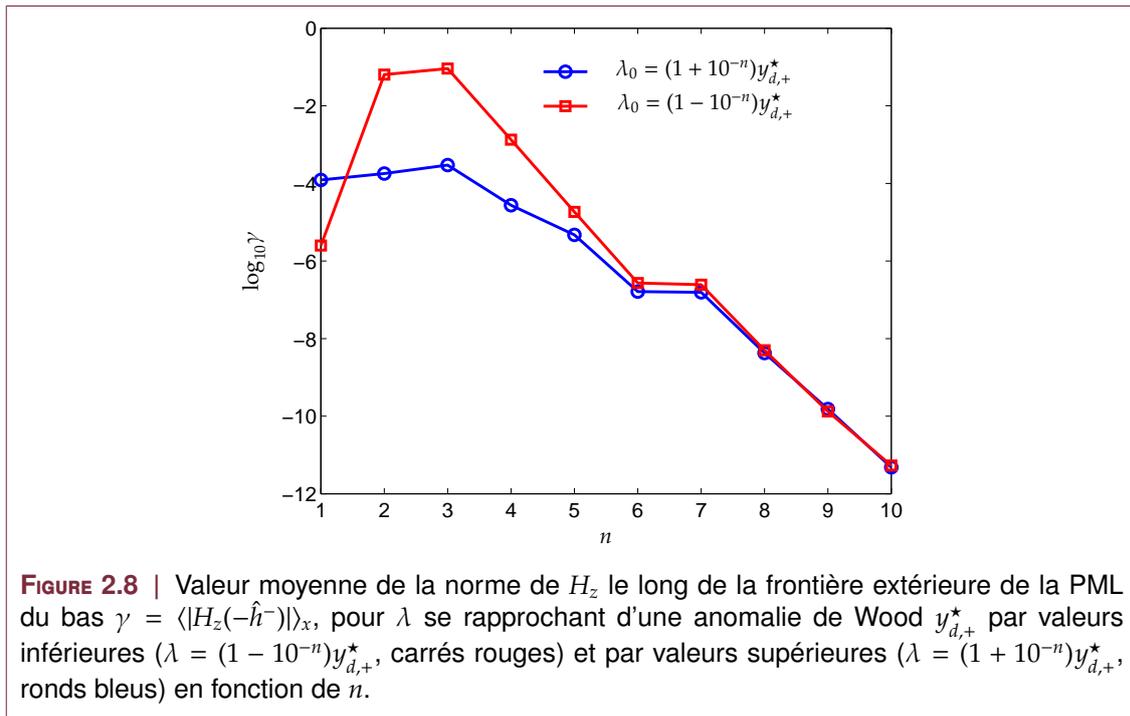


classique (traits pleins bleus) et atteint une forte valeur en $y = -\hat{h}^-$, alors que cet ordre tend vers zéro quand $y \rightarrow -\hat{h}^-$ dans le cas APML (tirets bleus). Pour valider la précision de la méthode, nous comparons les efficacités de diffraction obtenues avec PML et APML à celle obtenues par une autre méthode, la RCWA (cf. [sous-section 1.6.3](#)). Pour les paramètres choisis, seuls l'ordre zéro en réflexion et les ordres $-1, 0$ et $+1$ en transmission sont propagatifs. Nous pouvons vérifier le bilan d'énergie $B = R_0 + T_{-1} + T_0 + T_{+1}$ puisqu'il n'y a pas de milieu dissipatif dans cet exemple. Les résultats sont reportés dans le [tableau 2.1](#), et on constate un bon accord entre la FEM avec APML et la RCWA. Au contraire, si on utilise des PML classiques, les efficacités de diffraction sont moins précises par rapport à celles calculées avec la RCWA. En vérifiant le bilan d'énergie, on arrive aux mêmes conclusions : le résultat numérique est perturbé par la réflexion de l'onde au bout de la PML si celle-ci n'est pas adaptée à la situation d'un ordre de diffraction rasant.

	R_0	T_{-1}	T_0	T_{+1}	B
RCWA	0.1570	0.3966	0.1783	0.2680	0.9999
FEM + APML	0.1561	0.3959	0.1776	0.2703	0.9999
FEM + PML	0.1904	0.4118	0.1927	0.2481	1.0430

TABLE 2.1 | Efficacités de diffraction R_0, T_{-1}, T_0 et T_{+1} des quatre ordres propagatifs et bilan d'énergie $B = R_0 + T_{-1} + T_0 + T_{+1}$, calculé par trois méthodes : RCWA (ligne 1), FEM avec APML (ligne 2), FEM avec PML classique (ligne 3).

Pour terminer, afin d'illustrer le comportement de la PML adaptative quand la longueur d'onde devient de plus en plus proche d'une anomalie de Wood, nous avons calculé la valeur moyenne de la norme de H_z le long de la frontière extérieure de la PML du bas $\gamma = \langle |H_z(-\hat{h}^-)| \rangle_{x'}$, quand $\lambda = (1 + 10^{-n})y_{d,+}^*$ et $\lambda = (1 - 10^{-n})y_{d,+}^*$, pour $n = 1, 2, \dots, 10$. Les résultats sont tracés en [Fig. 2.8](#). Quand la longueur d'onde incidente se rapproche de $y_{d,+}^*$, γ croît tout d'abord mais pour $n > 3$, γ décroît exponentiellement.



Dans tous les cas, sa valeur reste assez petite pour considérer que notre APML est efficace.

Conclusion partielle

Nous avons, dans ce chapitre, exposé une formulation de la méthode des éléments finis développée précédemment à l'institut Fresnel, que nous utilisons pour calculer le champ diffracté par un réseau de géométrie et de propriétés optiques pouvant être complexes, éclairé par une onde plane de fréquence et d'incidence arbitraire, dans les deux cas de polarisation. Cette formulation est adaptée à la complexité des structures que nous voulons étudier et permet de prendre en compte sans difficulté les contraintes et défauts de fabrication. La méthode permet de ne modéliser qu'une période du réseau (en appliquant des conditions de quasi-périodicité sur les frontières latérales). Le problème de diffraction est ensuite traité comme un problème radiatif équivalent à sources confinées dans le ou les élément(s) diffractif(s). La nature ouverte du réseau (substrat et superstrat semi-infinis) nécessite d'utiliser des couches absorbantes, les PMLs, pour pouvoir atténuer les ondes propagatives dans l'espace libre. Nous avons mis en évidence que les PMLs classiques avec un étirement complexe constant sont inefficaces pour des configurations particulières où un ordre de diffraction devient rasant, les anomalies de Wood. Pour pallier ce problème, nous avons développé des PMLs adaptatives (Adaptive PML, APML) capable de traiter cette limitation [108]. Ces APMLs sont basées sur une transformation géométrique alliant une contraction réelle et un étirement complexe et absorbent efficacement tous les ordres de diffraction, en particulier, l'ordre rasant. Munis de la formulation du problème de diffraction, nous pouvons extraire les grandeurs énergétiques (transmission et réflexion dans les différents ordres, pertes Joule) et ainsi dresser un bilan d'énergie. Cela étant, il nous faut résoudre un problème FEM pour chaque fréquence, à angle fixé, pour obtenir des spectres sur toute une plage de fréquences. Ce processus peut être long compte tenu des temps de calcul exigés par la FEM. Notre but est de réaliser des filtres, c'est à dire des structures où une petite variation de la longueur d'onde incidente peut donner lieu à une grande variation des

efficacités de diffraction. Autrement dit, nous cherchons à mettre à profit les résonances des réseaux. Il est donc beaucoup plus judicieux de résoudre un problème spectral, i.e. chercher les fréquences propres complexes ω et modes propres des structures étudiées. Ainsi en résolvant un seul problème FEM, saurons-nous directement à quelle fréquence (partie réelle de ω) le réseau étudié est susceptible de résonner, et quelle est la largeur de cette résonance (partie imaginaire de ω). Le chapitre suivant est donc consacré à la formulation et à l'étude du spectre de l'opérateur de Maxwell qui régit la propagation des ondes électromagnétiques dans le cas particulier d'un réseau de diffraction.

Étude des propriétés spectrales de réseaux mono-périodiques

Sommaire

3.1	Le problème spectral sans dispersion	46
3.1.1	<i>Problème spectral</i>	46
3.1.2	<i>Tétrachotomie</i>	57
3.2	Validation de la méthode	58
3.2.1	<i>Exemple d'un empilement multicouche</i>	58
3.2.2	<i>Exemple d'un réseau de fentes</i>	60
3.3	Le problème spectral en présence de dispersion	65
3.3.1	<i>Modèle de permittivité</i>	65
3.3.2	<i>Formulation du problème aux valeurs propres</i>	66
3.3.3	<i>Exemples d'application</i>	68

L'ANALYSE spectrale de structures électromagnétiques ouvertes reste à ce jour une tâche délicate. En effet, le caractère non borné du problème (substrat et superstrat semi-infinis dans notre cas) fait que les fréquences propres sont complexes même dans le cas où tous les milieux en jeu sont sans pertes. Le problème est dissipatif par essence, la partie imaginaire des fréquences propres traduisant les pertes radiatives de la structures vers le reste de l'univers. Cela a pour conséquence que les modes dit *à fuites* associés à ces valeurs propres divergent exponentiellement à l'infini. Il devient alors complexe de traiter rigoureusement de pareils champs. Notre approche, fondée sur l'Optique de Transformation, permet par un changement de coordonnées complexe (utilisé pour construire les PMLs) de calculer numériquement les modes à fuites de l'opérateur de Maxwell.

Nous présentons dans ce chapitre les fondements de notre méthode appliquée au cas de réseaux mono-périodiques. Nous explicitons tout d'abord la formulation employée pour résoudre un problème spectral dans le cas de matériaux non dispersifs. Nous traitons alors un problème borné équivalent où une seule période du réseau est modélisée de par l'utilisation de conditions de Bloch, et où les domaines semi-infinis (substrat et superstrat) sont tronqués par des PMLs finies [99]. Les principaux paramètres en jeu dans nos modèles sont décrits et analysés et leurs effets sur la structure du spectre de l'opérateur de Maxwell sont mis en évidence. Nous mettons ensuite notre méthode à l'épreuve en la comparant avec une technique de recherche de pôles des coefficients de

Fresnel dans le plan complexe [139], sur le cas d'un empilement multicouche puis d'un réseau lamellaire. Cette formulation est ensuite étendue au cas de réseaux 1D avec un matériau dispersif dont la permittivité est modélisée par une loi à un pôle, conduisant à la résolution d'un problème aux valeurs propres quadratique scalaire dans le cas TE et vectoriel dans le cas TM.

3.1 Le problème spectral sans dispersion

Notre objectif est de trouver les résonances des structures étudiées. Pour ce faire, nous utilisons deux méthodes indépendantes qui sont détaillées dans cette partie. L'une consiste à résoudre un *problème spectral* par une méthode des éléments finis, et l'autre, baptisée *tétrachotomie* permet d'obtenir numériquement les pôles du coefficient de transmission en utilisant des outils d'analyse complexe.

3.1.1 Problème spectral

Comme nous l'avons souligné précédemment, la difficulté majeure du problème spectral traité ici réside dans le fait que nous avons affaire à une structure ouverte. En effet, le caractère non borné du substrat et du superstrat modifie considérablement la nature du spectre de l'opérateur associé : en plus du spectre discret (constitué des valeurs propres) auquel sont associés les modes guidés, il existe un spectre continu (constitué des valeurs propres généralisées) auquel sont associés les modes de radiation. D'un point de vue numérique, introduire des PML finies pour borner la cellule de calcul revient en quelque sorte à se ramener à une structure fermée, dont le spectre de l'opérateur associé est discret. Nous allons détailler ces différents points dans la partie suivante, en illustrant notre propos avec des exemples numériques.

On se bornera ici à une description « qualitative » du spectre, une analyse spectrale rigoureuse exige sans doute une collaboration avec la communauté des mathématiciens. Il serait bon notamment de préciser dans quels espaces fonctionnels « vivent » les vecteurs propres associés aux différentes parties du spectre, et ce pour les différents problèmes traités. Nous utiliserons plutôt le langage des physiciens et parlerons de champs *d'énergie finie*, ou bien *d'énergie infinie*. En plus de cela, rappelons que nous recherchons les modes propres dans des structures périodiques mono-dimensionnelles, les champs seront donc pseudo-périodiques de période d et de coefficient α .

Formulation du problème

Nous nous intéressons aux champs susceptibles de se propager dans la structure avec une constante de pseudo-périodicité α réelle, en régime harmonique de pulsation ω et *en l'absence de champ incident*. Nous traiterons le cas des modes polarisés rectilignement (TE ou TM). On étudie le même type de structure que dans la partie 2.1 mais cette fois sans champ incident ($u_0 = 0$). L'équation 2.5 devient alors :

$$-\operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} u^d) = k_0^2 \chi u^d \quad (3.1)$$

En notant $\mathcal{M}_\xi(v_n) := -\operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v_n)$, le problème spectral revient à trouver les solutions des équations de Maxwell *sans sources*, i.e. trouver les valeurs propres généralisées $\Lambda_n = k_n^2 = (\omega_n/c)^2$ et les vecteurs propres généralisés non nuls v_n de l'opérateur de Maxwell \mathcal{M}_ξ tels que :

$$\mathcal{M}_\xi(v_n) = \Lambda_n \chi v_n \quad (3.2)$$

Il est important ici de noter que les valeurs propres ω_n sont généralement complexes, même si l'opérateur de Maxwell \mathcal{M}_ξ est formellement auto-adjoint pour des matériaux sans pertes. De plus, la périodicité selon x permet de réduire le problème à une cellule élémentaire

de la même manière que pour le problème de diffraction décrit en partie 2.1. On peut alors appliquer la théorie de décomposition de Bloch-Floquet et ainsi paramétrer l'opérateur par le coefficient de quasi périodicité α , qui est fixé dans \mathbb{R} , en dépit de l'absence de champ incident. Remarquons que α est seulement une « réminiscence » du champ incident : il manque β . Il est donc vain de retrouver θ grâce à α puisque on ne connaît ni k^+ ni β . Il sera donné par la valeur propre ω_n : si ω_n'' est petit devant ω_n' , on peut poser $k_n^+ \simeq \sqrt{\varepsilon^+ \mu^+} \omega_n / c$, et déduire l'angle θ_n correspondant pour lequel une résonance est susceptible d'avoir lieu par $\alpha = k_n^+ \sin \theta_n$.

Étudions à présent la structure du spectre de notre opérateur.

Structure du spectre de l'opérateur de Maxwell

Le cas d'une structure fermée

Pour fixer les idées, considérons tout d'abord un exemple de deux miroirs plans parallèles, parfaitement conducteurs, séparés d'une distance h par un milieu homogène isotrope sans pertes de permittivité ε et de perméabilité μ . Ce cas simple peut se réduire à un problème mono-dimensionnel selon la direction (Oy) orthogonale aux plans des miroirs avec des conditions de Dirichlet homogènes en $y = 0$ et $y = h$. Le problème spectral associé consiste à trouver les valeurs propres $\omega_n \in \mathbb{C}$ et les vecteurs propres $v_n \in L^2([0, h])$ tels que :

$$\mathcal{M}(v_n) := -\frac{d^2 v_n}{dy^2} = \frac{\omega_n^2}{c^2} \varepsilon \mu v_n, \quad \forall y \in [0, h]$$

$$u(0) = u(h) = 0.$$

Comme l'opérateur \mathcal{M} est auto-adjoint (matériaux sans pertes) et à résolvante compacte (puisque de section $\Omega = [0, h]$ bornée), la théorie spectrale stipule que les ω_n forment une suite réelle tendant vers l'infini, et que les v_n forment une base hilbertienne de $L^2([0, h])$. Pour le cas académique traité ici, les fréquences propres sont données par :

$$\omega_n = n \frac{\pi c}{\sqrt{\varepsilon \mu} h}, \quad \forall n \in \mathbb{N}^*,$$

et les fonctions propres normalisées par

$$v_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{n\pi}{h} y\right).$$

Le cas d'une structure ouverte

Considérons le même exemple que précédemment, mais cette fois-ci le système est ouvert ($h = +\infty$). Le problème est toujours auto-adjoint, mais à résolvante non compacte. On montre que le spectre de l'opérateur associé est uniquement constitué du spectre continu qui se réduit à l'axe réel positif. Ce dernier résultat peut se voir « à la main » : si on fait tendre h vers $+\infty$, on voit que le spectre discret constitué des ω_n tend vers un spectre continu qui se trouve être \mathbb{R}^+ .

Ce résultat peut se généraliser à une classe de problèmes dits de Sturm-Liouville, dans laquelle s'inscrit le problème du réseau que nous traitons ici [58]. D'une manière générale, les valeurs propres constituent le spectre discret¹, avec des vecteurs propres

1. il faut en tout rigueur faire le *distinguo* entre spectre ponctuel et spectre discret.

exponentiellement décroissants à l'infini : ce sont les modes guidés, d'énergie finie. Les valeurs propres généralisées forment le spectre continu² avec des vecteurs propres généralisés oscillants à l'infini : ce sont les modes de radiation, d'énergie infinie. La résolvante de l'opérateur \mathcal{M}_ξ est définie pour λ appartenant à l'ensemble résolvant $\rho(\mathcal{M}_\xi)$ (le complémentaire dans \mathbb{C} du spectre) comme $R_{\mathcal{M}_\xi}(\lambda) = (\mathcal{M}_\xi - \lambda I)^{-1}$. Les valeurs propres correspondent aux pôles de la résolvante, et la résolvante admet vraisemblablement une coupure sur le spectre continu [51].

Revenons maintenant au problème d'un réseau, constitué de matériaux homogènes, isotropes et sans pertes. La périodicité selon (Ox) nous amène à rechercher des solutions v_n qui vérifient la décomposition de Bloch :

$$v_n(x, y) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} v_{nm}^d(y) e^{i\alpha_m x} \quad (3.3)$$

avec $\alpha_m = \alpha + \frac{2\pi}{d}m$. En injectant cette décomposition dans l'Eq. (3.2), on a :

$$-\frac{\partial^2 v_{nm}}{\partial y^2} = \beta_{nm}^2 v_{nm} \quad (3.4)$$

avec

$$\beta_{nm}^2 = \omega_n^2 / c^2 \varepsilon \mu - \alpha_m^2. \quad (3.5)$$

On se ramène ainsi à l'étude de l'opérateur mono-dimensionnel canonique $-\frac{\partial^2}{\partial y^2}$, dont nous avons vu que le spectre continu est \mathbb{R}^+ . Nous pouvons donc obtenir pour le problème du réseau les lieux des pulsations propres complexes ω associées au spectre continu correspondant au substrat (exposant -) et au superstrat (exposant +) à partir de l'Équation 3.5, en fonction du paramètre $\beta \in \mathbb{R}^+$. Il s'agit des courbes $\omega(\beta) = \mathcal{D}_m^\pm(\beta)$ donnés par les équations paramétriques :

$$\omega(\beta) = \mathcal{D}_m^\pm(\beta) = c^\pm \sqrt{\alpha_m^2 + \beta^2}, \quad \beta \in \mathbb{R}^+, \quad \forall m \in \mathbb{Z} \quad (3.6)$$

avec $c^\pm = c / \sqrt{\varepsilon^\pm \mu^\pm}$ la vitesse de la lumière dans le milieu considéré, c'est-à-dire les demi-droites $[c^\pm \alpha_m, +\infty[$.

Introduction de PML infinies

Comme nous l'avons vu en partie 2.1.4, les PML peuvent s'interpréter comme un changement de coordonnées complexes. Dans notre cas le changement porte sur y et est tel que $y \mapsto y_c = y/s_y$, où s_y est définie par l'Eq. (2.23) : elle vaut 1 dans la zone d'intérêt physique, ζ^+ dans le superstrat et ζ^- dans le substrat. Nous choisissons ζ^+ et ζ^- dans \mathbb{C}^+ . Nous considérons donc un nouvel opérateur noté $\mathcal{M}_{\tilde{\xi}}$ qui dépend du choix du changement de coordonnées s_y et dont les valeurs propres sont complexes. Le problème spectral associé consiste à trouver les valeurs propres $\tilde{\omega}_n \in \mathbb{C}$ et les vecteurs propres \tilde{v}_n tels que :

$$\mathcal{M}_{\tilde{\xi}}(\tilde{v}_n) = \tilde{\Lambda}_n \tilde{\chi} \tilde{v}_n \quad (3.7)$$

2. là aussi, il faudrait examiner les subtilités mathématiques existant entre spectre essentiel et spectre continu.

Expression explicite de la courbe du spectre continu avec PML infinies

Le changement de coordonnées introduit pour l'utilisation des PML peut se traduire en raisonnant sur la coordonnée non transformée y et en considérant une nouvelle constante de propagation $\tilde{\beta} = \beta/s_y$. En introduisant cette constante de propagation étirée dans l'Équation 3.6, nous obtenons les lieux du spectre continu, qui sont donnés par les chemins dans le plan complexe $(\omega' + i\omega'') = C_m^\pm$ paramétrés par β :

$$(\omega' + i\omega'')(\beta) = C_m^\pm(\beta) = c^\pm \sqrt{\alpha_m^2 + (\beta/s_y)^2}, \quad \beta \in \mathbb{R}^+, \quad \forall m \in \mathbb{Z} \quad (3.8)$$

Ainsi, l'ajout de PML infinies déplace-t-il le spectre dans le plan complexe. Ce déplacement révèle des *modes à fuites*, exponentiellement croissants à l'infini. Les valeurs propres associées sont complexes et correspondent aux pôles du prolongement analytique en λ de la résolvante, qui est réalisé en ajoutant des PML infinies (ce qui peut s'interpréter comme un prolongement analytique dans la variable y [51]).

Les modes à fuites peuvent être vus comme les modes de la structure fermée lorsque celle-ci est ouverte (c'est à dire « plongée » dans les deux milieux semi-infinis que sont le substrat et le superstrat). Notons enfin que ces modes à fuites sont une caractéristique intrinsèque au problème, l'introduction des PML est seulement un moyen de les découvrir.

Introduction de PML finies

Finalement, pour mettre en œuvre numériquement la méthode des éléments finis, il nous faut tronquer les PML. Le problème redevient alors à résolvante compacte, puisque sa section Ω est bornée, mais n'est plus auto-adjoint et ce à cause de l'introduction des milieux PML dissipatifs. L'opérateur associé noté $\mathcal{M}_{\tilde{\xi}}$, qui dépend de s_y mais aussi de la distance de troncature des PML, et des conditions aux limites en bout de PML, a un spectre qui est alors uniquement discret, les PML tronquées réalisant une discrétisation du spectre continu ([101]). Le problème spectral finalement résolu en pratique s'écrit donc :

$$\mathcal{M}_{\tilde{\xi}}(\widehat{v}_n) = \widehat{\Lambda}_n \widehat{\chi} \widehat{v}_n \quad (3.9)$$

où les vecteurs propres sont maintenant d'énergie finie.

L'opérateur $\widehat{\mathcal{M}}_{\tilde{\xi}}$ est l'extension non Hermitienne (obtenue à l'aide de la transformation géométrique réalisée par les PML) et à résolvante compacte (de par la taille finie des PML) adéquate pour calculer numériquement les modes du système ouvert. Ses caractéristiques spectrales sont reliées à ceux du problème initial à travers les processus qui viennent d'être décrits.

Les modes à fuites du problème (3.9) convergent, dans la zone d'intérêt physique, vers ceux du problème (3.2). Ceci dit, la démonstration mathématique rigoureuse est en dehors du cadre de ce travail et nous renvoyons le lecteur intéressé à la référence [51]. Dans la suite, nous confondrons de manière délibérée les deux problèmes et abandonnerons donc les notations avec chapeau ($\widehat{v}_n, \widehat{\Lambda}_n, \text{etc.}$), mais il faut garder à l'esprit que ce que nous résolvons numériquement est la version (3.9) étirée dans un espace complexe et bornée du problème (3.2) défini dans tout l'espace réel.

Formulation de la méthode des éléments finis

Le problème aux valeurs propres (PVP) défini par l'équation (3.2) est ensuite résolu par la FEM. La formulation est analogue à celle décrite en partie 2.1 : utilisation des PML au dessus et en dessous de la zone d'intérêt, prise en compte des conditions de

quasi-périodicité sur les frontières du domaine et conditions de Neumann homogènes imposées sur les frontières extérieures des PML. Notons qu'il n'y a pas de terme source dans ce cas.

De plus il est important de souligner que les vecteurs propres v_n sont d'énergie infinie (voir section 1.7), mais l'utilisation des PML les rend d'énergie finie, ce qui est une condition nécessaire à l'élaboration d'une formulation faible associée à la FEM. La cellule est maillée à l'aide d'éléments de Lagrange d'ordre 2. Dans les exemples numériques qui suivent, la taille maximale d'un élément du maillage est fixée à $\lambda^{\text{mesh}}/(N_m \sqrt{\Re(\varepsilon)})$, où N_m est un entier (choisi entre 6 et 10 en pratique, son choix résulte d'un compromis entre précision et temps de calcul), et où λ^{mesh} est une longueur d'onde choisie dans le voisinage de la bande spectrale où l'on veut trouver des valeurs propres.

Le système algébrique final s'écrit sous forme matricielle comme un problème aux valeurs propres généralisé $Av = \Lambda Bv$. Trouver les valeurs propres les plus proches d'un décalage arbitraire Λ^0 revient à calculer les plus grandes valeurs propres de la matrice $C = (A - \Lambda^0 B)^{-1}B$. Pour ce faire, le solveur aux valeurs propres utilise les bibliothèques ARPACK FORTRAN adaptées aux problèmes aux valeurs propres impliquant des matrices creuses et de grande taille [74]. Ce code est fondé sur une variante de l'algorithme d'Arnoldi appelée *Implicitly Restarted Arnoldi Method* (IRAM).

Choix des paramètres pour les PML

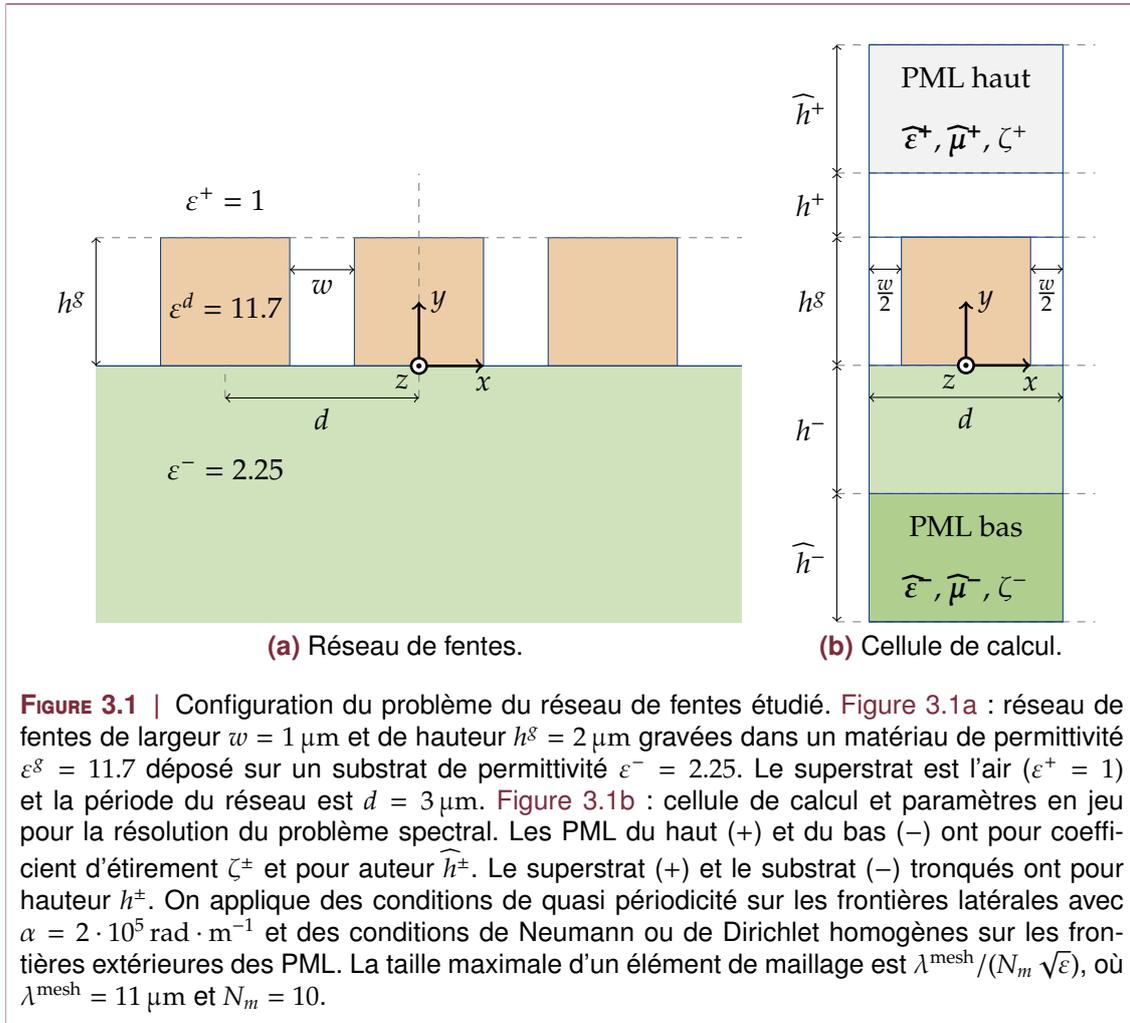
Il faut à présent choisir des paramètres pour les PML : les coefficients d'étirement ζ^\pm , leur hauteur \widehat{h}^\pm , leur distance à la structure diffractive h^\pm ainsi que la condition aux limites à appliquer en bout de PML. Afin d'illustrer l'influence de ces différents paramètres, nous résolvons le problème spectral sur un exemple numérique (cf. Figure 3.1) : un réseau de période $d = 3 \mu\text{m}$ de fentes de hauteur $h^g = 2 \mu\text{m}$ et de largeur $w = 1 \mu\text{m}$ gravées dans une couche de permittivité $\varepsilon^g = 11.7$, déposée sur un substrat de permittivité $\varepsilon^- = 4.84$. Le milieu incident est l'air ($\varepsilon^+ = 1$) et tout les matériaux sont non magnétiques ($\mu_r = 1$). Nous étudions le cas TE, fixons $\alpha = 2 \cdot 10^5 \text{ rad} \cdot \text{m}^{-1}$ et le paramètre de maille $N_m = 10$.

Taille des PML

En premier lieu, nous regardons le comportement des fréquences propres dans le plan complexe lorsque l'on augmente la taille des PML. On impose une condition de Neumann homogène sur les frontières extérieures des PML, on fixe $\zeta^\pm = e^{i\pi/4}$, $h^\pm = \lambda^{\text{ref}}/100$, avec $\lambda^{\text{ref}} = 11 \mu\text{m}$. Les lieux des pulsations propres sont tracés en figure 3.2, pour différentes tailles de PML. On a aussi représenté les courbes C_m^\pm donnant les lieux du spectre continu. Lorsque l'on augmente \widehat{h}^\pm , on observe que le spectre continu est d'autant mieux approximé (les points se rapprochent des courbes théoriques en pointillés et se densifient), ce qui paraît assez logique. D'autre part, les modes à fuites sont indépendants de ce paramètre.

Absorption des PML : argument

Observons maintenant l'influence du paramètre d'absorption ζ^\pm . On garde les mêmes paramètres que précédemment, avec $\widehat{h}^\pm = 10 \lambda^{\text{ref}}/\sqrt{\varepsilon^\pm}$, $|\zeta^\pm| = 1$ et on fait varier tout d'abord $\arg \zeta^\pm$. Les lieux des pulsations propres sont tracés en figure 3.3, pour différentes valeurs de $\arg \zeta^\pm$. On observe que le spectre continu se déplace, et les fréquences propres correspondant aux approximations de ce spectre continu suivent bien les courbes théoriques. Si on augmente $\arg \zeta^\pm$, on « dévoile » de plus en plus de modes à fuites : le mode nommé 1 sur la Fig. 3.3 est dévoilé dans les trois cas de figure, alors que le mode 2 n'est



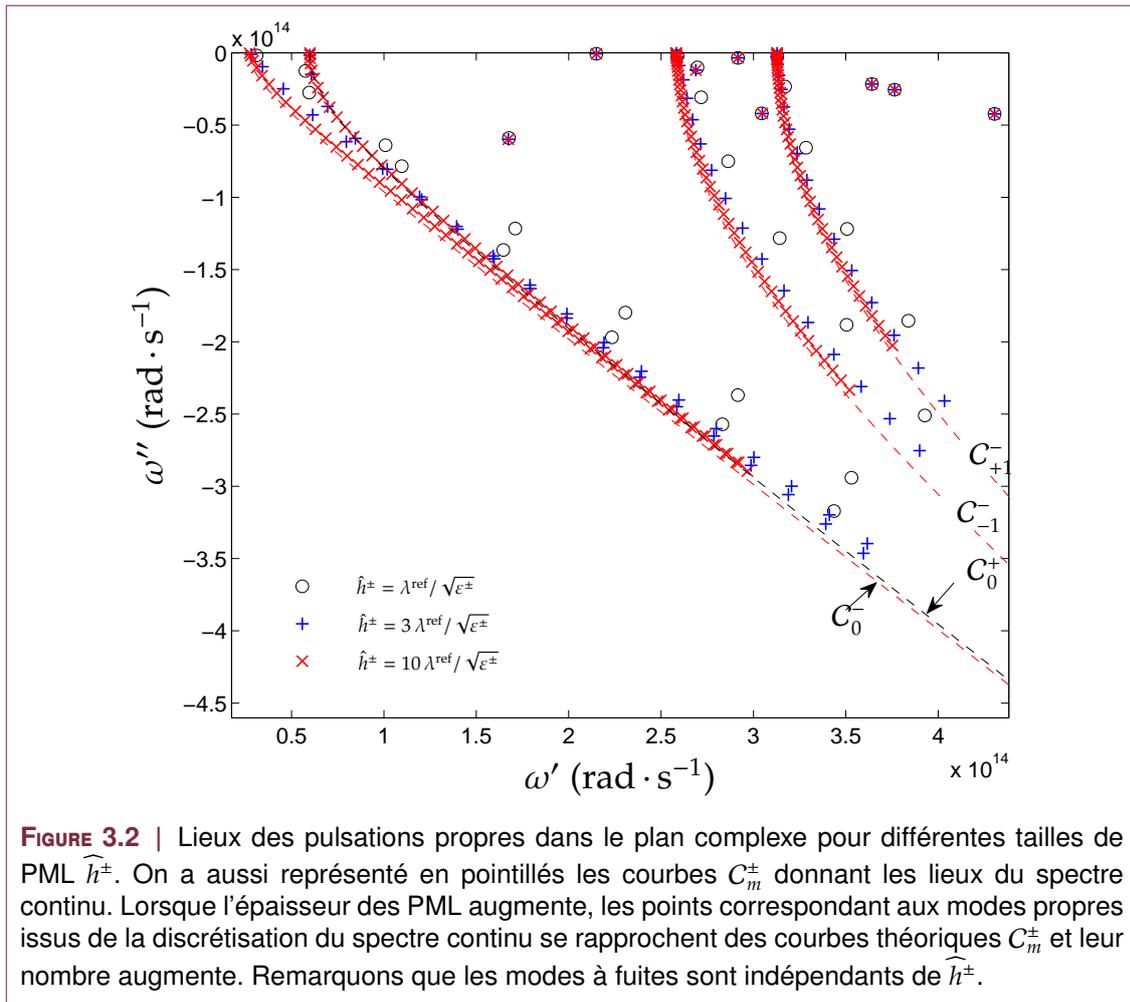
pas dévoilé pour $\arg \zeta^\pm = \pi/12$, et le mode 3 n'apparaît que pour $\arg \zeta^\pm = 5\pi/12$. Comme constaté précédemment, les modes à fuites, lorsqu'ils sont révélés, ne dépendent pas du choix du paramètre d'absorption. Les trois modes désignés par 4 présentent quant à eux un comportement particulier. Il s'agit *a priori* d'un même mode qui se déplace en fonction de quelle branche du spectre continu le révèle.

Absorption des PML : module

Nous fixons maintenant $\arg \zeta^\pm = \pi/4$ et faisons varier le module de ζ^\pm . Les résultats sont consignés en figure 3.4. De la même façon que lorsqu'on augmente la hauteur des PML, le fait d'augmenter le module de ζ^\pm permet une meilleure discrétisation du continu. En effet ce faisant, on diminue la longueur d'onde dans le milieu PML et ainsi plus de solutions oscillantes à l'infini (les modes de radiation) sont accessibles. De plus on constate là encore que les modes à fuites sont peu affectés par ces changements.

Distance PML-structure

Un autre paramètre important dans le calcul numérique des modes propres est la distance des PML par rapport à la structure résonante que l'on étudie. En effet, des solutions erronées peuvent apparaître si les PML sont trop éloignées, du réseau : il s'agit



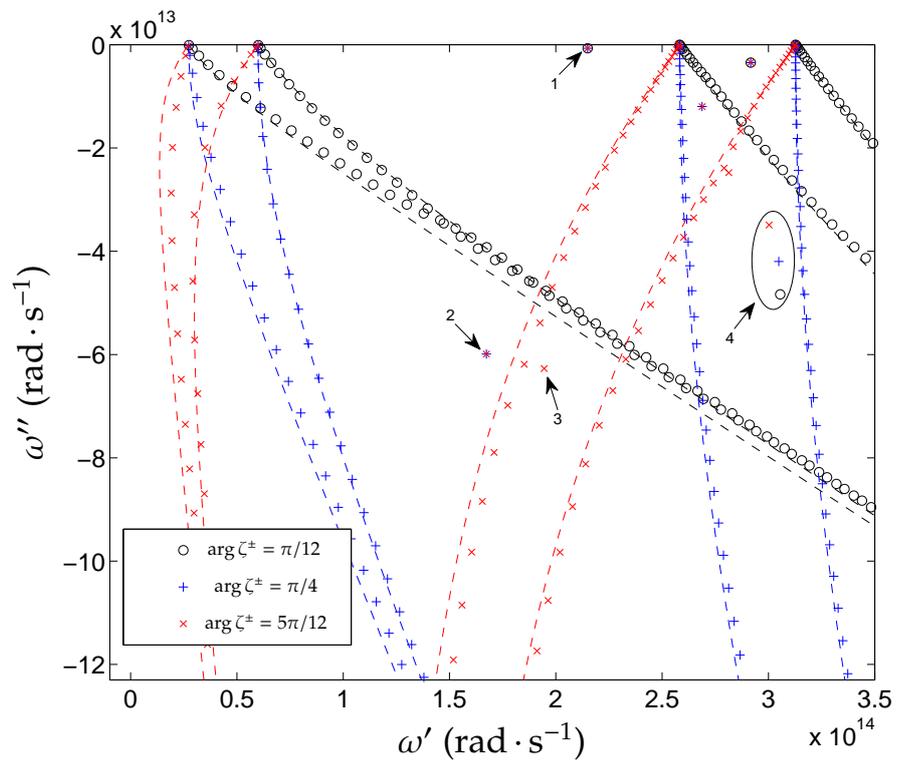
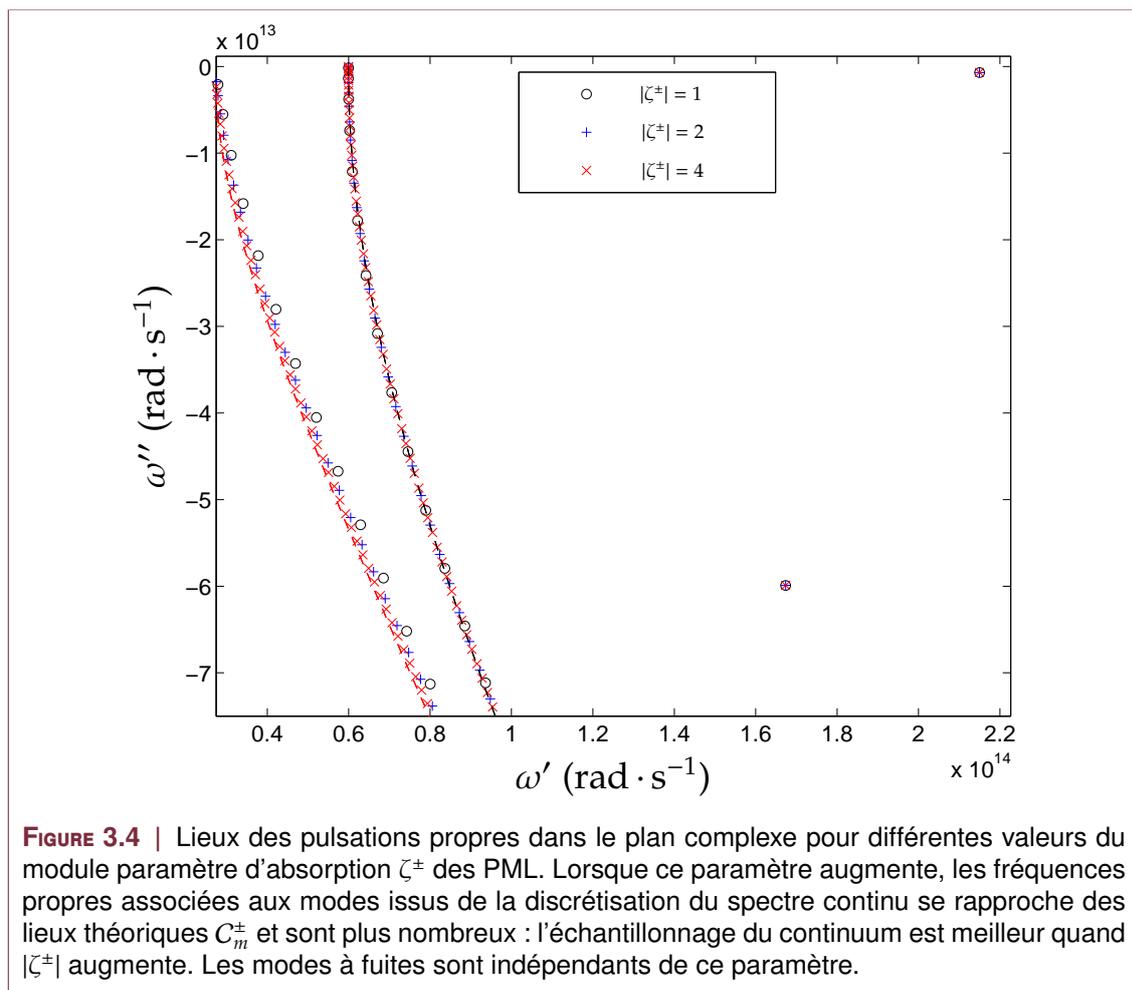


FIGURE 3.3 | Lieux des pulsations propres dans le plan complexe pour différentes valeurs de l'argument du paramètre d'absorption ζ^\pm des PML. Ce paramètre joue sur la rotation du spectre continu dans le plan complexe, et donc sur la possibilité de « révéler » certains modes à fuite. Lorsque $\arg \zeta^\pm$ est assez grand, un mode à fuite apparaît dans le spectre de l'opérateur et peut être ainsi calculé, mais sa valeur ne dépend pas de ce paramètre.



de modes « fallacieux » (*spurious modes* en anglais). Nous avons représenté en Fig. 3.5 le spectre pour les paramètres suivants : $\zeta^\pm = e^{i\pi/4}$, $\widehat{h}^\pm = 10\lambda^{\text{ref}}/\sqrt{\varepsilon^\pm}$, avec $\lambda^{\text{ref}} = 11\ \mu\text{m}$, pour plusieurs distances aux PML h^\pm . On constate que la pollution numérique diminue quand h^\pm diminue. D'autres auteurs ont été confrontés au même type de problème ([64]), une solution proposée est de placer les PML le plus proche possible de la structure. Une explication avancée dans [51] est une croissance exponentielle de la norme de la résolvante en fonction de la distance de la structure à la PML, ce qui crée une pollution numérique des résultats. Les auteurs proposent ainsi une solution consistant en des PML non orthogonales qui épousent les contours de la structure. Ce comportement numérique peut se voir « à la main » : vu que les modes à fuites sont des objets exponentiellement croissants à l'infini, si on place les couches absorbantes trop loin, cette croissance exponentielle va être d'autant plus importante, et ainsi amplifier les erreurs numériques sur le calcul des modes.

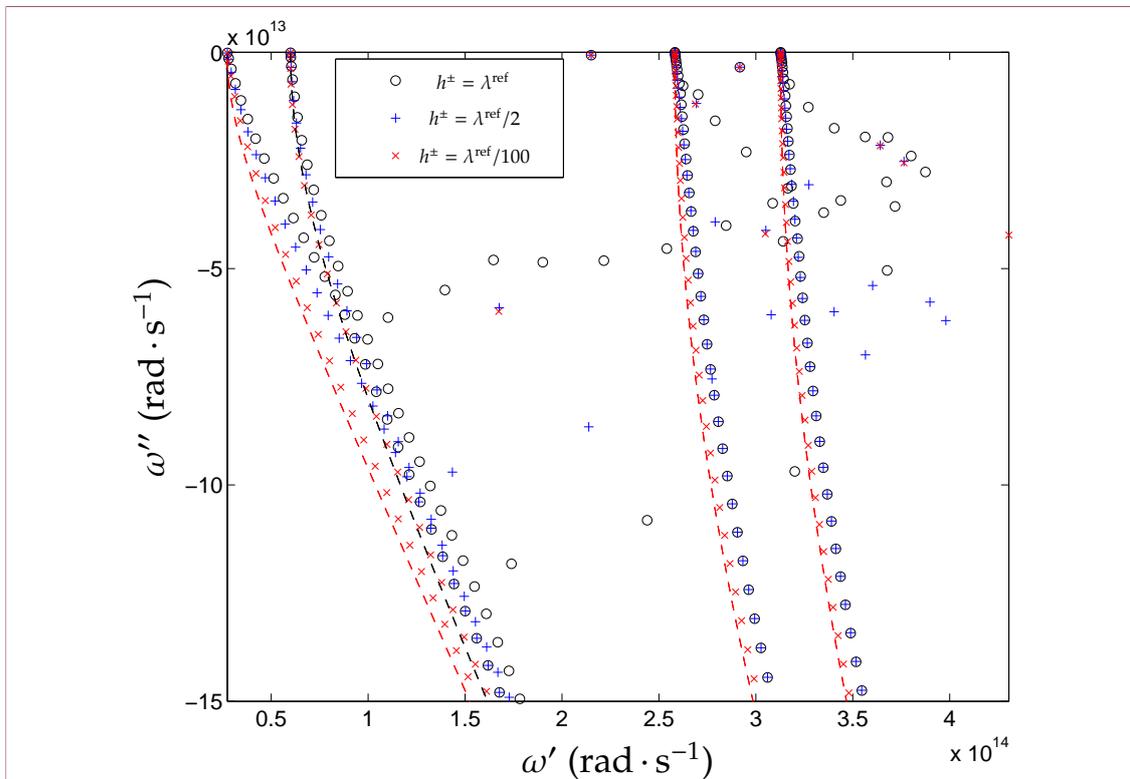
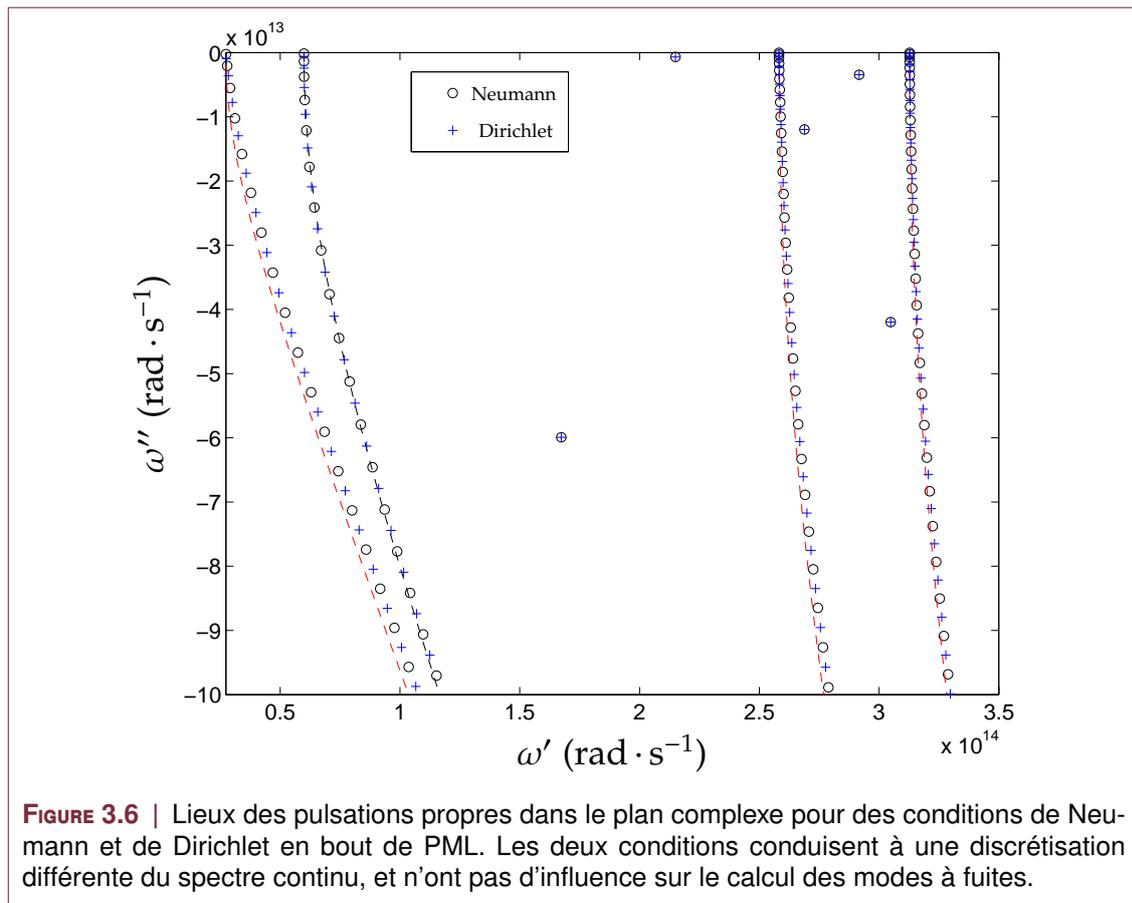


FIGURE 3.5 | Lieux des pulsations propres dans le plan complexe pour différentes distances h^\pm des PML à la structure. Lorsque la PML est trop loin de la structure diffractive, des instabilités numériques apparaissent et les modes sont mal calculés.

Condition aux limites en bout de PML

Enfin, il est légitime de se demander quelle est l'influence de la condition aux limites que l'on impose en bout de PML. Jusque là nous avons toujours utilisé une condition de Neumann homogène. Considérons toujours l'exemple numérique du réseau de fentes, de paramètres $\zeta^\pm = e^{i\pi/4}$, $\widehat{h}^\pm = 10\lambda^{\text{ref}}/\sqrt{\varepsilon^\pm}$, $h^\pm = \lambda^{\text{ref}}/100$, avec $\lambda^{\text{ref}} = 11\ \mu\text{m}$. En imposant soit une condition de Neumann, soit une condition de Dirichlet sur la frontière extérieure des PML, on voit (cf. Fig 3.6) que les modes de radiation calculés sont différents, en revanche ils sont dans les deux cas une approximation du spectre continu. Les modes à fuites sont, quant à eux encore une fois très peu sensibles à ce paramètre qui est une caractéristique

des PML.



3.1.2 Tétrachotomie

La recherche des pôles du coefficient de transmission en amplitude est un problème délicat puisque nous ignorons *a priori* le nombre de pôles ainsi que leur localisation dans le plan complexe. Considérons une restriction rectangulaire R du plan complexe de bord $\partial R = \Gamma$, et fixons α dans \mathbb{R} . On peut montrer que $t(\omega)$ possède une infinité dénombrable de pôles simples ω_n et peut être mis sous la forme ([153]) :

$$t(\omega) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{A_n}{\omega - \omega_n} + g(\omega)$$

où les coefficients $A_n \in \mathbb{C}$ et où g est une fonction holomorphe quelconque représentant le processus non résonant.

On considère maintenant que Γ est un lacet de Jordan contenant le pôle ω_m et uniquement celui-là. On définit les intégrales I_k pour $k = 0, 1, 2$:

$$I_k = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\Gamma} \omega^k t(\omega) d\omega = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\Gamma} \omega^k \frac{A_m}{\omega - \omega_m} d\omega \quad (3.10)$$

puisque d'après le théorème de Cauchy (A.2), l'intégrale de g sur un contour fermé est nulle.

En appliquant le théorème des résidus (A.3) à $f_k : \omega \mapsto \omega^k \frac{A_m}{\omega - \omega_m}$ on obtient :

$$I_k = \text{Res}_{\omega_m} f_k = \lim_{\omega \rightarrow \omega_m} (\omega - \omega_m) f_k(\omega) = A_m \omega_m^k$$

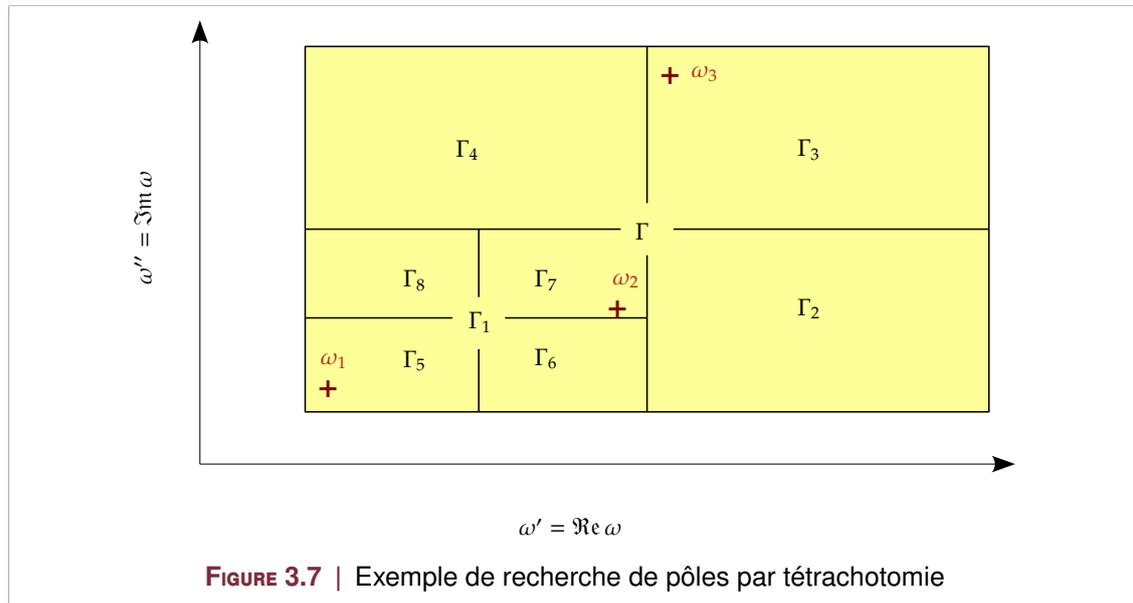


FIGURE 3.7 | Exemple de recherche de pôles par tétrachotomie

Ainsi connaissons-nous le coefficient $A_m = I_0$, et le pôle ω_m est donné précisément par :

$$\omega_m = \frac{I_2}{I_1} = \frac{I_1}{I_0} \quad (3.11)$$

L'algorithme de tétrachotomie consiste à calculer les pôles les uns après les autres en subdivisant le domaine en quatre jusqu'à « cerner » tous les pôles. Un exemple d'illustration est donné en figure 3.7.

Le calcul des intégrales 3.10 nous permet de distinguer trois cas de figure :

- $I_0 = I_1 = 0$: pas de pôle (cas de $\Gamma_2, \Gamma_4, \Gamma_6$ et Γ_8)
- $\frac{I_2}{I_1} = \frac{I_1}{I_0}$: un seul pôle (cas de Γ_3, Γ_5 et Γ_7)

– $\frac{l_2}{l_1} \neq \frac{l_1}{l_0}$: plusieurs pôles (cas de Γ et Γ_1)

La performance de la méthode est liée à la précision du calcul des intégrales 3.10. Le procédé de calcul (paramétrisation des bords de Γ et périodisation) est décrit intégralement dans [103]. D'un point de vue pratique, la méthode est implémentée à l'aide d'une routine Matlab.

3.2 Validation de la méthode

3.2.1 Exemple d'un empilement multicouche

Afin de valider les deux méthodes et de les comparer sur un cas simple et académique, on recherche les résonances d'un empilement de quatre couches, comme schématisé en Fig. 3.8. On se place dans le cas de polarisation TM. On cherche des résonances en incidence normale ($\theta = 0$), donc on fixe $\alpha = 0$. Les paramètres de l'exemple suivant sont $h_1 = 26 \mu\text{m}$, $h_2 = 0.5 \mu\text{m}$, $\epsilon_{\text{air}} = 1$, $\epsilon_{\text{Si}} = 11.7$, et les permittivités relatives [105] des autres matériaux (SiO₂ et ZnSe) sont représentées en Fig. 3.9 dans l'infrarouge lointain. Dans ce domaine spectral, on peut négliger l'absorption dans le ZnSe. En revanche, on travaille dans la bande d'absorption du SiO₂ (due à la résonance de la liaison Si-O vers $9.3 \mu\text{m}$) les parties réelles et imaginaires de sa permittivité relative varient rapidement avec la longueur d'onde (cf. Figure 3.9).

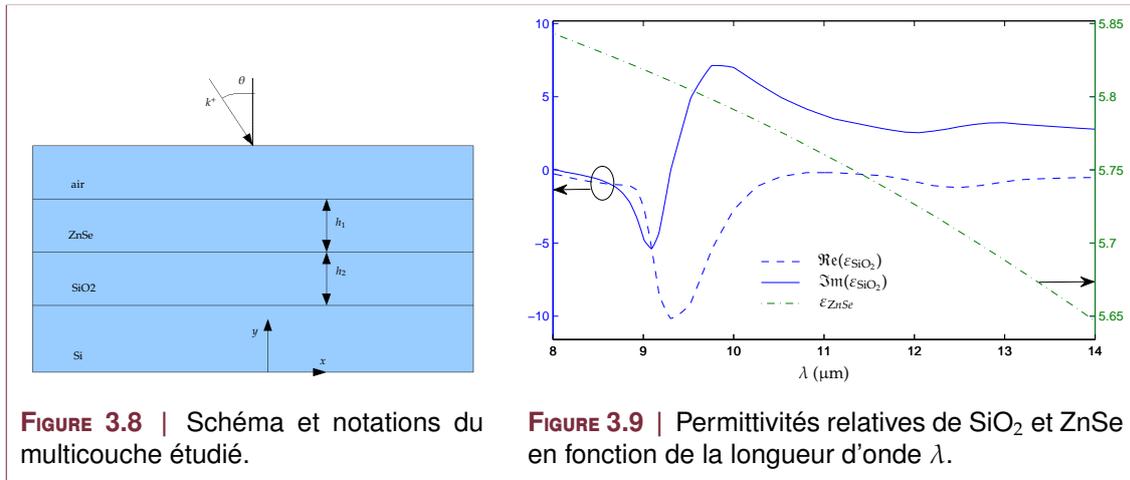


FIGURE 3.8 | Schéma et notations du multicouche étudié.

FIGURE 3.9 | Permittivités relatives de SiO₂ et ZnSe en fonction de la longueur d'onde λ .

L'étude de matériaux dispersifs se heurte au fait que le problème aux valeurs propres ne peut pas être traité directement par des *solvers* classiques, puisque l'opérateur dont on recherche les valeurs propres dépend lui-même de la valeur propre recherchée ω_n via $\epsilon(\omega_n)$. En pratique la permittivité est supposée constante : on recherche N_{eig} valeurs propres $\omega_n^{(1)}$ autour de la fréquence $\omega^{(0)}$ fixée arbitrairement. Puis, pour $n = 1, 2, \dots, N_{\text{eig}}$ on recherche une seule valeur propre $\omega_n^{(2)}$ autour de $\omega_n^{(1)}$ avec $\epsilon_r(\omega_n^{(1)})$ « mis à jour », et on itère en calculant $\omega_n^{(k)}$ jusqu'à ce qu'il y ait convergence avec une précision désirée sur la valeur de $\omega_n^{(k)}$.

Pour obtenir le coefficient de transmission de la structure, on utilise un formalisme matriciel abondamment traité dans la littérature (voir par exemple [82, 107]).

La Fig. 3.10 montre la position dans le plan complexe des résonances trouvées par la tétrachotomie et par la résolution du problème aux valeurs propres par la FEM. Pour

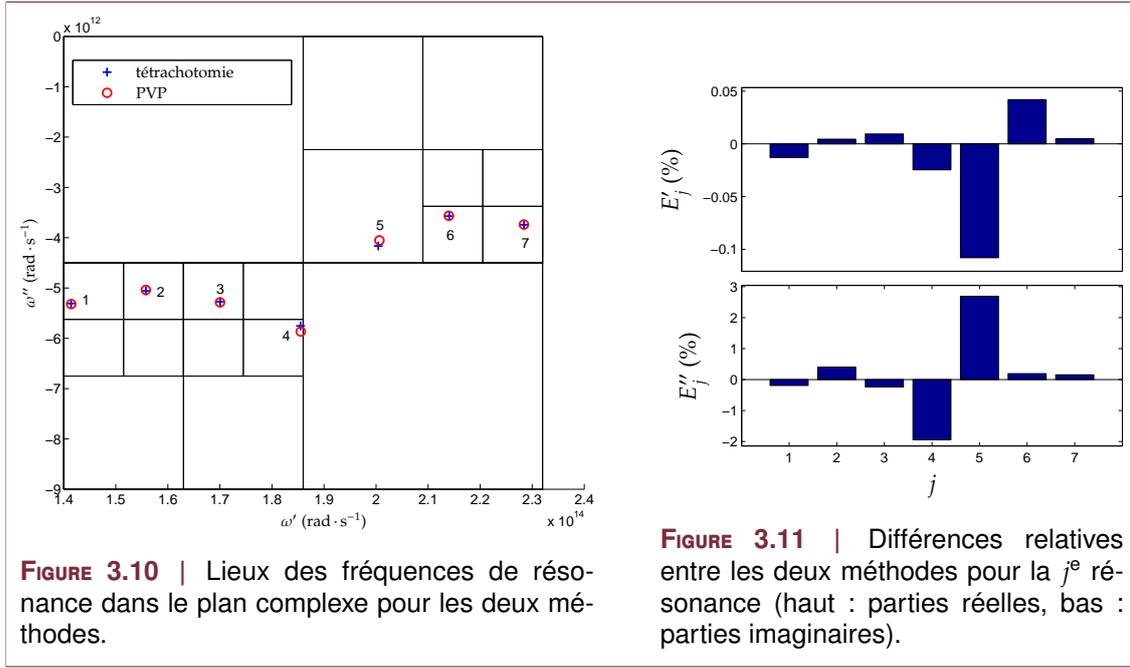


FIGURE 3.10 | Lieux des fréquences de résonance dans le plan complexe pour les deux méthodes.

FIGURE 3.11 | Différences relatives entre les deux méthodes pour la j^e résonance (haut : parties réelles, bas : parties imaginaires).

comparer les résultats, on définit les différences relatives suivantes :

$$E'_n = \frac{\omega'_n{}^{\text{tetra}} - \omega'_n{}^{\text{fem}}}{\omega'_n{}^{\text{tetra}}} \quad \text{et} \quad E''_n = \frac{\omega''_n{}^{\text{tetra}} - \omega''_n{}^{\text{fem}}}{\omega''_n{}^{\text{tetra}}} \quad \text{pour } n = 1, 2, \dots, 7 \quad (3.12)$$

Les deux méthodes sont en très bon accord comme on peut le voir en Fig. 3.11 : la différence relative maximale en valeur absolue est de 0.1% pour les parties réelles et de 2.7% pour les parties imaginaires. Remarquons que cet écart maximum concerne la résonance numérotée 5, qui se situe autour de $9.3 \mu\text{m}$, où $\varepsilon_{\text{SiO}_2}$ a un comportement résonant.

Le coefficient de transmission en énergie obtenu par un formalisme de matrices de transfert (trait plein) et par la résolution par la FEM décrite en partie 2.1 (cercles) est représenté sur la Fig. 3.12. Les deux calculs sont en accord satisfaisant, et, conformément aux résultats de l'analyse modale, la courbe de transmission présente des pics de résonance numérotés de 1 à 7 qui correspondent aux fréquences de résonance représentés en Fig. 3.10. Pour illustrer cette correspondance, on fait une approximation à un pôle, en supposant qu'autour du pôle ω_n , le coefficient de transmission peut s'écrire :

$$t_n(\omega) = \frac{B_n}{\omega - \omega_n} \quad (3.13)$$

On peut obtenir le coefficient $B_n = -i\omega''_n t(\omega'_n)$ en calculant le coefficient de transmission complexe $t(\omega'_n)$ à la résonance par la FEM. Ces modèles à un pôle sont tracés en Fig. 3.12 (pointillés) : localement autour de la fréquence de résonance, ils constituent une bonne approximation de la transmission, ω'_n définissant la position spectrale du pic et ω''_n sa largeur spectrale.

Cet exemple simple montre que les deux méthodes nous permettent de trouver les mêmes résonances avec une précision satisfaisante. Cela étant, la tetrachotomie présente pour son application en pratique un point faible : le calcul des intégrales 3.10 nécessite d'évaluer le coefficient de transmission pour un nombre de points dans le plan complexe qui augmente de manière notable avec la précision demandée. La méthode employée pour y parvenir doit être rapide pour pouvoir mettre en œuvre efficacement la tetrachotomie. On pourrait penser à calculer $t(\omega)$ par FEM, mais les temps de résolution

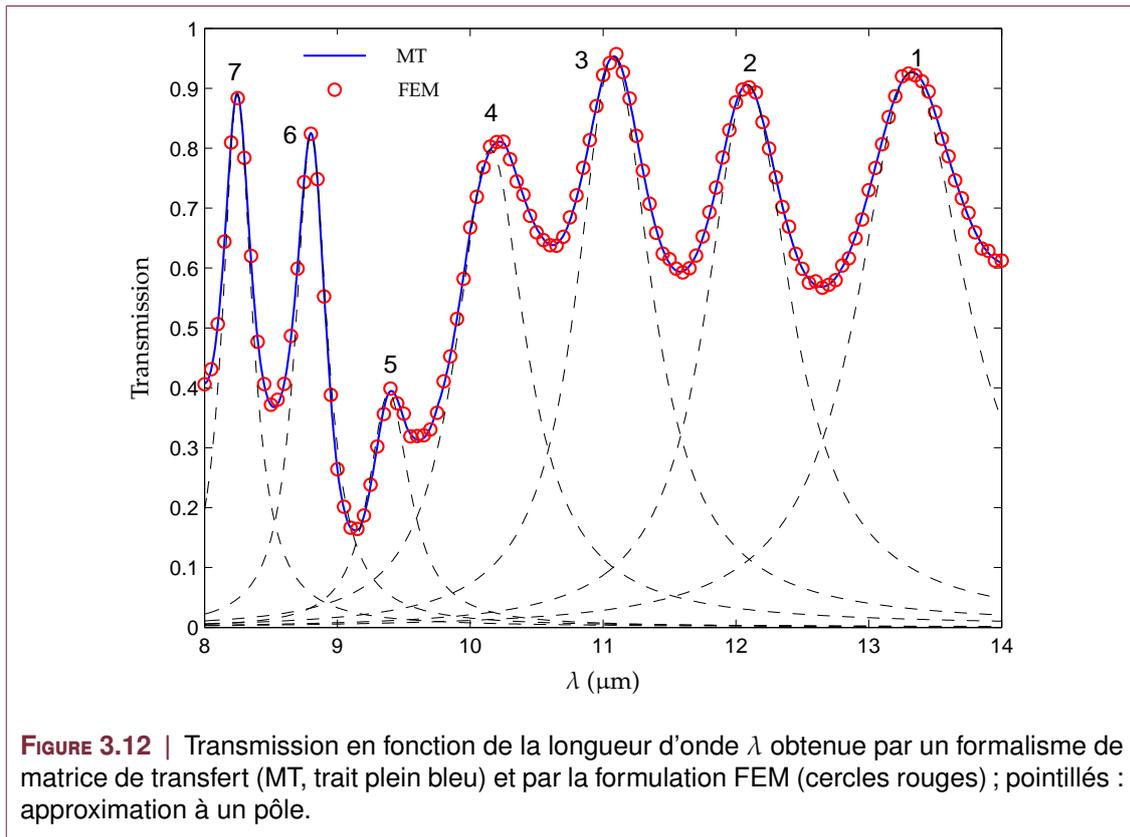


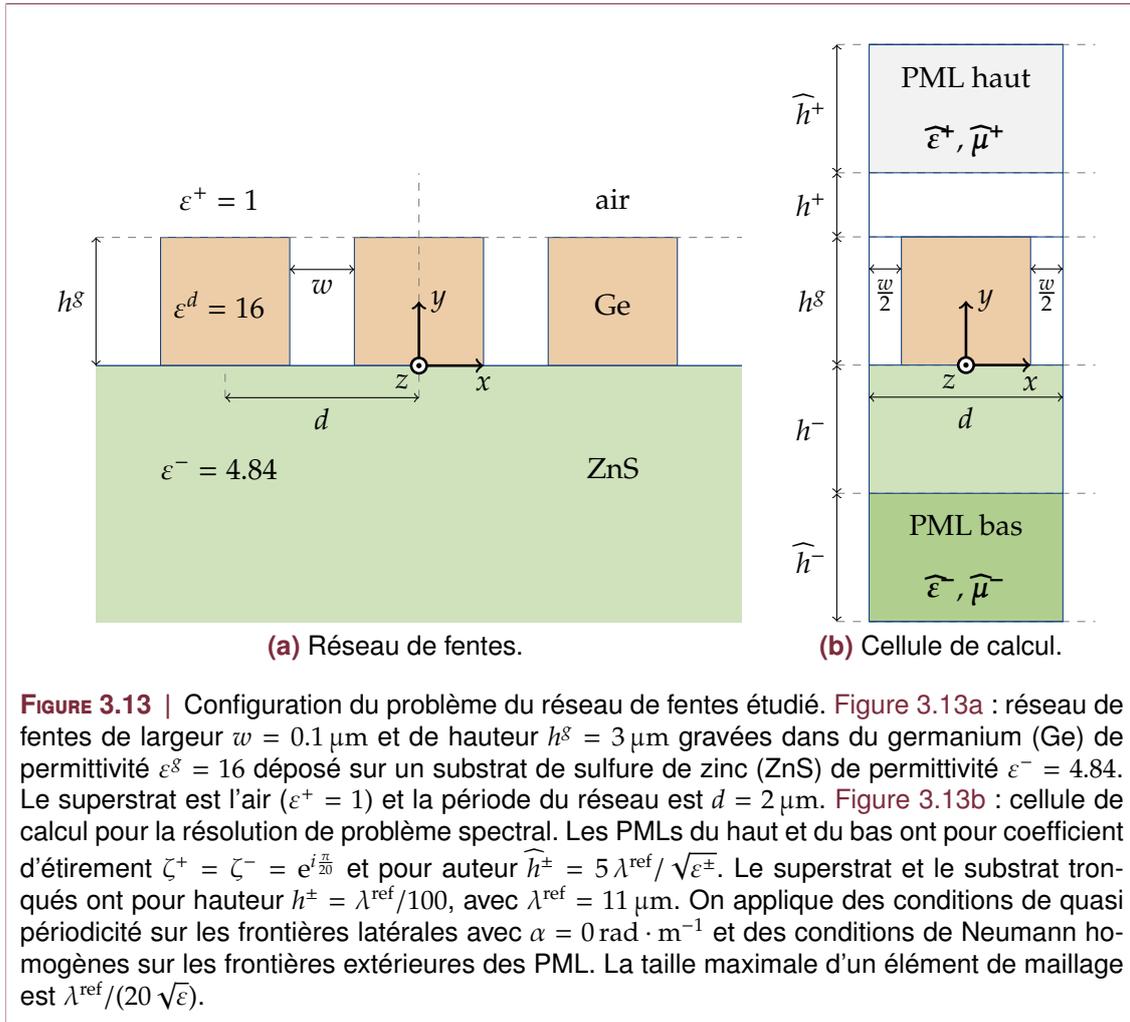
FIGURE 3.12 | Transmission en fonction de la longueur d'onde λ obtenue par un formalisme de matrice de transfert (MT, trait plein bleu) et par la formulation FEM (cercles rouges) ; pointillés : approximation à un pôle.

du problème pour une fréquence donnée sont prohibitifs. Un modèle analytique est la méthode la plus efficace (comme dans le cas du multicouche). Pour des réseaux de diffraction que l'on a pour objectif d'étudier, des formules peuvent être dérivées [70, 148], mais sous réserve de certaines hypothèses sur les matériaux (en considérant les métaux comme des conducteurs parfaits) et/ou la géométrie (taille du motif diffractif par rapport à la période), restreignant le domaine d'application de la méthode. L'avantage de la FEM est sa totale généralité vis-à-vis de la géométrie et des propriétés des matériaux. C'est pourquoi nous nous focalisons par la suite sur la résolution du problème aux valeurs propres par la FEM, que nous allons valider, dans la partie suivante, en comparant les résultats à ceux de la tétrachotomie sur un exemple d'un réseau de diffraction.

3.2.2 Exemple d'un réseau de fentes

Nous nous intéressons maintenant au problème qui nous préoccupe dans le cadre de notre étude, à savoir les réseaux de diffraction. L'objectif est toujours de valider la méthode numérique de recherche des modes à fuites par la FEM. Nous allons donc appliquer la tétrachotomie sur un exemple numérique d'un réseau de fentes. Comme nous l'avons fait remarquer dans la sous-section 3.2.1, l'application de l'algorithme de tétrachotomie nécessite d'évaluer le coefficient de transmission pour de nombreux points dans le plan complexe (typiquement plusieurs milliers). Le désavantage de la FEM est sa gourmandise en temps de calcul, de l'ordre de quelques secondes par fréquence pour un maillage avec $N_m = 6$. En conséquence, pour cette validation numérique, nous avons choisi d'utiliser une méthode beaucoup moins coûteuse en temps de calcul, la méthode modale de Fourier aussi connue sous le nom de RCWA (cf. partie 1.6.3). Cette méthode très populaire est largement employée pour la modélisation de réseaux de diffraction.

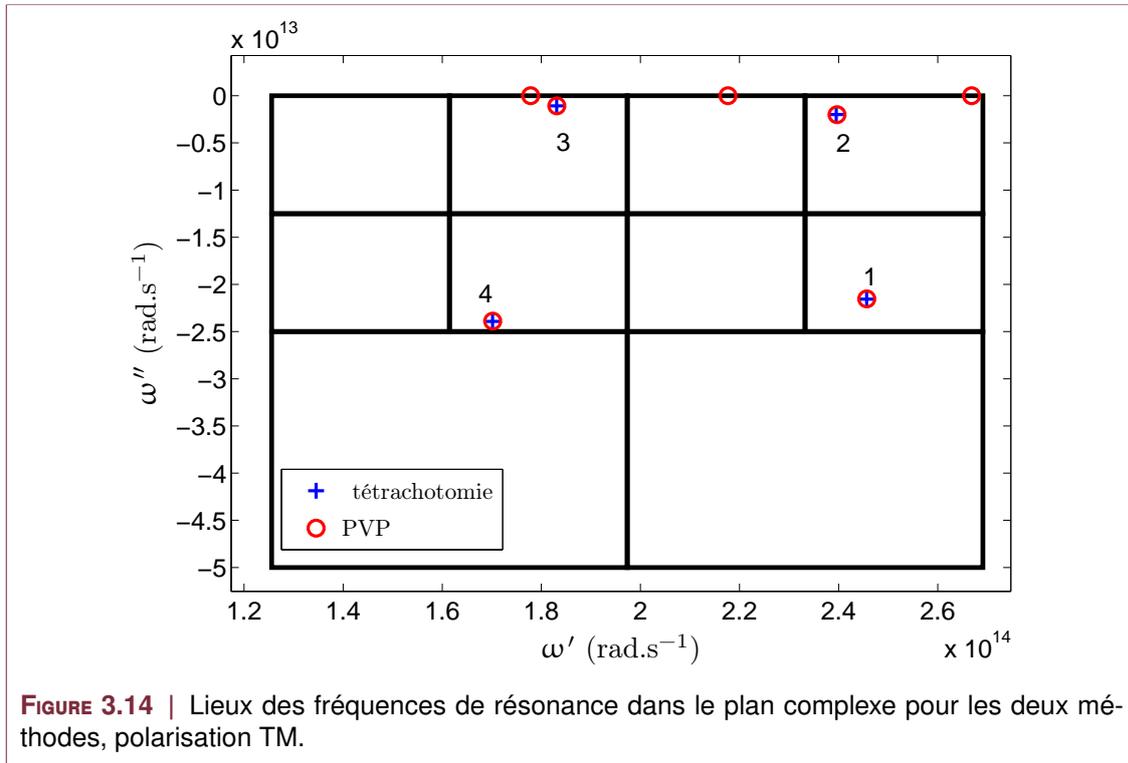
On considère un réseau mono-dimensionnel (voir Figure 3.13) de fentes de largeur $w = 0.1 \mu\text{m}$ gravées dans une couche de germanium ($n_{\text{Ge}} = 4$ dans l'infrarouge lointain)



d'épaisseur $h = 3 \mu\text{m}$ et déposée sur un substrat diélectrique en ZnS ($n^- = 2.2$). Le milieu incident est l'air ($n^+ = 1$) et la périodicité du réseau est $d = 3 \mu\text{m}$. Nous étudions le cas de polarisation TM et fixons $\alpha = 0 \text{ rad} \cdot \text{m}^{-1}$. Pour la résolution numérique par la FEM, on impose une condition de Neumann homogène sur les frontières extérieures des PML, on fixe $\zeta^\pm = e^{i\pi/4}$, $h^\pm = \lambda^{\text{ref}}/100$ et $\hat{h}^\pm = 5 \lambda^{\text{ref}} / \sqrt{\varepsilon^\pm}$ avec $\lambda^{\text{ref}} = 11 \mu\text{m}$. La taille maximale d'un élément de maillage est $\lambda^{\text{ref}}/(20 \sqrt{\varepsilon})$.

Cas TM

Les résultats obtenus par les deux méthodes sont illustrés sur la [Figure 3.14](#). On constate que la tétrachotomie permet de trouver uniquement les modes à fuites, qui ont une partie imaginaire significative. Les deux méthodes présentent un bon accord avec une erreur relative de moins de 0.07% sur les parties réelles et de moins de 0.7% sur les parties imaginaires. Observons les efficacités de diffraction : on a tracé les coefficients de transmission et de réflexion dans l'ordre 0 calculés par la FEM et par la RCWA en [Figure 3.16](#). Tout d'abord, les deux méthodes sont très proches d'un point de vue des grandeurs énergétiques, ce qui valide encore une fois notre formulation de la méthode des éléments finis. De plus, comme l'indiquent les traits verticaux en pointillés, la partie réelle de la longueur d'onde propre coïncide avec une résonance des coefficients de Fresnel. Les valeurs propres notées 1 et 4 ont une partie imaginaire importante, ce qui se traduit par un pic ou un creux de résonance assez large, tandis que les valeurs propres 2 et 3 ont une partie imaginaire plus petite, traduisant un amortissement plus faible, ce qui explique pourquoi les pics associés sont étroits spectralement.



Cas TE

Nous étudions à présent le cas TE, tous les paramètres étant identiques. Ici encore, les deux méthodes présentent un bon accord (cf. [Fig. 3.17](#)) avec une erreur relative de moins de 0.005% sur les parties réelles et de moins de 1.4% sur les parties imaginaires.

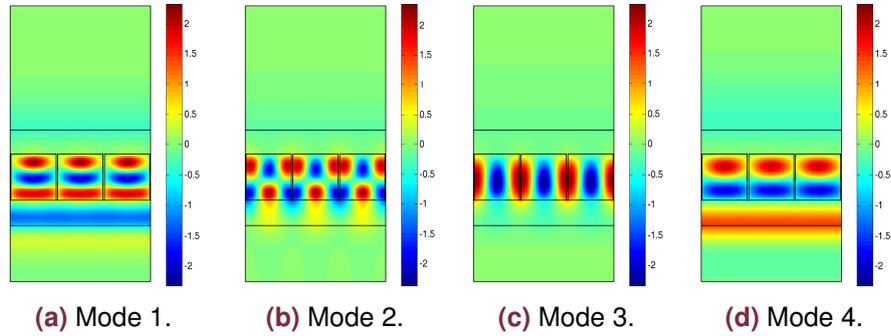


FIGURE 3.15 | Parties réelles de H_z pour les modes 1 à 4, polarisation TM.

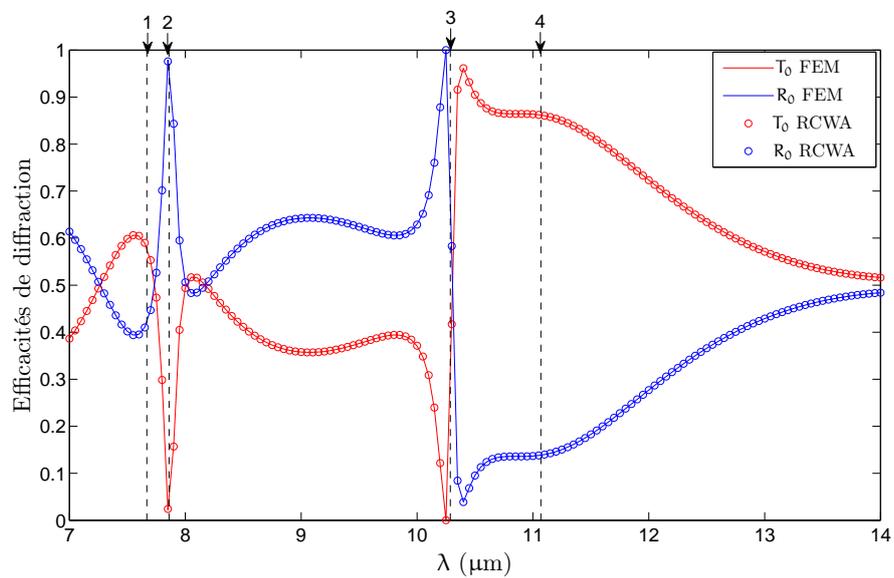
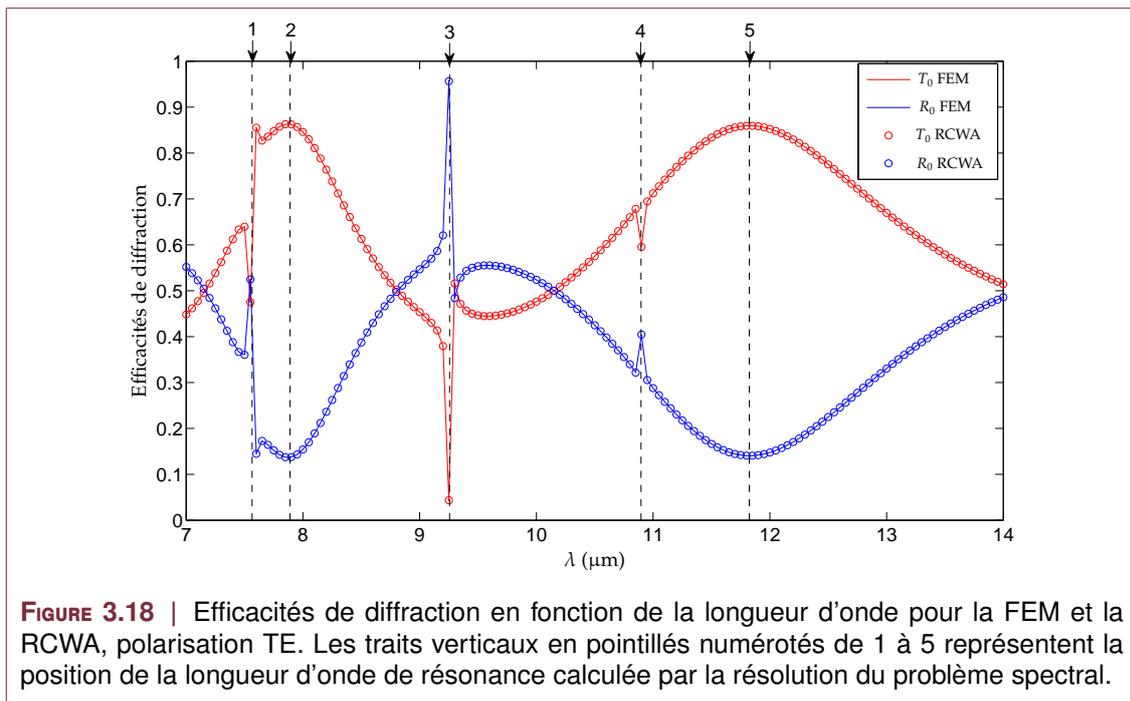
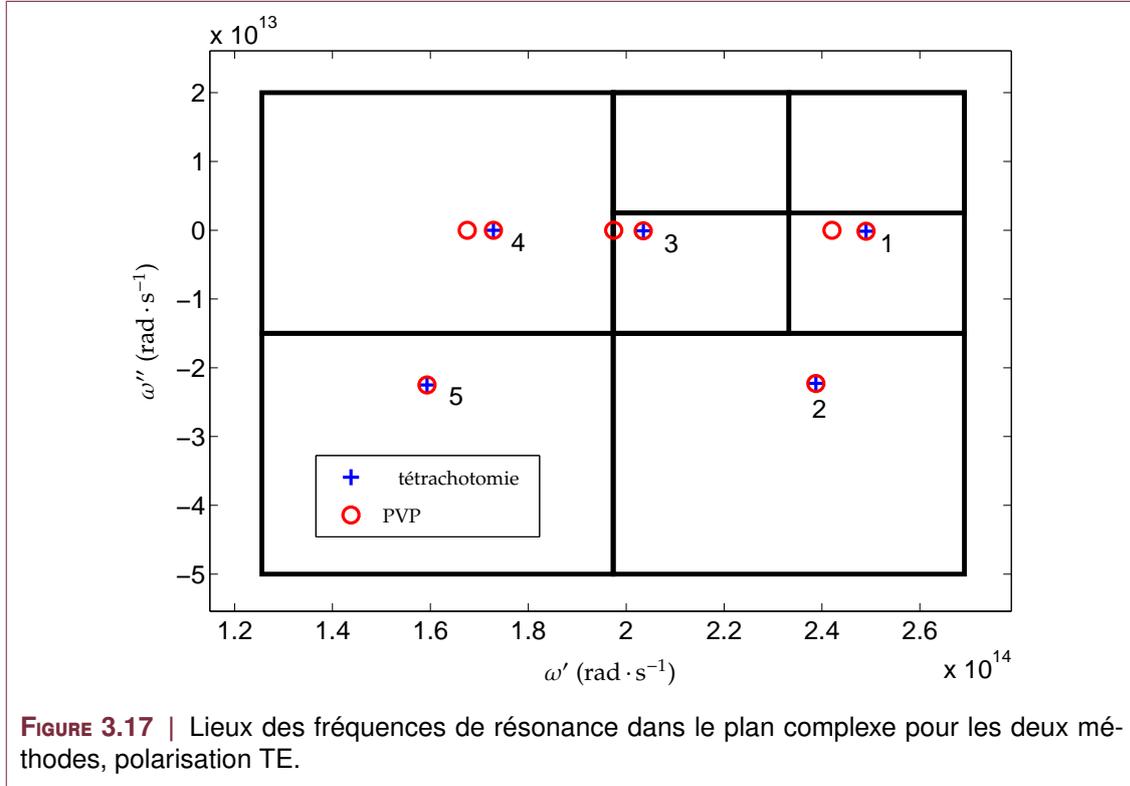


FIGURE 3.16 | Efficacités de diffraction en fonction de la longueur d'onde pour la FEM et la RCWA, polarisation TM. Les traits verticaux en pointillés numérotés de 1 à 4 représentent la position de la longueur d'onde de résonance calculée par la résolution du problème spectral.

De plus, la position spectrale des pics de résonance des coefficients de réflexion et de transmission correspond à la partie réelle de la longueur d'onde propre (cf. Fig. 3.18). d'un point de vue qualitatif, les pics les plus larges (2 et 5) sont associés à des fréquences de propres à forte partie imaginaire tandis que les pics étroits (1,3 et 4) correspondent à des fréquences de propres à faible partie imaginaire.



A ce stade de notre étude, nous avons validé l'approche qui consiste à résoudre le

problème spectral par la méthode des éléments finis, au travers d'un exemple d'un *slab* et d'un réseau de diffraction, en comparant les résultats obtenus avec la tétrachotomie. Pour les raisons évoquées précédemment (temps de calcul et limitations des méthodes de calcul du coefficient de transmission par rapport aux propriétés opto-géométriques des structures étudiées), nous utiliserons dans la suite uniquement la méthode de recherche des modes propres et fréquences propres par la FEM. Cette étape de validation nous a permis aussi d'observer qualitativement que la distribution de l'énergie dans la structure varie brutalement au voisinage de la partie réelle d'une fréquence propre. Autrement dit, une résonance correspond à l'excitation d'un mode propre, mais cette affirmation repose sur des observations qualitatives (on observe une corrélation entre les pics de résonance et la fréquence propre associée). Cette affirmation sera prouvée indiscutablement au chapitre 4. Mais nous allons poursuivre tout d'abord l'étude des propriétés spectrales de réseaux, en établissant une formulation de problème spectral adaptée à l'étude de matériaux dispersifs.

3.3 Le problème spectral en présence de dispersion

Pour traiter le problème spectral d'une structure comportant un matériau dont la permittivité dépend de la fréquence, nous avons utilisé la méthode classique du cas non dispersif et l'avons appliquée de manière itérative, comme décrit en sous-section 3.2.1. Cependant, cette méthode n'est pas directe et est assujettie à des critères arbitraires de convergence. Nous allons dans cette partie décrire une formulation capable de trouver les fréquences propres de réseaux ayant un seul matériau dispersif, dont la permittivité relative peut être décrite localement par un modèle adapté à cette formulation.

3.3.1 Modèle de permittivité

On suppose que la structure étudiée contient un seul matériau dispersif, homogène et isotrope, dont la permittivité relative peut être mise sous la forme :

$$\varepsilon^d(\omega) = \varepsilon_1^d - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_r^2} \quad (3.14)$$

où ω_r est la fréquence complexe de résonance de la permittivité du matériau. Ce modèle en apparence simpliste est en fait suffisant. En effet, on peut considérer deux cas :

- soit on est loin d'une résonance de la permittivité et l'approche qui consiste à supposer ε^d comme non dispersif est valide,
- soit on est proche de la résonance et alors on peut approcher ε^d par la loi (3.14).

Tous les milieux sauf le vide sont dispersifs. Les relations de Kramers-Kronig [67, 68] relient les parties réelles et imaginaires des fonctions de transfert et sont obtenues en exprimant la *causalité*. En Électromagnétisme elles sont vérifiées par la permittivité et impliquent que s'il y a de l'absorption dans le matériau, il y a aussi forcément de la dispersion. Dans l'IR III, on a vu (cf. Figure 3.9) que la silice présente un comportement dispersif pouvant être modélisé par l'Équation 3.14. Les métaux nobles, dans le visible possèdent des résonances de permittivité dues à des transitions électroniques interbandes. En revanche dans l'infrarouge lointain, la dispersion des métaux est très bien approchée par un modèle de Drude. À titre d'exemple, et vu que ce matériau sera employé par la suite, nous décrivons les paramètres employés pour la permittivité du carbure de silicium SiC. Dans la littérature, il existe un modèle de Lorentz du type ([105]) :

$$\varepsilon^L(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega} \right) \quad (3.15)$$

avec $\varepsilon_\infty = 6.7$, $\sigma_L = 969 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_T = 793 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_\Gamma = 4.76 \text{ cm}^{-1}$, avec $\omega_L = 2\pi c\sigma_L$, $\omega_T = 2\pi c\sigma_T$ et $\Gamma = 2\pi c\sigma_\Gamma$.

La fonction ε^L possède un pôle $\omega_p = \frac{1}{2}(\sqrt{4\omega_T^2 - 2\Gamma})$. On se propose un modèle du type (3.14) avec $\omega_r = \omega_p = 1.49 \cdot 10^{14} + i4.48 \cdot 10^{11} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$, $\varepsilon_1^d = \varepsilon_\infty = 6.7$ et $\omega_p = \varepsilon_\infty \sqrt{\omega_L^2 - \omega_T^2} = 2.71 \cdot 10^{14} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$. Les parties réelles et imaginaires de ε^d sont tracées sur la figure 3.19.

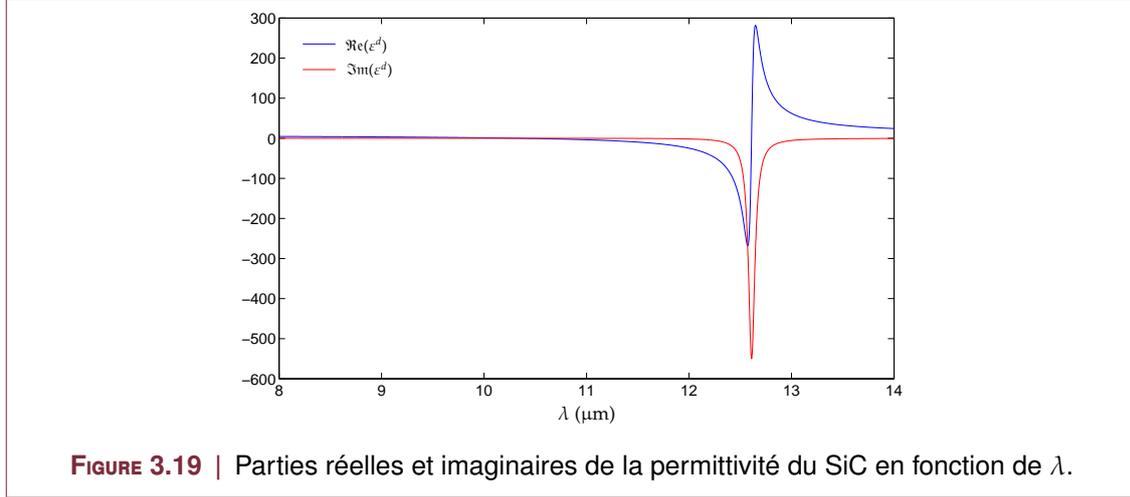


FIGURE 3.19 | Parties réelles et imaginaires de la permittivité du SiC en fonction de λ .

3.3.2 Formulation du problème aux valeurs propres

Nous nous intéressons à des structures du type de celles décrites en partie 2.1, c'est à dire des réseaux de diffraction mono-périodiques imbriqués dans un empilement multicouche. Les matériaux composant cette structure peuvent être éventuellement hétérogènes et anisotropes, à l'exception du substrat Ω_- , du superstrat Ω_+ , et du ou des domaines contenant le matériau dispersif étudié $\Omega_{d_1}, \Omega_{d_2}, \dots, \Omega_{d_M}$. On note ε^j et μ^j les tenseurs respectivement de permittivité et de perméabilité relative du domaine indicé j . On introduit les champs matriciels définis par morceaux C et D :

$$C(x, y) = \begin{cases} \varepsilon_1^d \mathbf{Id}_3 & \text{pour } (x, y) \in \Omega_{d_i}, i = 1, 2, \dots, M, \\ \varepsilon^j \mathbf{Id}_3 & \text{pour } (x, y) \in \Omega_j, j = \{+, -\}, \\ \varepsilon^j(x, y) & \text{pour } (x, y) \in \Omega_j, j = 1, 2, \dots, N, j \neq d_1, d_2, \dots, d_M. \end{cases}$$

et

$$D(x, y) = \begin{cases} \omega_p^2 \mathbf{Id}_3 & \text{pour } (x, y) \in \Omega_{d_i}, i = 1, 2, \dots, M \\ \mathbf{0} & \text{sinon} \end{cases}$$

D'après les définitions précédentes la fonction décrivant la permittivité relative de la structure peut se mettre sous la forme :

$$\varepsilon(x, y, \omega) = C(x, y) - \frac{D(x, y)}{\omega^2 - \omega_r^2}, \quad (3.16)$$

Dans la suite de cette partie et afin de ne pas alourdir les notations on n'écrira plus la dépendance spatiale de la permittivité, mais il faut garder à l'esprit le fait que C et D dépendent de x et y .

Le cas transverse électrique

Le problème défini par l'équation (3.1) s'écrit dans le cas TE (en omettant l'indice n pour alléger les notations) :

$$-\operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v) = \frac{\omega^2}{c^2} \chi v, \quad (3.17)$$

avec $u = e$, $\xi = \tilde{\mu}^T / \det(\tilde{\mu})$, $\chi = \varepsilon_{zz}$ et $\tilde{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \overline{\mu}_a \\ \mu_a & \mu_{yy} \end{pmatrix}$.

En tenant compte du modèle de permittivité (3.16) défini précédemment, et en multipliant les deux membres de l'équation (3.17) par $\omega^2 - \omega_r^2$, on obtient après développement :

$$-\frac{C_{zz}}{c^2} v \omega^4 + \left[\frac{1}{c^2} (C_{zz} \omega_r^2 + D_{zz}) v - \operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v) \right] \omega^2 + \omega_r^2 \operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v) = 0. \quad (3.18)$$

Cette dernière égalité fait apparaître des opérateurs *indépendants de la fréquence* \mathcal{M}_2^s , \mathcal{M}_1^s et \mathcal{M}_0^s définis comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0^s(v) &= \omega_r^2 \operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v), \\ \mathcal{M}_1^s(v) &= \frac{1}{c^2} (C_{zz} \omega_r^2 + D_{zz}) v - \operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v), \\ \mathcal{M}_2^s(v) &= -\frac{C_{zz}}{c^2} v, \\ \sigma &= \omega^2. \end{aligned}$$

On est donc conduit au problème aux valeurs propres généralisé quadratique suivant :

$$\mathcal{M}_2^s(v) \sigma^2 + \mathcal{M}_1^s(v) \sigma + \mathcal{M}_0^s(v) = 0. \quad (3.19)$$

Ce type de problème est réduit à un problème aux valeurs propres classique en posant $w = \sigma v$. On obtient ainsi un système de deux équations couplées qui s'écrit sous forme matricielle comme un problème aux valeurs propres généralisé linéaire :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{M}_0^s & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} -\mathcal{M}_1^s & -\mathcal{M}_2^s \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Le cas transverse magnétique

Le problème défini par l'équation (3.1) s'écrit dans le cas TM :

$$-\operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v) = \frac{\omega^2}{c^2} \chi v, \quad (3.21)$$

avec $v = H_z$, $\xi = \tilde{\varepsilon}^T / \det(\tilde{\varepsilon})$, $\chi = \mu_{zz}(\omega)$ et $\tilde{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \overline{\varepsilon}_a \\ \varepsilon_a & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix}$.

On suppose ici que tous les matériaux sont isotropes, on a alors $\xi = \varepsilon^{-1}(\omega) \underline{\underline{\operatorname{Id}_2}}$, et on cherche à mettre $\varepsilon^{-1}(\omega)$ sous la forme :

$$\varepsilon^{-1}(\omega) = \zeta(\omega) = \zeta_1 - \frac{\zeta_2}{\omega^2 - \omega_R^2} \quad (3.22)$$

D'après l'équation (3.14), on a :

$$\varepsilon^{-1}(\omega) = \frac{\omega^2 - \omega_r^2}{\varepsilon_1(\omega^2 - \omega_r^2) - \omega_p^2} = \varepsilon_1^{-1} + \frac{\omega_p^2 / \varepsilon_1^2}{(\omega^2 - \omega_r^2) - \omega_p^2 / \varepsilon_1}$$

Par identification on a donc $\zeta_1 = \varepsilon_1^{-1}$, $\zeta_2 = -\omega_p^2/\varepsilon_1^2$ et $\omega_R = \sqrt{\omega_r^2 + \omega_p^2/\varepsilon_1}$. Néanmoins, ce modèle n'est pas adapté à une formulation analogue au cas TE. En effet, si l'on multiplie l'équation (3.21) par $\omega^2 - \omega_R^2$, on ne peut pas « faire rentrer » ce facteur dans le terme $\text{div}(\varepsilon^{-1} \mathbf{grad} v)$ puisque ω_R dépend de x et y . La situation semble donc désespérée à moins de résoudre le problème aux valeurs propres vectoriel avec toutes les composantes du champ électrique afin de traiter le cas TM. On trouvera donc à la fois les modes TE et TM.

En notant $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)^T = (E_x, E_y, E_z)^T$, le problème spectral revient à chercher les fréquences propres $\omega \in \mathbb{C}$ et les champs propres \mathbf{v} tels que :

$$\mathbf{rot}(\boldsymbol{\mu}^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{v}) = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) \mathbf{v} \quad (3.23)$$

En tenant compte du modèle de permittivité (3.16) défini précédemment, et en multipliant les deux membres de l'équation (3.23) par $\omega^2 - \omega_r^2$, on obtient après développement :

$$-\frac{1}{c^2} \mathbf{C} \mathbf{v} \omega^4 + \left[\mathbf{rot}(\boldsymbol{\mu}^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{v}) + \frac{1}{c^2} (\mathbf{C} \omega_r^2 + \mathbf{D}) \mathbf{v} \right] \omega^2 - \omega_r^2 \mathbf{rot}(\boldsymbol{\mu}^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{v}) = 0. \quad (3.24)$$

De manière analogue au cas TE, cette dernière égalité fait apparaître des opérateurs indépendants de la fréquence \mathcal{M}_2^p , \mathcal{M}_1^p et \mathcal{M}_0^p définis comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0^p(\mathbf{v}) &= -\omega_r^2 \mathbf{rot}(\boldsymbol{\mu}^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{v}), \\ \mathcal{M}_1^p(\mathbf{v}) &= \mathbf{rot}(\boldsymbol{\mu}^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{v}) + \frac{1}{c^2} (\mathbf{C} \omega_r^2 + \mathbf{D}) \mathbf{v}, \\ \mathcal{M}_2^p(\mathbf{v}) &= -\frac{1}{c^2} \mathbf{C} \mathbf{v}, \\ \sigma &= \omega^2. \end{aligned}$$

On arrive au problème aux valeurs propres généralisé quadratique suivant :

$$\mathcal{M}_2^p(\mathbf{v}) \sigma^2 + \mathcal{M}_1^p(\mathbf{v}) \sigma + \mathcal{M}_0^p(\mathbf{v}) = 0 \quad (3.25)$$

que l'on traite comme au paragraphe précédent.

3.3.3 Exemples d'application

Le cas TE

Exemple académique

On se propose de vérifier la méthode développée précédemment tout d'abord sur un exemple simple où l'on connaît l'expression analytique de la solution. On considère une tige infinie selon (Oz) de section rectangulaire Ω de côté $L_x = 5 \mu\text{m}$ et $L_y = 9 \mu\text{m}$, constituée de SiC de perméabilité égale à 1 et dont la permittivité est du type 3.14, soit :

$$\varepsilon^d(\omega) = \varepsilon_1^d - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_r^2},$$

avec $\omega_r = 1.49 \cdot 10^{14} + i 4.48 \cdot 10^{11} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$, $\omega_p = 2.71 \cdot 10^{14} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$ et $\varepsilon_1^d = 6.7$. On impose sur le bord $\partial\Omega$ du rectangle des conditions de Dirichlet homogènes. Le problème physique consiste donc à trouver les fréquences de résonance de cette tige remplie de

SiC et dont les bords sont considérés comme parfaitement réfléchissants. Le problème spectral à résoudre se formule ainsi :

$$\begin{cases} -\Delta v = \Lambda \varepsilon v & \text{dans } \Omega \\ v = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.26)$$

avec $\Lambda = \frac{\omega^2}{c^2}$, et l'opérateur en jeu est l'opposé du Laplacien $-\Delta$. Les valeurs propres sont alors connues analytiquement et sont telles que :

$$\Lambda_{m,n} = \pi^2 \left(\frac{m^2}{L_x} + \frac{n^2}{L_y} \right) = \frac{\omega_{m,n}^2}{c^2} \varepsilon^d(\omega_{m,n}) \quad (3.27)$$

pour m et n entiers non nuls. En injectant le modèle (3.14) dans l'égalité (3.27), on obtient une équation bicarrée en $\omega_{m,n}$. On résout cette équation et on note les valeurs propres classées par ordre croissant selon leurs parties réelles ω_i^a .

On résout le problème spectral dans le cas dispersif par la méthode développée précédemment, on recherche N_{eig} valeurs propres notées ω_i^d . Pour vérification, on résout le cas non dispersif avec une permittivité $\varepsilon^d(\omega_j^d)$ pour $j = 1, 2, \dots, N_{\text{eig}}$, on cherche une valeur propre que l'on note ω_i^{nd} , $i = 1, 2, \dots, N_{\text{eig}}$. La Figure 3.20 montre la position dans le plan complexe des pulsations propres trouvées par les trois méthodes.

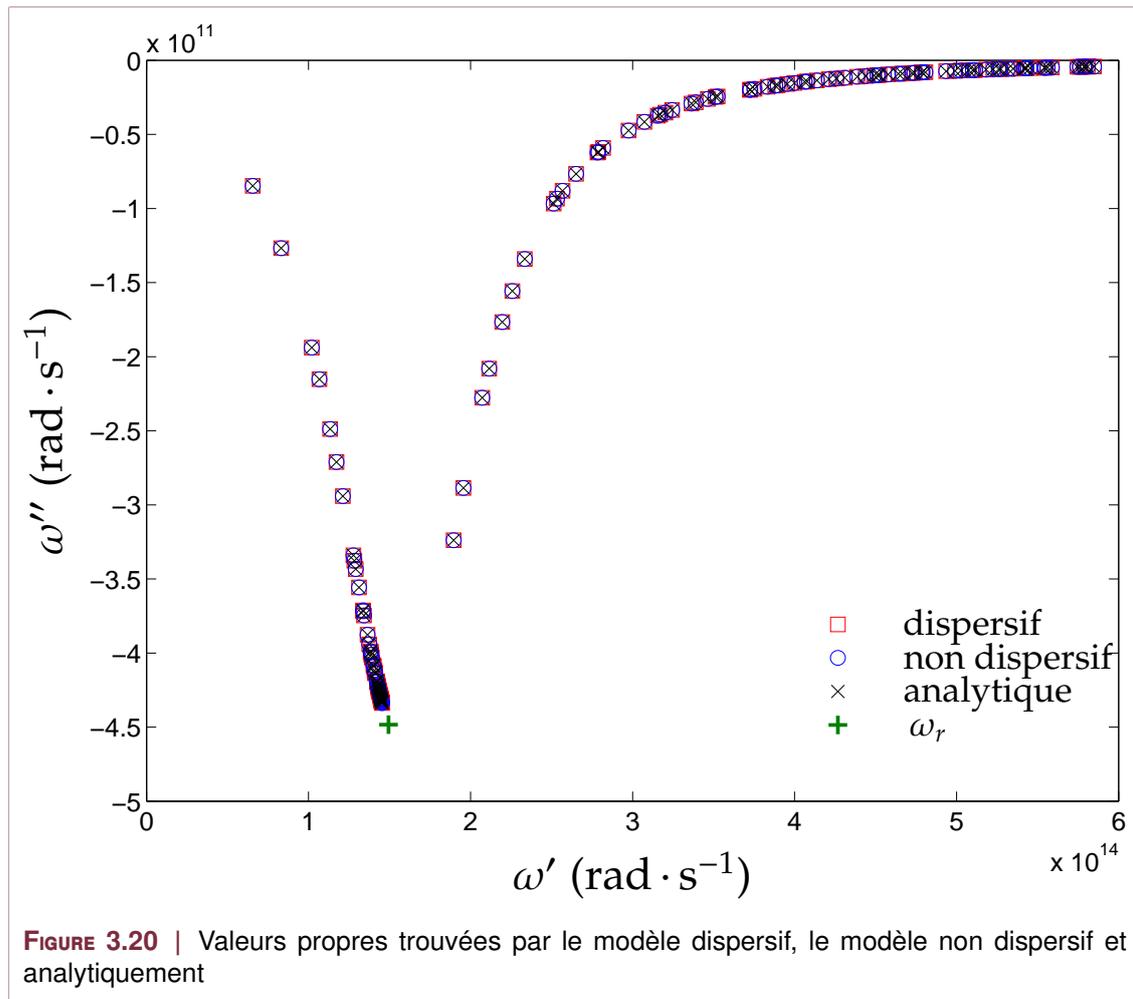
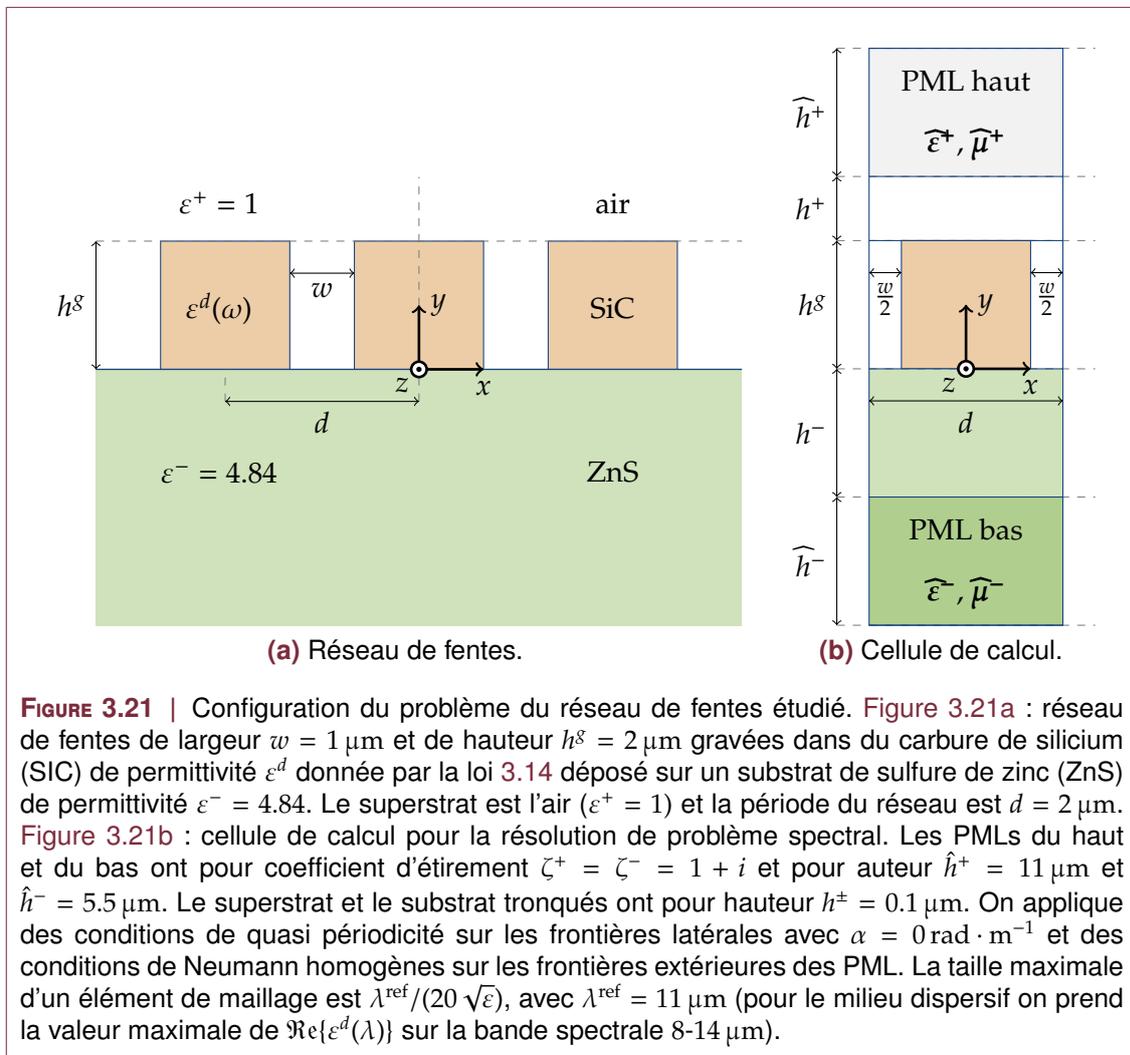


FIGURE 3.20 | Valeurs propres trouvées par le modèle dispersif, le modèle non dispersif et analytiquement

On constate un très bon accord entre les méthodes, les erreurs relatives restant inférieures à 10^{-5} pour les parties réelles et à 10^{-4} pour les parties imaginaires.

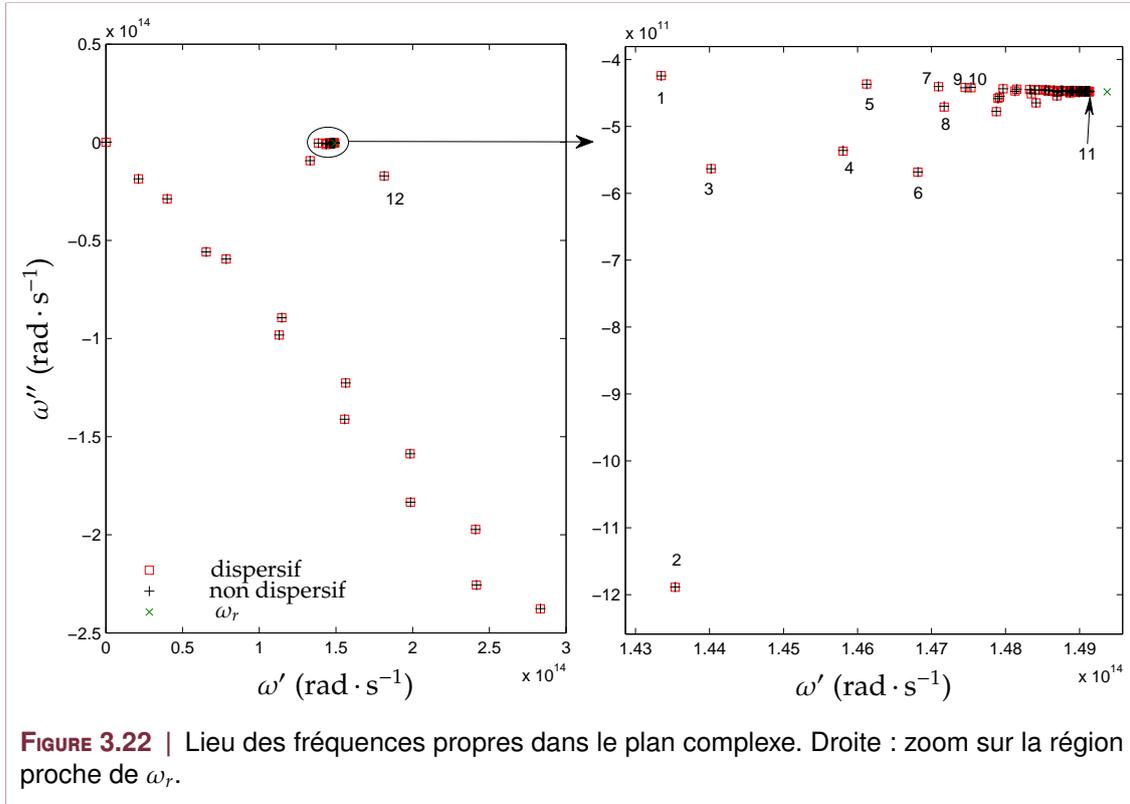
Nous observons une convergence des fréquences propres vers la fréquence de résonance du matériau ω_r , qui est un « point d'accumulation ». Cette convergence se fait de telle sorte que $\Re(\omega_i^d) < \Re(\omega_r)$. La permittivité associée devient de plus en plus grande, et par conséquent la longueur d'onde dans le milieu devient de plus en plus faible. Autrement dit, les variations spatiales des fonction propres sont de plus en plus rapides, ce qui nécessite d'un point de vue numérique de mailler très finement la cellule pour pouvoir approximer ces vecteurs propres correctement. Pour $\Re(\omega_i^d) > \Re(\omega_r)$, on a une autre « branche » de fréquences propres, qui convergent vers les fréquences propres réelles du problème Hermitien où $\varepsilon^d = \varepsilon_\infty$. Ces remarques nous font sentir combien le problème est intrinsèquement complexe : il serait vain de chercher à trouver *toutes* les fréquences propres du système dans une région donnée du plan complexe.

Réseau de diffraction



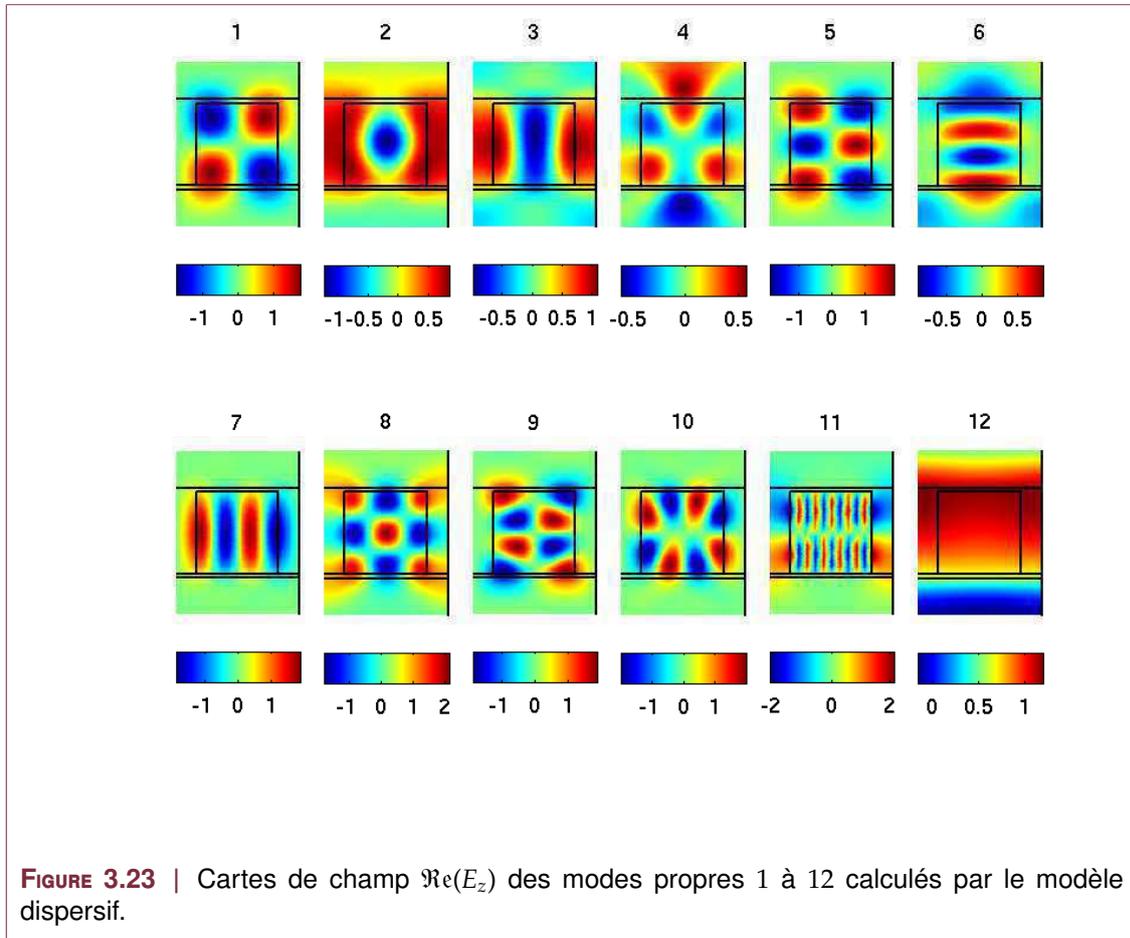
Nous pouvons après cette étape de validation sur un exemple académique passer au cas périodique *et* ouvert. Considérons un réseau de fentes (cf. Figure 3.21) de largeur $w = 1 \mu\text{m}$ et de hauteur $h^s = 2 \mu\text{m}$ gravées dans du SiC. Ce réseau est placé dans l'air ($\varepsilon^+ = 1$) et déposé sur un substrat de ZnS ($\varepsilon^- = 4.84$). On fixe $\alpha = 0$, $\zeta^\pm = 1 + i$, $h^\pm = 0.1 \mu\text{m}$,

$\hat{h}^+ = 11 \mu\text{m}$ et $\hat{h}^- = 5.5 \mu\text{m}$. Nous résolvons le problème aux valeurs propres (3.18) en cherchant 100 valeurs propres autour de $\lambda^s = 10 \mu\text{m}$. Les résultats sont consignés sur la figure 3.22.



Comme pour le cas précédent, nous constatons une accumulation de valeurs propres autour de la fréquence de résonance ω_r de la permittivité du SiC, et de telle sorte que $\Re(\omega_n) < \Re(\omega_r)$. On observe aussi les modes de radiation approchés (modes de PML). Pour vérifier notre calcul, nous avons aussi cherché comme au paragraphe précédent les valeurs propres par le problème non dispersif avec une permittivité « mise à jour ». Les résultats des deux méthodes sont en très bon accord, avec des erreurs relatives inférieures à 10^{-5} sur les parties réelles et à 10^{-3} sur les parties imaginaires. Nous avons aussi calculé les efficacités de diffraction entre 8 et 14 μm , en incidence normale, qui sont tracées en Figure 3.24. On observe que les variations des grandeurs énergétiques sont importantes entre 12.6 et 13.2 μm (à gauche sur la Figure 3.24), même si le grand nombre de résonances et leur proximité rend compliquée l'attribution d'un pic ou un creux à l'excitation d'un mode (cf. traits verticaux pour des question de lisibilité), à tel point que l'on observe même plus de pics de résonance. En outre, vu que la partie réelle de ε^d augmente à mesure que l'on s'approche de ω_r , les variations spatiales des modes sont de plus en plus rapides comme illustré par les cartes de champ en Figure 3.23. Par exemple le mode 1 à la fréquence propre $\omega_1 = 1.43 \cdot 10^{14} + i 4.24 \cdot 10^{11} \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$ correspond à une permittivité $\varepsilon^d(\omega_1) = 47.6 - 5.9 i$, tandis que le mode 2 à $\omega_2 = 1.49 \cdot 10^{14} + i 4.47 \cdot 10^{11} \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$ correspond à $\varepsilon^d(\omega_2) = 74.8 - 257.6 i$. Le mode 12 est tel que $\Re(\omega_{12}) > \Re(\omega_r)$ correspond quant à lui à une fréquence propre $\omega_{12} = 1.81 \cdot 10^{14} + i 1.71 \cdot 10^{13} \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$ portant la permittivité à une valeur de $\varepsilon^d(\omega_{12}) = 1.46 - 3.15 i$, ce qui fait, de par la faible valeur de la partie réelle, que la variation de spatiale de v_{12} est faible dans le plot de SiC. Notons enfin qu'aucun mode propre ne correspond à des valeurs où $\Re(\varepsilon^d) < 0$, là où le matériau

se comporte comme un métal. Ceci est dû au fait qu'en polarisation TE, les plasmons polaritons de surface du matériau ne peuvent être excités.



Le cas TM

Exemple académique

Nous reprenons ici l'exemple étudié au paragraphe 3.3.3. Notons tout d'abord que nous trouvons les modes TE et TM, mais les modes TE sont différents de ceux obtenus dans le cas TE scalaire étudié précédemment puisque nous appliquons ici au bord du domaine une condition de Dirichlet homogène pour H_z (les modes TM), ce qui implique une condition de Neumann homogène sur E_x et E_y (les modes TE). Les calculs sont là encore vérifiés analytiquement, les valeurs propres étant données par l'équation (3.27). Notons que les fréquences propres ω_n sont identiques pour les modes TE et TM, la seule différence est que m et n peuvent être nuls pour les modes TE. De plus nous vérifions aussi les solutions trouvées en résolvant le problème TM en vectoriel sans dispersion. Nous observons le même type de comportement que dans le cas TE : accumulation de valeurs propres autour de ω_r et convergence pour $\omega \rightarrow \infty$ vers des valeurs propres réelles (cf. Figure 3.25). Les comparaisons entre les différentes méthodes donnent des erreurs relatives inférieures à 0.06% sur les parties réelles et 0.1% sur les parties imaginaires.

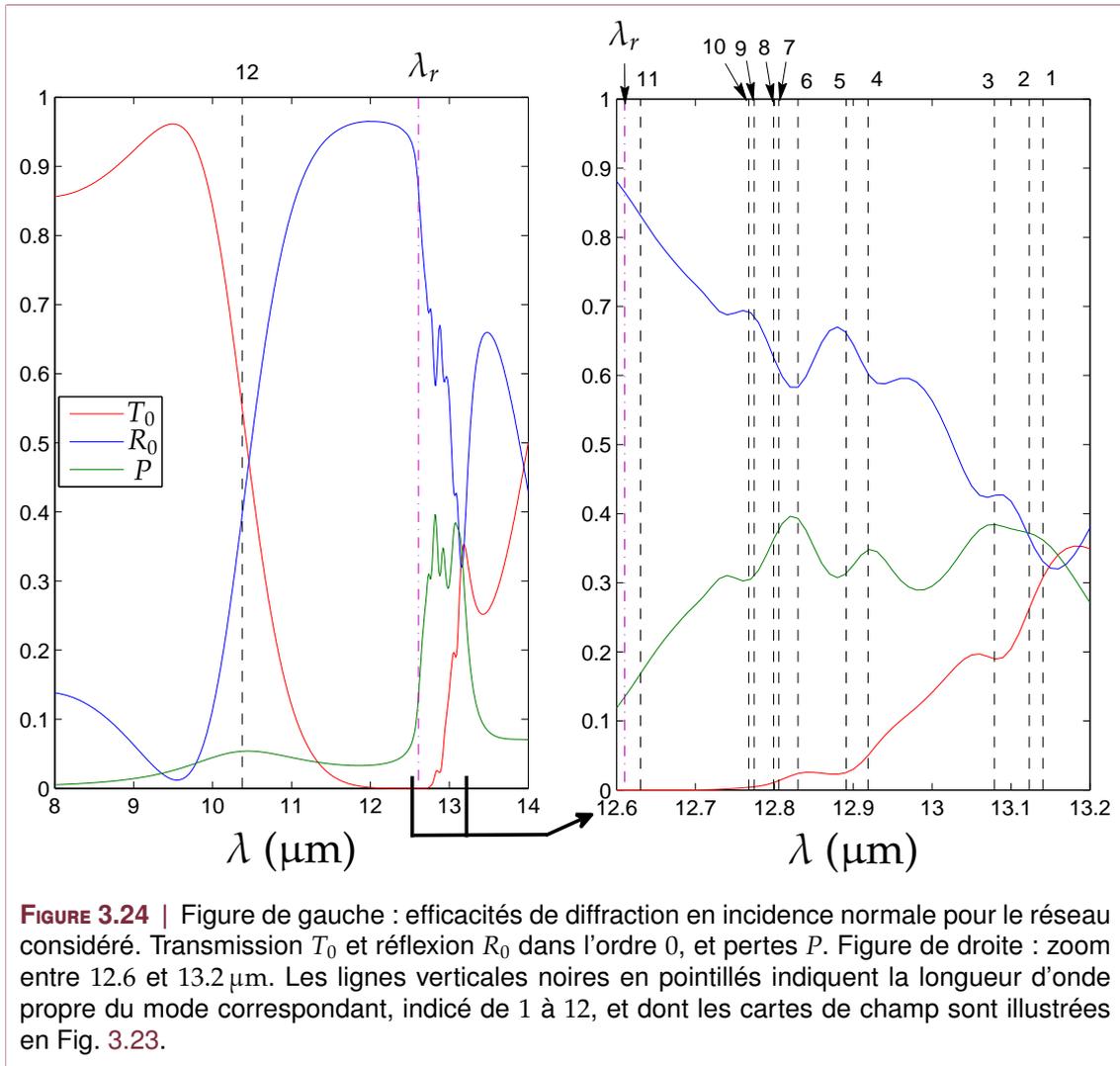


FIGURE 3.24 | Figure de gauche : efficacités de diffraction en incidence normale pour le réseau considéré. Transmission T_0 et réflexion R_0 dans l'ordre 0, et pertes P . Figure de droite : zoom entre 12.6 et 13.2 μm . Les lignes verticales noires en pointillés indiquent la longueur d'onde propre du mode correspondant, indicé de 1 à 12, et dont les cartes de champ sont illustrées en Fig. 3.23.

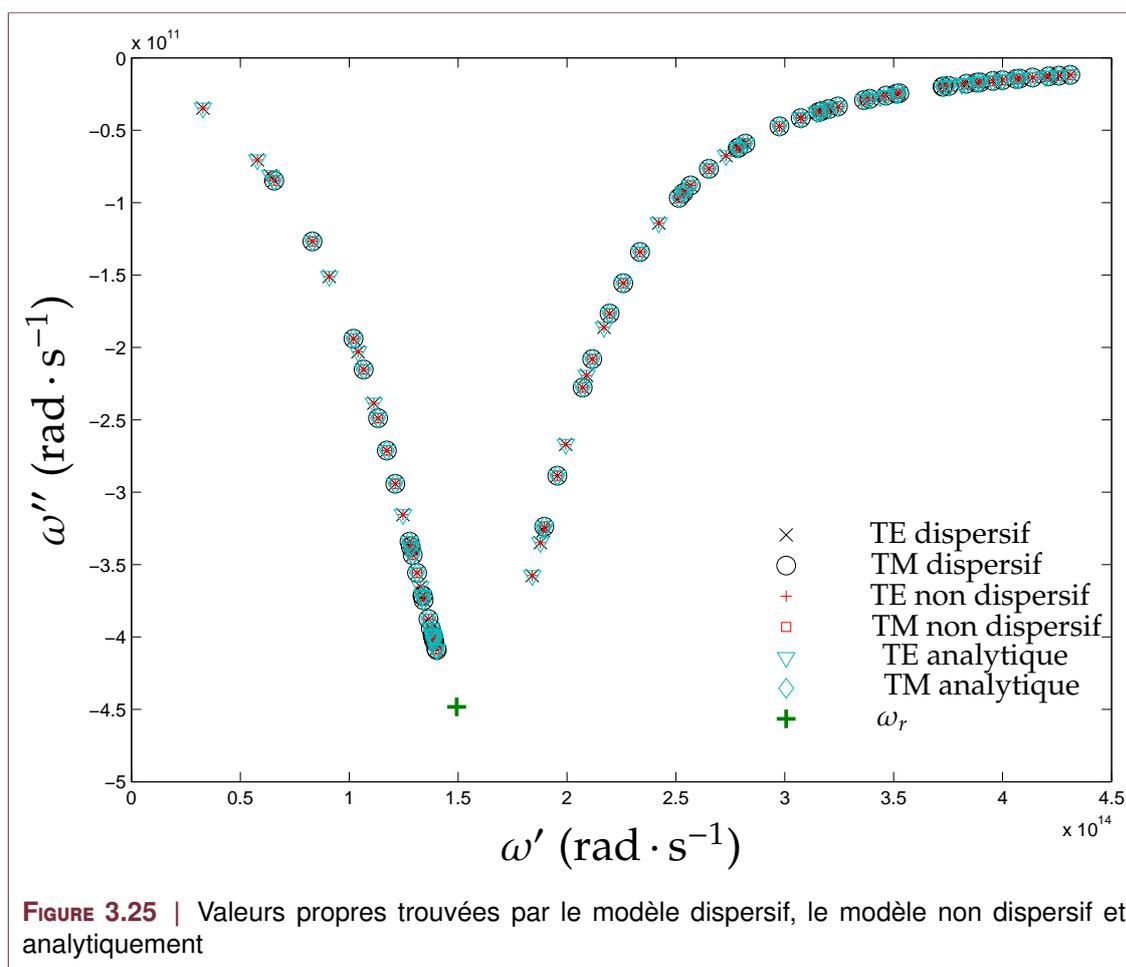


FIGURE 3.25 | Valeurs propres trouvées par le modèle dispersif, le modèle non dispersif et analytiquement

Réseau de diffraction

Passons maintenant au réseau décrit dans la partie précédente. On constate de nouveau une accumulation de fréquences propres des modes TE et TM vers ω_r (voir [Figure 3.26\(a\)](#)). Nous remarquons aussi une accumulation de valeurs propres correspondant uniquement à des modes TM vers deux régions du plan complexe. Afin de comprendre cet effet, considérons un dioptre plan séparant deux milieux de permittivité ε_1 et ε_2 . Le coefficient de réflexion en amplitude vaut dans le cas TM ([107]) :

$$r = \frac{\beta_1/\varepsilon_1 - \beta_2/\varepsilon_2}{\beta_1/\varepsilon_1 + \beta_2/\varepsilon_2} \quad (3.28)$$

Les modes propres de cette interface plane sont des pôles de $r(\omega)$. Ce sont des ondes se propageant à la surface séparant les deux matériaux, évanescentes dans la direction orthogonale à la surface. Il s'agit d'ondes de densité de charges : négatives (des électrons), on parle alors de *plasmon de surface* pour les métaux, ou bien positives, les *polaritons de surface* pour des matériaux polaires (comme le SiC étudié ici). Leur fréquence propre est telle que $\beta_1/\varepsilon_1 + \beta_2/\varepsilon_2 = 0$, ce qui nous donne la relation de dispersion de ces modes :

$$\alpha = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}}. \quad (3.29)$$

En incidence normale ($\alpha = 0$), en considérant $\varepsilon_1 = \varepsilon^\pm$ et $\varepsilon_2 = \varepsilon^d$, la condition de résonance devient $\varepsilon^d(\omega_{ps}^\pm) = -\varepsilon^\pm$, ce qui donne en tenant compte du modèle de permittivité (3.14) :

$$\omega_{ps}^\pm = \sqrt{\omega_r^2 + \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_\infty + \varepsilon^\pm}}. \quad (3.30)$$

Ces fréquences propres correspondant au plasmons polaritons de surface des interfaces SiC/superstrat (+) et SiC/substrat sont aussi des points d'accumulation pour les modes TM de notre problème spectral périodique (cf. [Figure 3.26\(a\)](#)). Nous avons aussi calculé les efficacités de diffraction, qui sont tracées en [Figure 3.26\(b\)](#). Les variations brutales dans les spectres sont corrélées à la position des fréquences de résonance.

Enfin, nous avons représenté en [figure 3.27](#) la partie réelle du champ électrique associé à différents modes. Pour des modes de fréquence associée de plus en plus proche de ω_r (modes A de 1 à 4), la variation spatiale devient de plus en plus rapide. Les modes B (5 à 8) sont proches de la fréquence plasmon associée à l'interface SiC/substrat, et ont des variations spatiales confinées principalement autour de cette interface. Les modes C (9 à 12) sont eux associés à une résonance de surface SiC/air, et sont donc localisés sur ces interfaces.

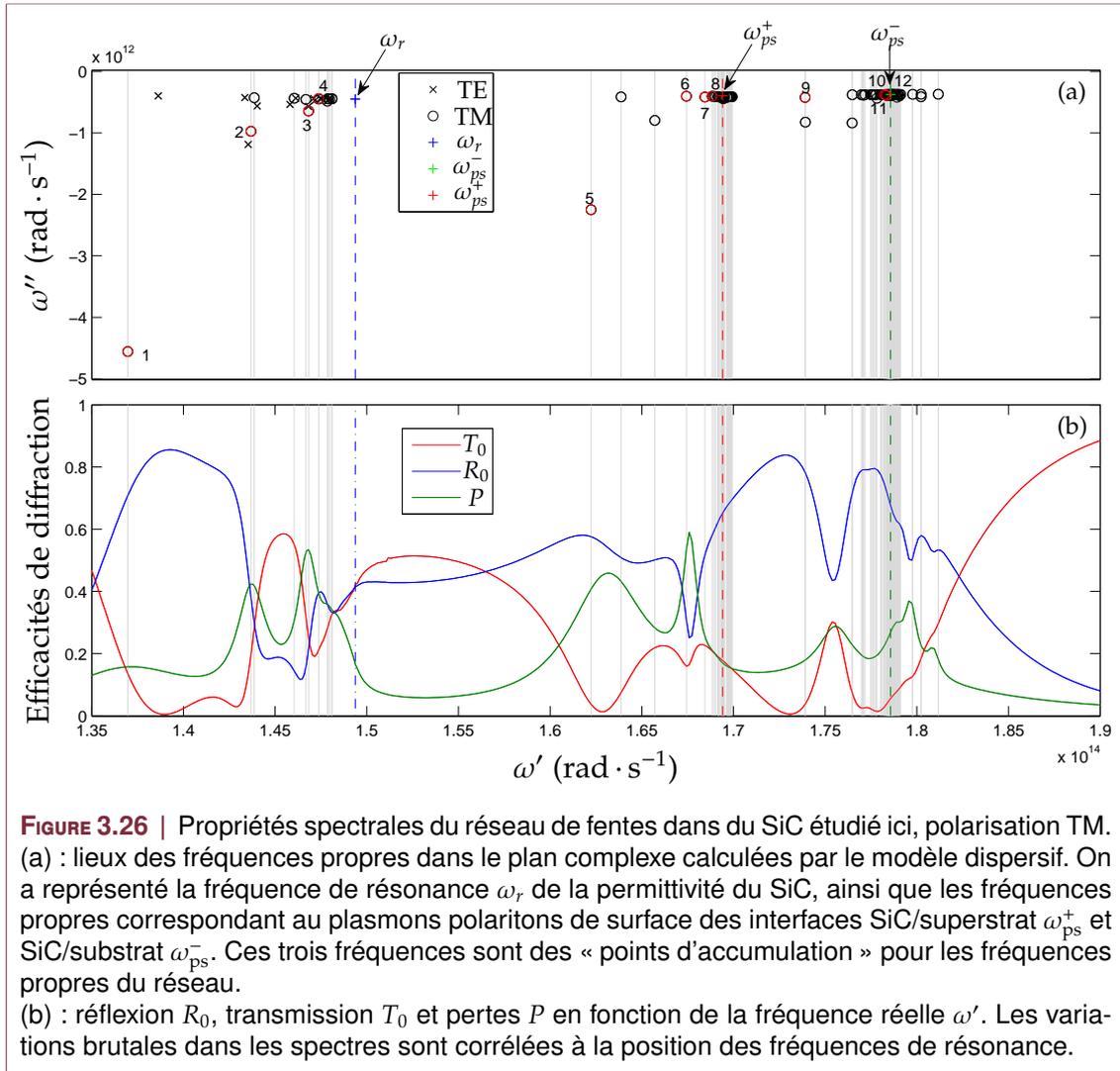
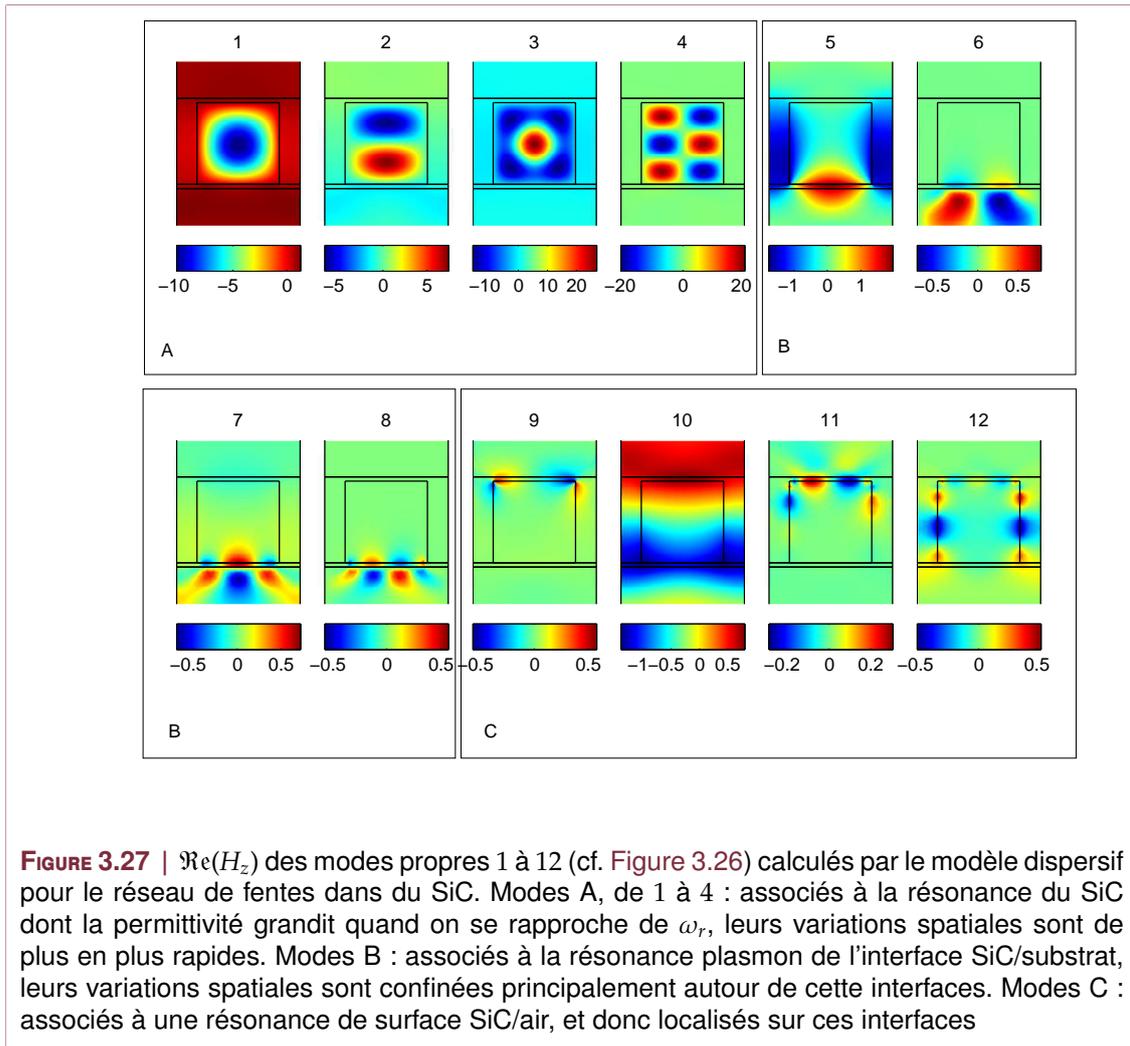


FIGURE 3.26 | Propriétés spectrales du réseau de fentes dans du SiC étudié ici, polarisation TM. (a) : lieux des fréquences propres dans le plan complexe calculées par le modèle dispersif. On a représenté la fréquence de résonance ω_r de la permittivité du SiC, ainsi que les fréquences propres correspondant au plasmons polaritons de surface des interfaces SiC/superstrat ω_{ps}^+ et SiC/substrat ω_{ps}^- . Ces trois fréquences sont des « points d'accumulation » pour les fréquences propres du réseau. (b) : réflexion R_0 , transmission T_0 et pertes P en fonction de la fréquence réelle ω' . Les variations brutales dans les spectres sont corrélées à la position des fréquences de résonance.



Conclusion partielle

Nous avons dans ce chapitre introduit les fondements de notre méthode d'analyse spectrale de résonateurs non bornés, appliquée au cas de réseaux mono-périodiques [137]. Le problème se réduit à l'étude des modes d'une structure fermée, la cellule de calcul FEM étant réduite à une période du réseau en utilisant des conditions de quasi-périodicité sur les frontières latérales, et tronqué dans les directions perpendiculaires au réseau par l'utilisation de PML.

La transformation géométrique de l'espace introduite par les PML a pour effet une rotation dans le plan complexe du spectre continu initialement réel. Nous obtenons ainsi une extension non auto-adjointe de l'opérateur de Maxwell dont les modes propres convergent dans la zone d'intérêt physique vers les modes propres du problème initial. Finalement, le caractère obligatoirement borné des PMLs utilisées dans la FEM entraîne une discrétisation du spectre continu, puisque le domaine que l'on considère alors est de taille finie.

Nous avons mis en avant l'effet de ces approximations sur le spectre de l'opérateur de Maxwell obtenu numériquement sur un réseau de fentes. La taille des PML et le module de leur coefficient d'étirement, s'ils augmentent, discrétisent de mieux en mieux le spectre continu, autrement dit l'infini est de mieux en mieux simulé. L'argument du coefficient d'absorption des PML influence la rotation du spectre continu dans \mathbb{C} , mettant à jour de plus en plus de modes à fuites au fur et à mesure que ce paramètre augmente. Changer les conditions aux limites en bout de PML résulte en des discrétisations différentes du spectre continu. Notons que tous ces paramètres, intrinsèques aux PMLs, n'influent pas sur la valeur des valeurs propres associées aux modes à fuites. Nous avons enfin confirmé des instabilités numériques sur le calcul des modes à fuites si les PML sont placées trop loin du réseau.

En premier lieu, cette technique est présentée dans le cadre de matériaux non dispersifs. Ses résultats sont comparés avec succès à une méthode nommée tétrachotomie permettant le calcul numérique des valeurs propres des modes à fuites, qui peuvent être aussi vues comme les pôles des coefficients de Fresnel. Cette étape essentielle de validation a été menée sur un exemple d'un multicouche et sur celui d'un réseau de fentes.

Nous avons par la suite étendu l'analyse spectrale aux réseaux comprenant un matériau dispersif. En considérant un modèle de permittivité avec une fréquence de résonance complexe, il faut alors traiter un problème aux valeurs propres quadratique en ω . Dans le cas TE, ce problème peut être traité par une résolution scalaire, mais il faut inexorablement considérer un problème vectoriel pour pouvoir, avec cette approche, résoudre le cas TM. Cette formulation est mise en pratique numériquement sur un réseau de fentes dans du SiC, matériau polaire dont la permittivité présente une résonance dans l'infrarouge lointain. Des effets de concentration de modes autour de la fréquence de résonance de la permittivité du matériau ont été mis en avant dans les deux cas. Dans le cas TM, nous avons observé une concentration des fréquences propres autour des fréquences de résonances correspondant aux plasmons polaritons de surface associés aux interfaces SiC/air et SiC/substrat.

Nous avons, au travers des exemples étudiés, vu que les résonances dans les propriétés de diffraction des réseaux étaient corrélés à la présence de modes à fuites. Cette affirmation qualitative repose sur le fait que l'on observe des variations brutales dans les efficacités de diffraction autour des fréquences correspondant aux parties réelles des modes en question. La largeur spectrale de ces résonances est quant à elle reliée à la partie imaginaire des fréquences propres des modes à fuites. Nous pouvons ainsi connaître *a priori* la fréquence d'une onde plane susceptible de provoquer une résonance particulière, sans même avoir éclairé notre réseau ! La résolution du problème spectral nous donne en

définitive l'ossature des propriétés diffractives des structures étudiées. Mais avec cette approche il nous manque des informations primordiales. Comment le champ diffracté par la structure résonne-t-il ? Quelle est la valeur des efficacités à la résonance ? Il nous faut pour tenter d'apporter un début de réponse à ces questions entreprendre de relier problème de diffraction et problème spectral. Maintenant que nous avons les briques élémentaires que sont les modes propres et les fréquences propres, il s'agit de construire l'édifice : développer un champ diffracté par la structure, solution d'un problème avec sources, sur la base des modes propres.

Méthode de décomposition modale

Sommaire

4.1	Développements théoriques de la méthode	82
4.1.1	Choix d'un produit interne et problème spectral adjoint	82
4.1.2	Décomposition d'un champ diffracté sur la base des vecteurs propres	84
4.2	Exemple numérique d'un réseau de fentes	86
4.2.1	Cas <i>TM</i>	86
4.2.2	Cas <i>TE</i>	89

Nous avons étudié au chapitre précédent la structure du spectre de l'opérateur associé à un réseau de diffraction. Ce spectre est constitué d'une partie ponctuelle (les modes guidés), ainsi que de parties continues (les modes de radiation). L'emploi de PML infinies révèle le spectre dans le plan complexe (la localisation de cette partie du spectre est reliée aux paramètres choisis pour les PML), faisant apparaître des modes à fuites. Lorsqu'on tronque les PML, on obtient des modes issus de la discrétisation du spectre continu.

Nous avons aussi considéré au [chapitre 2](#) le problème de la diffraction d'un onde plane par un réseau et rappelé une formulation du problème en champ diffracté adaptée à la résolution par la FEM.

Notre objectif dans ce chapitre est de relier les deux approches.

La question de la représentation spectrale de la fonction de Green d'un système ouvert, autrement dit sa décomposition sur les modes propres du système, est étudiée de longue date [124]. Dans le cas de guides d'ondes ouverts quelconques, il n'est toujours pas évident d'un point de vue théorique de savoir si les modes guidés, les modes à fuites et les modes de radiation forment une base complète de l'espace des solutions. Il n'est donc *a priori* pas rigoureux de parler de base dans ce cas là, mais nous le ferons par abus de langage, sans prétendre aucunement avoir démontré un quelconque relation de fermeture...

Nous voudrions savoir si la famille des vecteurs propres peut être utilisée pour décomposer un champ u solution des équations de Maxwell en présence de sources. Pour des problèmes hermitiens, les vecteurs propres constituent une base de l'espace

des solutions, autrement dit on peut décomposer n'importe quel champ u se propageant dans la structure considérée sous la forme :

$$u = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n v_n, \quad (4.1)$$

où $P_n = \langle u, v_n \rangle$ est la projection de u sur le vecteur v_n obtenue grâce au produit scalaire canonique $\langle \cdot, \cdot \rangle$ de l'espace des solutions.

Mais le problème que nous avons à traiter n'est pas hermitien, et c'est là que les choses se corsent. Les vecteurs propres ne sont plus orthogonaux au sens du produit scalaire précédent. Dès lors, comment calculer les coefficients P_n ? Quel produit scalaire utiliser ? En outre, la décomposition fait intervenir, en plus d'une somme discrète sur le spectre ponctuel, une intégrale sur le spectre continu Γ_c [5] :

$$u_2^d = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n v_n + \int_{\Gamma_c} P(\omega) v(\omega) d\omega. \quad (4.2)$$

On voit assez facilement qu'il faut prendre en compte en réalité un *continuum* de modes de radiation, ce qui pose problème pour une méthode numérique. La question légitime que l'on peut se poser est la suivante : peut-on remplacer dans la formule de décomposition précédente l'intégrale sur le spectre continu par une série sur les modes propres représentant une discrétisation de ce *continuum* ? Nous allons dans ce chapitre tenter d'apporter des éléments de réponse à ces questions.

Notons que des travaux récents portant sur la représentation spectrale de la fonction de Green de résonateurs électromagnétiques ouverts ont déjà été conduits. En particulier, une approche analytique a été développée pour des milieux périodiques 1D [123, 122].

Une autre méthode [93, 31] consiste à traiter un système comme une perturbation d'un problème canonique dont les éléments spectraux sont connus analytiquement, de calculer numériquement les modes de ce système perturbé et enfin d'utiliser ces modes dans la décomposition modale.

D'autres approches sont similaires à celle exposée ici [27, 26, 16] car les auteurs utilisent aussi des PML pour réduire le problème à une cellule de calcul bornée.

Cet engouement pour le sujet prouve l'intérêt d'un point de vue théorique de la représentation spectrale dans des milieux non bornés, à laquelle nous tentons d'apporter ici notre contribution.

4.1 Développements théoriques de la méthode

4.1.1 Choix d'un produit interne et problème spectral adjoint

Nous définissons un produit scalaire de deux fonctions f et g de $H(\Omega)$, l'espace des fonctions d'énergie finie sur Ω :

$$\langle f, g \rangle := \int_{\Omega} f(\mathbf{r}) \overline{g(\mathbf{r})} d\mathbf{r} \quad (4.3)$$

où \bar{z} désigne le complexe conjugué de z , et où Ω est un sous-espace, borné ou non, de \mathbb{R}^2 . Dans le cas d'opérateurs auto-adjoint, les modes propres forment une base Hilbertienne de $H(\Omega)$ et la relation d'orthogonalité s'écrit :

$$\langle \chi v_n, v_m \rangle = \|v_n\|^2 \delta_{nm} \quad (4.4)$$

où $\|v_n\| = \sqrt{\langle \chi v_n, v_n \rangle} = \sqrt{\int_{\Omega} \chi |v_n|^2 \, d\mathbf{r}}$ est la norme du vecteur v_n . Mais nous avons affaire à un opérateur non auto-adjoint, l'opérateur avec PMLs finies et conditions de quasi-périodicité, et les modes propres ne sont alors plus orthogonaux au sens de l'Équation 4.4. Le produit scalaire $\langle \chi \cdot, \cdot \rangle$ n'en est plus un puisque χ est à valeurs complexes dans les PMLs, et nous parlerons plutôt de produit interne de $H(\Omega, d, \alpha)$, où Ω désigne notre domaine fini de modélisation. C'est la raison pour laquelle nous considérons aussi le *problème spectral adjoint* qui a pour valeurs propres $\bar{\Lambda}_n = (\bar{\omega}_n/c)^2$ et dont les vecteurs propres sont notés w_n , défini par :

$$\mathcal{M}_{\xi^\dagger}^\dagger(w_n) := \bar{\Lambda}_n \chi^\dagger w_n. \quad (4.5)$$

L'opérateur adjoint $\mathcal{M}_{\xi^\dagger}^\dagger$ est défini par :

$$\langle \mathcal{M}_\xi(v), w \rangle = \langle v, \mathcal{M}_{\xi^\dagger}^\dagger(w) \rangle. \quad (4.6)$$

Déduisons maintenant son expression. En projetant la définition du problème spectral (3.2) sur w (on omet les indices pour alléger les notations) et en intégrant deux fois par parties, il vient :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}_\xi(v), w \rangle &= - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} v) \bar{w} \, d\mathbf{r} \\ &= \underbrace{- \int_{\Omega} v \operatorname{div}(\xi \mathbf{grad} \bar{w}) \, d\mathbf{r}}_{=\langle v, \mathcal{M}_{\xi^\star}(w) \rangle} + \underbrace{\int_{\partial\Omega} \xi (v \mathbf{grad} \bar{w} - \bar{w} \mathbf{grad} v) \cdot \mathbf{n} \, dS}_{=\mathcal{N}_\xi(v, w)}, \end{aligned}$$

où $A^\star = \bar{A}^\top$ est la matrice transposée conjuguée de A . Le second terme dans dans le membre de droite de l'équation précédente est un terme de surface appelé *conjoint* et noté $\mathcal{N}_\xi(v, w)$. Pour les conditions aux limites employées sur $\partial\Omega$ (cf. sous-section 2.1.5), ce terme s'annule. En effet, en bout de PML on utilise :

- soit des conditions de Dirichlet homogènes : $v = 0$ et $w = 0$, et donc le conjoint s'annule sur ces frontières.
- soit des conditions de Neumann homogènes : $(\xi \cdot \mathbf{grad} v) \cdot \mathbf{n} = 0$ et $(\xi^\star \cdot \mathbf{grad} w) \cdot \mathbf{n} = 0$, ce qui implique $\mathcal{N}_\xi(v, w) = 0$.

Sur les frontières latérales Γ_d et Γ_g , on utilise des conditions de Bloch. Puisque v et w sont quasi-périodiques, on peut les écrire sous la forme $v(x, y) = v_\#(y)e^{iax}$ et $w(x, y) = w_\#(y)e^{iax}$, où $v_\#$ et $w_\#$ sont d -périodiques selon x . On obtient donc pour le conjoint sur ces frontières :

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_\xi(v, w) &= \int_{\Gamma_d \cup \Gamma_g} \xi (v \mathbf{grad} \bar{w} - \bar{w} \mathbf{grad} v) \cdot \mathbf{n} \, dS \\ &= \int_{\Gamma_d \cup \Gamma_g} \xi (v_\# e^{iax} \mathbf{grad}(\bar{w}_\# e^{-iax}) - \bar{w}_\# e^{-iax} \mathbf{grad}(v_\# e^{iax})) \cdot \mathbf{n} \, dS \\ &= \int_{\Gamma_d \cup \Gamma_g} \xi (v_\# (\mathbf{grad} \bar{w}_\# - ia \bar{w}_\#) - \bar{w}_\# (\mathbf{grad} v_\# + ia v_\#)) \cdot \mathbf{n} \, dS. \end{aligned}$$

Puisque l'intégrande est d -périodique selon x , et que les deux frontières parallèles sont distante de d et ont des normales de direction opposées, les contributions de Γ_d et Γ_g sont de même valeur absolue mais de signe opposé. Cela signifie que le conjoint est aussi nul dans le cadre de la quasi-périodicité. Nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{M}_\xi(v), w \rangle &= \langle v, \mathcal{M}_{\xi^*}(w) \rangle \\
 \Leftrightarrow \langle \Lambda \chi v, w \rangle &= \langle v, \bar{\Lambda} \chi^\dagger w \rangle \\
 \Leftrightarrow \Lambda \langle \chi v, w \rangle &= \Lambda \langle \bar{\chi}^\dagger v, w \rangle,
 \end{aligned}$$

ce qui prouve que $\chi^\dagger = \bar{\chi}$. Le problème spectral adjoint s'écrit donc

$$\mathcal{M}_{\xi^\dagger}^\dagger(w_n) = \mathcal{M}_{\xi^*}(w_n) = -\text{div}(\xi^* \mathbf{grad} w_n) = \bar{\Lambda}_n \bar{\chi} w_n. \quad (4.7)$$

Le problème adjoint est donc identique au problème initial mais avec des propriétés matérielles différentes, les tenseurs de permittivité et de perméabilité sont transposés et conjugués (les matériaux isotropes à pertes sont remplacés par des matériaux isotropes actifs, de permittivité et perméabilité conjuguées). Cela a son importance pour les propriétés matérielles des PMLs cartésiennes (et cylindriques), qui seront obtenues par un étirement complexe conjugué. Notons aussi que les conditions aux limites sont inchangées pour les deux problèmes.

Observons à présent une propriété intéressante. En prenant la transposée conjuguée de l'Équation 3.2, on obtient

$$\{\mathcal{M}_\xi(v)\}^\star = \mathcal{M}_{\xi^*}(\bar{v}) = \mathcal{M}_{\xi^\dagger}^\dagger(\bar{v}) = \bar{\Lambda} \bar{\chi} \bar{v}. \quad (4.8)$$

On serait tentés de dire au vu de l'équation 4.8 que $w = \bar{v}$. Mais c'est sans compter sur les conditions au bord du domaine. Aussi, si l'on prend la transposée conjuguée des conditions aux limites sur $\partial\Omega$ du problème spectral, on a :

- pour des conditions de Dirichlet homogènes : $\bar{v} = 0$,
- pour des conditions de Neumann homogènes : $(\xi^* \mathbf{grad} \bar{v}) \cdot \mathbf{n} = 0$,
- pour des conditions quasi-périodicité : $\bar{v}(x, y) = \bar{v}_\#(y) e^{-i\alpha x}$.

Les conditions de quasi-périodicité donnent un coefficient opposé pour l'équation 4.8, ce qui montre que dans le cas général $w \neq \bar{v}$. En revanche pour le cas particulier $\alpha = 0$, et pour des problèmes non périodiques (où l'on place des PML terminées par des conditions de Neumann ou Dirichlet homogènes tout autour du domaine physique d'intérêt), les modes adjoints w_n sont simplement les conjugués des modes v_n .

Enfin, l'introduction de ce problème adjoint est nécessaire pour obtenir une propriété fondamentale, à savoir que les modes et les modes adjoints vérifient une relation de bi-orthogonalité :

$$\langle \chi v_n, w_m \rangle = \int_{\Omega} \chi v_n \bar{w}_m \, d\mathbf{r} = K_n \delta_{nm}. \quad (4.9)$$

Le coefficient K_n est analogue à une norme, à cela près qu'il est complexe et en pratique les modes et leur adjoint ne peuvent constituer une base orthonormée. De plus, ce coefficient peut être nul, même si cela n'arrivera pas dans les exemples numériques étudiés par la suite. La relation (4.9) est fondamentale : c'est elle qui va nous permettre de calculer les coefficients de décomposition du champ diffracté sur la base des vecteurs propres. Ceci est l'objet de la partie suivante.

4.1.2 Décomposition d'un champ diffracté sur la base des vecteurs propres

Tout champ u_2^d solution de (2.11) peut se décomposer sur la base des vecteurs propres :

$$u_2^d = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n v_n. \quad (4.10)$$

Le coefficient P_n traduit le couplage du mode n avec l'onde incidente et est donné par :

$$P_n = \langle \chi u_2^d, w_n \rangle, \quad \forall n \in \mathbb{N}^*. \quad (4.11)$$

En introduisant la décomposition (4.10) dans l'équation (2.11) vérifiée par u_2^d , on obtient :

$$\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_2^d) = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n \mathcal{L}_{\xi, \chi}(v_n) = -\mathcal{S}_1, \quad (4.12)$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\xi, \chi}(v_n) &= -\mathcal{M}_{\xi}(v_n) + \frac{\omega^2}{c^2} \chi v_n \\ &= \frac{\omega^2 - \omega_n^2}{c^2} \chi v_n \end{aligned}$$

d'où

$$\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u_2^d) = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n \frac{\omega^2 - \omega_n^2}{c^2} \chi v_n = -\mathcal{S}_1. \quad (4.13)$$

En projetant (4.13) sur le mode adjoint w_n il vient :

$$P_n = \frac{J_n}{\omega^2 - \omega_n^2} \quad (4.14)$$

avec

$$J_n = -\frac{c^2}{K_n} \langle \mathcal{S}_1, w_n \rangle = -\frac{c^2}{K_n} \int_{\Omega_{g'}} \mathcal{S}_1 \bar{w}_n \, dr, \quad (4.15)$$

où l'intégration se fait sur l'élément diffractif $\Omega_{g'}$ puisque le terme source \mathcal{S}_1 est nul partout ailleurs.

L'expression des coefficients de couplage P_n est ainsi obtenue simplement grâce aux fréquences propres ω_n , aux cartes de champs des vecteurs propres adjoints w_n calculés numériquement par la FEM, et du terme source \mathcal{S}_1 connu analytiquement, et ce, pour un champ incident de coefficient α fixé et de fréquence ω quelconque (et éventuellement complexe). Ainsi pouvons-nous savoir comment les modes sont excités lorsqu'une onde plane de fréquence arbitraire éclaire un réseau [136].

Il va de soi que toute cette théorie est valable pour des sources arbitraires [16], notamment pour un point source¹. Elle est valable également dans des cas de problèmes non périodiques.

Regardons de plus près le terme J_n : il a la dimension d'une pulsation au carré. De plus, on a $\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_1^p + \mathcal{S}_1^c$ (cf. Eq. 2.15), avec \mathcal{S}_1^p et \mathcal{S}_1^c définis par les équations 2.16 et 2.17 respectivement. Chacun de ces termes peut être décomposé en deux contributions :

$$\mathcal{S}_{1, \xi}^j = i u_g^j \operatorname{div} [\Delta \xi k^{g, j} e^{i k^{g, j} \cdot r}], \quad \text{pour } j = \{p, c\} \quad (4.16)$$

et

$$\mathcal{S}_{1, \chi}^j = i u_g^j \Delta \chi k_0^2 e^{i k^{g, j} \cdot r} \quad \text{pour } j = \{p, c\} \quad (4.17)$$

1. Dans ce cas, l'intégration devient alors élémentaire

avec $\Delta\xi = \xi^{g'} - \xi^g$ et $\Delta\chi = \chi^{g'} - \chi^g$. On peut alors écrire $J_n = J_{n,\xi}^p + J_{n,\xi}^c + J_{n,\chi}^p + J_{n,\chi}^c$. On obtient :

$$J_{n,\chi}^j = -\frac{c^2}{K_n} \langle \mathcal{S}_{1,\chi}^j, w_n \rangle = -\frac{\omega^2}{K_n} u_g^j \int_{\Omega} \Delta\chi(\mathbf{r}) \overline{w_n}(\mathbf{r}) e^{ik^{g,j} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (4.18)$$

Nous voyons donc que $J_{n,\chi}^j$ est proportionnelle à une transformée de Fourier spatiale $\mathcal{F}(f)$ de la fonction $f : \mathbf{r} \mapsto \Delta\chi(\mathbf{r}) \overline{w_n}(\mathbf{r})$ définie par :

$$\mathcal{F}(f)(\mathbf{k}) = \int f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (4.19)$$

En se souvenant que le terme de contraste des propriétés matérielles $\Delta\chi$ est nul en dehors de l'objet diffractif $\Omega_{g'}$, on peut écrire $\Delta\chi(\mathbf{r}) = \Delta\chi^0(\mathbf{r}) \mathbb{I}_{\Omega_{g'}}$, où $\mathbb{I}_{\Omega_{g'}}$ est la fonction indicatrice du domaine $\Omega_{g'}$. Il en résulte que

$$J_{n,\chi}^j(\mathbf{k}^{g,j}) = -\frac{\omega^2}{K_n} u_g^j \left[\mathcal{F}(\Delta\chi^0) * \mathcal{F}(\mathbb{I}_{\Omega_{g'}}) * \mathcal{F}(\overline{w_n}) \right](\mathbf{k}^{g,j}) \quad (4.20)$$

où $f * g$ désigne le produit de convolution des fonctions f et g .

4.2 Exemple numérique d'un réseau de fentes

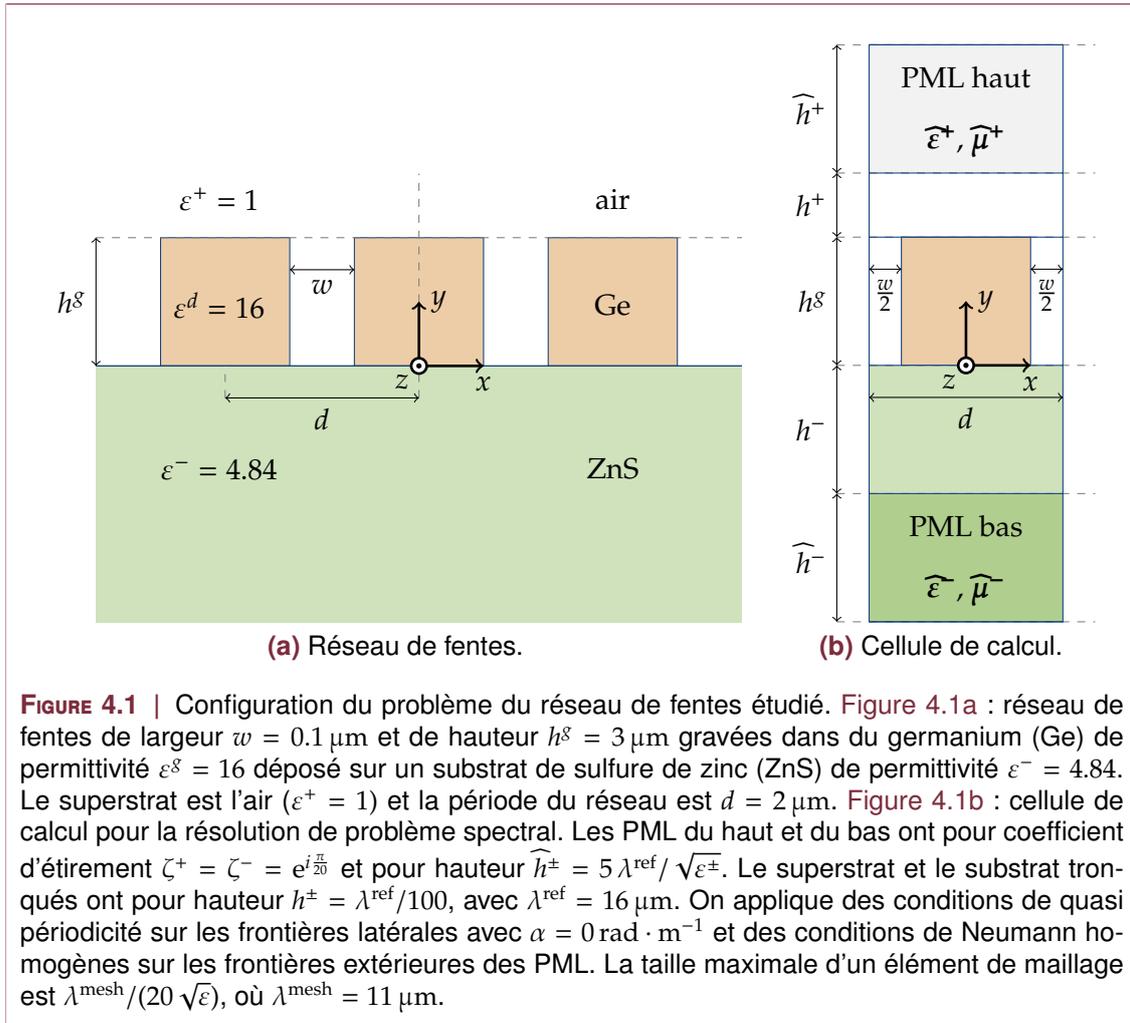
Nous étudions ici l'exemple traité à la sous-section 3.2.2 (voir Figure 4.1 pour la configuration et les paramètres employés), dans les deux cas de polarisation, à la lumière de la méthode modale exposée dans les parties 4.1.1 et 4.1.2.

4.2.1 Cas TM

Nous résolvons le problème spectral et le problème adjoint, en recherchant 500 modes autour de $\lambda^s = 11 \mu\text{m}$. Les lieux des fréquences propres ω_n et des fréquences propres adjointes $\overline{\omega_n}$ sont tracés en Figure 4.2. On observe que les deux solutions sont bien conjuguées l'une de l'autre. Le spectre continu est approximé par des fréquences discrètes relativement proches des valeurs théoriques (lignes en pointillés).

Observons maintenant les coefficients de couplage P_n . L'équation 4.14 montre que pour $\omega = \omega_n$, P_n tend vers l'infini, autrement dit le mode v_n est excité. Mais en pratique, la fréquence de l'onde plane est réelle, et ce comportement résonnant se produit pour $\omega = \omega_n''$. La valeur de P_n est alors finie et la largeur spectrale est donnée par ω_n'' . C'est un des points forts de la méthode : en plus de nous révéler sans ambiguïté qu'un mode donné est excité elle nous indique quelle est l'intensité de cette excitation. D'après l'équation 4.10, on voit en fait que le champ diffracté pour une fréquence incidente donnée est dû aux contributions simultanées de plusieurs modes propres. Il est donc plus approprié de parler de résonances que d'une résonance du champ diffracté. Cela étant, il y a souvent un mode qui est prépondérant dans la décomposition. En d'autres termes le coefficient de couplage qui lui est associé est plus grand en module que ceux correspondant aux autres modes et un résonance de u_2^d peut être attribuée à l'excitation de ce mode. Nous avons représenté en Figure 4.3 le module et la phase des P_n associés aux modes à fuites numérotés de 1 à 4. On observe un pic de résonance de $|P_n|$ ainsi qu'un saut de phase lorsque l'on s'approche de la longueur d'onde de résonance associée au mode en question (cf. les traits verticaux en pointillés). Comme on devait s'y attendre, le comportement est d'autant plus brusque que la valeur de la partie imaginaire est faible.

Nous sommes à présent en mesure de reconstruire le champ diffracté par la formule 4.10. C'est ce qui est fait en Figure 4.4, où l'on voit que les champ diffractés calculés



par la méthode modale et par le problème de diffraction sont très proches. L'erreur est maximale aux interfaces entre différents domaines de propriétés matérielles différentes. Nous avons vu en partie 3.1.1 qu'il faut garder les PML le plus proche possible des domaines auxquels elles sont adaptées afin d'éviter des instabilités numériques sur le calcul des vecteurs propres. Nous pensons que les erreurs, concentrées près des PML sont dues au comportement croissant des modes à fuites qui fait que les modes (et par conséquent le champ reconstruit) sont mal calculés précisément à cet endroit, bien que nous ayons tenté de limiter cette divergence en rapprochant au maximum les PML. Un autre explication avancée est le fait que nous tentons d'approcher la contribution du spectre continu (une intégrale) par des contributions discrètes (une somme), perdant ainsi inexorablement de l'information. Il se peut enfin qu'il faille prendre en compte des modes propres de fréquence plus élevée.

Nous pouvons calculer à partir du champ reconstruit les efficacités de diffraction. En répétant le processus pour différentes fréquences, on obtient des spectres de transmission et de réflexion. On a reporté les spectres calculés par sur la figure 4.5, et on constate un bon accord entre la méthode modale et le problème de diffraction. Les écarts sont dus aux erreurs de reconstruction mentionnées précédemment, qui sont maximales précisément à l'endroit où l'on calcule les efficacités. L'exemple particulier étudié ici nous montre combien le processus diffractif peut être complexe. En effet, on a deux résonance proches autour de $7.8 \mu\text{m}$, qui donnent lieu à une résonance hybride des efficacités de diffraction, mélange des excitations des modes 1 (à faible facteur de qualité, résonance large) et 2 (à grand facteur de qualité, résonance étroite). Une conclusion similaire peut être faite pour

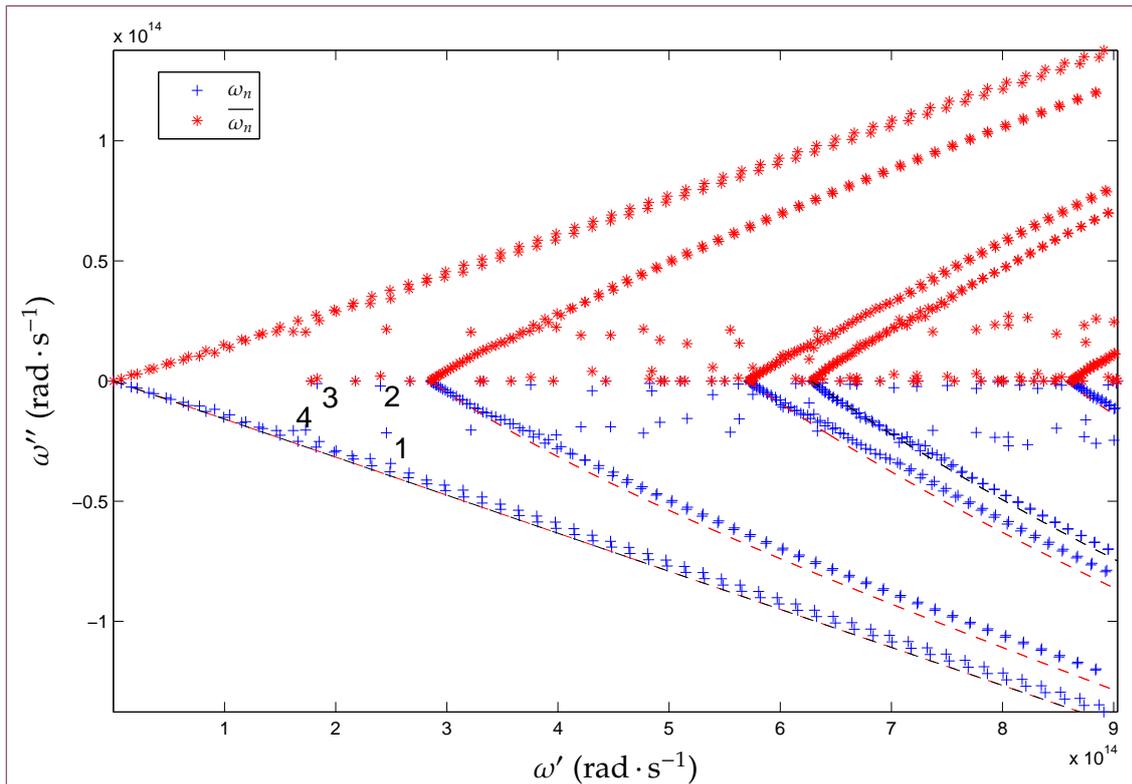


FIGURE 4.2 | Lieux des fréquences propres dans le plan complexe en polarisation TM. On voit que les fréquences propres et les fréquences propres adjointes sont bien conjuguées. Les fréquences associées aux modes issus de la discrétisation du spectre continu sont proches des valeurs théoriques en pointillés. Les modes à fuites 1 à 4 étudiés par la suite sont indiqués.

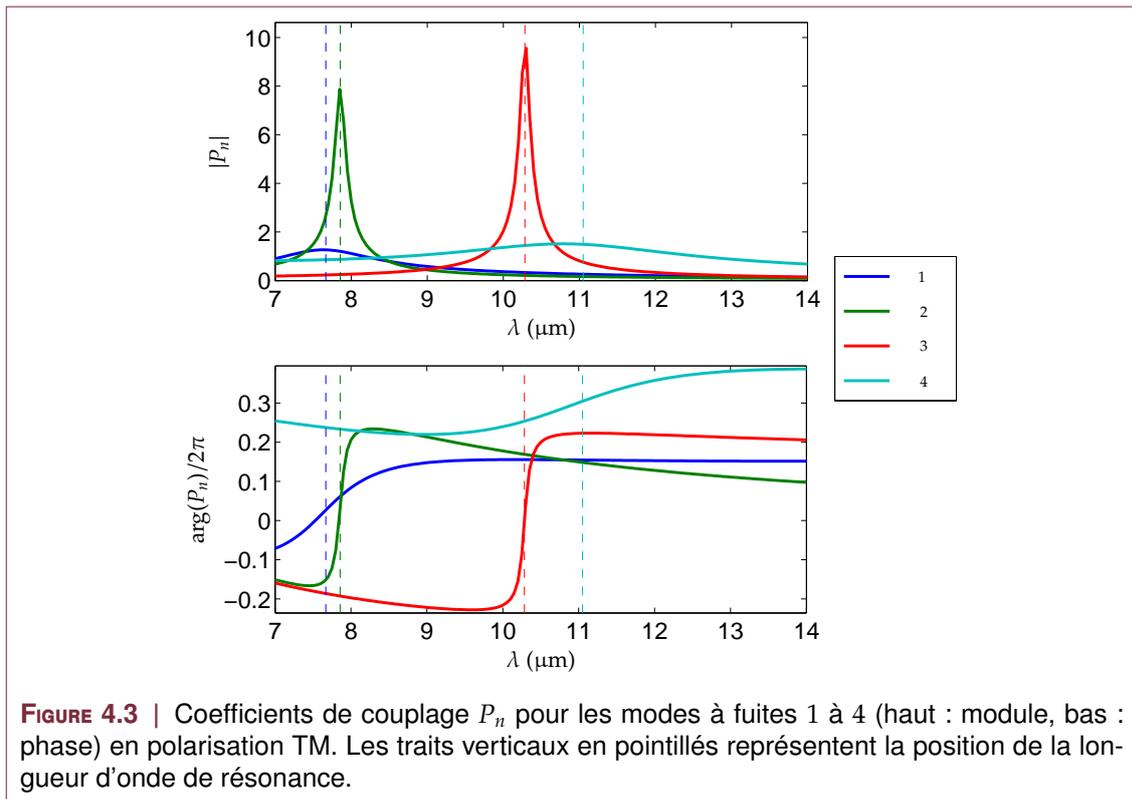
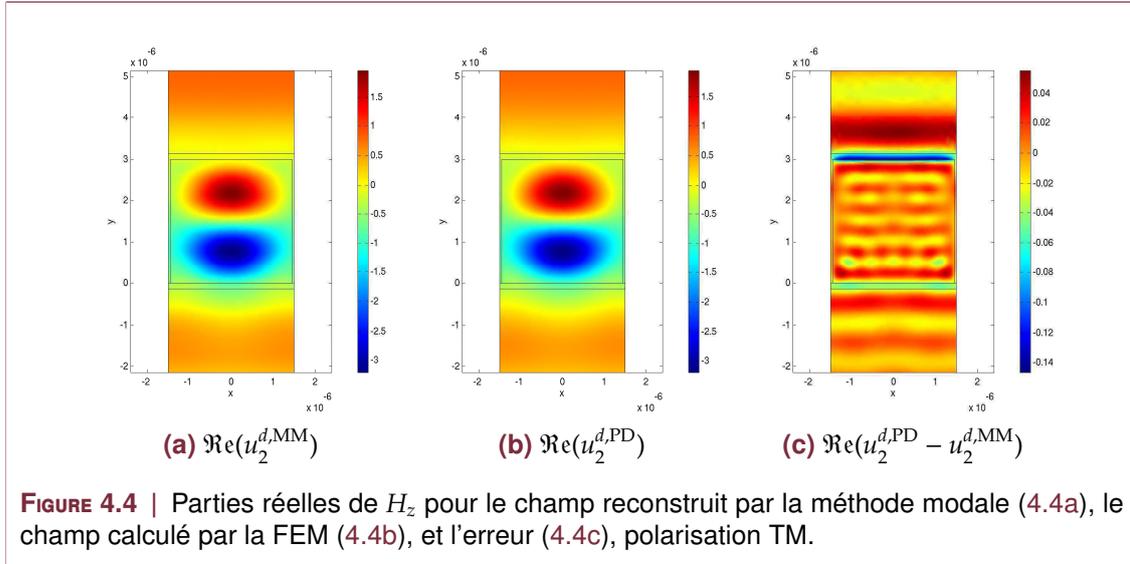
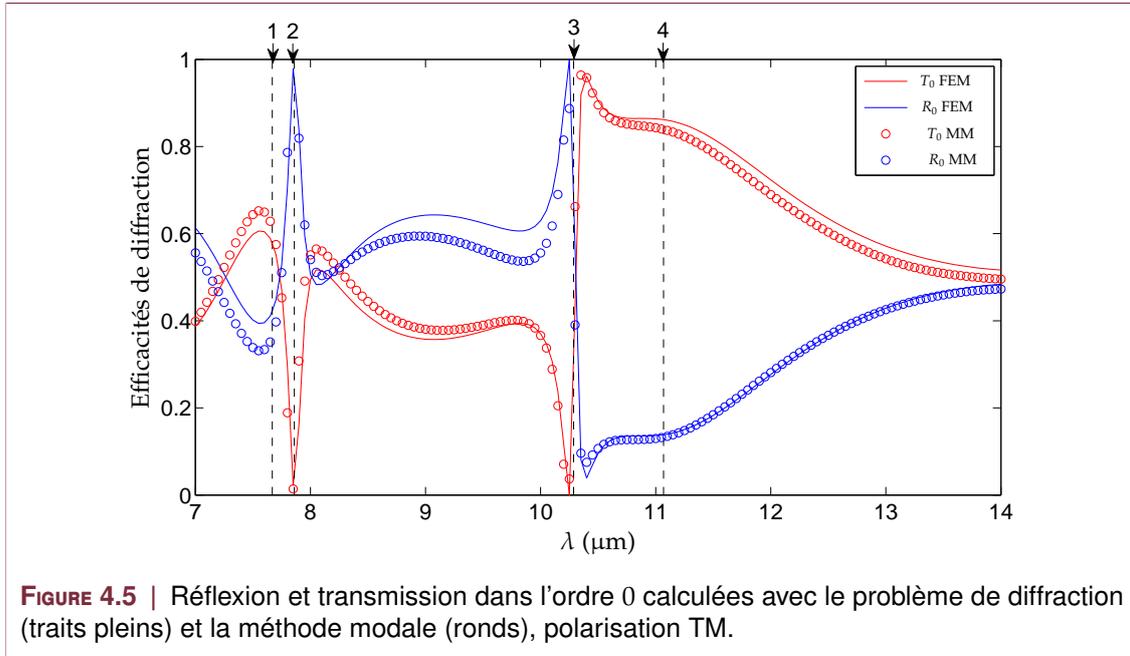


FIGURE 4.3 | Coefficients de couplage P_n pour les modes à fuites 1 à 4 (haut : module, bas : phase) en polarisation TM. Les traits verticaux en pointillés représentent la position de la longueur d'onde de résonance.



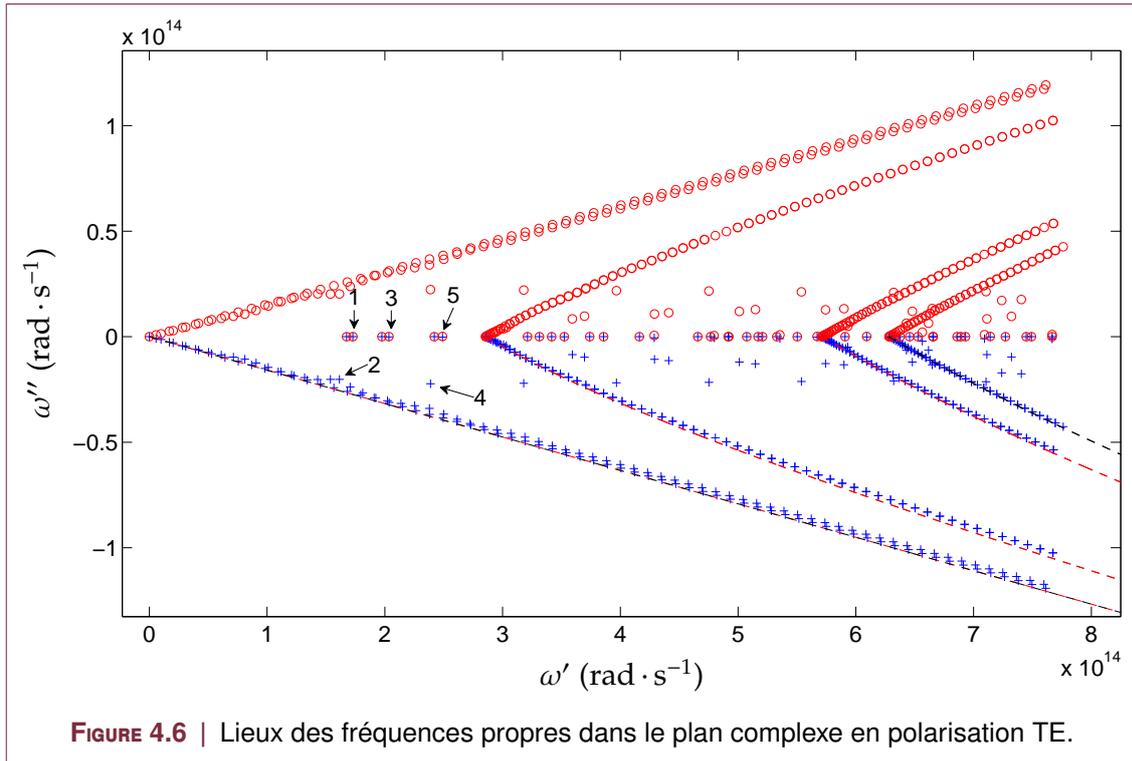
les modes 3 et 4 autour de $10.5 \mu\text{m}$.



4.2.2 Cas TE

Nous recherchons ici encore 500 modes, dont les valeurs propres associées sont représentées sur la Figure 4.6. Il est là encore clair que les valeurs propres du problème adjoint sont les conjuguées des valeurs propres du problème spectral. De plus, les différentes branches du spectre continu théorique, en pointillés, sont approchées par des valeurs propres discrètes qui « suivent » ces courbes.

Dans la bande spectrale qui nous intéresse, cinq modes à fuites (numérotés de 1 à 5) sont présents et participent principalement au processus de diffraction. Les modes 1, 3 et 4 ont des fréquences propres situées près de l'axe réel, tandis que les modes 2 et 5 ont des parties imaginaires plus importantes. Nous pouvons voir que ce sont ces modes qui sont effectivement excités en étudiant leurs coefficients de couplage avec une onde plane P_n . Ces coefficients, tracés sur la Figure 4.7, indiquent clairement que ces modes sont



responsables des résonances vues dans les spectres de réflexion et de transmission de la Figure 4.8. Comme prévu, on observe sur ces spectres que les positions des longueurs d'onde propres correspondent à des résonances du système. Les résonances dues aux modes 1, 3 et 4 à faible partie imaginaire sont abruptes, tandis que celles imputables aux modes 2 et 5 sont beaucoup plus larges.

En reconstruisant le champ avec 500 modes sur toute la bande spectrale, nous pouvons calculer ces efficacités. Le résultat obtenu est reporté sur la Figure 4.8, où l'on observe que les valeurs ainsi obtenues (ronds) sont très proches des valeurs de référence calculées en résolvant le problème de diffraction (traits pleins).

Afin d'évaluer les erreurs de reconstruction, nous avons calculé les erreurs relatives sur les efficacités :

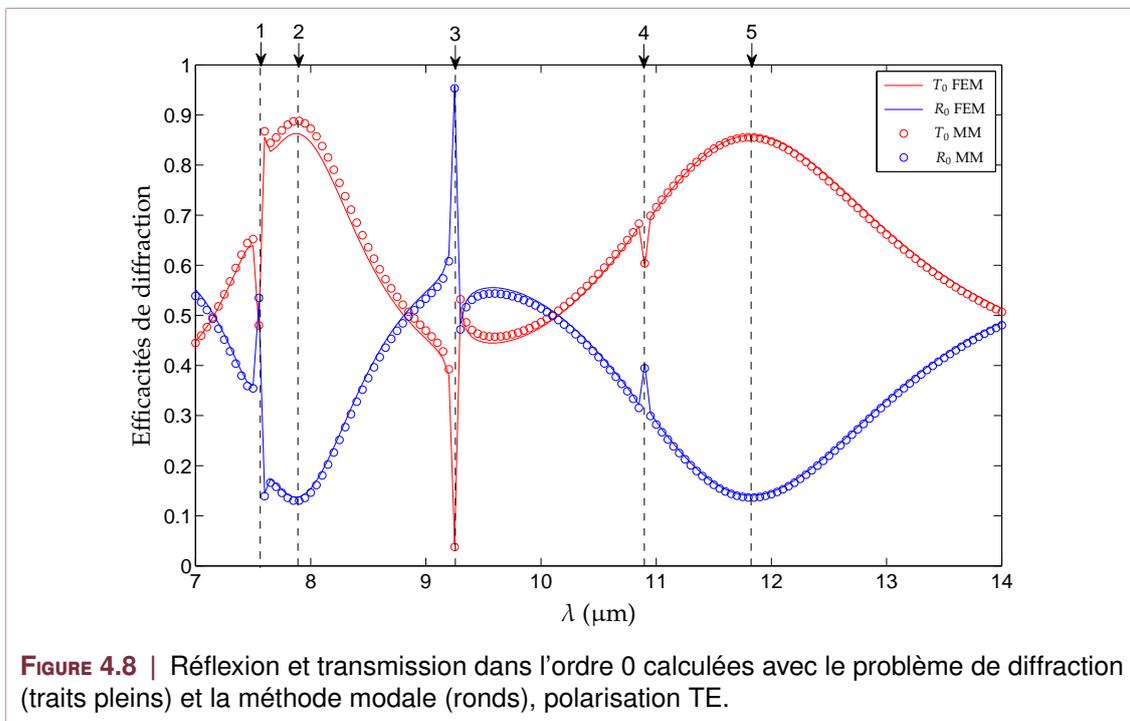
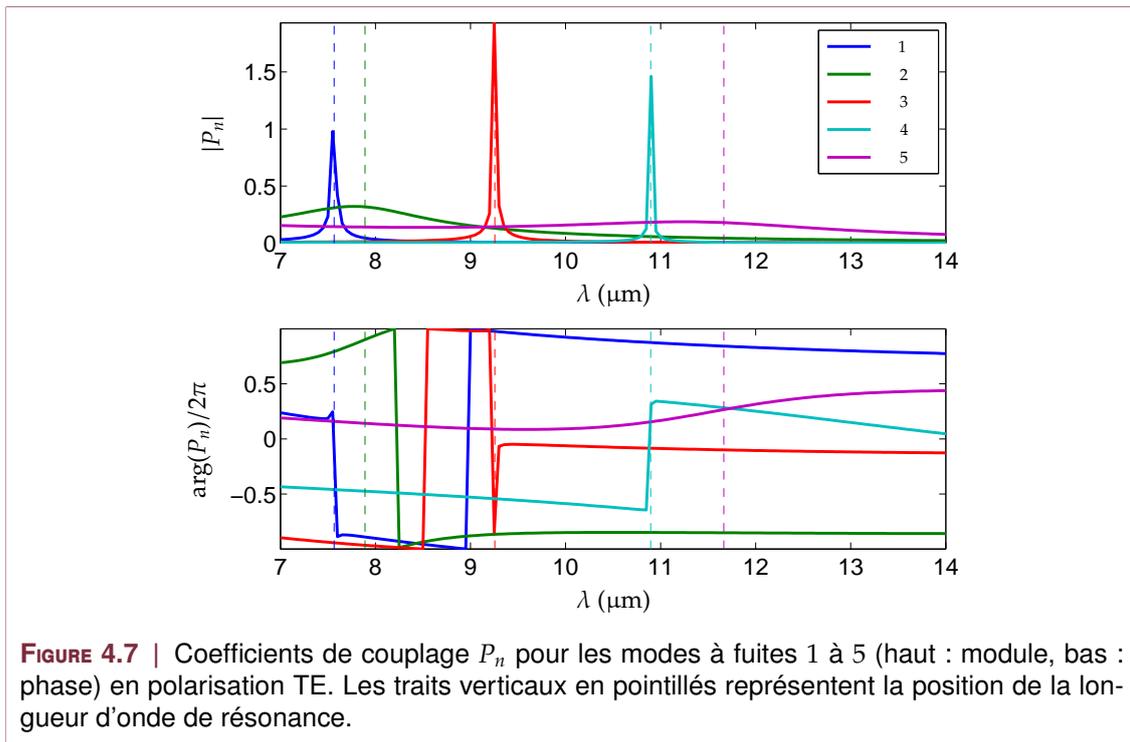
$$\mathfrak{E}_R = 1 - \frac{R_0^{\text{MM}}}{R_0^{\text{PD}}}$$

pour la réflexion,

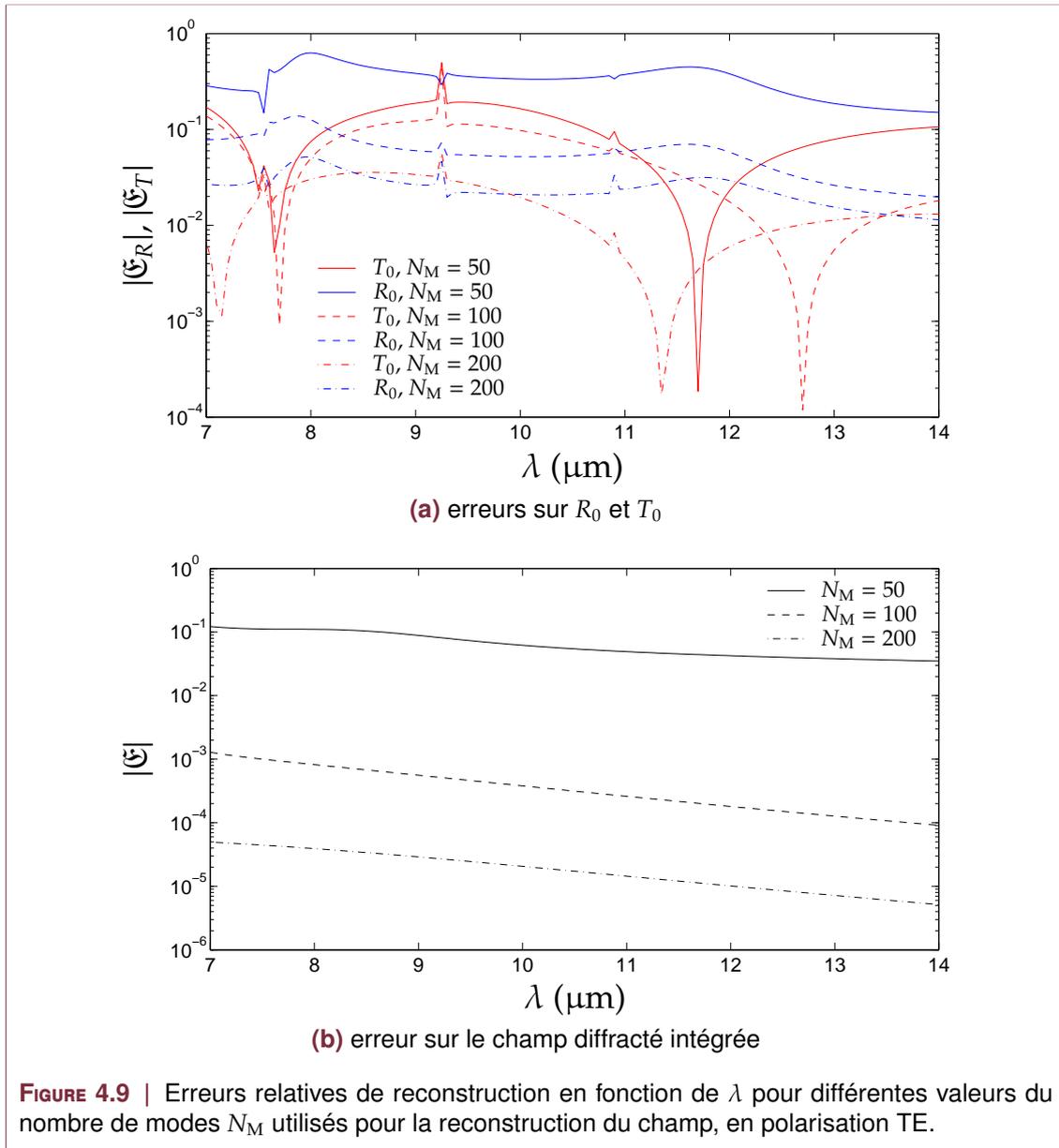
$$\mathfrak{E}_T = 1 - \frac{T_0^{\text{MM}}}{T_0^{\text{PD}}}$$

pour la transmission, ainsi que l'erreur sur les champs calculés intégrée sur la cellule de calcul Ω

$$\mathfrak{E} = \frac{\langle u_2^{d,\text{PD}} - u_2^{d,\text{MM}}, u_2^{d,\text{PD}} - u_2^{d,\text{MM}} \rangle}{\langle u_2^{d,\text{PD}}, u_2^{d,\text{PD}} \rangle} = \frac{\int_{\Omega} |u_2^{d,\text{PD}}(\mathbf{r}) - u_2^{d,\text{MM}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_{\Omega} |u_2^{d,\text{PD}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$



Les courbes donnant ces erreurs en fonction de λ sont tracées sur la **Figure 4.9**, pour différentes valeurs du nombre de modes N_M utilisés pour la reconstruction du champ. Les modes utilisés en priorité sont ceux ayant la plus forte valeur de $\max |P_n|$ sur la bande spectrale. Comme on pouvait s'y attendre, ces erreurs diminuent au fur et à mesure que le nombre de modes pris en compte dans la méthode modale augmente. Nous n'avons pas représenté les valeurs pour un plus grand nombre de modes, car pour $N_M > 200$, les erreurs ne diminuent plus de manière significative. Ce comportement laisse penser que, dans cet exemple et avec les paramètres choisis tout du moins, ces erreurs résiduelles ne sont pas dues aux erreurs de troncature mais aux erreurs de calcul sur les valeurs propres et les vecteurs propres eux-mêmes.



Conclusion partielle

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthode permettant d'obtenir la représentation spectrale d'un champ diffracté par un réseau à une longueur d'onde arbitraire [135]. Elle est basée sur la résolution d'un problème adjoint dont les vecteurs propres nous permettent d'orthogonaliser la base des vecteurs propres du problème spectral et ainsi de calculer les coefficients de couplage de l'onde plane incidente avec un mode donné. La dépendance fréquentielle des coefficients de couplage associés aux modes à fuite indique clairement que ces modes jouent un rôle clé dans les résonances du champ diffracté. Au travers d'exemples numériques, nous avons montré que cette méthode modale peut être appliquée en pratique pour calculer les spectres de transmission et de réflexion. Si l'on veut balayer une large plage spectrale, cette méthode s'avère potentiellement plus efficace en terme de temps de calcul que la résolution, pour chaque fréquence, du problème de diffraction, puisqu'il suffit alors de résoudre un seul problème FEM et de calculer le champ diffracté sur la base réduite des modes propres en calculant les coefficients de couplage par intégration numérique, à partir des fréquences propres et des modes adjoints. Nous avons également montré les limites de cette technique en terme de précision, puisqu'il faut d'une part calculer les modes de manière précise et d'autre part prendre en compte un grand nombre de modes du fait de la présence du spectre continu.

Généralisation au cas vectoriel

Sommaire

5.1	Problème de diffraction	95
5.1.1	Définition du problème vectoriel et notations	95
5.1.2	Problème radiatif équivalent à sources localisées	97
5.1.3	Quasi-périodicité et formulation faible	98
5.1.4	Considérations énergétiques	99
5.2	Problème spectral	101
5.2.1	Formulation du problème	101
5.2.2	Structure du spectre de l'opérateur de Maxwell	102
5.3	Méthode modale	103
5.3.1	Produit interne et problème spectral adjoint	103
5.3.2	Décomposition d'un champ diffracté sur les modes propres	103

Nous présentons dans ce chapitre une généralisation au cas vectoriel de ce qui a été fait aux chapitres 1, 2 et 3. En effet, cette étape est nécessaire puisque nous voulons concevoir des réseaux résonants dont la réponse spectrale est indépendante de la polarisation de l'onde incidente, il est donc crucial de pouvoir modéliser des réseaux bi-périodiques. Dans la mesure où nous avons détaillé les concepts dans le cas 2D, nous donnerons ici les principaux résultats, en insistant cependant sur les différences notables entre les deux cas. Les méthodes ainsi généralisées seront illustrées numériquement au chapitre 6, où nous présenterons des applications à la conception et à l'étude des propriétés diffractives de filtres à réseau.

Dans un premier temps, on présentera la formulation vectorielle de la FEM développée par Demésy *et. al.*, fondée sur les mêmes principes que ceux exposés au chapitre 1.

Puis nous étendrons notre technique de recherche de modes au cas tridimensionnel.

Enfin, nous développerons une méthode modale de reconstruction d'un champ vectoriel diffracté par un réseau à partir des modes propres du système.

5.1 Problème de diffraction

5.1.1 Définition du problème vectoriel et notations

On note x , y et z les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonales $Oxyz$. La Figure 5.1 représente le type de structure à l'étude dans cette partie, dans

le cas d'un seul élément diffractif par période, pour une meilleure lisibilité. Le choix de l'axe Oz comme axe de propagation de la lumière peut sembler contradictoire avec les notations du Chapitre 2. Il correspond aux notations les plus utilisées lors de la représentation de phénomènes optiques en 3D. Seul le régime harmonique sera ici abordé et les champs électriques et magnétiques seront par conséquent représentés par des vecteurs complexes notés \mathbf{E} et \mathbf{H} avec une dépendance temporelle choisie en $\exp(-i\omega t)$. Enfin, les champs de tenseurs de permittivité relative ε et de perméabilité relative μ peuvent varier continûment (resp. de façon discontinue) dans l'élément diffractif, autorisant l'étude de réseaux croisés à gradient d'indice (resp. saut d'indice).

Les structures à l'étude peuvent être décomposées en plusieurs sous-domaines, représentés en Figure 5.1 :

- La *superstrat* ($z > z_0$) est supposé linéaire, homogène, isotrope et sans pertes, donc caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ε^+ et sa perméabilité magnétique relative μ^+ . On note $k^+ := k_0 \sqrt{\varepsilon^+ \mu^+}$ le module du vecteur d'onde.
- L'*empilement multi-couches* ($z_0 < z < z_N$) est composé d'un empilement de N couches supposées linéaires, homogènes et isotropes, caractérisées par leur permittivité diélectrique relative ε_n , leur perméabilité magnétique relative μ_n et leur épaisseur e_n . On note $k_n := k_0 \sqrt{\varepsilon_n \mu_n}$ pour n entier de 1 à N .
- La *région des sillons* ($z_{g-1} < z < z_g$) qui est imbriquée dans la couche numérotée g (ε_g, μ_g) du domaine décrit ci-dessus. On se limitera dans ce développement au cas isotrope. Cette région hétérogène est donc décrite par des champs scalaires $\varepsilon_{g'}(x, y, z)$ et $\mu_{g'}(x, y, z)$. Notons aussi que ces champs peuvent être constants par morceaux. La périodicité des sillons selon Ox (resp. Oy) est notée d_x (resp. d_y).
- La *substrat* ($z < z_N$) est supposé linéaire, homogène et isotrope, caractérisé par sa permittivité diélectrique relative ε^- et sa perméabilité magnétique relative μ^- . On note $k^- := k_0 \sqrt{\varepsilon^- \mu^-}$.

Précisons ici que cette restriction aux matériaux isotropes n'est en aucun cas indispensable mais simplifie la présentation du développement de la méthode. Choisir des matériaux complètement anisotropes pour la région des sillons, ou les couches de l'empilement, est tout à fait possible. La formulation faible associée au problème comprendrait des termes supplémentaires mais cela ne rajouterait pas de degré de liberté supplémentaire au système final.

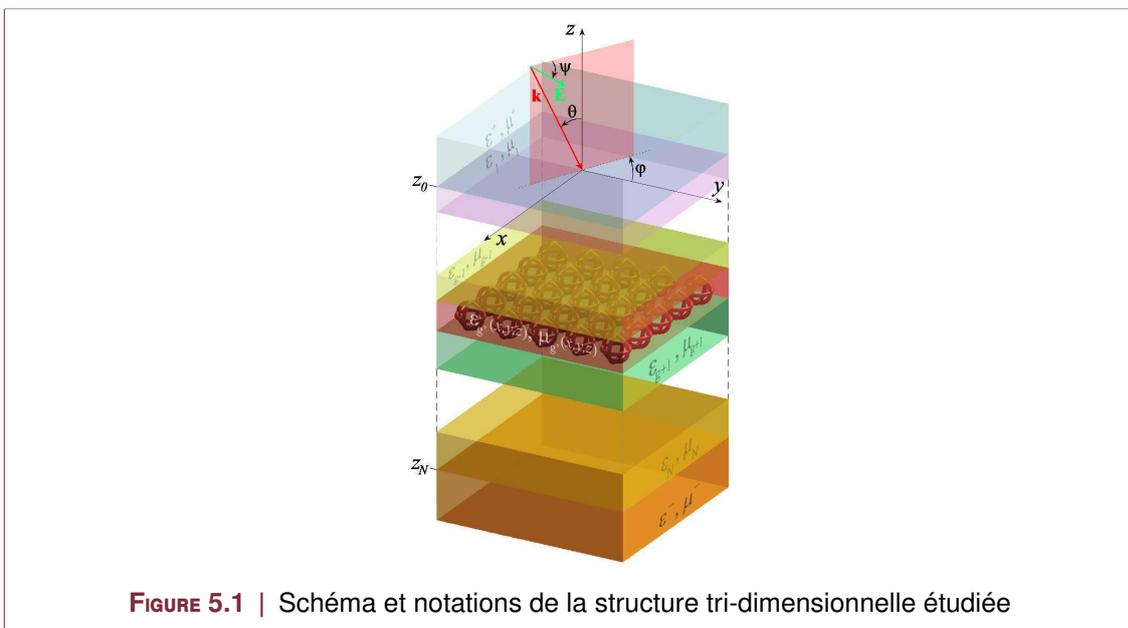


FIGURE 5.1 | Schéma et notations de la structure tri-dimensionnelle étudiée

Les permittivités relatives présentées ci-dessus peuvent être complexes, autorisant

l'étude de couches à pertes. Le champ incident sur cette structure est noté :

$$\mathbf{E}^{\text{inc}} = A^0 \exp(i \mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}) \quad (5.1)$$

avec

$$\mathbf{k}^+ = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 \\ \gamma_0 \end{pmatrix} = k^+ \begin{pmatrix} -\sin \theta_0 \cos \varphi_0 \\ -\sin \theta_0 \sin \varphi_0 \\ -\cos \theta_0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

et

$$A_0^e = \begin{pmatrix} E_x^0 \\ E_y^0 \\ E_z^0 \end{pmatrix} = A^e \begin{pmatrix} \cos \psi_0 \cos \theta_0 \cos \varphi_0 - \sin \psi_0 \sin \varphi_0 \\ \cos \psi_0 \cos \theta_0 \sin \varphi_0 + \sin \psi_0 \cos \varphi_0 \\ -\cos \psi_0 \sin \theta_0 \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

où $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$, $\theta_0 \in [0, \frac{\pi}{2}]$ et $\psi_0 \in [0, \pi]$.

Dans cette partie, on choisit arbitrairement de calculer le champ E , le champ H pouvant être déduit de Éq. (2.3a). En introduisant Éq. (2.3a) dans Éq. (2.3b), le problème de diffraction revient à trouver l'unique E solution de l'équation de propagation vectorielle :

$$\mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E) := -\text{rot}(\mu_r^{-1} \text{rot} E) + k_0^2 \varepsilon E = \mathbf{0}, \quad (5.4)$$

tel que le champ diffracté vérifie une COS (Condition d'Onde Sortante) et où E est une fonction quasi-périodique selon x et y .

5.1.2 Problème radiatif équivalent à sources localisées

Les champs scalaires de permittivité relative ε et de perméabilité relative μ associés à la structure peuvent donc être décrits à l'aide de fonctions définies par morceaux et des notations prises en 5.1.1 :

$$v(x, y, z) := \begin{cases} v^+ & \text{pour } z > 0 \\ v^n & \text{pour } z_{n-1} > z > z_n \text{ avec } 1 \leq n < g \\ v^{g'}(x, y, z) & \text{pour } z_{g-1} > z > z_g \\ v^n & \text{pour } z_{n'-1} > z > z'_n \text{ avec } g < n' \leq N \\ v^- & \text{pour } z < z_N \end{cases} \quad (5.5)$$

avec :

$$v = \{\varepsilon, \mu\}, \quad z_0 = 0 \quad \text{et} \quad z_n = -\sum_{l=1}^n e_l \quad \text{pour } 1 \leq n \leq N \quad (5.6)$$

Comme au chapitre 2, il est à présent utile d'introduire deux fonctions définies par morceaux ε_1 et μ_1 décrivant le cas de l'empilement multi-couches invariant selon Ox et Oy :

$$v_1(x, y, z) := \begin{cases} v^+ & \text{pour } z > 0 \\ v^n & \text{pour } z_{n-1} > z > z_n \text{ avec } 1 \leq n \leq N \\ v^- & \text{pour } z < z_N \end{cases} \quad (5.7)$$

On note enfin E_0 la restriction de E^{inc} au superstrat :

$$E_0 := \begin{cases} E^{\text{inc}} & \text{pour } z > z_0 \\ \mathbf{0} & \text{pour } z < z_0 \end{cases} \quad (5.8)$$

Le problème de diffraction dans le cas vectoriel revient donc à rechercher l'unique champ de vecteur E solution de :

$$-\mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E) = \mathbf{0} \quad \text{tel que } E^d := E - E_0 \text{ satisfait une C.O.S.} \quad (5.9)$$

Pour se ramener à un problème radiatif, un champ de vecteur intermédiaire noté E_1 est nécessaire et défini comme l'unique solution de :

$$\mathcal{L}_{\varepsilon_1, \mu_1}(E_1) = \mathbf{0} \quad \text{tel que } E_1^d := E_1 - E_0 \text{ satisfait une C.O.S.} \quad (5.10)$$

Le champ de vecteur E_1 correspond à un *problème annexe* associé au *cas général vectoriel de l'empilement multi-couches* et peut être calculé *indépendamment*. Ce calcul vectoriel est rarement traité dans la littérature, on pourra se reporter à l'annexe A de [24]. E_1 sera donc désormais *considéré comme connu*. C'est ici qu'est introduit le champ de vecteur E_2^d qui sera effectivement calculé grâce à la FEM et simplement défini comme la différence entre E et E_1 :

$$E_2^d := E - E_1 = E^d - E_1^d. \quad (5.11)$$

Tenant compte de ces nouvelles définitions, Éq. (5.9) s'écrit :

$$\mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E_2^d) = -\mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E_1), \quad (5.12)$$

où le membre de droite est un champ de vecteur qui peut être interprété comme *un terme source vectoriel connu* $-\mathcal{S}_1(x, y, z)$ dont le support est borné dans la région des sillons par l'élément diffractif. Pour s'en convaincre, on introduit le terme nul défini en Éq. (5.10) et la linéarité de \mathcal{L} (induite par celle du rotationnel) conduit à :

$$\mathcal{S}_1 := \mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E_1) = \mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E_1) - \underbrace{\mathcal{L}_{\varepsilon_1, \mu_1}(E_1)}_{=0} = \mathcal{L}_{\varepsilon - \varepsilon_1, \mu - \mu_1}(E_1). \quad (5.13)$$

5.1.3 Quasi-périodicité et formulation faible

La formulation faible est construite en multipliant scalairement l'Éq. 5.9 par des vecteurs de poids E' choisis dans l'ensemble des fonctions quasi-bi-périodiques de $L^2(\mathbf{rot})$ (noté $L^2(\mathbf{rot}, (d_x, d_y), \mathbf{k})$) dans Ω :

$$\mathcal{R}_{\varepsilon, \mu} = \int_{\Omega} -\mathbf{rot}(\mu_r^{-1} \mathbf{rot} E) \cdot \bar{E}' + k_0^2 \varepsilon E \cdot \bar{E}' d\Omega \quad (5.14)$$

En intégrant par partie Éq. 5.14 et en utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, on obtient :

$$\mathcal{R}_{\varepsilon, \mu} = \int_{\Omega} -\mu_r^{-1} \mathbf{rot} E \cdot \mathbf{rot} \bar{E}' + k_0^2 \varepsilon E \cdot \bar{E}' d\Omega - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{n} \times (\mu_r^{-1} \mathbf{rot} E)) \cdot \bar{E}' dS \quad (5.15)$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur unitaire de la normale extérieure à la surface.

La solution E_2^d de la *formulation faible associée au problème de diffraction*, exprimé sous une *forme radiative équivalente* en Éq. 5.12, est l'élément de $L^2(\mathbf{rot}, (d_x, d_y), \mathbf{k})$ tel que :

$$\forall E' \in L^2(\mathbf{rot}, d_x, d_y, \mathbf{k}), \quad \begin{cases} \forall (x, y, z) \in \Omega_s, & \mathcal{R}_{\varepsilon_g, \mu_g}(E_2^d, E') = -\mathcal{R}_{\varepsilon_g, \mu_g}(\mathcal{S}_1, E') \\ \forall (x, y, z) \in \Omega \setminus \Omega_s, & \mathcal{R}_{\varepsilon, \mu}(E_2^d, E') = 0 \end{cases}. \quad (5.16)$$

Enfin, comme dans le cas scalaire, des conditions de quasi-périodicité sont imposées selon Ox et selon Oy grâce au terme de bord. Les PML tri-dimensionnelles adaptées au substrat et superstrat sont calculées selon les mêmes principes qu'en partie 2.1.4, chapitre 2. Enfin, les conditions de Neumann homogènes sont appliquées sur leur frontière extérieure orthogonale à Oz respective.

5.1.4 Considérations énergétiques

Efficacités de diffraction

Contrairement aux méthodes basées sur la détermination des coefficients de Rayleigh du champ diffracté comme la méthode différentielle, la FEM permet d'obtenir directement les composantes complexes de E^d défini en Éq. 5.9 en tout point du volume de calcul. Cette partie détaille le calcul des efficacités de diffraction à partir des composantes transverses de ce champ.

En tant que différence entre deux fonctions quasi-périodiques selon Ox et Oy (voir Éq. 5.9), E^d est quasi-périodique et ses composantes sont décomposables en série de Rayleigh. Ceci est valable dans tout l'espace de calcul, région des sillons comprise :

$$E_x^d(x, y, z) = \sum_{(n,m) \in \mathbb{Z}^2} u_{n,m}^{d,x}(z) e^{-i(\alpha_n x + \beta_m y)} \quad (5.17)$$

avec $\alpha_n = \alpha_0 + \frac{2\pi}{d_x} n$, $\beta_m = \beta_0 + \frac{2\pi}{d_y} m$ et

$$u_{n,m}^{d,x}(z) = \frac{1}{d_x d_y} \int_{-d_x/2}^{d_x/2} \int_{-d_y/2}^{d_y/2} E_x^d(x, y, z) e^{-i(\alpha_n x + \beta_m y)} dx dy \quad (5.18)$$

En introduisant cette décomposition dans l'équation de Helmholtz vérifiée par E_x^d partout sauf dans la région des sillons, on peut exprimer ces coefficients de Rayleigh dans le substrat et le superstrat :

$$u_{n,m}^{d,x}(z) = e_{n,m}^{x,p} e^{-i\gamma_{n,m}^+ z} + e_{n,m}^{x,c} e^{i\gamma_{n,m}^+ z} \quad (5.19)$$

avec $\gamma_{n,m}^{\pm 2} = k^{\pm 2} - \alpha_n^2 - \beta_m^2$, avec $\gamma_{n,m}$ (ou $-i\gamma_{n,m}$) positif. $u_{n,m}^{d,x}$ correspond donc à la somme d'une onde plane propagative (se propageant vers dans le sens des z décroissants, exposant p) et d'une onde plane contra-propagative (exposant c). Les COS du champ diffracté E^d imposent :

$$\forall (n, m) \in \mathbb{Z}^2 \left\{ \begin{array}{l} e_{n,m}^{x,p} = 0 \quad \text{pour } z > z_0 \\ e_{n,m}^{x,c} = 0 \quad \text{pour } z < z_N \end{array} \right. \quad (5.20)$$

Comme dans le cas scalaire (cf. 2.1.7, chapitre 2), Éq. 5.18 permet donc de déterminer les $e_{n,m}^{x,c}$ (resp. $e_{n,m}^{x,p}$) par double intégration numérique (méthode des trapèzes) d'une coupe de champ à une altitude z_c fixée dans le superstrat (resp. substrat). Les composantes E_y^d et E_z^d s'écrivent et les coefficients $e_{n,m}^{y,\{c,p\}}$ et $e_{n,m}^{z,\{c,p\}}$ s'obtiennent numériquement exactement de la même manière.

On en déduit les efficacités de diffraction transmises et réfléchies définies par :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{n,m} = \frac{\gamma_{n,m}^+}{\gamma_0} e_{n,m}^c(z_c) \cdot \overline{e_{n,m}^c(z_c)} \quad \text{pour } z_c > z_0 \\ T_{n,m} = \frac{\gamma_{n,m}^-}{\gamma_0} e_{n,m}^p(z_c) \cdot \overline{e_{n,m}^p(z_c)} \quad \text{pour } z_c < z_N \end{array} \right. \quad (5.21)$$

avec $e_{n,m}^{\{c,p\}} = e_{n,m}^{x,\{c,p\}} \mathbf{x} + e_{n,m}^{y,\{c,p\}} \mathbf{y} + e_{n,m}^{z,\{c,p\}} \mathbf{z}$.

Calcul des pertes dues à l'effet Joule

Considérons un diélectrique à pertes caractérisé par sa permittivité complexe $\varepsilon = \varepsilon' + \varepsilon'' i$, sa perméabilité complexe $\mu_r = \mu' + \mu'' i$ et le vecteur unitaire \mathbf{n} de la normale extérieure à sa surface fermée S délimitant son volume Ω . En régime sinusoïdal, le champ

cède par période T à la matière une énergie W que l'on peut calculer grâce au Théorème de Poynting complexe dont la formulation découle directement des équations de Maxwell en régime harmonique (voir par exemple [107]) :

$$\frac{W}{T} = \Re \left(\int_S -\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}_{\text{moy}} dS \right) = -\Re \left(\int_{\Omega} \text{div} \mathbf{S}_{\text{moy}} d\Omega \right)$$

où $\mathbf{S}_{\text{moy}} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \times \bar{\mathbf{H}}$. Notons que la continuité de $\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}_{\text{moy}}$ est assurée par celle des composantes tangentielles des champs \mathbf{E} et \mathbf{H} lors de la traversée de S .

Dans le cas isotrope, en l'absence de courant, tenant compte de l'égalité $\text{div}(\mathbf{E} \times \bar{\mathbf{H}}) = -\mathbf{E} \cdot \text{rot} \bar{\mathbf{H}} + \bar{\mathbf{H}} \cdot \text{rot} \mathbf{E}$ et des équations de Maxwell définies en Éq. (2.3a) et Éq. (2.3b), on a :

$$\frac{W}{T} = \Re \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} i \omega (\varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E} \cdot \bar{\mathbf{E}} + \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \cdot \bar{\mathbf{H}}) d\Omega \right)$$

Ainsi, on obtient les pertes par effet Joule Q dans le matériau à pertes (pour tous les matériaux utilisés ici, $\mu_r = 1$) en calculant directement :

$$Q = \frac{W}{T} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \omega \varepsilon'' \mathbf{E} \cdot \bar{\mathbf{E}}$$

Les volumes et normales aux surfaces étant complètement définis lors de la mise en œuvre de la FEM, cette quantité est calculée rapidement, une fois \mathbf{E} connu en tout point de la structure. Connaissant les efficacités des ordres de diffraction propagatifs notés (n, m) , il est donc possible d'effectuer un bilan d'énergie complet pour chaque structure en vérifiant :

$$\sum_{n,m} R_{n,m} + \sum_{n,m} T_{n,m} + Q = 1.$$

Maillage et éléments d'arêtes (ou de Whitney) d'ordre 2

Considérons la cellule de calcul Ω et sa surface extérieure $\partial\Omega$. Ce volume est décomposé en un nombre fini de tétraèdres en respectant cette règle : deux tétraèdres du maillage ont en commun soit une face, soit une arête, soit un nœud, ou n'ont aucun contact.

L'emploi d'éléments finis nodaux conduirait à imposer la continuité de toutes les composantes du champ au passage d'un élément à un autre. Ceci n'est pas représentatif du cas général, puisque la composante normale du champ \mathbf{E} est discontinue à la traversée d'une interface entre deux matériaux de propriétés optiques différentes. Par exemple, l'utilisation d'éléments finis nodaux dans les problèmes aux valeurs propres de guide d'onde entraîne la présence de modes parasites dans la solution finale (voir [8]).

Dans le cas vectoriel, on a recours à des éléments finis particuliers, les éléments d'arête (ou formes de Whitney, adaptées par Bossavit [9]). Ces éléments conviennent à la représentation des champs de vecteurs comme \mathbf{E} , en autorisant la discontinuité de leur composante normale, tout en imposant la continuité de leurs composantes tangentielles. Au lieu d'associer les DDL du système algébrique final aux nœuds du maillage m (comme les éléments nodaux du cas scalaire), les éléments d'arête (resp. de face) interprètent les DDL comme les circulations (resp. flux) des champs de vecteurs à approximer le long (resp. à travers) des arêtes (resp. les faces) du maillage.

À partir des vecteurs de base \mathbf{w} et des DDL ϑ définis sur les arêtes \mathcal{A} et les faces \mathcal{F} , l'approximation de \mathbf{E}_2^d sur un maillage tétraédrique m s'écrit dans Ω :

$$\mathbf{E}_2^{d,m} = \sum_{a \in \mathcal{A}} \vartheta_a \mathbf{w}_a + \sum_{f \in \mathcal{F}} \vartheta_f \mathbf{w}_f \quad (5.22)$$

Les vecteurs de test E' (cf. Éq. 5.16, partie 5.1.3) sont choisis dans le même espace que la solution $E_2^d, L^2(\mathbf{rot}, (d_x, d_y), k)$. D'après la formulation de Galerkin, ce choix est fait de telle sorte que leur restriction à une bi-période appartienne à l'ensemble des vecteurs de base. En introduisant la décomposition du champ de l'Éq. 5.22 dans l'Éq. 5.16, on aboutit au système algébrique final qui est résolu, dans les applications numériques qui suivent, grâce à des solveurs directs.

5.2 Problème spectral

5.2.1 Formulation du problème

De manière analogue à ce qui a été fait en sous-section 3.1.1, nous recherchons dans cette partie les modes propres et fréquences propres des réseaux étudiés. Cela revient à chercher les champs capables de se propager dans la structure sans excitation (sans champ incident), avec des constantes de propagation (coefficients de pseudo-périodicité) α et β fixées dans \mathbb{R} . L'équation homogène associée à Éq 5.12 s'écrit

$$\mathbf{rot}(\mu_r^{-1} \mathbf{rot} E_2^d) = k_0^2 \varepsilon_r E_2^d \quad (5.23)$$

Nous prenons ici en compte le fait que les matériaux peuvent être anisotropes (ceci sera en fait le cas car nous utilisons des PMLs aux propriétés matérielles équivalentes anisotropes pour la modélisation de nos structures), par conséquent les tenseurs de permittivité et de perméabilité seront représentés par des matrices 3×3 . En notant $V_n = E_2^d$, $\mathcal{M}_\mu(V_n) := \mathbf{rot}(\mu^{-1} \mathbf{rot} V_n)$ et $\Lambda_n = (\omega_n/c)^2$, on obtient :

$$\mathcal{M}_\mu(V_n) = \Lambda_n \varepsilon V_n \quad (5.24)$$

Ainsi, le problème spectral à résoudre consiste à trouver les solutions non triviales de l'Équation 5.24, c'est à dire trouver les champs vectoriels propres V_n et les valeurs propres Λ_n généralisés de l'opérateur de Maxwell \mathcal{M}_μ .

Remarquons ici que si les angles d'incidence θ_0 et φ_0 apparaissent de manière subtile au travers des coefficients de pseudo-périodicité α et β (voir les remarques en partie 3.1.1 à ce sujet), *l'angle de polarisation ψ_0 n'intervient nullement dans le problème spectral*. Il apparait alors qu'une étude approfondie des vecteurs propres doit être menée pour savoir quelle polarisation peut exciter le mode propre en question. Cette problématique sera étudiée en partie 5.3, avec une attention particulière portée sur la dégénérescence de modes due à la symétrie des structures diffractives.

Comme pour le problème de diffraction, nous devons discrétiser l'équation 5.24 afin de pouvoir obtenir les solutions de manière numérique. Cette étape est réalisée grâce à la méthode des éléments finis, ce qui nécessite une cellule de calcul bornée. Le modèle consiste à ne traiter qu'une seule période du réseau et à appliquer des conditions de quasi-périodicité sur les frontières latérales. De plus, nous tronquons le substrat et le superstrat par des PMLs terminées par une condition de Neumann homogène. Enfin, la cellule est maillée avec des éléments d'arête (dits de Witney, cf. sous-sous-section 5.1.4) d'ordre 2, et nous fixons la taille maximale d'un élément à $\lambda^{\text{mesh}}/(N_m \sqrt{\Re(\varepsilon_r)})$, où N_m est un entier et λ^{mesh} une longueur d'onde choisie dans le voisinage d'une des longueur d'onde de résonance attendue. Le système algébrique final est résolu, dans les exemples numériques présentés, avec un solveur direct (PARDISO [120]).

5.2.2 Structure du spectre de l'opérateur de Maxwell

Comme dans le cas scalaire, le spectre de l'opérateur \mathcal{M}_μ est composé d'une partie continue et d'une partie discrète. Si les matériaux en jeu sont sans pertes, le problème spectral est formellement auto-adjoint, et les valeurs propres discrètes (modes guidés) et continues (modes de radiation) sont réelles. Revenant au problème canonique de l'opérateur mono-dimensionnel $-\frac{d^2}{dz^2}$ dont le spectre continu est l'axe réel positif, nous pouvons obtenir une paramétrisation des lieux du spectre continu associé à notre problème du bi-réseau. En effet, en décomposant les vecteurs propres V_n en ondes de Bloch suivant

$$V_n(x, y, z) = \sum_{(m,l) \in \mathbb{Z}^2} V_{nml}(z) e^{i(\alpha_m x + \beta_l y)} \quad (5.25)$$

et en injectant cette décomposition dans l'Équation 5.24, on obtient :

$$-\frac{\partial^2 V_{nml}}{\partial z^2} = \gamma_{nml}^2 V_{nml} \quad (5.26)$$

Ainsi, les fréquences propres complexes associées au spectre continu sont données par :

$$\mathcal{D}_{ml}^\pm(\gamma) = c^\pm \sqrt{\alpha_m^2 + \beta_l^2 + \gamma^2}, \quad \gamma \in \mathbb{R}^+, \quad \forall (m, l) \in \mathbb{Z}^2 \quad (5.27)$$

avec $c^\pm = c / \sqrt{\varepsilon^\pm \mu^\pm}$ la vitesse de la lumière dans le milieu considéré. En notant $d_{ml}^\pm = c^\pm \sqrt{\alpha_m^2 + \beta_l^2}$ ces chemins sont les demi-droites $[d_{ml}^\pm, +\infty[$.

Considérons maintenant le problème du réseau où l'on a rajouté des PMLs infinies. De manière analogue aux considérations développées en partie 3.1.1, le changement de coordonnées complexes $z \mapsto z_c = z/s_z$ effectué sur la variable z induit un déplacement du spectre continu dans le plan complexe. Les lieux fréquences propres complexes associées au spectre continu sont alors données par :

$$C_{ml}^\pm(\gamma) = c^\pm \sqrt{\alpha_m^2 + \beta_l^2 + (\gamma/s_z)^2}, \quad \gamma \in \mathbb{R}^+, \quad \forall (m, l) \in \mathbb{Z}^2 \quad (5.28)$$

Ce déplacement a pour conséquence de révéler les modes à fuite du système. Comme dans le cas scalaire, ces modes sont exponentiellement croissants selon z . Finalement, la réduction à une taille finie des PMLs implique que le spectre continu est discrétisé, si bien que l'opérateur que l'on considère dans le calcul FEM possède un spectre uniquement discret.

Aussi, les PMLs se révèlent-elles être dans la formulation vectorielle du problème spectral un outil puissant pour le calcul des modes à fuites. Demeure encore la question du choix de leurs paramètres. Là encore, les conclusions tirées en partie 3.1.1 restent valables. L'argument du paramètre d'absorption s_z ajuste le déplacement dans \mathbb{C} du spectre continu, révélant plus ou moins de modes à fuite. Le module de s_z et la hauteur des PMLs agissent de façon similaire : au plus ces paramètres augmentent, au plus la discrétisation du spectre continu est grande, en d'autres termes, on simule de mieux en mieux l'espace ouvert. Mettre une condition de Neumann ou de Dirichlet homogène en bout de PML a pour effet l'obtention d'une discrétisation différente du spectre continu. Notons que les modes à fuites sont quasi-insensibles aux variations de ces paramètres qui sont des caractéristiques des PMLs. Enfin, la distance PML/réseau est un paramètre critique : on veillera à la garder la plus faible possible afin d'éviter des erreurs numériques dues à la croissance des modes à fuites avant qu'ils ne soient amortis par la PML.

5.3 Méthode modale

5.3.1 Produit interne et problème spectral adjoint

Considérant deux fonctions vectorielles F et G de $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ dans \mathbb{C}^3 , d'énergie finie, nous définissons le produit interne suivant :

$$\langle F, G \rangle := \int_{\Omega} F(\mathbf{r}) \cdot \overline{G(\mathbf{r})} \, d\mathbf{r} \quad (5.29)$$

Comme en 2D, les modes propres que nous étudions ne sont pas orthogonaux vis à vis du produit interne $\langle \varepsilon, \cdot \rangle$, car le problème que l'on traite (celui avec PMLs finies) n'est pas auto-adjoint. Il est donc nécessaire de considérer un problème spectral adjoint de valeurs propres conjuguées $\overline{\Lambda_n}$ et dont les vecteurs propres sont notés W_n . L'opérateur adjoint est défini par

$$\langle \mathcal{M}_{\mu}(V_n), W_m \rangle = \langle V_n, \mathcal{M}_{\mu}^{\dagger}(W_m) \rangle.$$

On peut montrer que ce problème adjoint s'obtient en remplaçant les tenseurs définissant les propriétés des matériaux par les tenseurs transposés conjugués, et se formule donc ainsi :

$$\mathcal{M}_{\mu}^{\dagger}(W_n) := \mathcal{M}_{\mu^*}(W_n) = \overline{\Lambda_n} \varepsilon^* W_n. \quad (5.30)$$

En général, on a $V_n \neq \overline{W_n}$ à cause des conditions de quasi-périodicité (voir partie 4.1.1 pour la démonstration dans le cas scalaire, le cas vectoriel se traite de façon similaire), mais dans le cas particulier où $\alpha = \beta = 0$, les vecteurs propres adjoints sont simplement les conjugués des vecteurs propres¹.

Les modes et leurs adjoints vérifient une relation de bi-orthogonalité :

$$\langle \varepsilon V_n, W_m \rangle := \int_{\Omega} \varepsilon V_n(\mathbf{r}) \cdot \overline{W_m(\mathbf{r})} \, d\mathbf{r} = K_n \delta_{nm}. \quad (5.31)$$

5.3.2 Décomposition d'un champ diffracté sur les modes propres

Tout champ E_2^d solution de (5.12) peut se décomposer sur la base des vecteurs propres :

$$E_2^d = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n V_n \quad (5.32)$$

Le coefficient P_n traduit le couplage du mode n avec l'onde incidente et est donné par :

$$P_n = \langle \varepsilon E_2^d, W_n \rangle, \quad \forall n \in \mathbb{N}^*. \quad (5.33)$$

En introduisant la décomposition (5.32) dans l'équation (5.12) vérifiée par E_2^d , on obtient :

$$\mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(E_2^d) = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n \mathcal{L}_{\varepsilon, \mu}(V_n) = -\mathcal{S}_1 \quad (5.34)$$

1. Cette propriété est toujours vraie dans le cas non périodique (où il n'y a pas de conditions de pseudo-périodicité), par exemple un diffuseur placé dans le vide. Dans ce cas, une modélisation adaptée à la FEM consiste à placer des PMLs tout autour de l'objet.

avec :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\varepsilon,\mu}(V_n) &= -\mathcal{M}_\mu(V_n) + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon V_n \\ &= \frac{\omega^2 - \omega_n^2}{c^2} \varepsilon V_n\end{aligned}$$

d'où

$$\mathcal{L}_{\varepsilon,\mu}(\mathbf{E}_2^d) = \sum_{n=1}^{+\infty} P_n \frac{\omega^2 - \omega_n^2}{c^2} \varepsilon V_n = -\mathcal{S}_1 \quad (5.35)$$

En projetant (5.35) sur le mode adjoint W_n il vient :

$$P_n = \frac{J_n}{\omega^2 - \omega_n^2} \quad (5.36)$$

avec

$$J_n = -\frac{c^2}{K_n} \langle \mathcal{S}_1, W_n \rangle = -\frac{c^2}{K_n} \int_{\Omega_{g'}} \mathcal{S}_1(\mathbf{r}) \cdot \overline{W_n}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (5.37)$$

où l'intégration se fait sur l'élément diffractif $\Omega_{g'}$ puisque le terme source \mathcal{S}_1 est nul partout ailleurs.

Ainsi nous obtenons les coefficients de couplage P_n simplement grâce aux cartes de champ des modes adjoints, aux fréquences propres (une fois l'étape de résolution par la FEM des deux problèmes, ces quantités sont connues et donc le calcul est immédiat) et au terme source connu analytiquement. La dépendance fréquentielle de J_n est due à ce terme source (qui dépend du champ incident). De plus, \mathcal{S}_1 , et par conséquent P_n , dépendent de l'angle de polarisation ψ : on peut ainsi, en regardant la variation du coefficient de couplage en fonction de la polarisation de l'onde incidente pour un mode donné, obtenir la ou les polarisations qui permettent d'exciter ce mode de manière optimale, où au contraire celles qui éteignent l'excitation de ce mode.

Conclusion partielle

Ce chapitre a fait l'objet d'une généralisation des principes théoriques des méthodes exposées aux chapitres 1, 2 et 3. Cette extension au cas vectoriel de réseaux bi-périodiques était essentielle car nous voulons concevoir des filtres dont la réponse spectrale est indépendante de la polarisation de l'onde incidente. Nous allons à présent mettre en application ces techniques au chapitre suivant, où nous présentons des applications à la conception de filtres à réseaux et à l'optimisation de leur réponse spectrale. Les outils développés dans la première partie de ce mémoire nous permettront d'approcher sous différents angles l'étude des propriétés de diffraction de quelques structures potentiellement utilisables pour réaliser des fonctions de filtrage spectral résonant.

Deuxième partie

Application à la conception de filtres diffractifs dans l'infrarouge

Solutions de filtrage spectral diffractif : étude numérique

Sommaire

6.1 Réseaux de plots métalliques sur substrat	110
6.2 Réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique	113
6.3 Réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique métal	117
6.3.1 Description	117
6.3.2 Accordabilité de la résonance	117
6.3.3 Tolérance angulaire	118
6.3.4 Effets de la polarisation	119
6.4 Réseaux d'ouvertures coaxiales sur substrat	122

APRÈS avoir mis en place dans la première partie de ce mémoire les outils théoriques pour étudier les propriétés de diffraction dans des réseaux de diffraction, nous passons à la phase de conception et d'analyse de structures potentiellement utilisables comme filtres dans une application d'imagerie multispectrale. Nous étudions quatre structures différentes et mettons en avant leurs avantages et inconvénients respectifs pour l'application visée. Les méthodes développées dans la première partie sont utilisées pour simuler et étudier les caractéristiques spectrales des filtres en fonction de différents paramètres opto-géométriques. L'accent sera mis en particulier sur l'excitation des modes à fuites des structures pour réaliser les fonctions de filtrage.

Mais détaillons tout d'abord les exigences auxquelles doivent répondre les filtres.

- le domaine spectral : bande III de l'infrarouge (entre 8 et 14 μm),
- filtrage en transmission ou en réflexion,
- les gabarits : filtres large bande pour privilégier le flux (passe haut, passe bas, passe bande large, coupe bande large),
- bon taux de réjection,
- indépendance à l'angle d'incidence θ_0 entre 0 et 30°,
- indépendance à la polarisation.

La dernière exigence peut être satisfaite par des réseaux à maille carrée, et un objet diffractif à symétrie carrée.

D'un point de vue de la fabrication, des contraintes liées à la technologie et aux coûts exigent de préférence :

- d’avoir la structure la plus simple possible (éviter de multiplier les sous couches),
- de ne modifier que les dimensions transverses de la structure pour obtenir différents gabarits afin de réaliser tous les filtres sur un même substrat et en une seule opération de gravure,
- de ne pas déposer des épaisseurs de couches trop grandes afin d’éviter les contraintes mécaniques,
- d’avoir des formes à graver qui ne soient pas étroites et profondes (grands facteurs de forme).

Les permittivités pour les matériaux employés (ZnS, Si et Ge) sont des valeurs tabulées extraites de [105], et on utilise un modèle de Drude-Lorentz pour la permittivité des métaux (Al, Au [102] et Cr [44, 81]).

6.1 Réseaux de plots métalliques sur substrat

Une des structures les plus simples est un réseau de plots métalliques déposés sur un substrat isolant (cf. Figure 6.1a). Ce type de matrice d’éléments diffractifs sub-longueur d’onde (ainsi que sa contrepartie duale, des trous dans une couche métallique surnommée « tamis à photons ») ont été largement étudiés durant ces dix dernières années (voir par exemple [46] et ses références). La structuration périodique à l’échelle de la longueur d’onde leur confère des propriétés optiques particulières, notamment une transmission qualifiée d’extraordinaire.

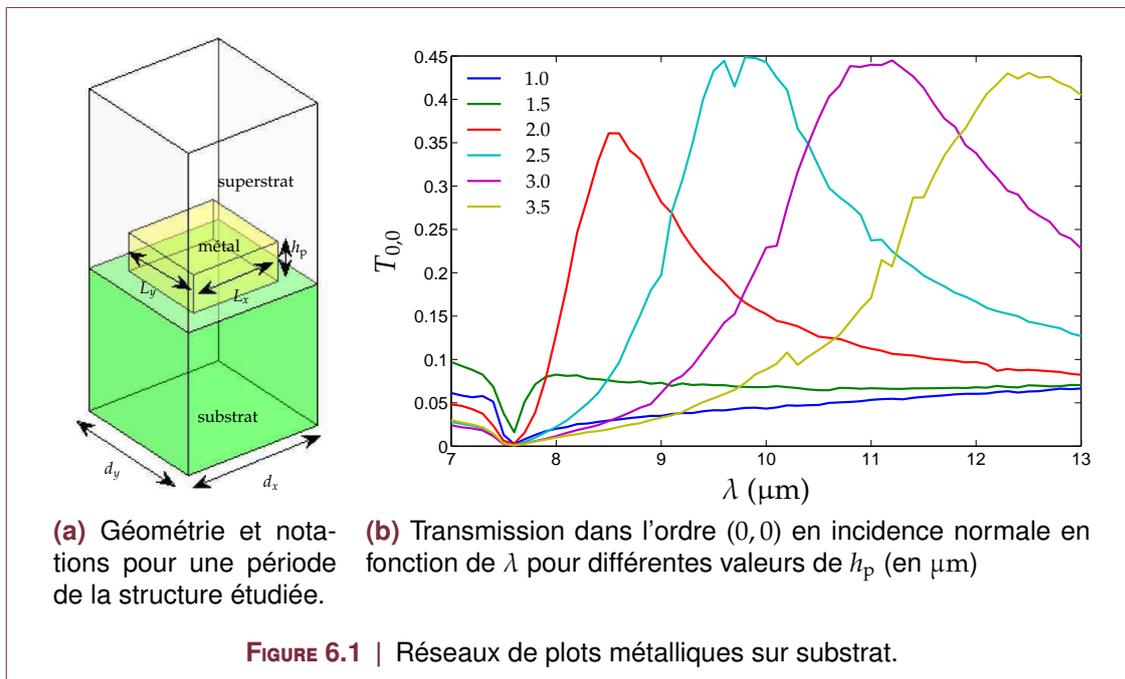
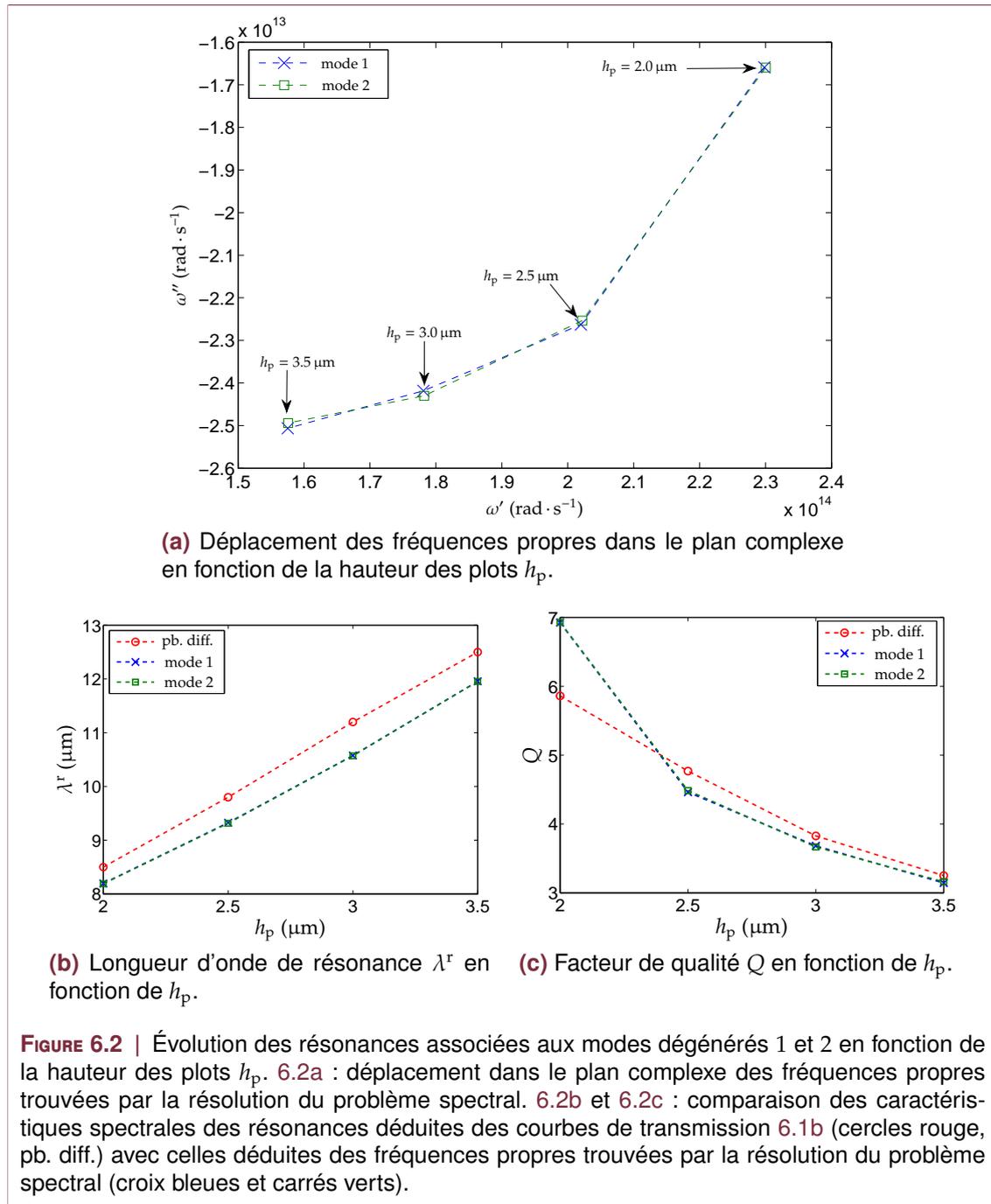


FIGURE 6.1 | Réseaux de plots métalliques sur substrat.

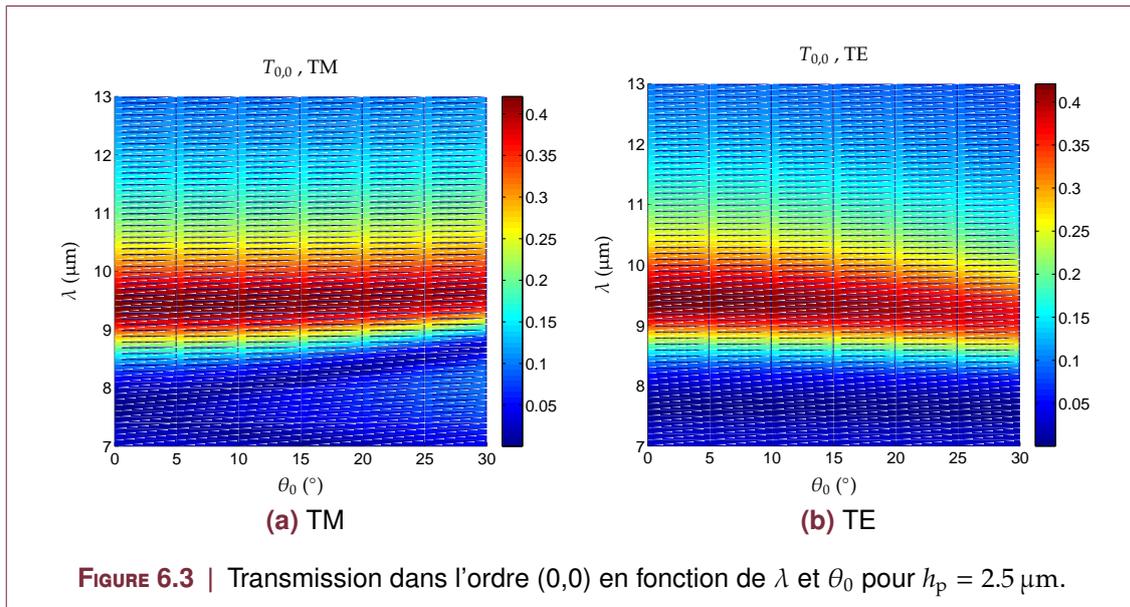
Nous employons ici un substrat de silicium et le métal utilisé est le chrome. Les réseaux ont une maille carrée de période $d_x = d_y = d$ et sont constitués de plots carrés ($L_x = L_y = L$) d’épaisseur h_p .

Nous étudions la transmission de ce genre de structure en fonction de la hauteur des plots, et fixons $d = 2.2 \mu\text{m}$ et $f = L/d = 0.9$. Les résultats sont reportés sur la Figure 6.1b. Pour de faibles valeurs de h_p , il n’y a pas de résonance. On observe l’apparition d’un pic de transmission dont la position spectrale se déplace vers les grandes longueurs d’onde

et qui s'élargit à mesure que h_p augmente.



Cherchons à présent les fréquences propres de ces réseaux. En résolvant le problème spectral, nous obtenons deux modes dégénérés dont les longueurs d'onde propres sont proches des maxima des courbes de transmission. Nous avons tracé sur la Figure 6.2a les lieux des fréquences propres dans le plan complexe pour différentes épaisseurs des plots. Nous observons que ces fréquences se déplacent quand h_p varie. Si la hauteur augmente : leur partie réelle diminue et leur partie imaginaire augmente en valeur absolue, ce qui signifie que les résonances associées se déplacent vers les grandes longueurs d'onde et s'élargissent. Ce constat est en accord avec l'observation des pics de transmission de la Figure 6.1b. Pour confirmer cette analyse qualitative, nous avons extrait les paramètres de résonance à partir des courbes de transmission : la fréquence de résonance ω^r est



celle qui correspond au maximum de transmission $T_{0,0}^{\text{max}}$ sur le domaine considéré, et la largeur à mi-hauteur $\Delta\omega$ est la largeur du pic à $T_{0,0}^{\text{max}}/2$, le facteur de qualité du pic est alors donné par $Q = \omega^r/\Delta\omega$.

Sur les Figures 6.2b et 6.2c, nous avons représenté respectivement les longueurs d'onde propre et les facteurs de qualité des résonances trouvés par l'étude de la transmission et par le problème aux valeurs propres, en fonction de la hauteur des plots. Nous voyons que l'accord des deux approches est correct. On observe une variation linéaire de λ^r en fonction de h_p . Les différences observées tiennent au fait que les caractéristiques spectrales issues des fréquences propres sont valables pour un mode *isolé*, alors que celles extraites de la transmission sont « perturbées » par un autre mode de fréquence plus faible (non étudié ici).

La Figure 6.3 illustre la dépendance angulaire de la transmission pour $h_p = 2.5 \mu\text{m}$. On constate que dans le cas TM, la longueur d'onde de résonance augmente légèrement en fonction de θ_0 , alors qu'en polarisation TE, elle diminue. Dans les deux cas, la largeur diminue lorsque l'angle d'incidence augmente.

Ces réseaux présentent des spectres intéressants pour des filtres passe bande, avec une bonne tolérance à l'angle d'incidence jusqu'à 30° , bien que la transmission à la résonance ne soit que de l'ordre de 0.5. Cette valeur pourrait être améliorée en ayant un environnement symétrique (substrat et superstrat identiques), mais ceci complexifie énormément le procédé de fabrication. Pour obtenir une résonance, les motifs diffractifs doivent présenter un grand rapport de forme (fentes étroites et profondes), difficilement réalisables par des procédés standard, que ce soit en chimie ou en gravure plasma. Pour ces raisons, nous essayons de trouver des structures avec des éléments diffractifs de faible épaisseur.

6.2 Réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique

L'article [106] présente une étude numérique et expérimentale de bi réseaux de plots métalliques de faible épaisseur, couplés à une cavité résonante de matériau à fort indice de réfraction.

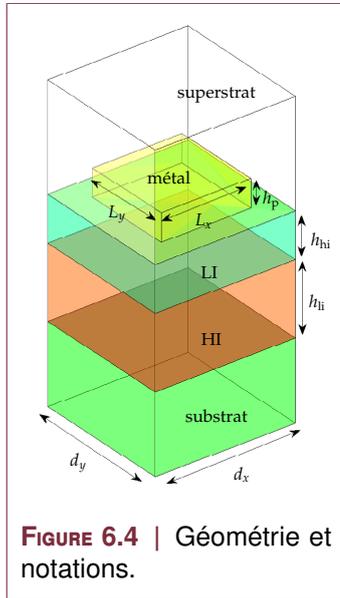


FIGURE 6.4 | Géométrie et notations.

Ces structures présentent dans la bande II de l'infrarouge des pics de résonance en transmission, réalisant ainsi des filtres passe bande avec un très bon taux de réjection hors résonance. C'est ce type de structure (cf. Fig. 6.4) qui est étudié ici, transposé dans la bande III. Les caractéristiques utilisées pour les simulations sont les suivantes :

- substrat en silicium,
- couche bas indice (LI) en sulfure de zinc (ZnS), d'épaisseur $h_{hi} = 3.25 \mu\text{m} \approx \lambda_r / (2n_{\text{ZnS}})$, où $\lambda_r = 11 \mu\text{m}$,
- couche haut indice (HI) en germanium (Ge), d'épaisseur $h_{hi} = 1.374 \mu\text{m} \approx \lambda_r / (2n_{\text{Ge}})$,
- plots métalliques carrés ($L_x = L_y = L$) en aluminium, $h_p = 200 \text{ nm}$, période $dx = dy = d$,
- facteur de remplissage $f = L/d = 0.85$,
- superstrat : air.

Avec ces paramètres, certains ordres transmis différents de l'ordre (0, 0) sont propagatifs sur la bande spectrale considérée, ce qui complique l'étude des propriétés diffractives de ce genre de structure. Ces ordres peuvent être gênants dans la perspective de l'intégration des filtres à un détecteur : si les angles diffractés qui leur sont propres sont importants, du signal issu d'un filtre associé à un pixel peut venir polluer la détection des pixels voisins.

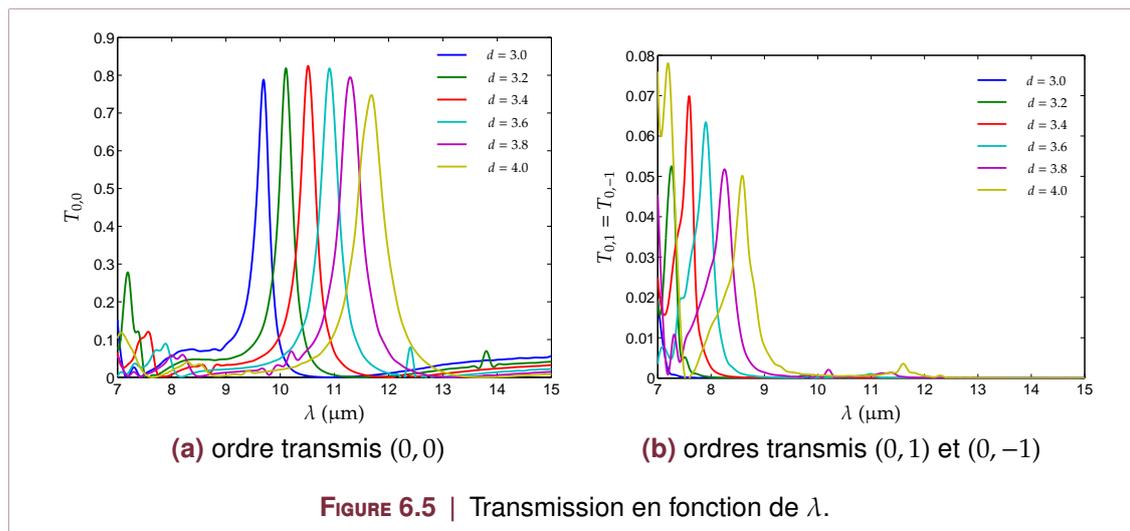
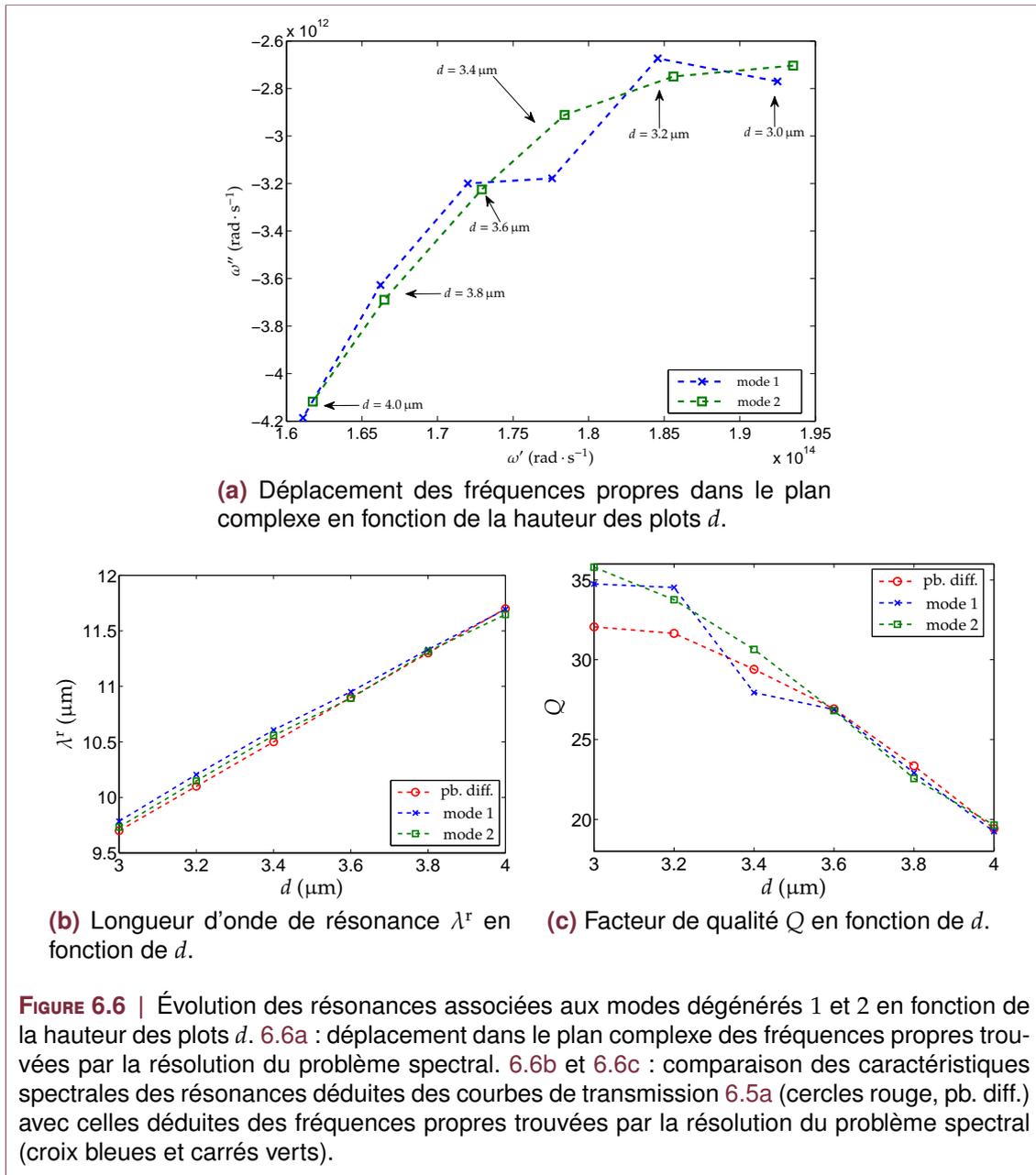


FIGURE 6.5 | Transmission en fonction de λ .

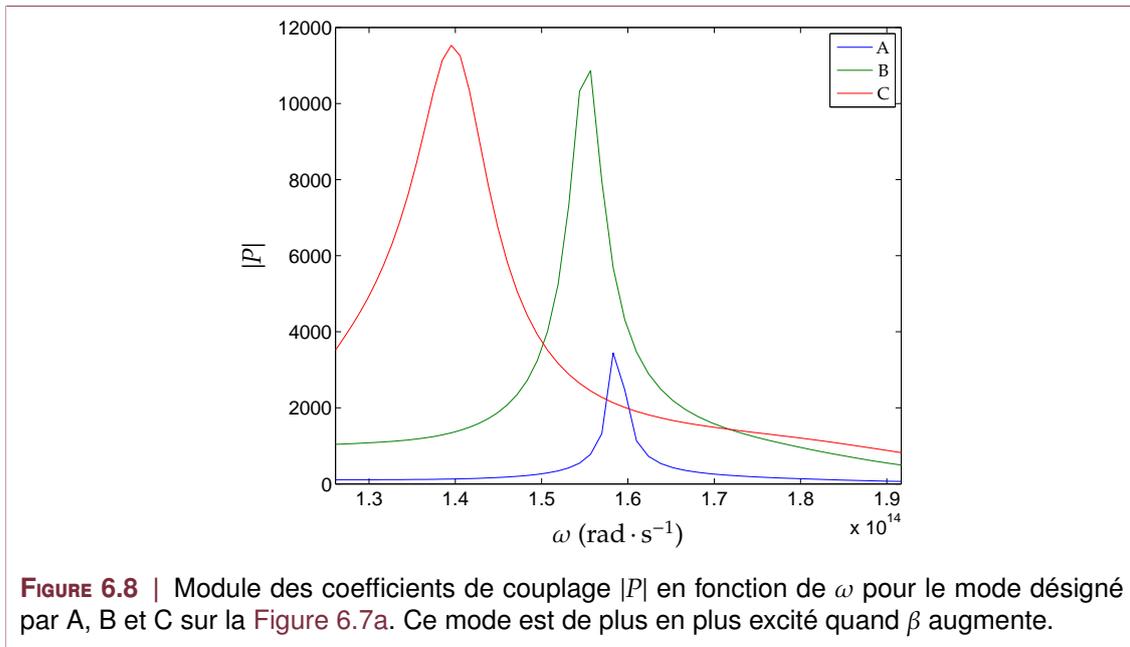
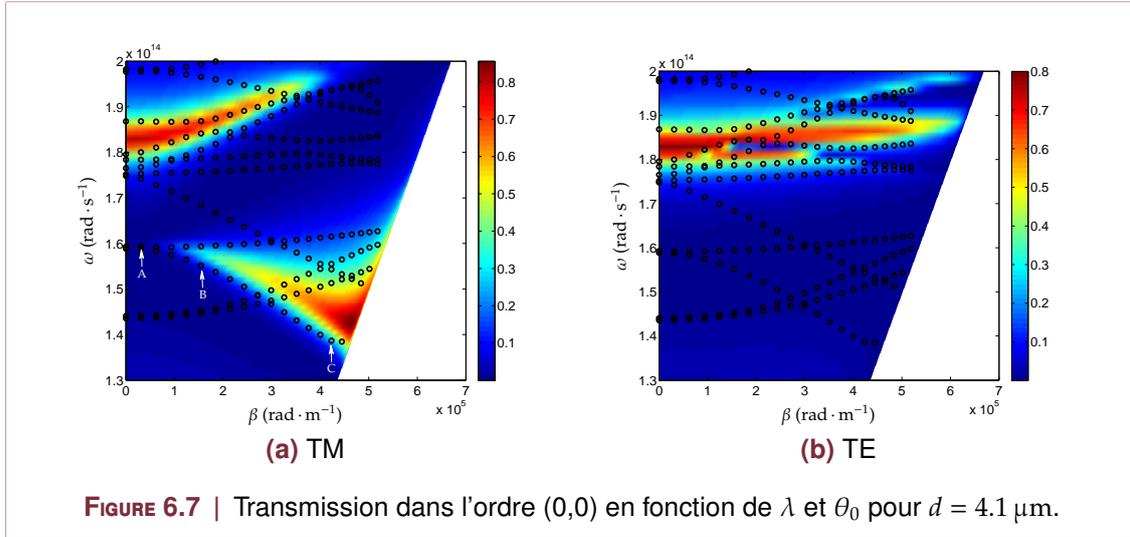
Physiquement, le résonateur est constitué du réseau de plots couplés à une couche quart d'onde haut indice en germanium. La couche bas indice en ZnS est une couche tampon dont le rôle principal est de diminuer, en incidence normale du moins, l'intensité transmise dans les ordres différents de l'ordre spéculaire.

Les spectres en transmission sont tracés sur la Figure 6.5. On obtient des filtres passe bande en transmission dont la longueur d'onde de résonance est ajustable en réalisant une homothétie sur les dimensions transverses (en pratique on fait varier d à facteur de remplissage f constant), et relativement étroits (environ 500 nm de largeur à mi-hauteur).



Ces pics de résonances sont reliés à l'excitation de modes à fuites de la structure, nous avons par conséquent résolu le problème spectral avec $\alpha = \beta = 0$ (ce qui correspond à l'incidence normale pour le problème de diffraction). De la même manière que dans la partie 6.1, nous avons représenté sur la figure 6.6a le déplacement dans le plan complexe quand d varie des fréquences propres du système correspondant aux deux modes dégénérés dont l'excitation donne lieu aux pics de transmission. Nous avons aussi extrait des efficacités de diffraction les caractéristiques spectrales des résonances en question. L'accord entre les deux approches est bon (cf. Figure 6.6b et Figure 6.6c). On observe que la longueur d'onde de résonance augmente linéairement et que le facteur de qualité diminue sensiblement avec d , ce qui est cohérent avec l'observation des spectres de la Figure 6.5a : le pic de transmission se décale vers les grandes longueurs d'onde tandis

qu'il s'élargit conjointement.



Nous avons aussi étudié la dépendance angulaire de ce type de structure. On a représenté sur la Figure 6.7 l'évolution des fréquences propres en fonction de β pour $\alpha = 0$, appelée *diagramme de dispersion* sur imposée à la cartographie du coefficient de transmission dans l'ordre (0,0). On observe que la transmission dépend grandement de β , et de nombreux modes sont mis en jeu dans les propriétés diffractives de ces structures.

Dans le cas TM (cf. Figure 6.7a), le pic de transmission autour de $1.85 \cdot 10^{14}$ rad·s $^{-1}$ se déplace vers les fréquences plus élevées avec β et s'affaiblit, alors qu'en parallèle un second pic apparaît vers $1.65 \cdot 10^{14}$ rad·s $^{-1}$ et se décale vers les faibles fréquences. Nous avons calculé les coefficients de couplage P associés au mode désigné par A, B et C sur la Figure 6.7a (il s'agit du même mode donnant lieu à la résonance à basse fréquence qui se déplace en fonction de β). Les résultats, tracés sur la Figure 6.8, indiquent que ce mode est de plus en plus excité quand β augmente ($|P|$ augmente à la résonance), ce qui

corrobore les informations données par l'étude de la transmission en fonction de β . Dans le cas TE, (cf. [Figure 6.7b](#)), la résonance du coefficient de transmission reste centrée autour de $1.85 \cdot 10^{14} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$, mais elle diminue en intensité, et on n'observe plus un pic unique mais plusieurs, associés à excitation de plusieurs quasimodes.

Nous voyons que ce type de structure possède des propriétés spectrales qui sont très dépendante de l'incidence et de la polarisation, ce qui est un problème pour l'application d'imagerie multispectrale visée. De plus, les pics de transmission sont trop étroits spectralement, il est en effet essentiel de préserver l'aspect large bande des filtres car le flux sur les capteurs est généralement très faible dans cette bande de longueur d'onde. Il est possible d'élargir les filtres, mais c'est au détriment de la transmission à la résonance, et de toute manière la dépendance à l'incidence et à la polarisation demeure. Ces structures apparaissent donc comme des candidats médiocres pour le filtrage multispectral dans l'IR III.

6.3 Réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique métal

6.3.1 Description

Un autre type de structure étudiée est représenté sur la [Figure 6.9](#). En dehors de la résonance, la structure se comporte comme un miroir du fait de la couche de chrome. Pour des paramètres bien choisis, l'onde incidente est quasi totalement absorbée à la longueur d'onde de résonance, ce qui réalise un filtre coupe bande¹ en réflexion.

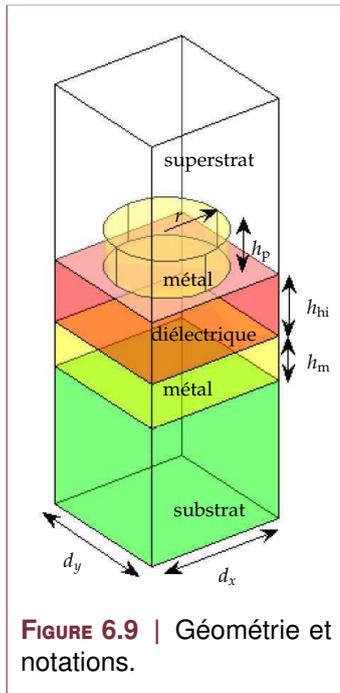


FIGURE 6.9 | Géométrie et notations.

Cet effet d'absorption totale a été mis à profit pour la conception de filtres indépendants de l'incidence dans l'infrarouge proche avec des réseaux monodimensionnels[142, 14]. D'autres études ont été menées sur des structures bi-dimensionnelles mettant en avant une absorption élevée sous certaines conditions [131, 18, 71].

Les paramètres employés dans les simulations sont les suivants :

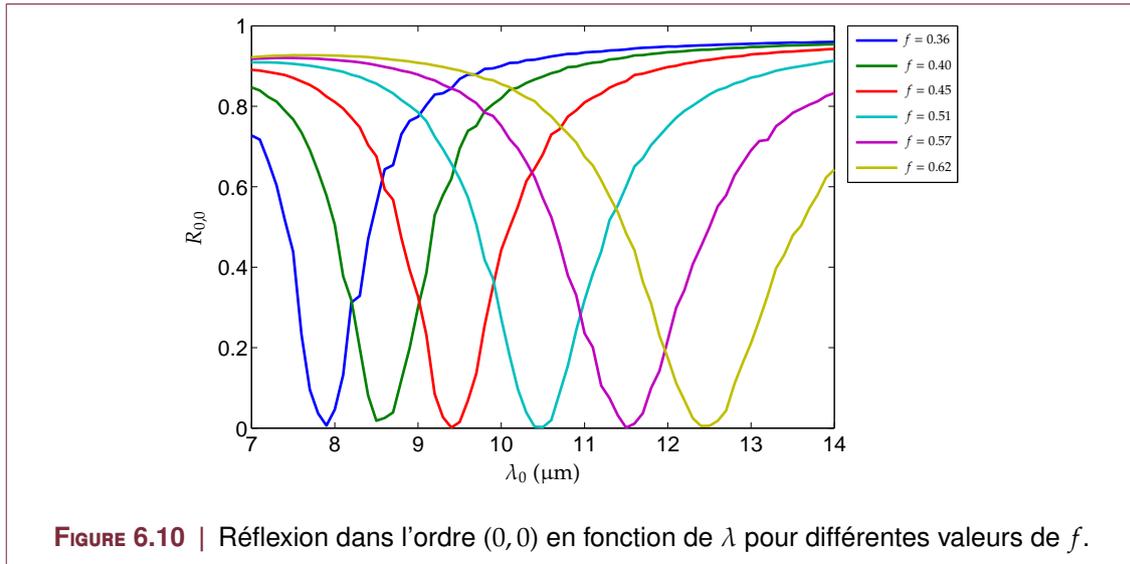
- substrat en silicium,
- couche métallique en chrome de hauteur $h_m = 0.2 \mu\text{m}$,
- couche diélectrique en germanium de hauteur $h_{hi} = 0.25 \mu\text{m}$,
- plots cylindriques en chrome de hauteur $h_p = 0.1 \mu\text{m}$ et de rayon r ,
- période $d = d_x = d_y = 2.2 \mu\text{m}$,
- superstrat : air.

6.3.2 Accordabilité de la résonance

On réussit à ajuster la position spectrale du creux de réflexion en faisant varier le facteur de remplissage $f = 2r/d$. Lorsque ce paramètre augmente, la longueur d'onde de résonance augmente et la largeur du creux augmente également (cf. [Figure 6.10](#)). Ces filtres présentent un très bon taux de réjection puisque la valeur de $R_{0,0}$ est quasi nulle à la résonance tandis qu'en dehors elle est supérieure à 90%. Il se produit un phénomène d'absorption totale [6], toute l'énergie incidente est dissipée par effet Joule dans le métal.

Nous avons recherché les fréquences propres associés à cette résonance et observé leur évolution en fonction de f , pour $\alpha = \beta = 0$. Nous trouvons deux modes dégénérés dont les parties réelles correspondent aux positions spectrales du minimum de $R_{0,0}$. La figure 6.11a représente la longueur d'onde de résonance associées à ces modes (carrés bleus et verts) et la longueur d'onde donnant un minimum de réflexion (ronds rouges). Les deux approches donnent des résultats en très bon accord : on peut ajuster linéairement la position du filtre en modifiant le paramètre f . Nous avons représenté sur la figure 6.11a les largeurs spectrales associées à ces creux. Nous voyons que les deux approches

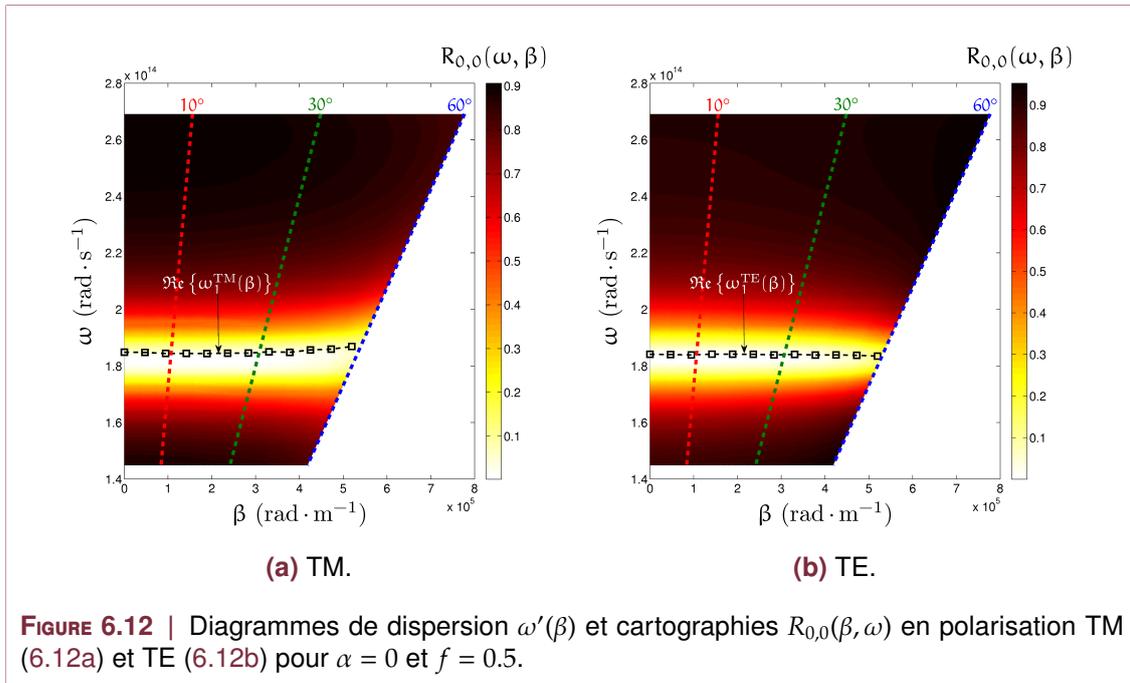
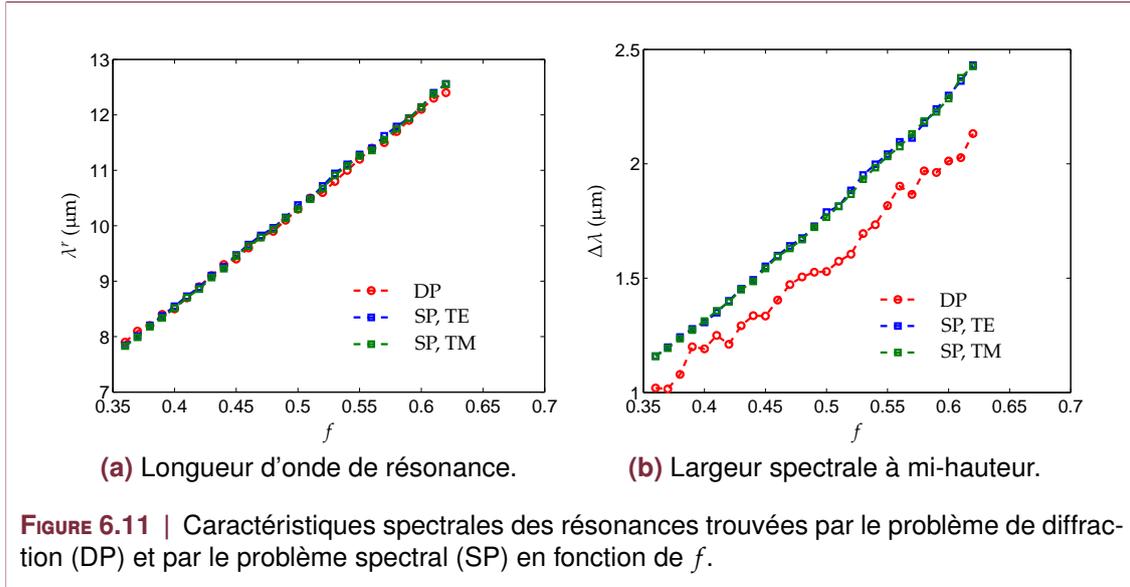
1. le terme anglais *notch filter* revient souvent dans la littérature mais semble réservé à des filtres très étroits spectralement.



donnent la même tendance : la largeur augmente linéairement quand f augmente. Néanmoins on observe une légère différence entre la valeur obtenue en mesurant la largeur du creux de réflexion et les valeurs tirées de la partie imaginaire des fréquences propres. Comme on l'a vu sur l'exemple de la partie 6.1, ces écarts peuvent être attribués au fait que l'on considère le mode isolé quand on associe une largeur spectrale à une résonance. Un autre explication pourrait être la suivante. Considérons que l'on peut approcher le champ diffracté avec un seul mode V_1 de fréquence propre ω_1 . On a donc $E_2^d \approx P_1 V_1$. Le coefficient de réflexion dans l'ordre (0,0) vaut $R_{0,0} = |r_1 + r_2|^2$ où r_1 est le coefficient de réflexion en amplitude associé au problème annexe sans réseau périodique, et r_2 est le champ qui est effectivement calculé. Si de plus on suppose qu'autour de la résonance $r_1 \ll r_2$, $R_{0,0}$ est alors proportionnel à $|P_1|^2 = |J_1(\omega)/(\omega^2 - \omega_1^2)|^2$. De ce fait, même si l'on considère un mode isolé, même pour des matériaux non dispersifs, on ne peut pas faire l'approximation qui consiste à dire que la partie réelle de la fréquence propre ω_1' est un extrémum des coefficients de Fresnel, ni que la largeur spectrale du pic/creux de résonance est la partie imaginaire de la fréquence propre ω_1'' , car il faut en toute rigueur considérer la dépendance fréquentielle de J_1 . Dans la plupart des cas, autour de la résonance, le dénominateur $\omega^2 - \omega_1^2$ domine et on peut raisonnablement faire l'approximation susmentionnée. Mais dans d'autres cas cette approximation est moins justifiée, et ce d'autant plus que la résonance est large. Cette remarque s'applique à l'exemple traité ici.

6.3.3 Tolérance angulaire

La réponse spectrale de ces réseaux a la particularité d'être *indépendante de l'angle d'incidence*, la fréquence de résonance reste constante pour θ_0 compris entre 0 et 60° . Ceci est illustré sur la Figure 6.12 où l'on a représenté le diagramme de dispersion $\omega'(\beta)$ pour $\alpha = 0$ et $f = 0.5$, superposé sur la cartographies de $R_{0,0}(\beta, \omega)$, dans les cas de polarisation TM (Figure 6.12a) et TE (Figure 6.12b). Lorsque β augmente, on observe que la fréquence correspondant au minimum de réflexion ne varie quasiment pas (elle augmente légèrement en polarisation TM et diminue légèrement en TE). L'évolution des parties réelles des fréquences propres associées ω_1^{TM} et ω_1^{TE} corroborent ces observations. On constate aussi une très légère augmentation (resp. diminution) de la largeur spectrale du creux en polarisation TM (resp. TE), constatations confirmées par l'étude des parties imaginaires des fréquences propres (non représentées ici : $\omega_1^{\text{TM}''}$ augmente et $\omega_1^{\text{TE}''}$ diminue quand β augmente).



6.3.4 Effets de la polarisation

Voyons à présent l'influence de la polarisation sur la réponse spectrale de ces absorbeurs. D'après la Figure 6.12, le comportement spectral est quasiment indépendant de la polarisation TE ou TM entre 0 et 60°. Puisque dans le problème spectral il n'y a par définition pas de champ incident, l'angle de polarisation ψ n'intervient pas lors de la recherche des modes propres. La dépendance à la polarisation des coefficients de couplage $P_n = J_n(\omega, \psi) / (\omega^2 - \omega_n^2)$ est régie par le terme $J_n(\omega, \psi) = -\frac{c^2}{K_n} \langle \mathcal{S}_1(\omega, \psi), \mathbf{W}_n \rangle$. Nous avons vu que deux modes dégénérés coexistent pour $\alpha = \beta = 0$ (cas de « l'incidence normale » si l'on peut dire). Notons ces deux modes V_1^A et V_1^B , associés à la fréquence propre ω_1 . Il est évident que toute combinaison linéaire de ces deux modes est aussi un mode propre

du système. Il est donc possible de trouver des coefficients A_1 et B_1 tels qu'un de ces modes que l'on notera $\mathbf{V}_1^{\text{TE}} = A_1 \mathbf{V}_1^A + B_1 \mathbf{V}_1^B$ soit excité à la résonance ($\omega = \omega'_1$) de façon maximale en polarisation TE ($\psi = -\pi/2$) et pas du tout en polarisation TM ($\psi = 0$). En termes mathématiques, cela peut se traduire par :

$$\begin{cases} I_1^{\text{TE,TE}} = \langle \mathcal{S}_1(\omega'_1, -\frac{\pi}{2}), \mathbf{W}_1^{\text{TE}} \rangle = 1, \\ I_1^{\text{TE,TM}} = \langle \mathcal{S}_1(\omega'_1, 0), \mathbf{W}_1^{\text{TE}} \rangle = 0. \end{cases}$$

En se souvenant que pour le cas particulier $\alpha = \beta = 0$ on a $\mathbf{W}_n = \overline{\mathbf{V}}_n$, et en exploitant la linéarité du produit interne, on obtient un système de deux équations à deux inconnues A_1 et B_1 :

$$\begin{cases} A_1 I_1^{A,\text{TE}} + B_1 I_1^{B,\text{TE}} = 1, \\ A_1 I_1^{A,\text{TM}} + B_1 I_1^{B,\text{TM}} = 0, \end{cases} \quad (6.1)$$

avec

$$\begin{cases} I_1^{A,\text{TE}} = \langle \mathcal{S}_1(\omega'_1, -\frac{\pi}{2}), \mathbf{W}_1^A \rangle, \\ I_1^{B,\text{TE}} = \langle \mathcal{S}_1(\omega'_1, -\frac{\pi}{2}), \mathbf{W}_1^B \rangle, \\ I_1^{A,\text{TM}} = \langle \mathcal{S}_1(\omega'_1, 0), \mathbf{W}_1^A \rangle, \\ I_1^{B,\text{TM}} = \langle \mathcal{S}_1(\omega'_1, 0), \mathbf{W}_1^B \rangle. \end{cases}$$

Le système 6.1 nous permet de trouver les coefficients A_1 et B_1 et donc de construire le mode \mathbf{V}_1^{TE} . Pour le mode \mathbf{V}_1^{TM} , il suffit alors d'appliquer la procédure d'orthogonalisation de Gram-Schmidt à, par exemple, \mathbf{V}_1^A pour construire un vecteur $\mathbf{V}_1^{\text{TM}'}$:

$$\mathbf{V}_1^{\text{TM}'} = \mathbf{V}_1^A - \frac{\langle \varepsilon \mathbf{V}_1^{\text{TE}}, \mathbf{W}_1^A \rangle}{\langle \varepsilon \mathbf{V}_1^{\text{TE}}, \mathbf{W}_1^{\text{TE}} \rangle} \mathbf{V}_1^{\text{TE}}$$

On veut, de plus, afin de pouvoir comparer leurs coefficients de couplage, que les deux modes dégénérés aient la même pseudo-norme. Il suffit pour y parvenir de prendre :

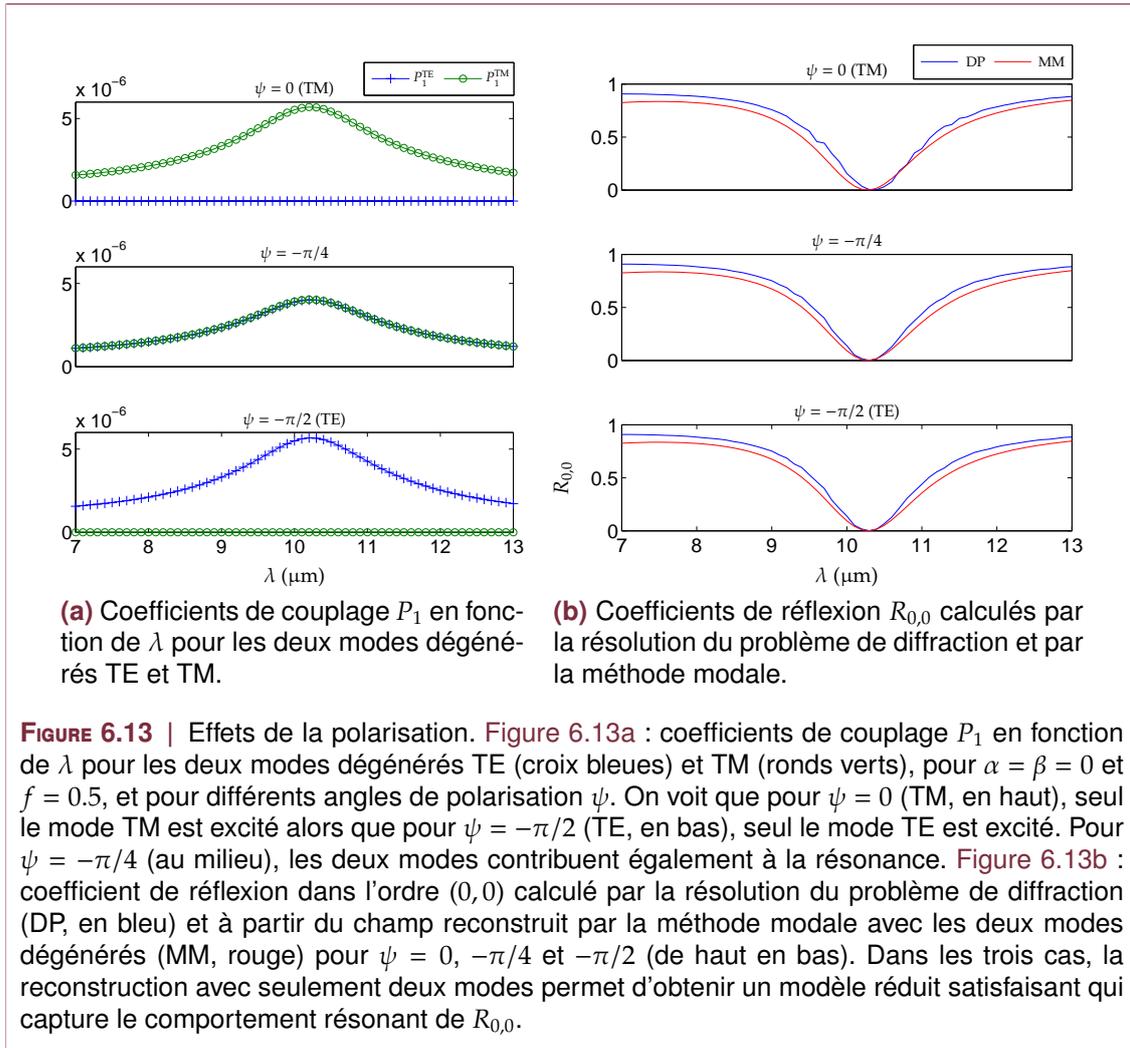
$$\mathbf{V}_1^{\text{TM}} = \sqrt{\frac{\langle \varepsilon \mathbf{V}_1^{\text{TE}}, \mathbf{W}_1^{\text{TE}} \rangle}{\langle \varepsilon \mathbf{V}_1^{\text{TM}'}, \mathbf{W}_1^{\text{TM}'} \rangle}} \mathbf{V}_1^{\text{TM}'}$$

Une fois ces vecteurs propres construits, on peut vérifier numériquement les valeurs prises par les coefficients de couplage associés P_1^{TE} et P_1^{TM} , en fonction de la longueur d'onde et de la polarisation. C'est ce qui est fait sur la [Figure 6.13a](#), pour $\alpha = \beta = 0$ et $f = 0.5$. On voit que pour $\psi = 0$ (TM, en haut), seul le mode TM est excité alors que pour $\psi = -\pi/2$ (TE, en bas), seul le mode TE est excité. Pour $\psi = -\pi/4$ (au milieu), les deux modes présentent des contributions égales au champ diffracté. Cette procédure d'orthogonalisation permet d'étudier plus clairement les effets de polarisation, qui ne peuvent être révélés que par une étude approfondie des vecteurs propres et de leurs coefficients de couplage.

Pour finir, nous avons reconstruit le champ électrique diffracté uniquement avec les deux quasimodes TE et TM que l'on vient d'étudier :

$$\mathbf{E}_2^d \approx P_1^{\text{TE}} \mathbf{V}_1^{\text{TE}} + P_1^{\text{TM}} \mathbf{V}_1^{\text{TM}}.$$

À partir de cette approximation, nous pouvons calculer le coefficient de réflexion $R_{0,0}$ en fonction de λ . Sur la [Figure 6.13b](#), nous avons comparé les valeurs issues de ce modèle simplifié (MM, courbe rouge) à celles calculées par la résolution du problème de



diffraction (DP, courbe bleue), pour $\psi = 0, -\pi/4$ et $-\pi/2$ (de haut en bas). Il s'avère que dans les trois cas, le modèle réduit construit avec seulement deux² modes représente avec pertinence les variations spectrales du coefficient de réflexion autour de la résonance.

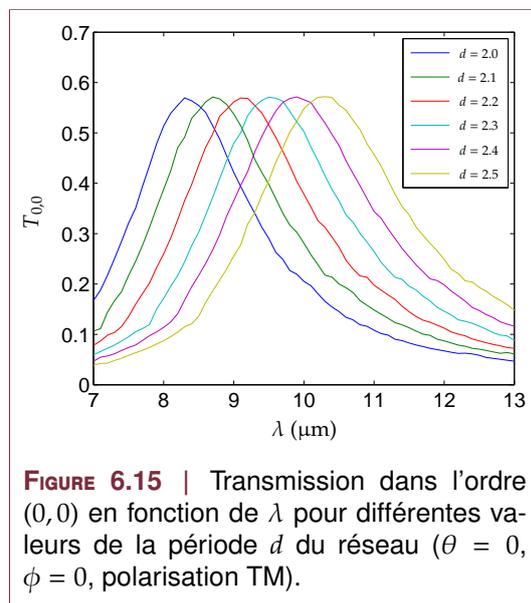
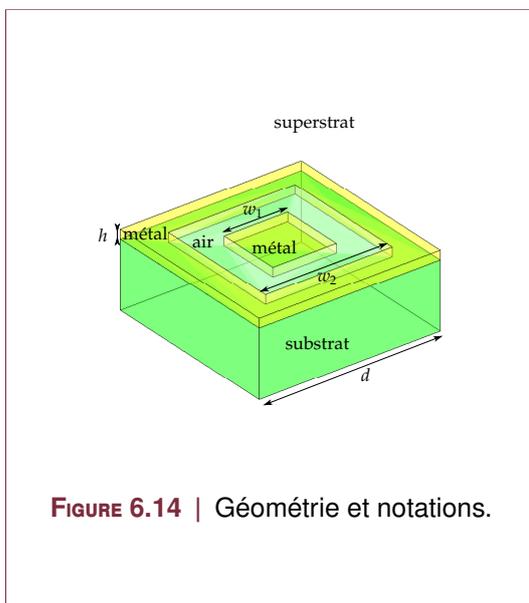
2. en fait pour les cas de polarisation TE et TM il suffirait de prendre en compte seulement le mode de polarisation correspondante puisque la contribution de l'autre est négligeable (cf. Figure 6.13a)

6.4 Réseaux d'ouvertures coaxiales sur substrat

La dernière structure que nous étudions est représentée schématiquement sur la Figure 6.14. Il s'agit d'ouvertures coaxiales dans une couche métallique déposée sur un substrat. Ce genre de structure est relativement simple à fabriquer puisqu'elle ne nécessite qu'un dépôt sur un substrat d'une fine couche de métal, et une seule étape de micro-structuration.

Les paramètres utilisés sont :

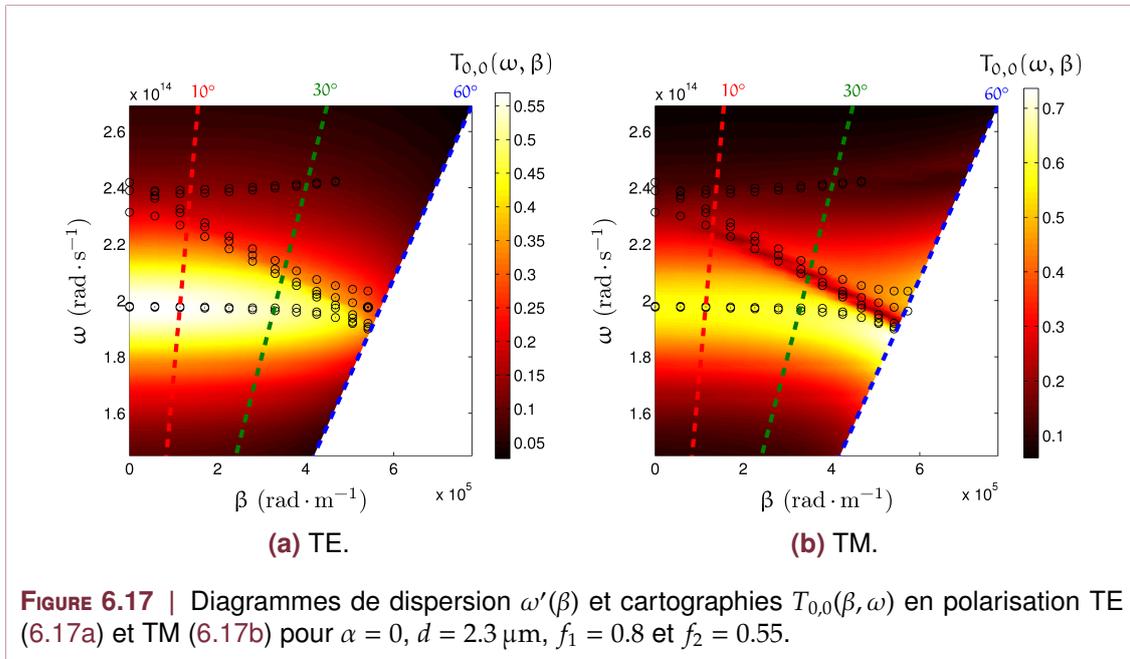
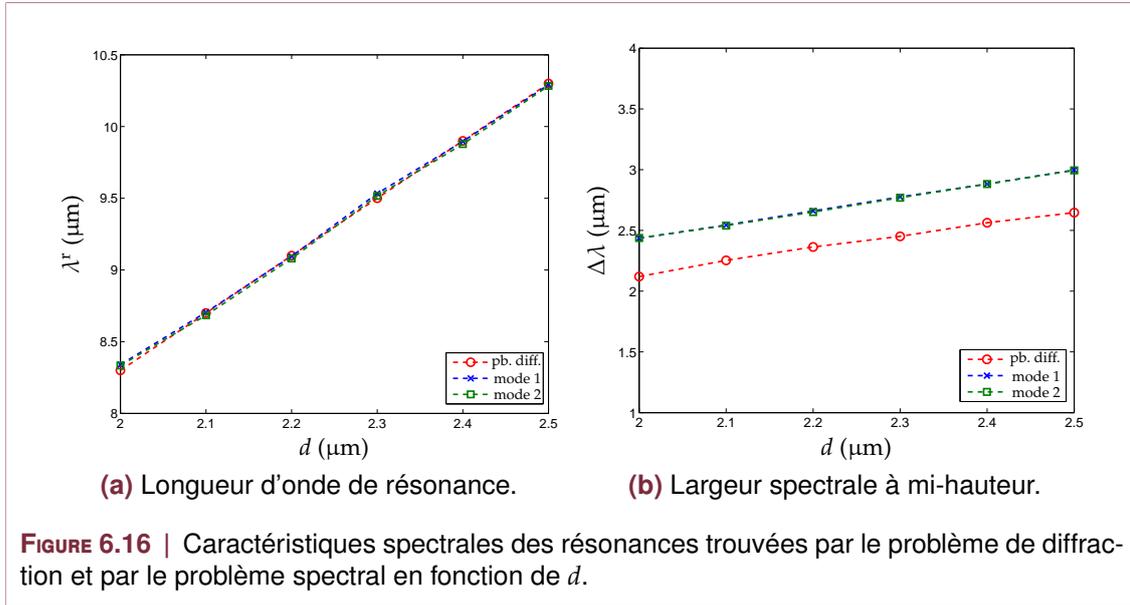
- substrat en silicium,
- couche métallique en or de hauteur $h = 90$ nm,
- ouvertures symétriques selon x et y : largeur intérieure w_1 , largeur extérieure w_2 ,
- période $d = d_x = d_y$,
- superstrat : air.



Pour des paramètres géométriques adéquats, ces réseaux présentent des spectres en transmission présentant un pic, et sont donc potentiellement utilisables pour réaliser un filtrage passe bande en transmission. Nous avons étudié un exemple particulier en fixant les ratios $f_2 = w_2/d = 0.55$ et $f_1 = w_1/w_2 = 0.8$, et en faisant varier la période (les différentes structures sont donc homothétiques). On observe une résonance marquée dans le spectre de transmission dans l'ordre spéculaire, en incidence normale. Lorsque la période augmente, le pic de résonance se déplace vers les grandes longueurs d'onde, sa largeur augmente légèrement, mais la valeur de $T_{0,0}$ reste autour de 55%, ce qui est exceptionnel compte tenu du fait que la couche métallique est opaque dans ce domaine spectral et que le rapport de la surface ouverte sur la surface totale $(w_2^2 - w_1^2)/d^2 = f_2^2(1 - f_1^2)$ n'est que de 11% !

Les résonances sont dues à l'excitation d'un mode propre des structures, relié en particulier à un mode propagatif TEM_{11} supporté par une ouverture coaxiale unique. Ces structures présentent de plus une transmission exaltée supérieure à celle produite par des réseaux de trous possédant le même ratio de surface ouverte, et ajoutent un degré de liberté supplémentaire dans la conception de par la présence de l'îlot central.

L'étude spectrale de la structure vient confirmer que l'excitation des modes propres



est reliée à cette transmission exaltée. Nous avons représenté sur la **Figure 6.16** l'évolution des caractéristiques spectrales des résonances en fonction de d , mesurées sur les courbes de transmission **6.15** et déduites des fréquences propres calculées par l'analyse spectrale. On constate un très bon accord sur la longueur d'onde de résonance λ^r qui augmente linéairement quand d augmente. L'accord est moins bon pour la largeur à mi-hauteur $\Delta\lambda$ (cf. discussion **sous-section 6.3.2**), néanmoins la tendance est la même pour les deux approches.

L'étude de l'évolution de la transmission montre que la résonance est peu modifiée entre 0 et 60° en polarisation TE, comme illustré sur la **Figure 6.17a**, bien qu'il y ait un léger décalage vers les grandes longueurs d'ondes ainsi qu'une diminution de la largeur spectrale et de la transmission à la résonance. En revanche, le cas TM (**Figure 6.17b**) est plus complexe, il y a un dédoublement du pic de transmission dû à l'excitation d'autres modes propres quand β augmente. La position spectrale des fréquences propres (ronds noirs) coïncident avec ces variations brutales dans les spectres, ce qui indique le rôle clé joué par les quasimodes du système dans les propriétés de diffraction de la structure.

Conclusion partielle

Nous avons proposé dans ce chapitre plusieurs type de filtres dans l'infrarouge lointain et étudié comment évoluent leurs caractéristiques spectrales en modifiant leurs dimensions transverses ainsi que leur tolérance à l'incidence et à la polarisation.

Le premier d'entre eux, un réseau de plots métalliques sur substrat étudié dans la [section 6.1](#), présente un large pic de transmission utilisable pour réaliser un filtre passe bande, tolérant à l'incidence et la polarisation. Cela dit, ce type de composant est complexe à réaliser car il faut des plots épais et proches les uns des autres pour observer une résonance exploitable, ce qui est complexe à réaliser technologiquement avec les procédés standard de fabrication.

Le second type de composant considéré est un réseau de plots métalliques sur bi-couche diélectrique (cf. [section 6.2](#)), présentant un pic de transmission étroit dont la position est ajustable avec la période du réseau. Malheureusement, ces structures sont très dépendantes de l'angle d'incidence et de la polarisation, les rendant inutilisables pour des applications d'imagerie multispectrale.

Le troisième type de structure, des réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique/métal ([section 6.3](#)), constituent des candidats prometteurs. Ils peuvent être utilisés comme filtres coupe bande en réflexion grâce à une absorption totale de l'onde incidente à la fréquence de résonance. Leur caractère large bande, ainsi que leur très bonne tolérance à la fois à l'incidence et à la polarisation en font de très bons prétendants pour le filtrage multispectral [138], bien que l'architecture optique de filtrage se complexifie à cause de leur caractère réfléchissant.

Le quatrième et dernier type de structure étudié est fondé sur un réseau d'ouvertures coaxiales dans une fine couche métallique déposée sur un substrat (cf. [section 6.4](#)). Ils présentent de larges pics de transmission utilisables pour un filtrage passe bande, et sont peu dépendants de l'incidence et de la polarisation.

Dans le chapitre suivant, nous allons passer à la mise en pratique des études théoriques précédente. Nous avons choisi de fabriquer et caractériser en parallèle deux types de filtres étudiés précédemment.

Fabrication et caractérisation de filtres diffractifs pour l'infrarouge

Sommaire

7.1 Réseaux absorbeurs	127
7.1.1 Couche résonante en germanium	127
7.1.2 Couche résonante en silicium	132
7.2 Réseaux coaxiaux	133
7.2.1 Fabrication	133
7.2.2 Caractérisation.	134

DANS cette partie, nous détaillons les deux voies de filtrage identifiées au [chapitre 6](#) comme permettant de répondre aux exigences de l'application imagerie multispectrale, et que nous avons explorées de manière pratique.

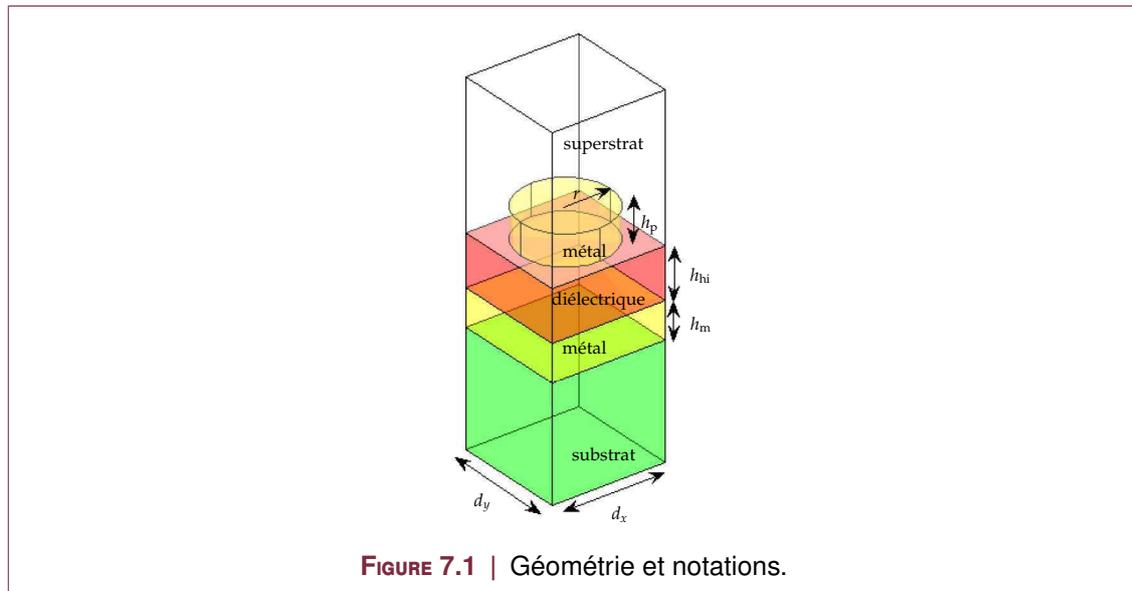
La première concerne des réseaux de plots métalliques sur bi-couche diélectrique/métal (réseaux absorbeurs), étudiés dans la [section 6.3](#), qui réalisent des filtres coupe bande en réflexion. La deuxième piste concerne des réseaux d'ouvertures coaxiales dans une couche métallique déposée sur un substrat présentées dans la [section 6.4](#), donnant lieu à un filtrage passe bande en transmission. Pour chacune d'entre elles, des structures ont été fabriquées puis caractérisées dans l'infrarouge par des mesures spectrophotométriques. Dans les deux cas, nous décrivons les procédés de fabrication. Les mesures ont été réalisées avec un spectrophotomètre à transformée de Fourier acquis par l'Institut Fresnel dont les caractéristiques sont détaillées en [Appendice B](#). Nous présentons ici les premiers résultats obtenus sur les toutes premières structures fabriquées.

7.1 Réseaux absorbeurs

7.1.1 Couche résonante en germanium

Fabrication

Nous avons en premier lieu fabriqué des réseaux absorbeurs du même type que ceux étudiés à la [section 6.3](#), et schématisés une nouvelle fois sur la [Figure 7.1](#). Afin de valider expérimentalement les solutions de filtrage proposées nous avons choisi de réaliser des structures avec des propriétés opto-géométriques correspondant aux moyens



de photolithographie disponibles et maîtrisés. Les composants fabriqués seront destinés à produire les fonctions de filtrage entre 14 et 20 μm . Les caractéristiques des échantillons fabriqués, fixées à partir des modélisations réalisées, sont les suivantes :

- substrat en silicium intrinsèque d'orientation 100 et d'épaisseur 525 μm ,
- couche métallique en chrome de hauteur $h_m = 0.2 \mu\text{m}$,
- couche diélectrique en germanium de hauteur $h_{hi} = 1.4 \mu\text{m}$,
- plots cylindriques de rayon r constitués d'une couche d'accroche en titane de hauteur $h_p^{\text{Ti}} = 10 \text{ nm}$ et d'une couche de chrome de hauteur $h_p^{\text{Cr}} = 90 \text{ nm}$,
- période $d = d_x = d_y$,
- superstrat : air.

Tout le processus de fabrication a été réalisé à SILIOS Technologies selon un procédé classique de photolithographie, à l'exception du masque et du dépôt de la couche de germanium réalisés sur commande. Les différentes couches ont été déposées par pulvérisation cathodique sur une plaquette de silicium de 100 mm de diamètre. Vient ensuite l'étape de structuration à proprement parler. Elle est réalisée par photolithographie. Premièrement, une couche de résine photosensible est déposée sur la couche à graver. Cette résine est ensuite soumise à un rayonnement ultraviolet. Lors de cette étape l'utilisation d'un masque formé de zones opaques et transparentes permet de définir les motifs à reproduire. Les caractéristiques chimiques des zones irradiées sont alors modifiées et sont ainsi solubles dans un agent chimique spécifique qui est appliqué lors du développement. L'étape suivante est la gravure chimique de la couche située sous la résine dans toutes les zones non recouvertes. Finalement la résine restante est enlevée par un solvant.

Lors de la gravure chimique de nos échantillons, il est apparu que le produit utilisé classiquement pour le chrome n'arrivait pas à graver la couche. Ce problème a été attribué à une réaction chimique avec la couche de germanium produisant un composé, aux propriétés physiques différentes de celles du chrome métallique. Pour remédier à ce problème, nous avons employé une fine couche protectrice de titane juste au dessus du germanium. On a ensuite déposé la couche de chrome et gravé chimiquement sans encombre les deux couches métalliques Cr/Ti.

Tous les composants sont fabriqués sur la même plaquette de silicium (*wafers*) et chacun recouvre une zone de 1 cm^2 (cf. le masque de photolithographie représenté sur

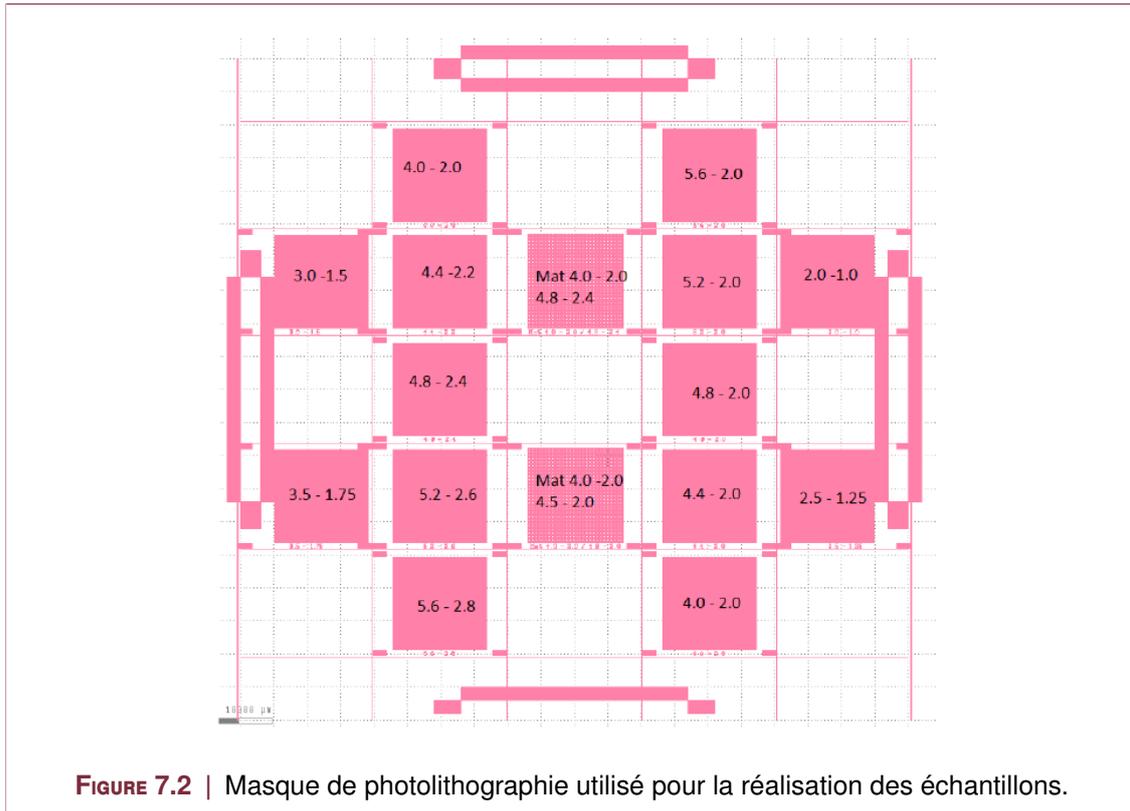


FIGURE 7.2 | Masque de photolithographie utilisé pour la réalisation des échantillons.

la Figure 7.2). Seules les dimensions transverses des structures varient, la fabrication ne requiert donc qu'une seule étape de photolithographie. Les différentes périodes d utilisées sont 4, 4.4, 4.8, 5.2 et 5.8 μm . Deux jeux de filtres ont été fabriqués : le premier pour un diamètre $D = 2 \mu\text{m}$ des plots constant et le second pour un ratio $f = D/d = 0.5$ constant. Les différents filtres sont repérés par le couple période-diamètre des plots $d-D$ en μm . Les courbes de réflexion dans l'ordre $(0, 0)$, en incidence normale, calculées par la FEM sont tracées sur la Figure 7.3.

Dans l'optique de tester la solution de filtrage au niveau du pixel d'un détecteur IR, nous avons également prévu deux matrices bi-spectrales avec un pas de 17 μm (taille des pixels dans les microbolomètres de dernière génération). Elles sont constituées d'un damier de deux filtres différents :

- matrice A : 4.0-2.0 (4×4 plots) et 4.8-2.4 (3×3 plots),
- matrice B : 4.0-2.0 (4×4 plots) et 4.8-2.0 (3×3 plots).

De plus, nous avons gardé quatre zones sans couche supérieure de chrome pour pouvoir mesurer le bicouche seul. Des images prises au Microscope Électronique à Balayage (MEB, en anglais *Scanning Electron Microscope, SEM*) du réseau 4.0-2.0 sont reportées sur la Figure 7.4.

Caractérisation

Nous avons étudié tout d'abord le bicouche Cr/Ge sur silicium seul (sans le réseau de plots). Dans un premier temps, nous avons observé au MEB cet échantillon. En prenant quatre images sous des illuminations différentes, il est possible de reconstruire par stéréoscopie le profil de hauteur des couches. Une image MEB du bi-couche est reportée sur la Figure 7.5a et le profil calculé est tracé sur la Figure 7.5b. On observe un bon accord par rapport aux épaisseurs de consigne ($h_{\text{Ge}} = 1.4 \mu\text{m}$, $h_{\text{Cr}} = 0.2 \mu\text{m}$). Notons que l'épaisseur de la couche de chrome est moins critique car il suffit que la couche soit plus grande que l'épaisseur de peau du chrome dans cette bande spectrale, soit environ

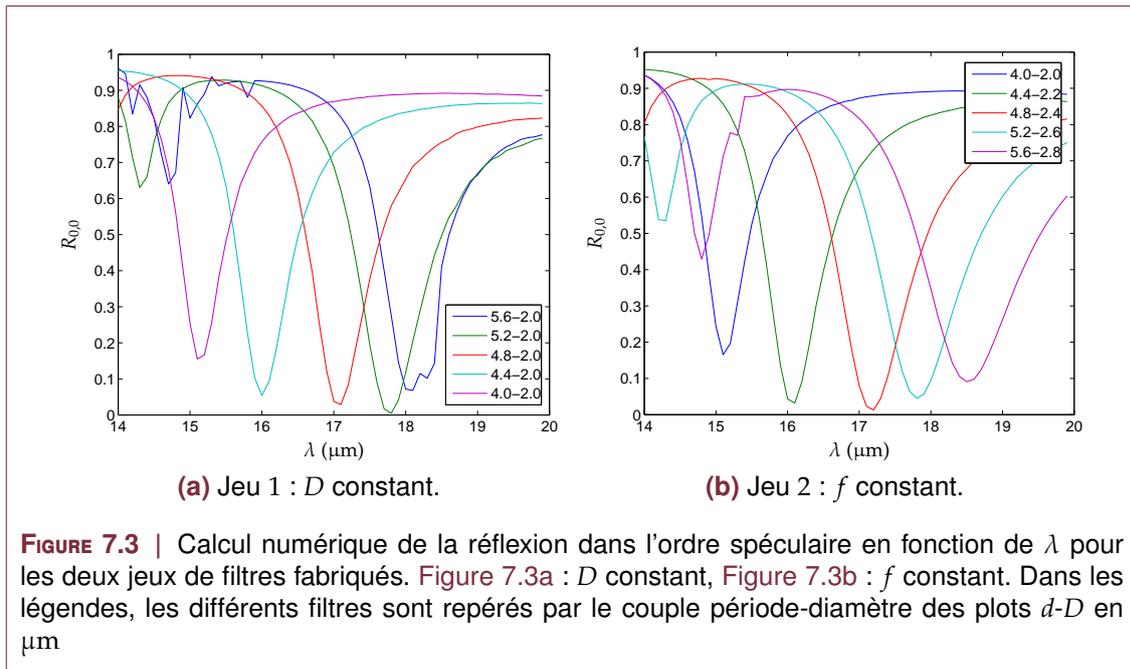


FIGURE 7.3 | Calcul numérique de la réflexion dans l'ordre spéculaire en fonction de λ pour les deux jeux de filtres fabriqués. **Figure 7.3a** : D constant, **Figure 7.3b** : f constant. Dans les légendes, les différents filtres sont repérés par le couple période-diamètre des plots d - D en μm

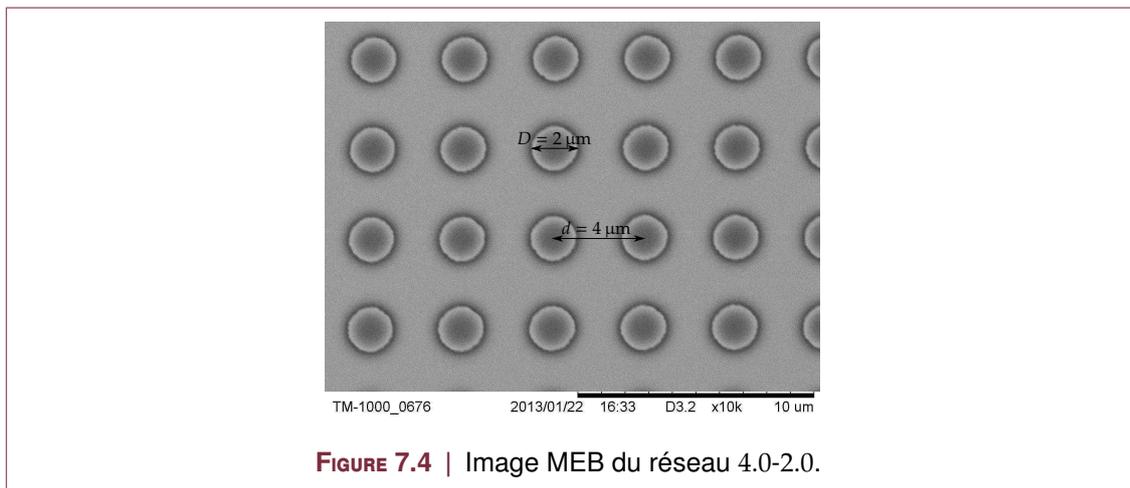
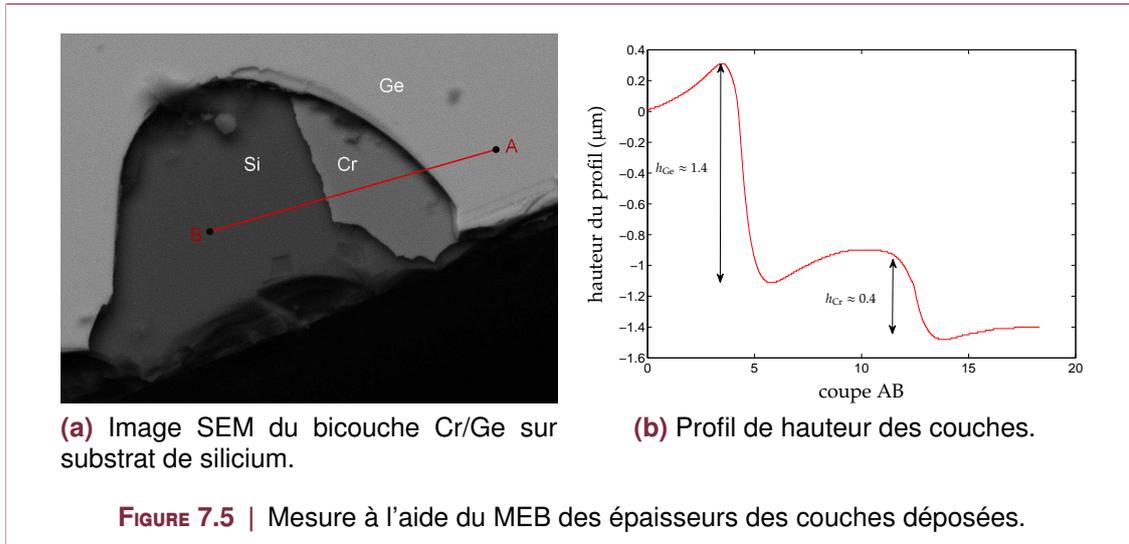


FIGURE 7.4 | Image MEB du réseau 4.0-2.0.

90 nm pour que la couche se comporte comme un miroir).

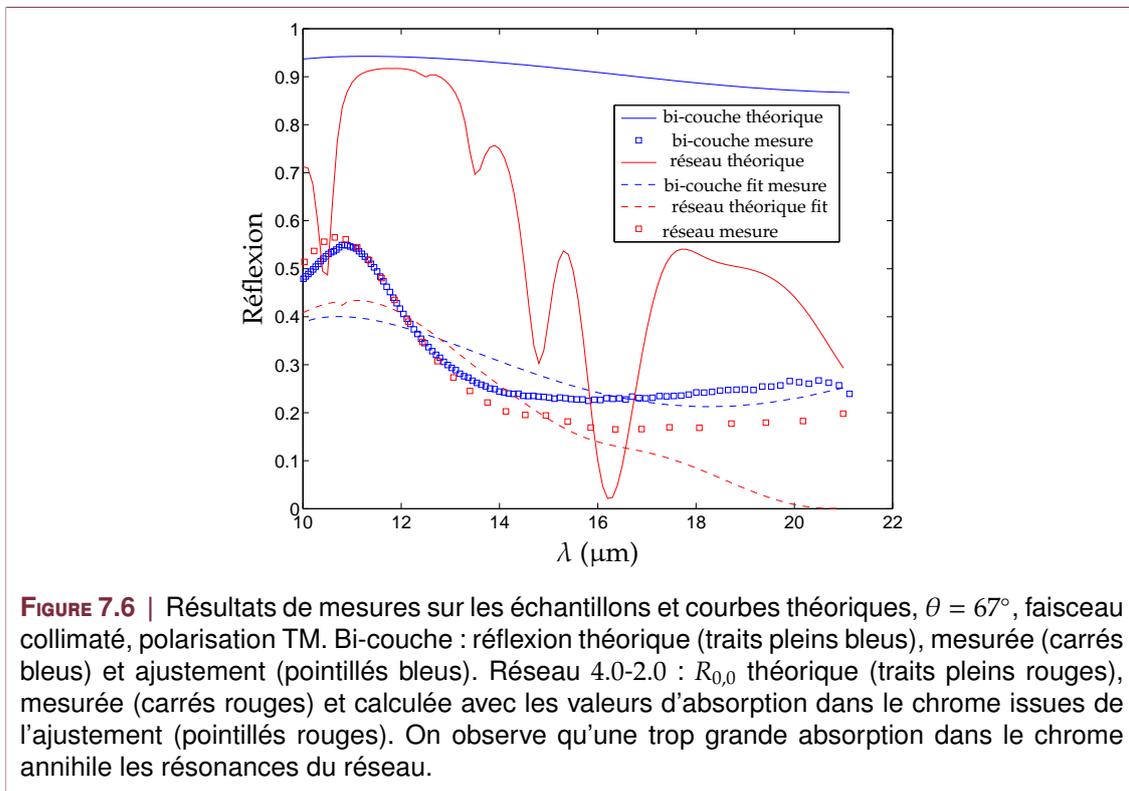
Les mesures ont été faites en réflexion pour une incidence de 67° , en faisceau collimaté. Sur la **Figure 7.6**, on voit que la réflexion mesurée sur ce bi-couche (carrés bleus) est bien moindre que celle à laquelle on s'attendait en théorie (courbe bleue en traits pleins). Nous avons aussi mesuré la transmission qui est nulle, nous en déduisons que l'absorption dans l'échantillon est beaucoup plus importante que prévue. De plus, les positions spectrales des maxima et minima de réflexion pour des longueurs d'onde plus faibles coïncident avec celles prévues par le calcul. Les épaisseurs mesurées sur les couches étant du bon ordre de grandeur, nous avons modifié dans le calcul les différents paramètres optiques des matériaux afin de retrouver l'allure des courbes expérimentales. Le paramètre important est la partie imaginaire de la permittivité du chrome.

Pour exemple nous donnons le résultat de ce calcul avec une absorption accrue (la courbe bleue en pointillés sur la **Figure 7.6**). Passons maintenant à un échantillon microstructuré, le réseau 4.0-2.0. La courbe théorique correspondante (traits pleins rouges) montre plusieurs résonances marquées, alors que la courbe expérimentale (carrés rouges) est relativement plate et très similaire à la courbe correspondant au bi-couche seul. Nous avons recalculé par la FEM la réflexion de ce réseau en injectant les paramètres modifiés



issus de l'ajustement sur le bi-couche et qui traduisent l'absorption supplémentaire dans le chrome. Le résultat est radical (cf. courbe rouge en pointillés) : une absorption trop importante « tue » les résonances.

L'origine de cette dissipation inattendue est probablement liée aux phénomènes évoqués dans la [section 7.1](#) concernant les problèmes de gravure des plots en chrome. Il semble qu'une réaction chimique ait lieu entre les deux couches chrome et germanium, formant un composé d'indice inconnu, mais dont la partie imaginaire est grande devant la partie réelle, provoquant une absorption trop importante dans les échantillons pour qu'un comportement résonant puisse être observé. Afin de résoudre ces difficultés, nous avons décidé de fabriquer d'autres structures en remplaçant le germanium par du silicium.

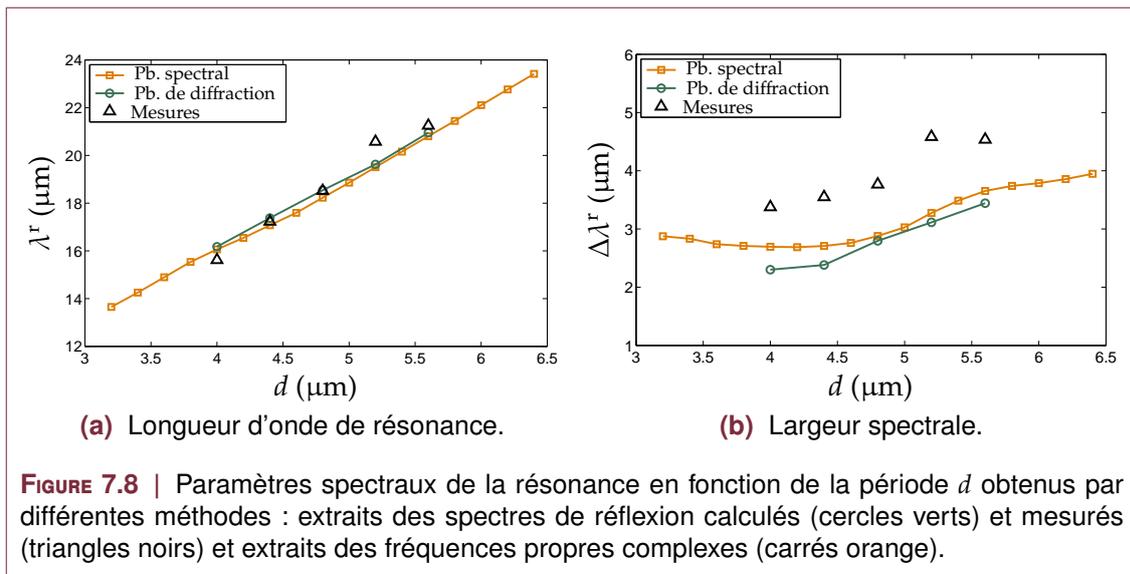
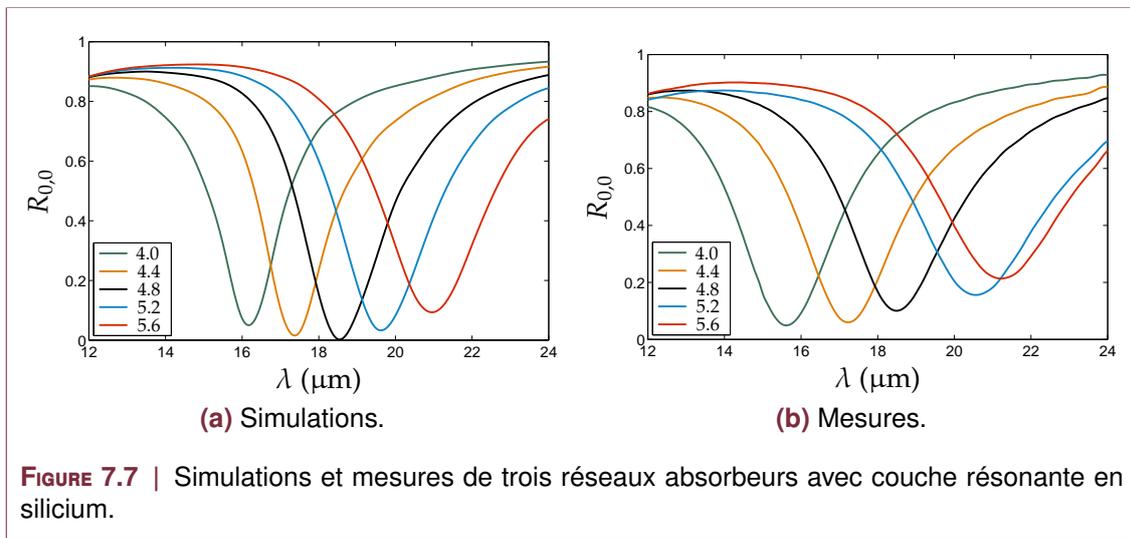


7.1.2 Couche résonante en silicium

Fabrication

Nous avons donc fabriqué des structures avec les mêmes paramètres, mais en changeant la couche de germanium par une couche de silicium de 530 nm d'épaisseur. Les dépôts des différentes couches ont été réalisés à l'Institut Fresnel par l'équipe RCMO par pulvérisation cathodique magnétron, grâce au bâti HELIOS qui fera partie du futur Espace Photonique du laboratoire. L'étape de photolithographie a été réalisée à SILIOS dans les mêmes conditions que celles évoquées précédemment. Notons que dans ce cas il n'est pas nécessaire de déposer un couche d'accroche, et les réseaux sont finalement constitués de plots cylindriques de hauteur 100 nm.

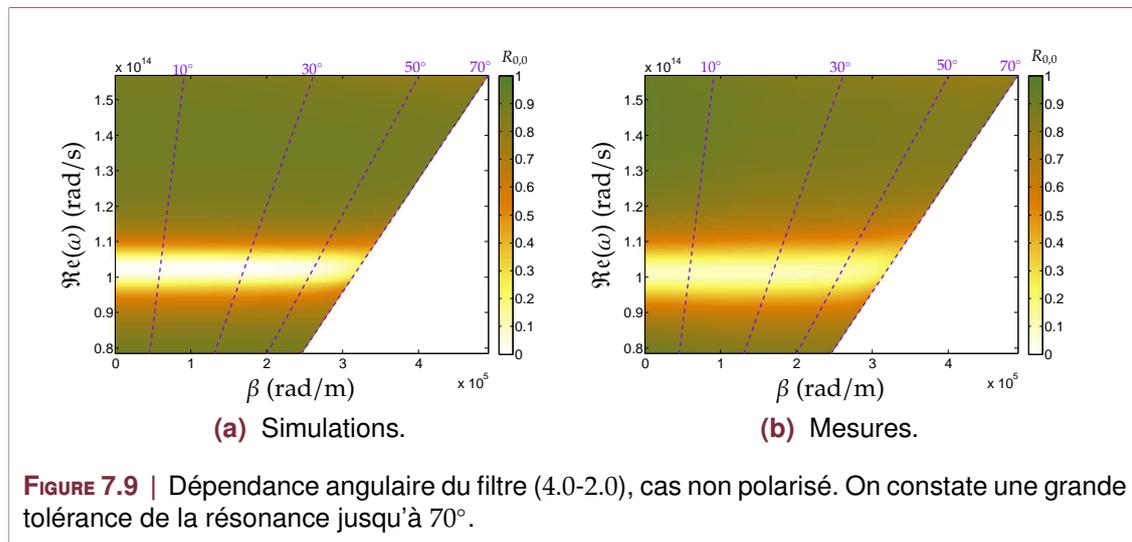
Caractérisation



Nous avons caractérisé trois de ces structures tout d'abord en incidence normale, en faisceau focalisé non polarisé. Les spectres de réflexion sont reportés sur la [Figure 7.7b](#) et comparés aux résultats issus des simulations numériques [Figure 7.7a](#). On constate un bon accord pour la position spectrale de la résonance. En revanche les niveaux de réflexion

à la résonance sont plus importants sur les mesures, ainsi que la largeur spectrale. Ceci peut s'expliquer par les imperfections de fabrication sur les dimensions transverses des plots, paramètre qui affecte la position et la valeur du minimum de réflexion. Notons aussi que les mesures ont été ici réalisées en faisceau focalisé dont le demi angle est de 16° , alors que les simulations considèrent une onde plane en incidence normale. Cela étant, la grande tolérance de ces structures à l'angle d'incidence fait que la présence de plusieurs incidences dans le faisceau focalisé utilisé perturbe peu le résultat de mesure en incidence normale. En tout état de cause, ces premiers résultats démontrent en pratique l'accordabilité spectrale des filtres en ne modifiant que les dimensions transverses des réseaux. Cette accordabilité est linéaire comme on peut le voir sur la [Figure 7.8a](#), où l'on a représenté la fréquence de résonance en fonction de d obtenue à partir des spectres calculés et mesurés ainsi qu'à partir des fréquences propres complexes. Les résultats donnés par les deux approches numériques sont en excellent accord avec la réalité expérimentale. Pour la largeur à mi-hauteur ([Figure 7.8a](#)), les données mesurées sont plus grandes que les valeurs théoriques pour les raisons évoquées précédemment, mais la variation en fonction de la période présente un comportement similaire à celle obtenue numériquement.

Nous avons mesuré la dépendance angulaire du filtre (4.0-2.0) toujours en faisceau focalisé non polarisé. Les résultats sont reportés sur la [Figure 7.9a](#). On observe une indépendance de la résonance jusqu'à 70° , avec néanmoins une légère augmentation de la réflexion à la résonance pour $\theta = 70^\circ$, comme les simulations numériques le prédisent (cf. [Figure 7.9b](#)). Ces premiers résultats de mesure démontrent la faisabilité de filtres coupe bande très tolérants à l'angle d'incidence.



7.2 Réseaux coaxiaux

7.2.1 Fabrication

Le deuxième type de filtre fabriqué pour valider expérimentalement nos calculs numériques et démontrer la faisabilité du filtrage est celui étudié dans la [section 6.4](#), des réseaux d'ouvertures coaxiales. La fabrication des échantillons a été faite au CINAM¹ sur la plateforme de lithographie électronique Planète². Les échantillons sont fabriqués

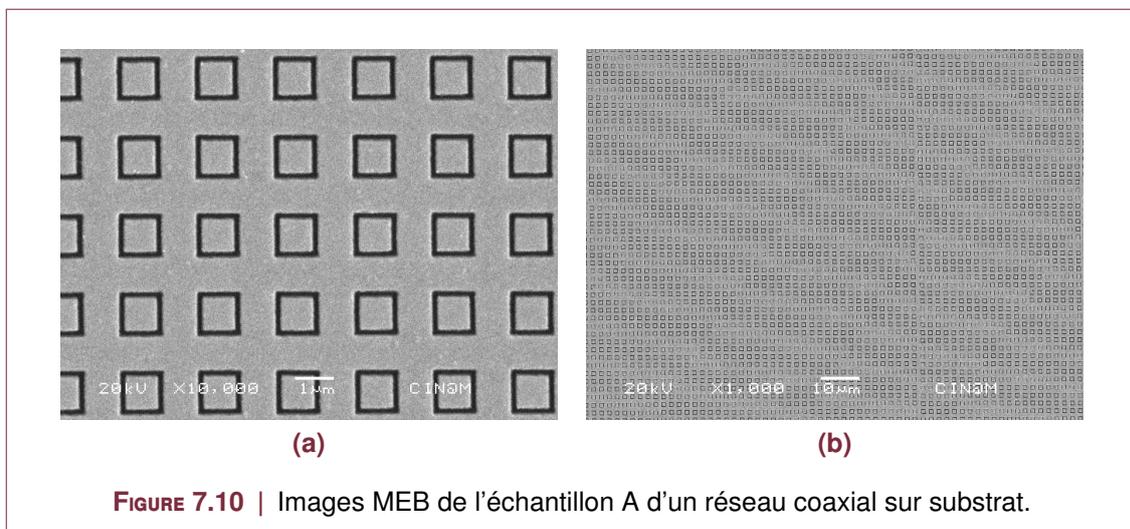
1. Centre Interdisciplinaire des NANosciences de Marseille, UMR CNRS 7325.

2. faisant partie de CT-PACA, la station de fabrication utilisée a été financée par les fonds FEDER.

sur un substrat de silicium intrinsèque (100) poli double face d'épaisseur 1 mm. Deux approches ont été envisagées pour réaliser les motifs :

- par gravure,
- par *lift-off*.

La méthode par gravure a l'avantage d'utiliser une résine positive qui donne des surfaces à graver plus faibles et donc des temps de gravure réduits, cependant les structures obtenues présentaient des défauts (bords des ouvertures irréguliers) et des imprécisions dans la taille transverse des tranchées. La méthode par *lift-off* finalement retenue nous oblige à utiliser une résine négative et à affiner le procédé existant, en effet les motifs de petite taille n'étaient pas reproduits régulièrement. Après différentes étapes de calibration et de tests, un premier échantillon A a été fabriqué sur une surface carrée de $6 \times 6 \text{ mm}^2$ avec les paramètres suivants : $d = 2 \text{ }\mu\text{m}$, $w_1 = 0.88 \text{ }\mu\text{m}$, $w_2 = 1.1 \text{ }\mu\text{m}$ et $h = 90 \text{ nm}$. Une image MEB montrant plusieurs périodes de cette puce est reportée sur la Figure 7.10a.



Néanmoins, une légère dérive apparaît dans la structuration sur une si grande surface (40 h de fabrication), due à une panne sur le laser réalisant le contrôle optique de positionnement en cours de gravure. Il en résulte des décalages des motifs, assez réguliers comme on peut le voir sur la Figure 7.10b.

Un second échantillon, noté M, a été fabriqué. Il s'agit d'une puce multispectrale, constituée de quatre filtres diffractifs de taille plus réduite ($3 \times 3 \text{ mm}^2$) afin de réduire le temps d'écriture ainsi que les dérives mentionnées précédemment. Néanmoins, quelques défauts de fabrication subsistent. Les quatre zones gravées sont séparées d'environ 3 mm^2 . Les dimensions relatives des différents réseaux correspondent au cas étudié à la section 6.4 ($f_1 = 0.55$, $f_2 = 0.8$). La variation de la position spectrale de la résonance étant linéaire en fonction de d (cf. Figure 6.16a), nous pouvons par interpolation trouver les paramètres qui nous donnent des filtres centrés à quatre longueur d'onde λ^r choisies sur la bande IR III. L'équation de la droite est $\lambda^r = 4d + 0.3$ (avec λ^r et d en μm). Les paramètres utilisés sont résumés dans la Tableau 7.1.

7.2.2 Caractérisation

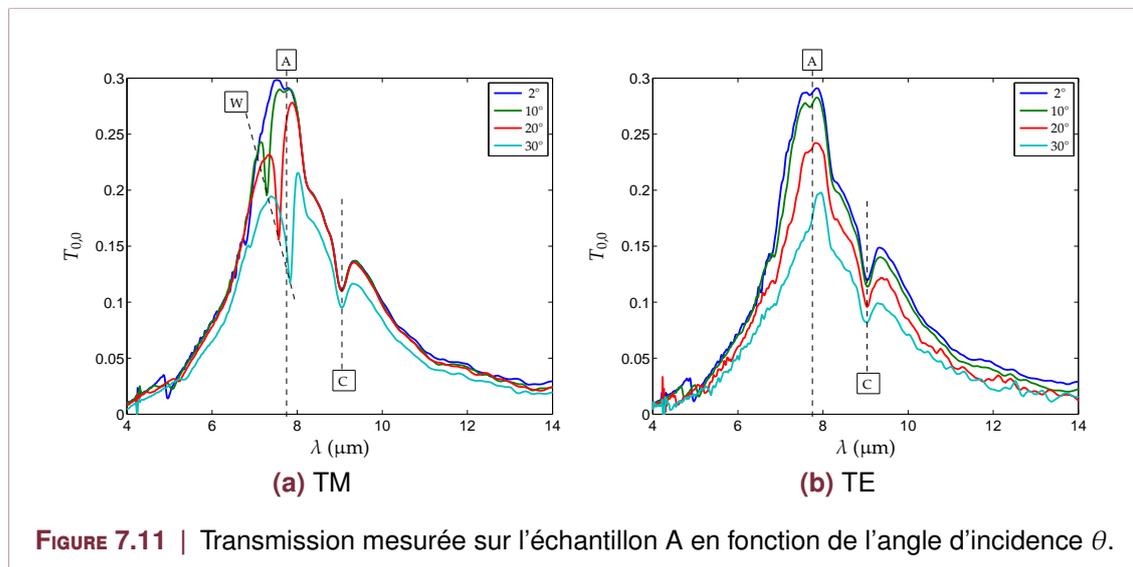
Les mesures sur l'échantillon A ont été réalisées en fonction de l'angle d'incidence θ , en faisceau collimaté dans les deux cas de polarisation. Les résultats sont normalisés avec un *background* réalisé sans l'échantillon. Il est important de noter ici que la valeur que l'on obtient alors est la transmission à travers *tout* l'échantillon (réseau + substrat), ce qui est différent de ce que l'on calcule numériquement (la transmission dans le substrat supposé

	M1	M2	M3	M4
d (nm)	1920	2250	2600	2930
w_1 (nm)	850	990	1140	1290
w_2 (nm)	1060	1240	1430	1610
λ^r (μm)	8	9.7	10.3	12

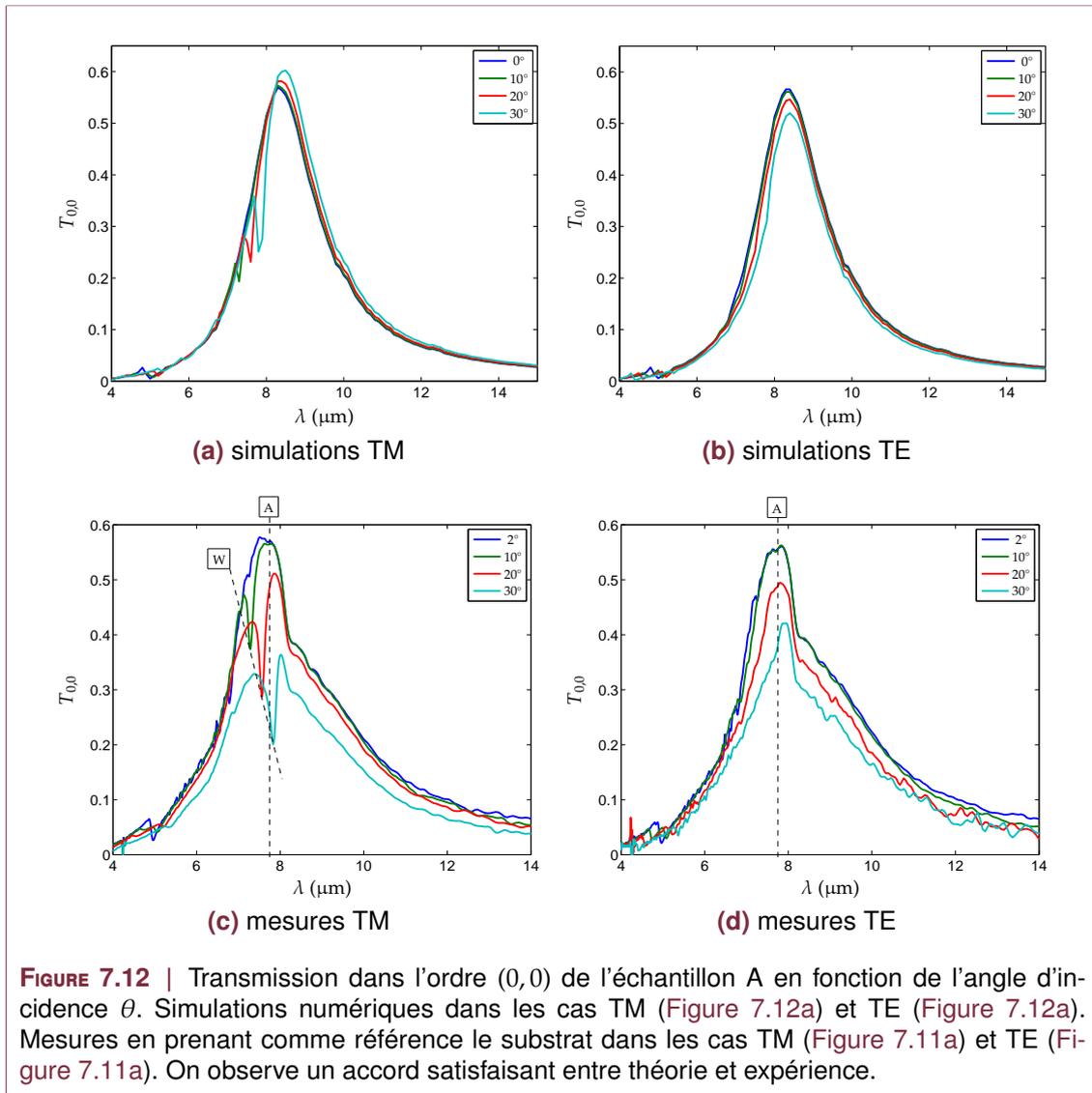
TABLE 7.1 | Paramètres utilisés pour l'échantillon multispectral M.

infini, juste derrière le réseau). Il y a donc la propagation dans le substrat ainsi que la transmission sur la face arrière qui entrent en jeu. Nous avons délibérément présenté dans un premier temps les résultats sous cette forme car la transmission ainsi mesurée est celle qui sera effectivement obtenue dans l'application de filtrage. On a représenté sur la [Figure 7.11](#) les résultats de ces mesures.

Considérons d'abord le cas d'une très faible incidence $\theta = 2^\circ$. On observe un large pic de résonance vers $\lambda^r = 7.8 \mu\text{m}$ et de largeur à mi-hauteur $\Delta\lambda = 2.6 \mu\text{m}$ du à l'excitation d'un mode à fuites. Par rapport aux spectres simulés ($\lambda^r = 8.3 \mu\text{m}$ et $\Delta\lambda = 2.1 \mu\text{m}$), ce pic est légèrement décalé vers les faibles longueurs d'ondes, ce qui est probablement dû aux imperfections de fabrication, notamment la dérive évoquée à la [section 7.2](#), et la valeur de la largeur spectrale est en bon accord. D'autre part, la valeur de la transmission à la résonance est d'environ 29% pour l'échantillon. La transmission à travers le substrat nu a été mesurée également et vaut environ 54% à 2° , et montre une résonance d'absorption vers $9 \mu\text{m}$ due à la vibration de molécules d'oxygène présentes dans le volume du silicium de type CZ, ainsi qu'à la présence probable d'oxyde natif sur les deux faces. Cette bande d'absorption se retrouve sur les mesures effectuées sur l'échantillon (C sur la [Figure 7.11](#)).



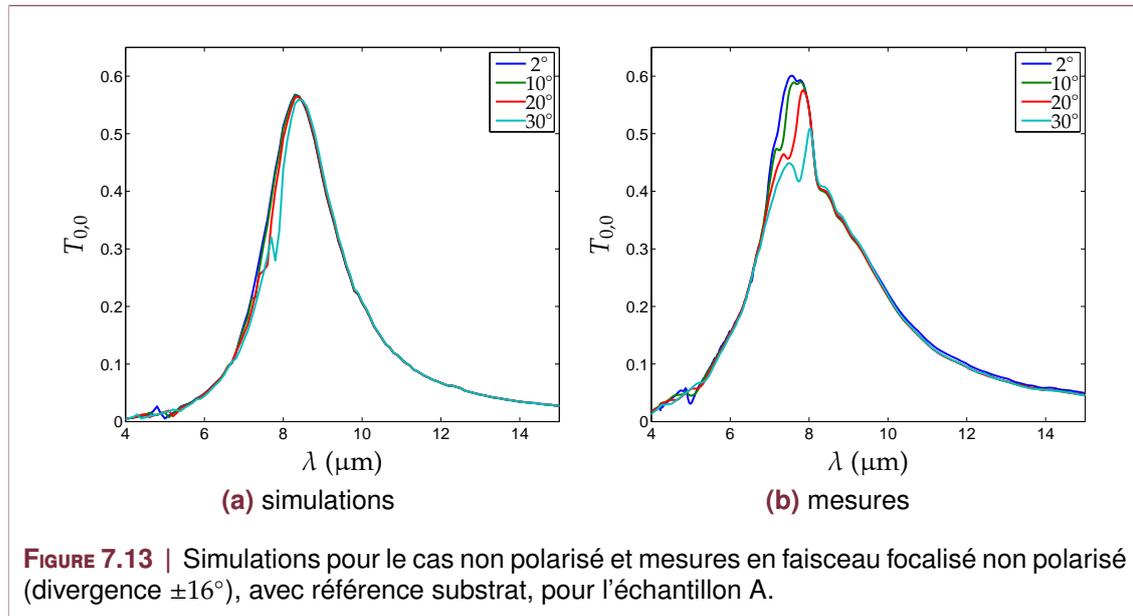
Nous avons calculé les transmissions normalisées par rapport aux transmission obtenues sur le substrat, afin de s'affranchir de son influence ([Figure 7.11a](#) et [7.11b](#)). Les valeurs obtenues sont plus comparables aux modèles numériques utilisés pour les simulations ([Figure 7.12a](#) et [7.12b](#)). Ce faisant, la résonance C due à l'absorption du substrat n'apparaît plus sur les courbes de transmission. De plus, la transmission globale se trouve augmentée et atteint environ 55% à 2° , valeur comparable aux résultats obtenus numériquement en incidence normale.



Lorsque l'angle d'incidence augmente, la résonance principale A reste centrée sur $\lambda^r = 7.8 \mu\text{m}$ pour θ compris entre 2 et 30° . En revanche, la transmission globale chute pour de grandes incidences. Ceci pourrait s'expliquer par le fait que la surface apparente du faisceau sur l'échantillon varie de façon inversement proportionnelle à $\cos \theta$, et donc augmente lorsque θ augmente. Il est donc possible que le spot « déborde » de la surface gravée, ou tout du moins couvre une plus grande surface, et vu que l'échantillon n'est pas homogène, les contributions de ces inhomogénéités sont plus grandes, faisant chuter la transmission. La taille du *spot* a été réduite au maximum pour tenter de diminuer ces effets, c'est ce qui explique le caractère bruité des spectres.

Pour le cas de polarisation TM (Figure 7.11a), on voit de plus apparaître des creux de résonances secondaires notés W qui se déplacent vers les grandes longueurs d'ondes à mesure que θ augmente. Ces résonances sont reliées à la présence d'une anomalie de Wood associée à l'ordre (0,1) et sont prévues par le calcul numérique (cf. Figure 7.12a). Leur position spectrale est en bon accord avec les simulations. Dans le cas TE en revanche, on n'observe pas ces anomalies (cf. Figure 7.11b), comme nous l'avions anticipé par le calcul (cf. Figure 7.12b). Là aussi les niveaux de transmission chutent lorsque l'incidence augmente. Enfin, la largeur du pic A diminue quand θ devient grand. Ce comportement que l'on peut observer sur les spectres calculés est néanmoins plus marqué sur les me-

sures expérimentales.



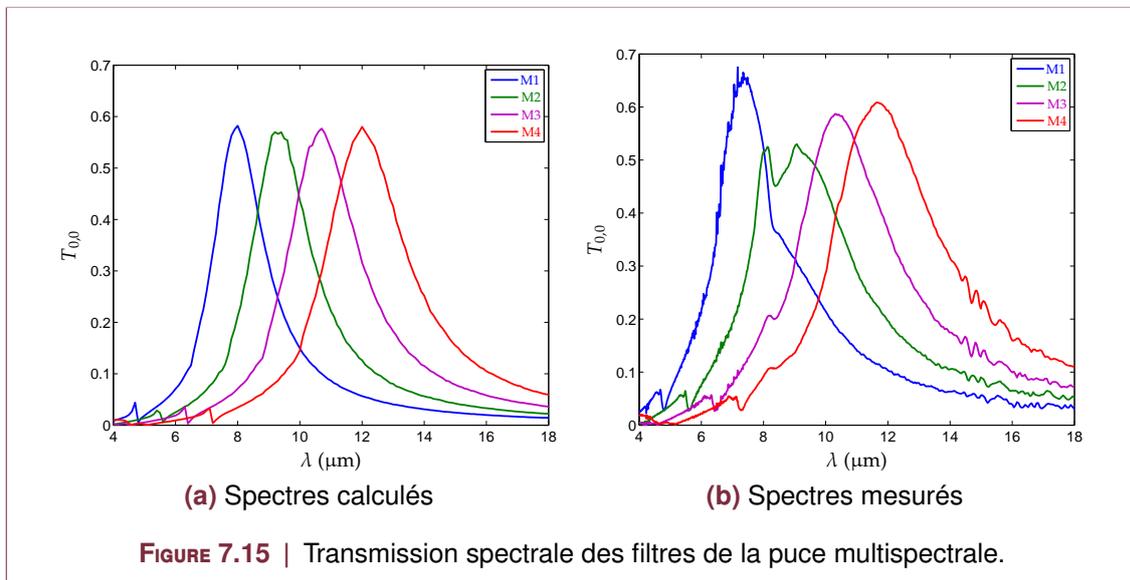
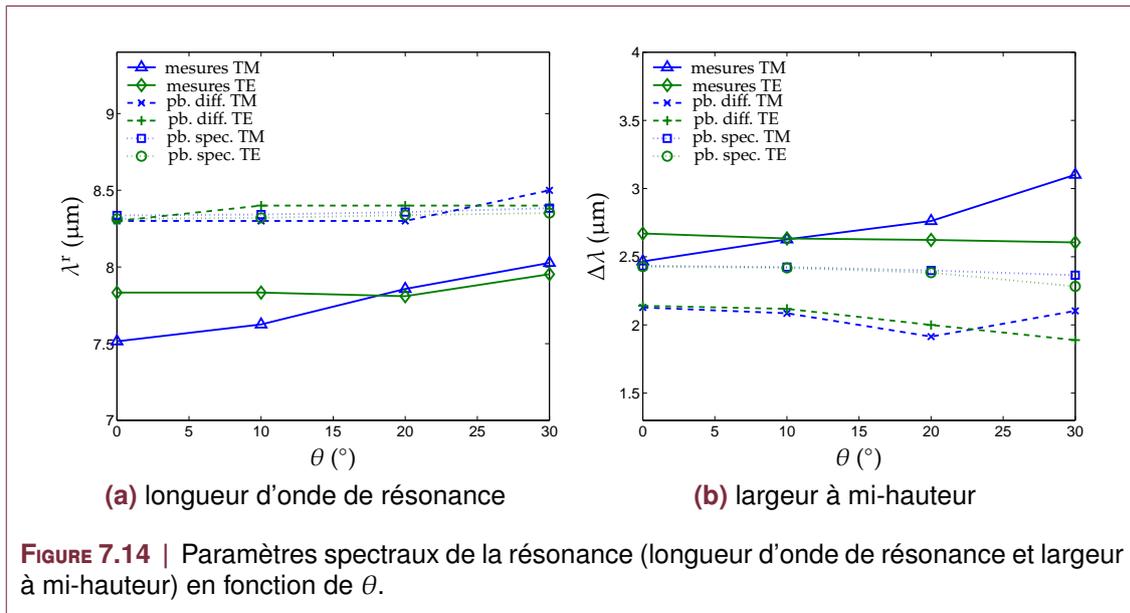
Nous avons enfin caractérisé l'échantillon A pour différentes incidences en faisceau focalisé non polarisé (ce qui représente les conditions d'utilisation réelles du filtre), dans ce cas la taille du faisceau est beaucoup plus faible et nous nous affranchissons des problèmes mentionnés précédemment. Les résultats sont reportés sur la [Figure 7.13](#). Nous observons que la dépendance en angle est moindre que dans le cas d'un faisceau collimaté.

Nous avons également recherché les modes à fuites de la structure correspondant à la résonance A. Vu que nous savons que la fréquence de résonance $\omega^A \approx 8.3 \mu\text{m}$ reste quasi constante en fonction de l'angle d'incidence, nous résolvons le problème spectral avec $\alpha = \Re(\omega^A/c \sin \theta)$ pour θ compris entre 0 et 30° , et pouvons donc tracer les variations des fréquences propres en fonction de l'angle d'incidence. Les valeurs des paramètres spectraux de la résonance (longueur d'onde de résonance et largeur à mi-hauteur) en fonction de θ sont reportés sur la [Figure 7.14](#). Les deux approches théoriques (problème de diffraction et problème spectral) donnent des résultats similaires et qui rendent compte des résultats expérimentaux :

- qualitativement : la position spectrale de la résonance principale A varie peu (cf. [Figure 7.14a](#)) et *idem* pour la largeur spectrale (cf. [Figure 7.14b](#)),
- quantitativement : même si nous avons émis des réserves puisque l'échantillon n'est pas parfait, les valeurs obtenues sont assez proches. La fréquence de résonance se trouve autour de $8 \mu\text{m}$ et la largeur spectrale vaut *grosso modo* $2.5 \mu\text{m}$.

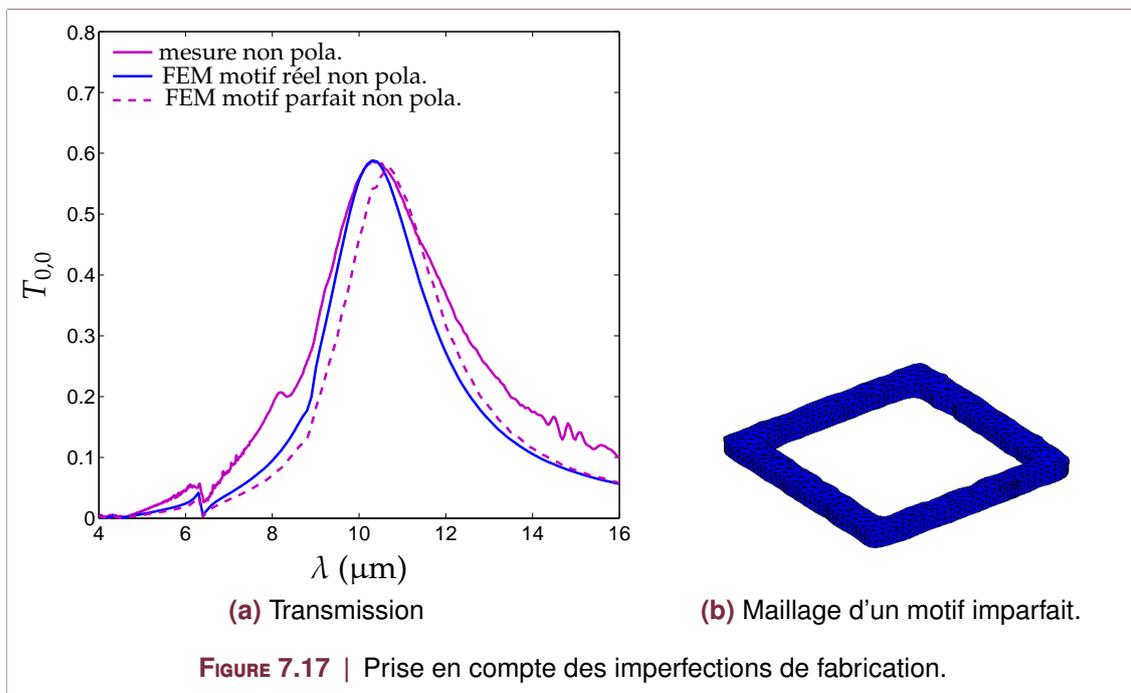
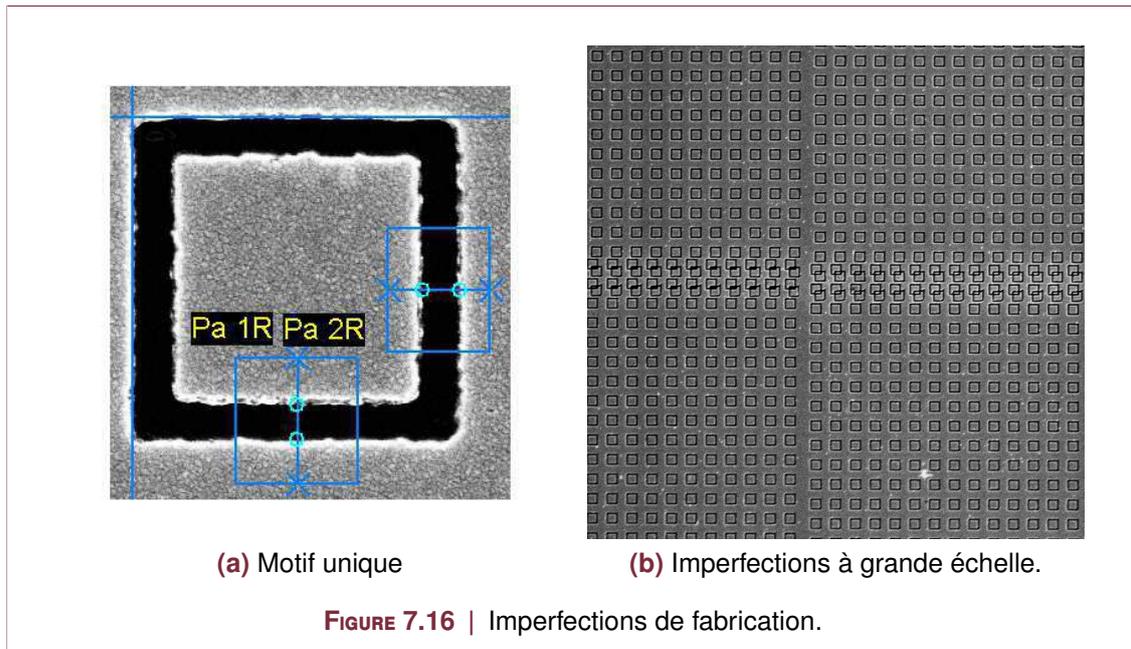
Passons maintenant à l'échantillon multispectral M décrit la [section 7.2](#). Nous l'avons caractérisé uniquement en faisceau focalisé à cause de la taille réduite des zones gravées, en lumière non polarisée et en incidence normale. Les spectres obtenus pour les quatre filtres M1, M2, M3 et M4, en prenant comme spectre de référence la transmission à travers le substrat, sont tracés sur la [Figure 7.15b](#). Nous avons représenté à côté sur la [Figure 7.15a](#) la transmission théorique.

L'accord entre simulation et expérience est correct, même si les filtres fabriqués ont des longueurs d'onde de résonance légèrement plus faibles et sont spectralement plus larges. Les niveaux de transmission à la résonance ($\approx 60\%$) sont du même ordre de

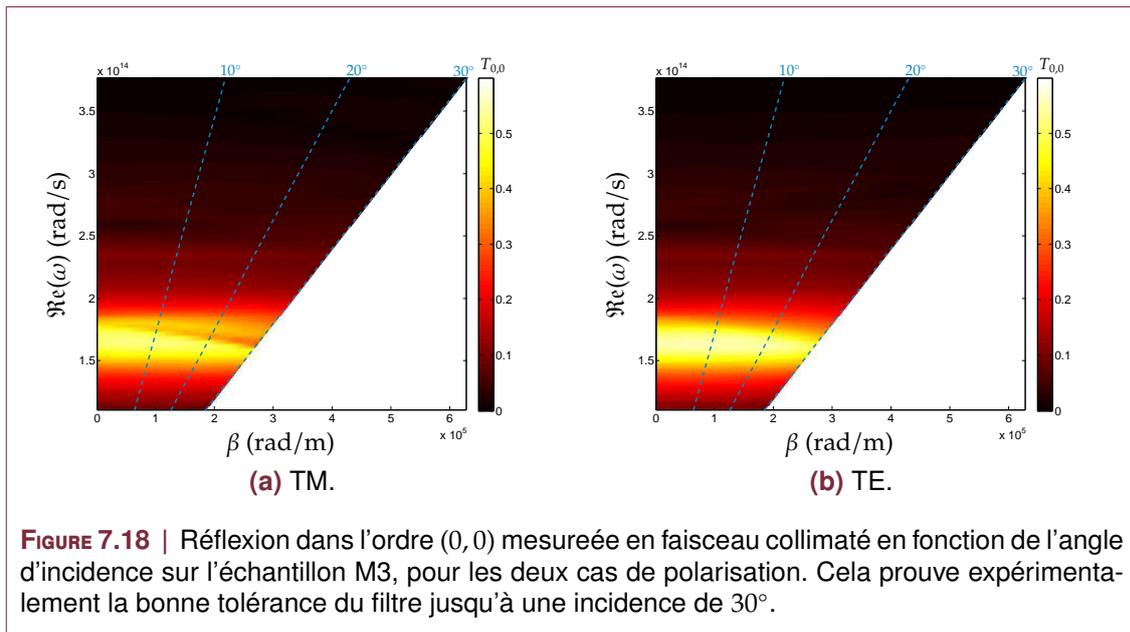


grandeur que ce que les simulations laissaient présager. Notons qu'une légère résonance secondaire se retrouvant sur tous les filtres apparaît autour de $8.3 \mu\text{m}$. Des investigations sont encore nécessaires pour déterminer son origine. La présence de cette résonance secondaire est plus évidente sur le filtre M2 dont la résonance principale se situe elle aussi autour de $8.3 \mu\text{m}$: il apparaît dans ce cas un résonance hybride.

Tous les écarts constatés entre théorie et expérience sont à mettre en perspective avec les incertitudes sur les indices des matériaux ainsi que les différences entre les conditions des simulations (infinité de périodes, substrat infini, bords des ouvertures droits et angles parfaits, onde plane...) et celles rencontrées en pratique dans la fabrication et la caractérisation (nombre fini de périodes, substrat d'épaisseur finie, déviation des périodes, motifs imparfaits, faisceau convergent...). Une prise en compte plus rigoureuse des imperfections de fabrication est donc nécessaire. Des images SEM des motifs uniques révèlent en effet des différences entre les dimensions en x et y , ainsi que des coins légèrement arrondis et une rugosité de surface (cf. Figure 7.16a). Nous avons à partir de cette image SEM extrait le profil réel d'une ouverture pour l'échantillon M3. Les imper-



fections sont prises en compte facilement avec la FEM car les géométries pouvant être traitées sont arbitraires. Le maillage du motif répété périodiquement est représenté sur la [Figure 7.17b](#). La transmission en incidence normale pour ce motif est tracée sur la [Figure 7.17a](#), et comparée à la mesure expérimentale et au cas d'un motif parfait. On constate que la position du pic pour les simulations avec le motif réel est plus proche de celle mesurée expérimentalement. Cet accord démontre la polyvalence de la méthode des éléments finis, capable de prendre en compte les imperfections de fabrication rencontrées en pratique, et ce sans nécessité de modifier lourdement le code de simulation numérique. Notons cependant que notre code étant fondé sur la répétition périodique d'un élément diffractif, il est beaucoup plus délicat (voire impossible en terme de ressources de calcul) de prendre en compte les imperfections à plus grande échelle comme celles observées sur la [Figure 7.16b](#) (décalage des périodes, recouvrement des motifs, etc.).



Pour finir, nous avons réalisé des mesures en fonction de l'angle d'incidence sur l'échantillon M3, en faisceau polarisé et collimaté. Les diagrammes de dispersion sont représentés en Figure 7.18 et démontrent la bonne tolérance du filtre jusqu'à 30° , dans les deux cas de polarisation. On observe dans le cas TM la présence d'un creux secondaire de résonance due à l'excitation d'un autre modes à fuites comme nous l'avions étudié numériquement dans la section 6.4.

Conclusion partielle

Nous avons dans cette partie exposé la fabrication et la caractérisation des deux voies de filtrage spectral retenues.

La première (filtrage coupe-bande en réflexion) est basée sur l'utilisation de réseaux de plots métalliques sur un bi-couche isolant/métal. Nous avons après une étude numérique de conception fabriqué des premières structures. L'incompatibilité manifeste (du moins dans nos conditions de fabrication) entre les matériaux choisis (chrome et germanium) nous a amené à remplacer le germanium par du silicium. Les composants alors fabriqués et les mesures réalisées démontrent la faisabilité d'un filtrage ajustable en longueur d'onde en ne modifiant que les dimensions transverses des réseaux, ainsi que des filtres très tolérants à l'angle d'incidence jusqu'à 70° .

La deuxième voie de filtrage a été explorée avec des résultats très satisfaisants. Le premier échantillon fabriqué et mesuré réalise un filtre passe bande en transmission, doté d'une bonne tolérance angulaire jusqu'à 30° , peu dépendant de la direction de polarisation incidente et avec des niveaux de transmission corrects. Une puce multispectrale constituée de quatre filtres centrés à différentes longueurs d'onde a ensuite été fabriquée, montrant l'accordabilité spectrale de ces réseaux d'ouvertures coaxiales en ne modifiant que leurs dimensions transverses. La fabrication de plusieurs filtres sur un même support reste donc simple puisqu'elle ne nécessite qu'une étape de dépôt et une étape de gravure, ouvrant ainsi la voie aux applications à grande échelle et donc bas coût. Les résultats des mesures sont en accord avec les simulations numériques, et nous avons montré que l'on peut prendre en compte certains défauts de fabrication (au niveau du motif) de manière simple avec la FEM.

Enfin, ces résultats ont permis de confirmer la capacité de nos approches théoriques à rendre compte de la réalité expérimentale. L'excitation des modes à fuites trouve ainsi une application concrète dans le filtrage spectral dans l'infrarouge.

Conclusion et perspectives

Conclusion générale

LE développement des applications multispectrales dans l'infrarouge nécessite la conception de filtres large bande, dotés d'une bonne tolérance angulaire et indépendants de la polarisation de la lumière incidente. Nous avons identifié des pistes de filtrage prometteuses par des réseaux de période sub-longueur d'onde fonctionnant dans le domaine de résonance. Pour modéliser correctement les propriétés spectrales de ces structures diffractives, il convient de résoudre les équations de Maxwell afin de calculer les efficacités de diffraction. De plus, le filtrage étant réalisé par des effets de résonance, il est primordial de calculer les fréquences propres et les modes propres des structures pressenties ainsi que de comprendre leur excitation par une onde incidente.

Nous avons utilisé une formulation scalaire de la FEM pour résoudre les équations de Maxwell en régime harmonique dans les deux cas de polarisation TE et TM. Celle-ci est fondée sur le traitement d'un problème de radiation équivalent et l'utilisation de conditions de Bloch et de PML, et est adaptée à l'étude de la diffraction d'une onde plane par un réseau mono-dimensionnel de géométrie arbitraire composé de matériaux possiblement z -anisotropes. Dans ce contexte, nous avons développé des PMLs adaptatives pour traiter le cas des anomalies de Wood, lorsque un ordre de diffraction devient rasant, pour lequel les PML classiques ne remplissent plus leur rôle.

Afin d'étudier les résonances de structures périodiques ouvertes, nous avons développé une méthode scalaire de recherche de leurs modes propres et de leurs fréquences propres par la résolution d'un problème spectral par la FEM dans les deux cas de polarisation. Cette formulation, qui repose aussi sur le traitement d'un problème borné équivalent grâce à l'utilisation de conditions de Bloch et de PML, nous permet de trouver un nombre arbitraire de fréquences propres complexes pour des réseaux non dispersifs de géométrie quelconque.

Nous avons mis en évidence la structure du spectre de l'opérateur de Maxwell, constituée d'un spectre discret et d'un spectre continu. L'emploi d'une transformation géométrique *ad hoc* pour définir les PMLs permet de déplacer le spectre continu dans le plan complexe et permet de calculer numériquement les modes à fuites, des êtres mathématiques dont le champ est exponentiellement croissant à l'infini et qui traduisent physiquement la dissipation d'énergie du réseau vers le reste de l'univers. Une étude des différents paramètres des PML et de leur influence sur les résultats numériques a été menée.

Notre approche a été validée en comparant les résultats obtenus avec la tétrachotomie, une méthode de recherche de pôles des coefficients de Fresnel (qui correspondent aux valeurs propres du système), sur des exemples d'un multicouche et d'un réseau de fentes. Nous avons étendu enfin la méthode de résolution du problème spectral au cas de réseaux comportant un matériau dispersif ayant un modèle de permittivité à un pôle. Cette formulation, qui nous conduit au traitement d'un problème aux valeurs propres quadratique, a été mise en œuvre pour l'étude des propriétés spectrales d'un réseau de fentes dans du carbure de silicium, matériau qui possède une bande d'absorption résonante dans l'infrarouge.

Une contribution de ce travail a été de relier le problème de diffraction au problème spectral. En traitant un problème spectral adjoint, nous obtenons une famille de vecteurs propres adjoints bi-orthogonaux aux vecteurs propres du problème spectral. Nous pouvons ensuite décomposer un champ solution du problème avec sources sur la base des modes propres, les coefficients de cette décomposition modale sont alors calculés simplement à l'aide des fréquences propres, des cartes de champ des modes adjoints ainsi que du terme source. Ces coefficients traduisent le couplage d'un mode donné avec les sources, et en particulier avec une onde plane incidente de fréquence arbitraire, et nous permettent de savoir comment ce mode est excité. Cette méthode modale a été appliquée sur un exemple numérique d'un réseau de fentes, et comparée avec succès aux résultats issus de la résolution du problème de diffraction dans les cas TE et TM. Elle permet de calculer un champ diffracté projeté sur un nombre fini de modes propres, et d'obtenir un modèle réduit satisfaisant permettant de calculer les spectres de réflexion, de transmission et d'absorption avec des temps de calcul raisonnables puisqu'il suffit de résoudre uniquement deux problèmes FEM et de calculer les efficacités *a posteriori* par des intégrations numériques à différentes longueurs d'onde.

Étant donné que nous voulons concevoir des filtres indépendants de la polarisation, les réseaux mono-dimensionnels ne sont pas adaptés à notre application. Nous avons donc présenté la généralisation des méthodes exposées dans le cas scalaire au cas vectoriel pour des réseaux bi-périodiques de géométrie arbitraires. Les principes généraux sont analogues à ceux du cas mono-dimensionnel. En premier lieu, nous avons donné les bases de la résolution du problème de diffraction d'une onde plane de polarisation arbitraire par des réseaux croisés, fondée aussi sur l'utilisation de conditions de Bloch et de PML et sur le traitement d'un problème radiatif équivalent. Puis nous avons étendu la résolution du problème spectral au cas vectoriel bi-périodique en traitant un problème borné équivalent avec conditions de quasi-périodicité et PML. Enfin, nous avons exposé les fondements d'une méthode de décomposition d'un champ solution du problème avec sources sur la base des modes propres du système grâce à la résolution d'un problème adjoint. Nous avons mis en évidence que les effets de polarisation, bien que n'intervenant pas dans le problème spectral, peuvent être étudiés grâce aux coefficients de couplage calculés par la méthode modale.

Nous avons exploité ces méthodes vectorielles pour l'étude des propriétés diffractives de quatre types de bi-réseaux. Des études paramétriques ont été menées pour identifier l'influence des différents paramètres géométriques et optiques sur les réponses spectrales des réseaux. Le premier d'entre eux, un réseau de plots métalliques permet d'obtenir des filtres passe-bande larges dont la fréquence de résonance se déplace avec la hauteur des plots. L'étude comparative des spectres et des fréquences propres montrent que ces résonances sont dues à l'excitation de modes de type Fabry-Pérot dans l'espace séparant les plots. Néanmoins, il faut des plots peu espacés et épais pour observer les résonances, ce qui est complexe à réaliser avec des techniques classiques de gravure. De plus, il est judicieux d'un point de vue de la fabrication de réaliser tous les filtres sur un même substrat en une seule étape de gravure, et donc de ne modifier que les dimensions transverses des réseaux. Le deuxième type structure considéré consiste en des réseaux de plots métalliques carrés de faible épaisseur sur un bi-couche diélectrique. Ces réseaux réalisent des filtres passe bande en transmission ajustables en longueur d'onde avec la période du réseau. Malheureusement, ils sont trop étroits pour notre application et sont dépendants de l'angle d'incidence et de la polarisation, comportement confirmé par les spectres en transmission et l'étude des modes propres. Nous avons donc étudié des réseaux de plots cylindriques métalliques de faible épaisseur déposés sur un bicouche métal/diélectrique, réalisant des filtres coupe bande large en réflexion par l'excitation de deux modes propres

de la structure dont la position est ajustable avec les dimensions transverses du réseau. Ces filtres sont indépendants de l'incidence jusqu'à 60° , ce qui est confirmé par l'étude du diagramme de dispersion pour les modes considérés. Enfin, les réponses spectrales sont indépendantes de la polarisation grâce à l'excitation simultanée des deux modes à fuites ce qui est confirmé en étudiant les coefficients de couplage desdits modes propres pour différentes polarisations. L'utilisation de ces deux modes uniquement pour calculer correctement le spectre en réflexion montre que le modèle réduit qui en résulte est suffisant pour décrire les propriétés de diffraction de la structure dans le domaine spectral considéré. Le dernier type de réseau étudié est constitué d'ouvertures annulaires dans une couche métallique. L'excitation de modes à fuites dans les ouvertures permet d'obtenir une large résonance en transmission pouvant être utilisée pour réaliser un filtrage passe bande peu dépendant de la polarisation et de l'incidence jusqu'à 30° . Les filtres peuvent être accordés spectralement en modifiant les dimensions transverses des ouvertures ainsi que la période.

Finalement nous avons fabriqué et caractérisé expérimentalement deux types de bi-réseaux que nous avons étudié numériquement. Le premier type, des réseaux de plots cylindriques en chrome sur un empilement chrome/silicium réalisant un filtrage coupe bande en réflexion, ont donné des résultats de mesure en accord avec la théorie. Les premières structures fabriquées et mesurées démontrent l'accordabilité spectrale des filtres avec les dimensions transverses des réseaux ainsi que leur grande tolérance angulaire et leur indépendance à la polarisation.

Le deuxième type, des réseaux d'ouvertures annulaires dans une couche d'or, ont présenté des résonances dont la position et la largeur spectrale sont en bon accord avec la théorie. De plus, l'étude de l'influence de l'angle d'incidence et de la polarisation montre que ces structures sont peu dépendantes à ces paramètres, comme prévu par les simulations numériques. Nous avons ainsi conçu et fabriqué une puce multispectrale constituée de quatre filtres échantillonnés sur la bande IR III sur un même substrat, démontrant la possibilité d'accorder les filtres avec les dimensions transverses des réseaux, ce qui simplifie la fabrication en limitant le nombre d'étapes technologiques (une seule photolithographie). Ces résultats expérimentaux viennent valider les méthodes développées et montrent la faisabilité de filtres diffractifs pour des applications multispectrales dans l'infrarouge lointain.

Perspectives

Filtrage multispectral

Il reste à ce jour de nombreux aspects à étudier. L'architecture optique du dispositif de filtrage est, dans le cas de filtres passe bande en transmission, relativement simple puisqu'il suffit de placer une matrice de filtres centrés à différentes longueurs d'onde devant le microbolomètre. Le filtrage peut alors être réalisé au niveau du pixel ou bien au niveau d'un groupe de pixels connexes. Le pas des pixels dans les dernières générations de microbolomètres est de $17\ \mu\text{m}$. Il est clair que dans le cas d'un filtrage au niveau du pixel, les phénomènes de diaphotie (*crossstalk* en anglais) entre pixels voisins peuvent devenir gênants, surtout si d'autres ordres que l'ordre spéculaire sont propagatifs. De plus, la taille des pixels devient alors de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde, ce qui est propice aux phénomènes de diffraction par les pixels eux mêmes. Ces points méritent donc une étude approfondie. En outre, il convient d'étudier les effets de taille finie du réseau sur sa réponse spectrale car des pixels de taille aussi réduite ne peuvent accueillir qu'un nombre réduit de périodes. Nous avons commencé l'étude de ce point par la

réalisation de matrices bi-spectrales de $17 \times 17 \mu\text{m}^2$ pour les réseaux de plots en chrome sur un bicouche Ge/Cr, mais ils faisaient partie du lot d'échantillons ne présentant pas de résonances, et donc inexploitable. Un autre aspect à étudier concerne le type de substrat, car nous avons vu que la silice native sur les substrats de silicium pouvait perturber les réponses des filtres. De plus, l'épaisseur de ces substrats diminue la transmission effective des filtres, il serait donc bénéfique de prendre des substrats moins épais. En revanche pour les filtres en réflexion que nous avons étudiés, le support importe peu puisque la couche de chrome déposée par dessus est opaque dans le domaine spectral envisagé. Néanmoins, le filtrage en réflexion nécessite de concevoir une architecture optique plus complexe qui reste à étudier et qui diminuera inexorablement la compacité du dispositif.

Méthodes numériques

La méthode de recherche de modes propres consiste, nous l'avons vu, à traiter un problème borné équivalent tronqué par des PML. Lorsque les PML sont trop éloignées de la structure diffractive, des instabilités numériques apparaissent, faussant le calcul des fréquences propres. Il apparaît essentiel de comprendre ce phénomène et d'essayer d'y remédier en développant des PML adaptées aux problèmes spectraux. Une solution consiste vraisemblablement à développer des PML non convexes épousant les contours de l'objet étudié.

Pour ce qui est du filtrage spectral, maintenant que la méthode de recherche de modes a été mise en place, la conception de filtres s'en trouve possiblement simplifiée. Le problème inverse consiste à partir d'un gabarit que l'on se donne à trouver les paramètres opto-géométriques qui permettent d'approcher au mieux cette cible. En raisonnant en termes d'excitation de modes à fuites, le problème se réduit alors à placer un (ou quelques) point(s) dans le plan complexe.

D'un point de vue théorique, notre approche consistant à trouver les modes à fuites fonctionne aussi pour des problèmes non périodiques, et peut donc être appliquée à l'étude de résonateurs ouverts. Il en est un qui a récemment attiré une attention mondiale, puisqu'il s'agit de la cavité utilisée dans des expériences d'électrodynamique quantique (*Quantum Electro Dynamic*, QED) par Serge Haroche et ses collaborateurs, couronné du prix Nobel de Physique 2012. Le piégeage de photons individuels durant des temps macroscopiques (120 ms) a été une prouesse technique, et permet d'enregistrer la naissance, la vie et la mort d'un photon [50]. Nous avons étudié cette cavité ouverte [19] constituée de deux miroirs toroïdaux en niobium et retrouvé numériquement les caractéristiques spectrales, obtenues expérimentalement dans la référence [69], des résonances dues aux deux modes à fuites dont les valeurs propres associées possèdent une partie imaginaire très faible devant la partie réelle, c'est à dire un grand temps de vie. Ces résultats prouvent la capacité de notre formulation à calculer des caractéristiques spectrales de résonateurs ouverts de géométrie complexe dans le cas non périodique. De plus, ils montrent la précision de la méthode puisqu'il s'agissait là d'un cas extrême où la partie imaginaire de la fréquence propre est plus faible de 9 ordres de grandeur que la partie réelle !

La méthode modale que nous avons développée devrait se révéler particulièrement utile dans l'étude de nanoparticules. En effet, la résolution du problème spectral nous donne les modes propres, mais on ne sait pas quelles sont les conditions d'excitation d'un mode donné, mis à part sur des cas simples par des considérations de symétrie. L'étude des coefficients de couplage avec une onde plane incidente en fonction de la longueur d'onde, des angles d'incidence et de la polarisation permet ainsi de trouver les conditions optimales d'excitation, ou au contraire de non excitation du mode en question. Enfin, la

méthode modale fonctionne avec des sources arbitraires, et le calcul de la fonction de Green devient alors élémentaire. On obtient ainsi sa représentation spectrale, qui peut être utilisée notamment pour calculer la densité locale d'états (*Local Density of States*, LDOS) de diverses structures résonantes.

Annexes

Notions d'analyse complexe

Sommaire

A.1 Fonctions de \mathbb{C} dans \mathbb{C} , \mathbb{C} -dérivabilité et holomorphicité	151
A.2 Intégration sur une courbe dans \mathbb{C}	152
A.3 Théorème de Cauchy	152
A.4 Théorème des résidus	153

A.1 Fonctions de \mathbb{C} dans \mathbb{C} , \mathbb{C} -dérivabilité et holomorphicité

On considère une fonction $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ d'une variable complexe $z = x + iy$, définie sur un sous-ensemble ouvert U du plan complexe \mathbb{C} .

Définition A.1 On dit qu'une application $L : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ est \mathbb{R} -linéaire si :

$$\forall (a_1, a_2) \in \mathbb{R}^2, \quad \forall (z_1, z_2) \in \mathbb{C}^2, \quad L(a_1 z_1 + a_2 z_2) = a_1 L(z_1) + a_2 L(z_2) \quad (\text{A.1})$$

Définition A.2 On dit que la fonction f est \mathbb{R} -différentiable en un point $z_0 \in U$ s'il existe une application \mathbb{R} -linéaire $L : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ et une fonction ϵ d'une variable complexe telles que :

$$\epsilon(h) \rightarrow 0 \text{ quand } h \rightarrow 0 \text{ et } f(z_0 + h) = f(z_0) + L(h) + h\epsilon(h) \quad (\text{A.2})$$

avec $|h| < r$, où r est le rayon d'une boule $B(z_0, r) \subset U$ centrée en z_0 .

Lorsqu'elle existe, l'application L est unique et est appelée différentielle de f en z_0 . On la note habituellement $df(z_0)$. On dit que f est \mathbb{R} -différentiable sur U si elle est \mathbb{R} -différentiable en tout point de U .

■ **Propriété A.1** Si f est \mathbb{R} -différentiable en un point $z_0 \in U$, alors :

- elle est continue en z_0
- elle admet des dérivées partielles d'ordre 1 en z_0 :

$$\frac{\partial f}{\partial x}(z_0) = L(1) = df(z_0)(1) \text{ et } \frac{\partial f}{\partial y}(z_0) = L(i) = df(z_0)(i) \quad (\text{A.3})$$

La dérivabilité au sens complexe se définit ainsi :

Définition A.3 On dit que la fonction f est \mathbb{C} -différentiable en un point $z_0 \in U$ si la limite

$$f'(z_0) = \lim_{h \rightarrow 0, h \in \mathbb{C}^*} \frac{f(z_0 + h) - f(z_0)}{h} \quad (\text{A.4})$$

existe et est finie.

Il est important de remarquer que la condition de \mathbb{C} -différentiabilité pour les fonctions de variable complexe est bien plus contraignante que la condition analogue pour les fonctions de variable réelle. La différence est la suivante :

- dans \mathbb{R} , il y a essentiellement deux manières de s'approcher d'un point : à droite, ou à gauche. Une fonction de variable réelle est dérivable en un point si et seulement si le "taux d'accroissement" admet en ce point une limite à droite et une limite à gauche ayant la même valeur (finie)
- dans \mathbb{C} , il y a une infinité de manières de s'approcher d'un point ; chacune d'elles doit donner lieu à une limite (finie) du "taux d'accroissement", ces limites étant de plus toutes égales.

Théorème A.1 Pour que la fonction f soit \mathbb{C} -différentiable en un point $z_0 \in U$, il faut et il suffit :

- qu'elle soit \mathbb{R} -différentiable en z_0
- et que, de plus, elle vérifie les conditions de Cauchy-Riemann en z_0 :

$$\frac{\partial f}{\partial y}(z_0) = i \frac{\partial f}{\partial x}(z_0) \quad (\text{A.5})$$

La différentielle de f au point z_0 est l'application $df(z_0) : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, h \mapsto f'(z_0)h$ et la dérivée au sens complexe s'écrit :

$$f'(z_0) = \frac{\partial f}{\partial x}(z_0) = -i \frac{\partial f}{\partial y}(z_0) = \frac{\partial f}{\partial z}(z_0) \quad (\text{A.6})$$

Définition A.4 On dit qu'une fonction est holomorphe sur un ouvert U de \mathbb{C} si elle est \mathbb{C} -différentiable en tout point de U .

A.2 Intégration sur une courbe dans \mathbb{C}

L'intégrale curviligne est un des outils de base de l'analyse complexe. Si U est un ouvert du plan complexe, f une fonction continue de U dans \mathbb{C} et γ un arc paramétré continûment dérivable tracé de $[a, b]$ dans U on définit l'intégrale de f le long de γ en écrivant une intégrale de variable réelle

$$\int_{\gamma} f(z) dz = \int_a^b f(\gamma(t)) \gamma'(t) dt \quad (\text{A.7})$$

A.3 Théorème de Cauchy

Un important résultat concernant les intégrales curvilignes de fonctions holomorphes dans le plan complexe est le théorème de Cauchy. D'après ce théorème, si deux chemins différents relient les deux mêmes points et si une fonction est holomorphe « entre » les deux chemins, alors les deux intégrales de cette fonction suivant ces chemins sont égales. Le théorème est habituellement formulé pour les chemins fermés de la manière suivante :

Théorème A.2 Soit U un sous-ensemble ouvert de \mathbb{C} qui est simplement connexe, soit $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction holomorphe, et soit γ un chemin rectifiable dans U dont le point de départ est confondu avec le point d'arrivée (c'est-à-dire un lacet), alors :

$$\int_{\gamma} f(z)dz = 0 \quad (\text{A.8})$$

La formule intégrale de Cauchy est un point essentiel de l'analyse complexe. Elle exprime le fait que la valeur en un point d'une fonction holomorphe est complètement déterminée par les valeurs qu'elle prend sur un chemin fermé contenant (c'est-à-dire entourant) ce point. Elle peut aussi être utilisée pour exprimer sous forme d'intégrales toutes les dérivées d'une fonction holomorphe. Supposons que U soit un ouvert connexe du plan complexe \mathbb{C} , que $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ soit une fonction holomorphe sur U . Soit γ un chemin fermé inclus dans U , soit enfin z_0 n'appartenant pas à ce chemin. On a alors la formule suivante :

$$f(z_0) \cdot \text{Ind}_{\gamma}(z_0) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} \frac{f(\xi)}{\xi - z_0} d\xi \quad (\text{A.9})$$

où $\text{Ind}_{\gamma}(z_0)$ désigne l'indice du point z_0 par rapport au chemin γ :

$$\text{Ind}_{\gamma}(z_0) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} \frac{d\zeta}{\zeta - z_0} \quad (\text{A.10})$$

Corollaire A.1 Toute fonction holomorphe sur un ouvert U est indéfiniment dérivable en tout point par rapport à la variable complexe. Une telle fonction coïncide au voisinage de tout point z_0 de U avec sa série de Taylor en ce point (elle est analytique), et la série converge sur tout disque ouvert de centre z_0 et inclus dans U . On a alors :

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(z - z_0)^n \text{ avec } c_n = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} \frac{f(\xi)}{(\xi - z_0)^{n+1}} d\xi \quad (\text{A.11})$$

A.4 Théorème des résidus

Le théorème des résidus en analyse complexe est un outil puissant pour évaluer des intégrales curvilignes de fonctions holomorphes sur des courbes fermées ; il peut aussi bien être utilisé pour calculer des intégrales de fonctions réelles ainsi que la somme de certaines séries. Il généralise le théorème intégral de Cauchy et la formule intégrale de Cauchy.

Théorème A.3 Soit U un sous-ensemble ouvert et simplement connexe du plan complexe \mathbb{C} , z_1, \dots, z_n un ensemble de points distincts et isolés de U et f est une fonction qui est définie et holomorphe sur $U - z_1, \dots, z_n$. Si γ est une courbe rectifiable dans U qui ne rencontre aucun des points singuliers z_k et dont le point de départ correspond au point d'arrivée (c'est-à-dire un lacet rectifiable), alors :

$$\oint_{\gamma} f(z)dz = 2i\pi \sum_{k=1}^n \text{Res}_{z_k} f \text{Ind}_{\gamma}(z_k). \quad (\text{A.12})$$

où $\text{Res}_{z_k} f$ désigne le résidu de f en z_k .

Définition A.5 Soit $D \subseteq \mathbb{C}$ un ouvert de \mathbb{C} , D_f isolé dans D et $f : D \setminus D_f \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction holomorphe. Pour chaque point $z_0 \in D$, il existe un voisinage de z_0 noté $U = U_r(z_0) \setminus \{z_0\} \subset D$ relativement compact dans D , telle que $f|_U$ est holomorphe. La fonction f possède dans ce cas un développement de Laurent sur U :

$$f|_U(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n(z - z_0)^n \quad (\text{A.13})$$

On définit alors le résidu de f en z_0 par :

$$\text{Res}_{z_0} f := a_{-1} = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\partial U} f(z) dz \quad (\text{A.14})$$

Le résidu d'une fonction holomorphe f en un point singulier z_0 (pôle ou point singulier essentiel) est donc a_{-1} , c'est à dire le coefficient de $1/(z - z_0)$ dans le développement de Laurent de la fonction au voisinage de z_0 . Le résidu est \mathbb{C} -linéaire, c'est-à-dire que pour $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ on a : $\text{Res}_{z_0}(\lambda f + \mu g) = \lambda \text{Res}_{z_0} f + \mu \text{Res}_{z_0} g$.

On calcule les résidus traditionnellement de deux manières :

- soit à partir du développement de Laurent au voisinage de z_0
- soit en utilisant la formule générale suivante, si f possède en z_0 un pôle d'ordre n :

$$\text{Res}_{z_0} f = \frac{1}{(n-1)!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{\partial^{n-1}}{\partial z^{n-1}} (z - z_0)^n f(z) \quad (\text{A.15})$$

En particulier, si f a en z_0 un pôle d'ordre 1 :

$$\text{Res}_{z_0} f = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z) \quad (\text{A.16})$$

Banc de caractérisation

L'appareil utilisé est un spectrophotomètre infrarouge à transformée de Fourier (en anglais *Fourier Transform InfraRed spectrometer*, FTIR). Il est constitué de quatre éléments fondamentaux : la source infrarouge, un interféromètre, un détecteur et l'électronique de calcul. C'est un spectrophotomètre Thermo Fisher-Nicolet 6700 accompagné du logiciel d'acquisition et de traitement des données OMNIC. Sa gamme spectrale s'étend de 7400 à 350 cm^{-1} (1.35 à $28.6\text{ }\mu\text{m}$) avec une résolution de 0.125 cm^{-1} . Le système comprend également une source laser He-Ne ($\lambda = 632.8\text{ nm}$) qui sert de signal de référence pour le temps d'acquisition des données et pour la mesure du déplacement des différents miroirs optiques de l'appareil.

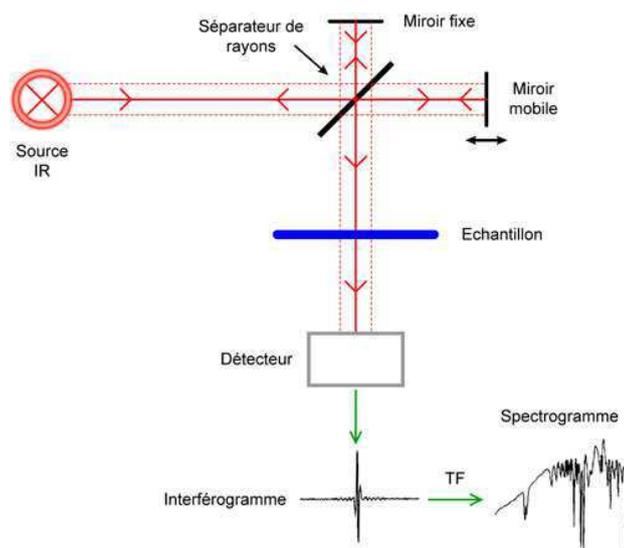


FIGURE B.1 | Schéma de principe de fonctionnement d'un FTIR.

La **Figure B.1** représente le schéma de principe du fonctionnement de l'appareil. La source ETC (*Electrically Temperature Controlled*) émet dans le centre infrarouge et la totalité du rayonnement est envoyée vers un interféromètre de Michelson, le cœur de l'instrument. L'intensité du rayonnement de la source est divisée en deux par une séparatrice semi réfléchissante composée d'un substrat en KBr recouvert d'un traitement multicouches diélectriques : 50% retournent à la source et 50% (deux fois 25%) sont recombinés de manière cohérente et envoyés vers l'échantillon. L'intensité lumineuse enregistrée par le détecteur (qui peut être soit un DTGS, *Deuterated TriGlycine Sulfate*, pyroélectrique et refroidi à l'azote liquide soit un MCT, *Mercury Cadmium Telluride* HgCdTe, photoconducteur et refroidi par effet Peltier) en fonction de la différence de marche induite par le déplacement du miroir mobile (c.-à-d. en fonction du temps) pour constituer un interférogramme. La transformée de Fourier de cet interférogramme permet d'obtenir un spectre dans l'espace des fréquences. Il faut en premier lieu enregistrer un spectre de référence (*background*), qui tient compte en particulier de l'absorption de l'eau et du

dioxyde de carbone présents dans l'enceinte, et ensuite procéder à la mesure sur notre échantillon. Le rapport des deux signaux nous donne pour finir le spectre utile. Le faisceau est focalisé dans le compartiment principal de l'appareil, dans lequel nous pouvons mettre un porte échantillon monté sur une platine de rotation afin de réaliser des mesures en transmission de 0 à 90°. Un accessoire composé d'un jeu de miroirs de renvoi permet de faire des mesures de réflexion en fonction de l'angle d'incidence, entre 0 et 90°.

La spécificité du FTIR utilisé est qu'il est possible de réaliser des mesures avec un faisceau collimaté ($\pm 0.3^\circ$ de divergence, 6 mm de diamètre ajustable par un iris). Le faisceau est mis en forme par un système optique constitué de plusieurs miroirs et déporté vers un banc externe, où un porte échantillon et une platine de rotation nous permettent de réaliser des mesures entre 0 et 60° en transmission et 67 et 90° en réflexion. Un polariseur motorisé placé devant l'échantillon permet de faire varier l'état de polarisation du faisceau.

- [1] A. ARCHAMBAULT et al. « Surface plasmon Fourier optics ». Dans : *Phys. Rev. B* 79 (19 2009), p. 195414 (cf. p. 21).
- [2] B. E. BAYER. *Color imaging array*. U.S. Patent 11,341,206. 1976 (cf. p. 6).
- [3] J.-P. BERENGER. « A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves ». Dans : *J. Comput. Phys.* 114.2 (1994), p. 185–200 (cf. p. 22, 32).
- [4] P. BERNASCOLLE, G. PELOUS et L. GRENIER. « Remote detection of natural gas clouds in open fields by IR imagery ». Dans : *Proc. SPIE*. T. 3700. Thermosense XXI. 1999, p. 409–416 (cf. p. 13).
- [5] A.-S. BONNET-BENDHIA et al. « Finite element computation of leaky modes in stratified waveguides ». Dans : *Ultrasonic Wave Propagation in Non Homogeneous Media*. Springer, 2009 (cf. p. 22, 82).
- [6] N. BONOD et al. « Total absorption of light by lamellar metallic gratings ». Dans : *Opt. Express* 16.20 (2008), p. 15431–15438 (cf. p. 117).
- [7] J. BOSSARD et al. « The design and fabrication of planar multiband metallodielectric frequency selective surfaces for infrared applications ». Dans : *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on* 54.4 (2006), p. 1265–1276 (cf. p. 17).
- [8] A BOSSAVIT. « Solving Maxwell equations in a closed cavity, and the question of spurious modes ». Dans : *IEEE Trans. on Magnetism* 26.2 (1990), p. 702–705 (cf. p. 100).
- [9] A. BOSSAVIT et I. MAYERGOYZ. « Edge-elements for scattering problems ». Dans : *IEEE Trans. on Magnetism* 25.4 (1989), p. 2816–2821 (cf. p. 100).
- [10] A. BRUCKNER, J. DUPARRE et A. BRAUER. « Advanced artificial compound-eye imaging systems ». Dans : sous la dir. de D. L. DICKENSHEETS et H. SCHENK. T. 6887. 1. San Jose, CA, USA : SPIE, 2008, p. 688709 (cf. p. 14).
- [11] X. BUET et al. « High angular tolerance and reflectivity with narrow bandwidth cavity-resonator-integrated guided-mode resonance filter ». Dans : *Opt. Express* 20.8 (2012), p. 9322–9327 (cf. p. 17).
- [12] D. A. BYKOV et L. L. DOSKOLOVICH. « Numerical Methods for Calculating Poles of the Scattering Matrix With Applications in Grating Theory ». Dans : *J. Lightwave Technol.* 31.5 (2013), p. 793–801 (cf. p. 22).
- [13] E. CENTENO et D. FELBACQ. « Optical bistability in finite-size nonlinear bidimensional photonic crystals doped by a microcavity ». Dans : *Phys. Rev. B* 62 (12 2000), R7683–R7686 (cf. p. 22).
- [14] C.-W. CHENG et al. « Angle-independent plasmonic infrared band-stop reflective filter based on the Ag/SiO₂/Ag T-shaped array ». Dans : *Opt. Lett.* 36.8 (2011), p. 1440–1442 (cf. p. 117).
- [15] A. A. CRUZ-CABRERA et al. « Fabrication and testing of plasmonic optimized transmission and reflection coatings ». Dans : (2008), 68830R–68830R–8 (cf. p. 18).
- [16] Q. DAI et al. « Generalized modal expansion of electromagnetic field in 2-D bounded and unbounded media ». Dans : *IEEE Antenn. Wirel. Pr.* 17.7 (2012), p. 1052–1055 (cf. p. 82, 85).

- [17] H. DAMMANN. « Color separation gratings ». Dans : *Appl. Opt.* 17.15 (1978), p. 2273–2279 (cf. p. 17).
- [18] G. DAYAL et S. A. RAMAKRISHNA. « Design of highly absorbing metamaterials for Infrared frequencies ». Dans : *Opt. Express* 20.16 (2012), p. 17503–17508 (cf. p. 117).
- [19] V. DEBIERRE et al. « Absorption in quantum electrodynamics cavities in terms of a quantum jump operator ». Dans : *ArXiv e-prints* (jan. 2013) (cf. p. 146).
- [20] T. DELORT et D. MAYSTRE. « Finite-element method for gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 2592–2601 (1993), p. 10 (cf. p. 18).
- [21] G. DEMÉSY et al. « All-purpose finite element formulation for arbitrarily shaped crossed-gratings embedded in a multilayered stack ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 27.4 (2010), p. 878–889 (cf. p. 27).
- [22] G. DEMÉSY et al. « The finite element method as applied to the diffraction by an anisotropic grating ». Dans : *Opt. Express* 15.26 (2007), p. 18089–18102 (cf. p. 27).
- [23] G. DEMÉSY et al. « Versatile full-vectorial finite element model for crossed gratings ». Dans : *Opt. Lett.* 34.14 (2009), p. 2216–2218 (cf. p. 18, 27).
- [24] G. DEMÉSY. « Modélisation électromagnétique tri-dimensionnelle de réseaux complexes. Application au filtrage spectral dans les imageurs CMOS. » Thèse de doct. Université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, 2009 (cf. p. 18, 19, 27, 28, 98).
- [25] G. DEMÉSY et al. « An all-purpose three-dimensional finite element model for crossed-gratings ». Dans : *Proceedings SPIE*. T. 7353. Prague, Czech Republic, 2009, 73530G (cf. p. 27).
- [26] H. DERUDDER, D. DE ZUTTER et F. OLYSLAGER. « Efficient calculation of the 2D Green's function of a truncated grounded dielectric slab ». Dans : *Antennas and Propagation Society International Symposium, 2000. IEEE*. T. 2. 2000, 618–621 vol.2 (cf. p. 82).
- [27] H. DERUDDER, F. OLYSLAGER et D. DE ZUTTER. « An efficient series expansion for the 2D Green's function of a microstrip substrate using perfectly matched layers ». Dans : *Microwave and Guided Wave Letters, IEEE* 9.12 (1999), p. 505–507 (cf. p. 82).
- [28] Y. DING et R. MAGNUSSON. « Doubly resonant single-layer bandpass optical filters ». Dans : *Opt. Lett.* 29.10 (2004), p. 1135–1137 (cf. p. 17).
- [29] Y. DING et R. MAGNUSSON. « Resonant leaky-mode spectral-band engineering and device applications ». Dans : *Opt. Express* 12 (2004), p. 5661–5674 (cf. p. 17).
- [30] Y. DING et R. MAGNUSSON. « Use of nondegenerate resonant leaky modes to fashion diverse optical spectra ». Dans : *Opt. Express* 12.9 (2004), p. 1885–1891 (cf. p. 17, 20).
- [31] M. B. DOOST, W. LANGBEIN et E. A. MULJAROV. « Resonant-state expansion applied to planar open optical systems ». Dans : *Phys. Rev. A* 85 (2 2012), p. 023835 (cf. p. 20, 82).
- [32] L. L. DOSKOLOVICH et al. « Design and investigation of color separation diffraction gratings ». Dans : *Appl. Opt.* 46.15 (2007), p. 2825–2830 (cf. p. 17).
- [33] J. W. DUPARRÉ et F. C. WIPPERMANN. « Micro-optical artificial compound eyes ». Dans : *Bioinspi. Biomim.* 1.1 (2006), R1 (cf. p. 13).
- [34] T. EBBESEN et al. « Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays ». Dans : *Nature* 391 (1998), p. 667–669 (cf. p. 16).
- [35] M. V. ELISEEV, A. G. ROZHNEV et A. B. MANENKOV. « Guided and Leaky Modes of Complex Waveguide Structures ». Dans : *J. Lightwave Technol.* 23.8 (2005), p. 2586 (cf. p. 22).

- [36] W. FAN et al. « Enhanced mid-infrared transmission through nanoscale metallic coaxial-aperture arrays ». Dans : *Opt. Express* 13.12 (2005), p. 4406–4413 (cf. p. 18).
- [37] U. FANO. « Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts ». Dans : *Phys. Rev.* 124 (6 1961), p. 1866–1878 (cf. p. 16).
- [38] U. FANO. « Zur Theorie der Intensitätsanomalien der Beugung ». Dans : *Annalen der Physik* 424.5 (1938), p. 393–443 (cf. p. 16).
- [39] A. L. FEHREMBACH et A. SENTENAC. « Unpolarized narrow-band filtering with resonant gratings ». Dans : *Appl. Phys. Lett.* 86 (2005), p. 121105 (cf. p. 17).
- [40] A.-L. FEHREMBACH et al. « Measurement and modeling of 2D hexagonal resonant-grating filter performance ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 27.7 (2010), p. 1535–1540 (cf. p. 17).
- [41] A.-L. FEHREMBACH et A. SENTENAC. « Study of waveguide gratings eigenmodes for unpolarized filtering applications ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 20 (2003), p. 481–488 (cf. p. 17).
- [42] D. FELBACQ. « Numerical computation of resonance poles in scattering theory ». Dans : *Phys. Rev. E* 64 (4 2001), p. 047702 (cf. p. 22).
- [43] Y. FERREC. « Spectro-imagerie aéroportée par transformation de Fourier avec un interféromètre statique à décalage latéral : réalisation et mise en oeuvre ». Thèse de doct. Laboratoire Charles Fabry de l’Institut d’Optique, 2008 (cf. p. 13).
- [44] S. S. FOUAD, A. H. AMMAR et M. H. EL-FAZARY. « A New Approach to the Correlation of the Electrical Properties with Interband and Intraband Transitions of Thin Cr Films ». Dans : *Phys. Status Solidi B* 187.1 (1995), p. 99–108 (cf. p. 110).
- [45] Z. C. G. BAO et H. WU. « Adaptive finite-element method for diffraction gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 22 (2005), p. 1106–1114 (cf. p. 18).
- [46] F. GARCIA-VIDAL et al. « Light passing through subwavelength apertures ». Dans : *Rev. Mod. Phys.* 82 (1 2010), p. 729–787 (cf. p. 16, 110).
- [47] V. GELU. « Lo Credo de Cassien ». Dans : *Cançons provençalas. Ostau dau País Marselhès, Édisud, 1854*, p. 109–116 (cf. p. v).
- [48] C. GENET et T. W. EBBESEN. « Light in tiny holes ». Dans : *Nature* 445 (2007), p. 39–46 (cf. p. 16).
- [49] N. A. GIPPIUS et al. « Resonant mode coupling of optical resonances in stacked nanostructures ». Dans : *Opt. Express* 18.7 (2010), p. 7569–7574 (cf. p. 22).
- [50] S. GLEYZES et al. « Quantum jumps of light recording the birth and death of a photon in a cavity ». Dans : *Nature* 446.7133 (mar. 2007), p. 297–300 (cf. p. 146).
- [51] B. GOURSAUD. « Etude mathématique et numérique de guides d’ondes ouverts non uniformes, par approche modale ». Thèse de doct. Ecole Polytechnique, ENSTA ParisTech, 2010 (cf. p. 48, 49, 55).
- [52] G. GRANET. « Reformulation of the lamellar grating problem through the concept of adaptive spatial resolution ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 16.10 (1999), p. 2510–2516 (cf. p. 18).
- [53] J.-J. GREFFET. « Introduction to Surface Plasmon Theory ». Dans : *Plasmonics*. Sous la dir. de S. ENOCH et N. BONOD. T. 167. Springer Series in Optical Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 2012, p. 105–148. ISBN : 978-3-642-28078-8 (cf. p. 21).
- [54] S. GUENNEAU et al. « A finite element formulation for spectral problems in optical fibers ». Dans : *COMPEL* 20.1 (2001), p. 120–31 (cf. p. 34).

- [55] M. GUILLAUMÉE, L. A. DUNBAR et R. P. STANLEY. « Description of the modes governing the optical transmission through metal gratings ». Dans : *Opt. Express* 19.5 (2011), p. 4740–4755 (cf. p. 16).
- [56] W. J. GUNNING et al. « Adaptive focal plane array : an example of MEMS, photonics, and electronics integration ». Dans : (2005), p. 366–375 (cf. p. 14).
- [57] R. HAIDAR et al. « Free-standing subwavelength metallic gratings for snapshot multispectral imaging ». Dans : *Appl. Phys. Lett.* 96.22, 221104 (2010), p. 221104 (cf. p. 14).
- [58] G. HANSON et A. YAKOVLEV. « Operator Theory for Electromagnetics : An Introduction ». Springer, 2002. ISBN : 9780387952758 (cf. p. 47).
- [59] S. HEIN, T. HOHAGE et W. KOCH. « On resonances in open systems ». Dans : *J. Fluid Mech.* 506 (2004), p. 255–284 (cf. p. 20).
- [60] S. HERNANDEZ et al. « 850 nm wavelength range nanoscale resonant optical filter fabrication using standard microelectronics techniques ». Dans : *Microelectronic Engineering* 84.4 (2007), p. 673–677 (cf. p. 17).
- [61] A. HESSEL et A. A. OLINER. « A New Theory of Wood’s Anomalies on Optical Gratings ». Dans : *Appl. Opt.* 4.10 (1965), p. 1275–1297 (cf. p. 16).
- [62] Y. HIRAOKA, T. SHIMI et T. HARAGUCHI. « Multispectral Imaging Fluorescence Microscopy for Living Cells ». Dans : *Cell Structure and Function* 27.5 (2002), p. 367–374 (cf. p. 13).
- [63] G. R. J. CHANDEZON et D. MAYSTRE. « A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application ». Dans : *J. of Optics* 11.4 (1980), p. 235–241 (cf. p. 18).
- [64] S. KIM et J. E. PASCIAK. « The computation of resonances in open systems using a perfectly matched layer ». Dans : *Mathematics of Computation* 78 (267 2009), p. 1375–1398 (cf. p. 55).
- [65] E. C. KINZEL et X. XU. « Extraordinary infrared transmission through a periodic bowtie aperture array ». Dans : *Opt. Lett.* 35.7 (2010), p. 992–994 (cf. p. 18).
- [66] D. KOROBKIN et al. « Mid-infrared metamaterial based on perforated SiC membrane : engineering optical response using surface phonon polaritons ». Dans : *Appl. Phys. A : Mater. Sci. Process.* 88 (4 2007). 10.1007/s00339-007-4084-8, p. 605–609 (cf. p. 16).
- [67] H. KRAMERS. « La diffusion de la lumière par les atomes ». Dans : *Atti Cong. Intern. Fisica, (Transactions of Volta Centenary Congress) Como 2 (1927)*, 545–557 (cf. p. 65).
- [68] R. D. L. KRONIG. « ON THE THEORY OF DISPERSION OF X-RAYS ». Dans : *J. Opt. Soc. Am.* 12.6 (1926), p. 547–556 (cf. p. 65).
- [69] S. KUHR et al. « Ultrahigh finesse Fabry-Perot superconducting resonator ». Dans : *Appl. Phys. Lett.* 90.16, 164101 (2007), p. 164101 (cf. p. 146).
- [70] S. KUKHLEVSKY et al. « Analytical model of the enhanced light transmission through subwavelength metal slits : Green’s function formalism versus Rayleigh’s expansion ». Dans : *Appl. Phys. B : Lasers Opt.* 84 (1 2006), p. 19–24 (cf. p. 60).
- [71] N. I. LANDY et al. « Perfect Metamaterial Absorber ». Dans : *Phys. Rev. Lett.* 100 (20 2008), p. 207402 (cf. p. 117).
- [72] M. LASSAS et E. SOMERSALO. « Analysis of the PML equations in general convex geometry ». Dans : *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh : Section A Mathematics* 131.05 (2001), p. 1183–1207 (cf. p. 32).

- [73] M. LASSAS, J. LIUKKONEN et E. SOMERSALO. « Complex Riemannian metric and absorbing boundary conditions ». Dans : *J. Math. Pure. Appl.* 80.7 (2001), p. 739–768 (cf. p. 32).
- [74] R. B. LEHOUCQ, D. C. SORENSEN et C. YANG. *ARPACK Users Guide : Solution of Large Scale Eigenvalue Problems by Implicitly Restarted Arnoldi Methods*. 1997 (cf. p. 50).
- [75] H. LEZEC et T. THIO. « Diffracted evanescent wave model for enhanced and suppressed optical transmission through subwavelength hole arrays ». Dans : *Opt. Express* 12.16 (2004), p. 3629–3651 (cf. p. 16).
- [76] L. LI. « New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 14 :10 (1997), p. 2758–2767 (cf. p. 18).
- [77] L. LI. « Oblique-coordinate-system-based Chandezon method for modeling one-dimensionally periodic, multilayer, inhomogeneous, anisotropic gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 16 (1999), p. 2521–2531 (cf. p. 18).
- [78] L. LI. « Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996), p. 1870–1876 (cf. p. 18).
- [79] K. LIDDIARD. « Thin-film resistance bolometer IR detectors ». Dans : *Infrared Physics* 24.1 (1984), p. 57–64 (cf. p. 12).
- [80] O. LIMAJ et al. « Midinfrared surface plasmon sensor based on a substrateless metal mesh ». Dans : *Applied Physics Letters* 98.9, 091902 (2011), p. 091902 (cf. p. 18).
- [81] R. LOVRINČIĆ et A. PUCCI. « Infrared optical properties of chromium nanoscale films with a phase transition ». Dans : *Phys. Rev. B* 80 (20 2009), p. 205404 (cf. p. 110).
- [82] H. MACLEOD. « Thin-film optical filters ». Third. Institute of Physics Pub., 2001 (cf. p. 58).
- [83] R. MAGNUSON et M. SHOKOOH-SAREMI. « Widely tunable guided-mode resonance nanoelectromechanical RGB pixels ». Dans : *Opt. Express* 15.17 (2007), p. 10903–10910 (cf. p. 17).
- [84] T. MAIER et H. BRÜCKL. « Wavelength-tunable microbolometers with metamaterial absorbers ». Dans : *Opt. Lett.* 34.19 (2009), p. 3012–3014 (cf. p. 14).
- [85] T. MAIER et H. BRUECKL. « Multispectral microbolometers for the midinfrared ». Dans : *Opt. Lett.* 35.22 (2010), p. 3766–3768 (cf. p. 14).
- [86] N. MARCUVITZ. « On field representations in terms of leaky modes or Eigenmodes ». Dans : *Antennas and Propagation, IRE Transactions on* 4.3 (1956), p. 192–194 (cf. p. 20).
- [87] L. MARTÍN-MORENO et al. « Theory of Extraordinary Optical Transmission through Subwavelength Hole Arrays ». Dans : *Phys. Rev. Lett.* 86 (6 2001), p. 1114–1117 (cf. p. 16).
- [88] D. MAYSTRE. « A new general integral theory for dielectric coated gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am.* 68.4 (1978), p. 490–495 (cf. p. 16).
- [89] D. MAYSTRE. « A new general integral theory for dielectric coated gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 68 (1978), p. 490–495 (cf. p. 18).
- [90] D. MAYSTRE et M. NEVIÈRE. « Electromagnetic theory of crossed gratings ». Dans : *Journal of Optics* 9.5 (1978), p. 301 (cf. p. 16).
- [91] M. G. MOHARAM et T. K. GAYLORD. « Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 71 (1981), p. 811–818 (cf. p. 18).

- [92] R. M. MORE. « Theory of Decaying States ». Dans : *Phys. Rev. A* 4 (5 1971), p. 1782–1790 (cf. p. 20).
- [93] E. A. MULJAROV, W. LANGBEIN et R. ZIMMERMANN. « Brillouin-Wigner perturbation theory in open electromagnetic systems ». Dans : *EPL (Europhysics Letters)* 92.5 (2010), p. 50010 (cf. p. 82).
- [94] B. MUNK. « Frequency selective surfaces ». John Wiley New York, 2000 (cf. p. 17).
- [95] E. NARANJO, S. BALIGA et P. BERNASCOLLE. « IR gas imaging in an industrial setting ». Dans : (2010), 76610K–76610K–8 (cf. p. 13).
- [96] M. NEVIÈRE. « Electromagnetic Theory of Gratings ». Dans : sous la dir. de R. PETIT. Berlin : Springer-Verlag, 1980. Chap. 5 (cf. p. 20, 22).
- [97] A. NICOLET et al. « Geometrical transformations and equivalent materials in computational electromagnetism ». Dans : *COMPEL* 27.4 (2008), p. 806–819 (cf. p. 32).
- [98] A. NICOLET et al. « Leaky modes in twisted microstructured optical fibres ». Dans : *Waves in Random and Complex Media* 17 :4 (2007), p. 559–570 (cf. p. 22).
- [99] A. NICOLET et al. « Perfectly matched layers via transformation electromagnetism for the computation of quasi-modes ». Dans : *International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA)*. Contributed talk. Cape Town, South Africa, 2012 (cf. p. 45).
- [100] A. NICOLET et al. « Leaky modes in twisted microstructured optical fibres ». Dans : *Waves in Random and Complex Media* 17 (2007), 559–570 (cf. p. 32).
- [101] F. OLYSLAGER. « Discretization of Continuous Spectra Based on Perfectly Matched Layers ». Dans : *SIAM Journal on Applied Mathematics* 64.4 (2004), p. 1408–1433 (cf. p. 49).
- [102] M. A. ORDAL et al. « Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared : Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W. » Dans : *Appl. Opt.* 24.24 (1985), p. 4493–4499 (cf. p. 110).
- [103] Y. OULD AGHA. « Transformations géométriques réelles et complexes : application à la recherche de modes à pertes dans des fibres optiques microstructurées ». Thèse de doct. Université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, 2007 (cf. p. 22, 58).
- [104] Y. OULD AGHA et al. « On the use of PML for the computation of leaky modes : an application to gradient index MOF ». Dans : *COMPEL* 27.1 (2008), p. 95–109 (cf. p. 22).
- [105] E. D. PALIK. « Handbook of optical constants of solids ». Academic Press, 1991 (cf. p. 58, 65, 110).
- [106] J. L. PERCHEC et al. « High rejection bandpass optical filters based on sub-wavelength metal patch arrays ». Dans : *Opt. Express* 19.17 (2011), p. 15720–15731 (cf. p. 18, 113).
- [107] R. PETIT. « Ondes électromagnétiques en radioélectricité et en optique ». Masson, 1993 (cf. p. 31, 58, 75, 100).
- [108] E. POPOV. « Gratings : Theory and Numeric Applications ». AMU, 2012, 12 chapters. ISBN : 2-85399-860-4 (cf. p. 42).
- [109] E. POPOV et al. « Enhanced transmission due to nonplasmon resonances in one- and two-dimensional gratings ». Dans : *Appl. Opt.* 43.5 (2004), p. 999–1008 (cf. p. 16).

- [110] M. POPOVIC. « Complex-frequency leaky mode computations using PML boundary layers for dielectric resonant structures ». Dans : *Integrated Photonics Research*. Optical Society of America, 2003, ITuD4 (cf. p. 22).
- [111] E. PUTLEY. « History of infrared detection. Part I : The first detectors of thermal radiation ». Dans : *Infrared Physics* 22.3 (1982), p. 125–131 (cf. p. 10).
- [112] L. RAYLEIGH. « Note on the remarkable case of diffraction spectra described by Prof. Wood ». Dans : *Philos. Mag.* 14 (1907), p. 60–65 (cf. p. 16, 37).
- [113] A. ROGALSKI. « Infrared detectors : an overview ». Dans : *Infrared Physics & Technology* 43.3-5 (2002), p. 187–210 (cf. p. 9).
- [114] A. ROGALSKI. « Infrared detectors : status and trends ». Dans : *Progress in Quantum Electronics* 27.2-3 (2003), p. 59–210 (cf. p. 14).
- [115] K. ROKUSHIMA et J. YAMANAKA. « Analysis of anisotropic dielectric gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 73 (1983), p. 901–908 (cf. p. 18).
- [116] S. ROMMELUÈRE et al. « Single-scan extraction of two-dimensional parameters of infrared focal plane arrays utilizing a Fourier-transform spectrometer ». Dans : *Appl. Opt.* 46.9 (2007), p. 1379–1384 (cf. p. 13).
- [117] W. M. SAJ. « FDTD simulations of 2D plasmon waveguide on silver nanorods in hexagonal lattice ». Dans : *Opt. Express* 13 (2005), p. 4818–4827 (cf. p. 18).
- [118] J. SANDERS. « Selected papers on natural and artificial compound eye sensors ». SPIE milestone series. Spie Optical Engineering Press, 1996. ISBN : 9780819421838 (cf. p. 13).
- [119] M. SARRAZIN et J.-P. VIGNERON. « Light transmission assisted by Brewster-Zennek modes in chromium films carrying a subwavelength hole array ». Dans : *Phys. Rev. B* 71 (7 2005), p. 075404 (cf. p. 16).
- [120] O. SCHENK et K. GÄRTNER. « Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO ». Dans : *Future Generation Computer Systems* 20.3 (2004), p. 475–487 (cf. p. 35, 101).
- [121] A. SENTENAC et A.-L. FEHREMBACH. « Angular tolerant resonant grating filters under oblique incidence ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 22.3 (2005), p. 475–480 (cf. p. 17).
- [122] A. SETTIMI, S. SEVERINI et B. J. HOENDERS. « Quasi-normal-modes description of transmission properties for photonic bandgap structures ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. B* 26.4 (2009), p. 876–891 (cf. p. 20, 82).
- [123] A. SETTIMI et al. « Quasinormal-mode description of waves in one-dimensional photonic crystals ». Dans : *Phys. Rev. E* 68 (2 2003), p. 026614 (cf. p. 20, 82).
- [124] V. V. SHEVCHENKO. « The expansion of the fields of open waveguides in proper and improper modes ». Dans : *Radiophysics and Quantum Electronics* 14 (8 1971). 10.1007/BF01029499, p. 972–977 (cf. p. 81).
- [125] R. SHOGENJI et al. « Multispectral imaging using compact compound optics ». Dans : *Opt. Express* 12.8 (2004), p. 1643–1655 (cf. p. 13, 14).
- [126] M. SHOKOEH-SAREMI et R. MAGNUSSON. « Wideband leaky-mode resonance reflectors : Influence of grating profile and sublayers ». Dans : *Opt. Express* 16.22 (2008), p. 18249–18263 (cf. p. 17).
- [127] P. A. STURROCK. « Kinematics of Growing Waves ». Dans : *Phys. Rev.* 112 (5 1958), p. 1488–1503 (cf. p. 21).
- [128] J. J. TALGHADER, A. S. GAWARIKAR et R. P. SHEA. « Spectral selectivity in infrared thermal detection ». Dans : *Light Sci Appl* 1 (août 2012), e24– (cf. p. 14).

- [129] T. TAMIR et S. ZHANG. « Resonant scattering by multilayered dielectric gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 14.7 (1997), p. 1607–1616 (cf. p. 20).
- [130] J. TANIDA et al. « Color imaging with an integrated compound imaging system ». Dans : *Opt. Express* 11.18 (2003), p. 2109–2117 (cf. p. 13, 14).
- [131] H. TAO et al. « A metamaterial absorber for the terahertz regime : design, fabrication and characterization ». Dans : *Opt. Express* 16.10 (2008), p. 7181–7188 (cf. p. 117).
- [132] J.-L. TISSOT. « Imagerie infrarouge thermique à base de détecteurs non refroidis ». Dans : *Techniques de l'ingénieur Composants optoélectroniques TIB451DUO.e4061* (2013) (cf. p. 10, 11).
- [133] C. D. TRAN. « Principles, Instrumentation, and Applications of Infrared Multispectral Imaging, An Overview ». Dans : *Analytical Letters* 38 (5 2005), p. 735–752 (cf. p. 12).
- [134] B. VIAL et al. « Adaptive perfectly matched layer for Wood's anomalies in diffraction gratings ». Dans : *Opt. Express* 20.27 (2012), p. 28094–28105 (cf. p. 37).
- [135] B. VIAL et al. *Analyse spectrale de réseaux de diffraction par la méthode des éléments finis : décomposition modale du champ électromagnétique diffracté*. Contributed talk. Marseille, France, 2012 (cf. p. 93).
- [136] B. VIAL et al. *Analysis of diffraction gratings via their quasi-modes*. Contributed talk. Pula, Croatia, 2012 (cf. p. 85).
- [137] B. VIAL et al. « Analysis of diffraction gratings via their resonances ». Dans : sous la dir. de D. N. CHIGRIN. T. 1398. 1. Contributed talk. AIP, 2011, p. 109–111 (cf. p. 78).
- [138] B. VIAL et al. *Engineering eigenmodes in open microstructured resonators for far infrared filtering applications*. Poster session. Saint-Étienne, France, 2012 (cf. p. 125).
- [139] B. VIAL et al. « Resonances determination in microstructured films embedded in multilayered stacks ». Dans : *Proc. SPIE 8168 : Advances in Optical Thin Films IV*. Poster session. Marseille, France, 2011 (cf. p. 46).
- [140] B. VIAL et al. « Transformation optics PML and quasi-mode analysis : Application to diffraction gratings ». Dans : sous la dir. de D. N. CHIGRIN. T. 1475. 1. Contributed talk. AIP, 2012, p. 89–91 (cf. p. 22).
- [141] G. VINCENT. « Réseaux métalliques sub-longueurs d'onde, applications à l'optique infrarouge. » Thèse de doct. l'université d'Orsay – PARIS XI, 2008 (cf. p. 14).
- [142] C. M. WANG et al. « Angle-Independent Infrared Filter Assisted by Localized Surface Plasmon Polariton ». Dans : *IEEE Photonics Technology Letters* 20 (juil. 2008), p. 1103–1105 (cf. p. 117).
- [143] S. S. WANG et R. MAGNUSSON. « Theory and applications of guided-mode resonance filters ». Dans : *Appl. Opt.* 32.14 (1993), p. 2606–2613 (cf. p. 17).
- [144] K. WATANABE. « Numerical integration schemes used on the differential theory for anisotropic gratings ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 19 (2002), p. 2245–2252 (cf. p. 18).
- [145] R. WOOD. « On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum ». Dans : *Proceedings of the Physical Society of London* 18 (1902), p. 269–275 (cf. p. 16, 37).
- [146] T. XU et al. « Plasmonic nanoresonators for high-resolution colour filtering and spectral imaging ». Dans : *Nat Commun* 1 (août 2010), p. 59– (cf. p. 14).

-
- [147] Y. T. Y. OHKAWA et M. KOSHIBA. « Analysis of anisotropic dielectric grating diffraction using the finite-element method ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996), p. 1006–1012 (cf. p. 18).
- [148] R. YANG et al. « Analytical model for the transmission of electromagnetic waves through arrays of slits in perfect conductors and lossy metal screens ». Dans : *J. Appl. Phys.* 109.10, 103107 (2011), p. 103107 (cf. p. 60).
- [149] K. YEE. « Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media ». Dans : *IEEE Trans. Ant. Prop.* AP-14 (1966), p. 302–307 (cf. p. 18).
- [150] Z. ZHANG et al. « Dependence of leaky mode coupling on loss in photonic crystal fiber with hybrid cladding ». Dans : *Opt. Express* 16.3 (2008), p. 1915–1922 (cf. p. 22).
- [151] J. ZHU et Y. Y. LU. « Leaky Modes of Slab Waveguides—Asymptotic Solutions ». Dans : *J. Lightwave Technol.* 24.3 (2006), p. 1619 (cf. p. 20).
- [152] F. ZOLLA et R. PETIT. « Method of fictitious sources as applied to the electromagnetic diffraction of a plane wave by a grating in conical mounts ». Dans : *J. Opt. Soc. Am. A* 13 (1996), p. 796–802 (cf. p. 18).
- [153] F. ZOLLA et al. « Foundations of photonic crystal fibres ». Dans : 2^e éd. Imperial College Press, 2012 (cf. p. 20, 22, 32, 57).

A

absorbeur, réseau 111, 121
 adjoint, opérateur 79
 anisotropie 30
 atmosphère, absorption de l' 8

B

bolomètre 11

C

caractérisation 149
 corps noir 7
 couplage, coefficient de 81

D

détecteur infrarouge 9
 quantique 10
 thermique 10
 résistif, *voir* bolomètre
 diffraction
 d'une onde plane par un réseau
 bidimensionnel, 91
 monodimensionnel, 27
 efficacités de 35
 réseau de 15

E

énergie, bilan d' 36

F

filtrage
 diffractif 17
 coupe bande en réflexion, 111, 121

 passe bande en transmission, 104,
 107, 116, 127
 interférentiel 14
 formulation faible 33

L

Lagrange, éléments de 35

M

Maxwell,
 équations de 29
 opérateur de 44
 méthode modale 77
 méthodes numériques 18, 22
 microbolomètre *voir* bolomètre
 mode à fuites 20
 multispectral
 filtrage 13
 imagerie 13

P

pertes Joule 36
 Planck, loi de 7
 plasmons polaritons de surface 72
 PML 32
 adaptatives 37
 uniformes 32
 polarisation 29
 problème spectral
 pour un réseau bidimensionnel
 sans dispersion, 97
 pour un réseau monodimensionnel
 avec dispersion, 62
 sans dispersion, 44
 produit interne 78

R

radiation,
 modes de 46

problème de	30
réseau	
d'ouvertures coaxiales.....	116, 127
de plots métalliques	104
de plots métalliques sur bi-couche di- électrique.....	107
de plots métalliques sur bi-couche di- électrique/métal.....	111, 121
résonance, phénomène de	19

S

spectre	
continu	45
de l'opérateur de Maxwell	45
discret	45
spectrométrie	12
spectrophotomètre ... <i>voir</i> caractérisation	

T

tetrachotomie	54
---------------------	----

W

Wien, loi de	7
Wood, anomalies de	36

Ce document a été produit avec le système de composition L^AT_EX.

Version du 13 décembre 2013.

Étude de résonateurs électromagnétiques ouverts par approche modale. Application au filtrage multispectral dans l'infrarouge.

Résumé : L'imagerie infrarouge est aujourd'hui en plein développement de par la production à grande échelle de détecteurs non refroidis. Une des évolutions potentielles pour ces capteurs est d'y intégrer des dispositifs de filtrage optique pour réaliser des images sur plusieurs bandes spectrales, permettant d'extraire différentes informations comme par exemple la composition chimique de la scène observée. Dans ce mémoire, nous discutons des possibilités de réaliser ces fonctions de filtrage spectral par des structures diffractives bi-périodiques dont les motifs sont de taille comparable à la longueur d'onde, ce qui leur confère des propriétés résonantes. Pour ce faire, nous avons développé une approche modale fondée sur la méthode des éléments finis (FEM) adaptée à des structures diffractives de géométrie quelconque. Si l'étude des modes propres dans le cas de domaines bornés est bien connue, elle se révèle beaucoup plus délicate dans le cas non borné, laissant apparaître des quasimodes associés à des valeurs propres complexes. Notre méthode, à travers une transformation géométrique de l'espace, permet de se ramener à un problème borné où l'espace libre est tronqué par des couches parfaitement adaptées (Perfectly Matched Layers, PML). Cette technique qui nous permet de trouver numériquement un nombre arbitraire de valeurs propres a été validée dans le cas scalaire en la comparant avec une méthode de recherche de pôles dans le plan complexe. De plus, nous montrons qu'il est possible de décomposer le champ solution du problème avec sources sur la base réduite des vecteurs propres associés. Ainsi pouvons-nous obtenir les coefficients de couplage d'une onde plane de fréquence, d'incidence et de polarisation arbitraires avec un mode particulier, nous donnant ainsi des informations précieuses sur les conditions d'excitation des résonances du système. Ces méthodes, développées en détail dans le cas scalaire, sont généralisées au cas vectoriel. Nous avons en outre développé un modèle numérique pour prendre en compte la dispersion d'indice dans le cas du problème spectral. De plus nous utilisons une formulation de la FEM adaptée au calcul de la diffraction d'une onde plane par des structures diffractives de géométrie quelconque, et avons développé des PMLs adaptatives pour traiter le cas des anomalies de Wood pour lequel les PMLs classiques deviennent inefficaces. Nous appliquons ensuite ces techniques à la conception de plusieurs structures bi-périodiques destinées à réaliser différentes fonctions de filtrage dans l'infrarouge et à l'étude de leurs propriétés spectrales. Enfin, deux types de filtres, coupe bande en réflexion et passe bande en transmission, ont été fabriqués et caractérisés expérimentalement.

Mots clés : résonances, quasimodes, réseaux de diffraction, éléments finis, filtrage multispectral, infrarouge, métamatériaux, nanophotonique.

Study of open electromagnetic resonators by modal approach. Application to infrared multispectral filtering.

Abstract : Infrared imaging is nowadays growing rapidly due to large-scale production of uncooled detectors. One of the potential evolution of these sensors is to integrate optical filtering capabilities to realize images on several spectral bands, allowing to extract information such as the chemical composition of the observed scene. In this thesis, we discuss the possibilities to realize these filtering functions by bi-periodic diffractive structures patterned at a sub-wavelength scale, which shows a resonant behaviour. To that extent, we have developed a modal approach based on the finite element method (FEM) adapted to diffractive structures of arbitrary geometry. If the modal analysis in unbounded domains is well known, it shows to be much more difficult in the unbounded case, revealing quasimodes associated with complex eigenvalues. Through a geometrical transformation of space, our method allows to treat a bounded problem where the free space is truncated by Perfectly Matched Layers (PML). This technique that allows us to find numerically an arbitrary number of eigenvalues has been validated in the scalar case by comparing it with a pole finding method in the complex plane. In addition, we show that it is possible to expand the solution of the problem with sources on the reduced eigenvectors basis. Thus we can obtain the coupling coefficients of a plane wave of frequency, incidence and arbitrary polarization with a particular mode, giving us valuable information on the conditions of excitation of resonances of the system. These methods, developed in detail in the scalar case, are generalized to the vector case. We also developed a numerical model to take into account index dispersion in the case of the spectral problem. In addition we use a FEM formulation suitable for the calculation of the diffraction of a plane wave by diffractive structures of arbitrary geometry, and have developed adaptive PMLs to treat the case of Wood anomalies for which the classical PMLs become ineffective. We then apply these techniques to the design of several bi-periodic structures realizing different filtering functions in the infrared and study their spectral properties. Finally, two types of filters, band cut in reflexion and bandpass in transmission, have been fabricated and experimentally characterized.

Keywords : resonances, quasimodes, diffraction gratings, finite elements, multispectral filtering, infrared, metamaterial, nanophotonics.