



HAL
open science

Méthode des Eléments Finis pour les nanostructures métalliques : application au filtrage spectral dans le visible et extension au calcul modal en présence de dispersion

Yoann Brûlé

► **To cite this version:**

Yoann Brûlé. Méthode des Eléments Finis pour les nanostructures métalliques : application au filtrage spectral dans le visible et extension au calcul modal en présence de dispersion. Optique [physics.optics]. Ecole Centrale Marseille, 2016. Français. NNT : 2016ECDM0008 . tel-01496132

HAL Id: tel-01496132

<https://theses.hal.science/tel-01496132>

Submitted on 27 Mar 2017

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 de Marseille
pour obtenir le grade de Docteur

École Doctorale : Physique et Sciences de la Matière
Spécialité : Optique, Photonique et Traitement d'Image

**MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS
POUR LES NANOSTRUCTURES MÉTALLIQUES:
APPLICATION AU FILTRAGE SPECTRAL DANS LE VISIBLE ET
EXTENSION AU CALCUL MODAL EN PRÉSENCE DE DISPERSION**

Yoann BRÛLÉ

Institut Fresnel (Équipes ATHÉNA et EPSILON)—CNRS

Soutenue publiquement le 18 novembre 2016 devant un jury composé de

Anne-Sophie	BONNET-BENDHIA	Rapporteur	DR CNRS—ENSTA ParisTech
Olivier	GAUTHIER-LAFAYE	Rapporteur	CR CNRS—LAAS-CNRS
Béatrice	DAGENS	Examineur	DR CNRS—C2N
David	BARAT	Examineur	Dr. Ingénieur—Groupe PSA
Philippe	LALANNE	Examineur	DR CNRS—LP2N
Boris	GRALAK	Directeur de Thèse	CR CNRS—Institut Fresnel

Membre Invité

Guillaume	DEMÉSY	Co-directeur de Thèse	MC—Aix Marseille Université
-----------	--------	-----------------------	-----------------------------

Cette page a été intentionnellement laissée vide.

À Clara

TABLE DES MATIÈRES

Introduction	1
1 La méthode des éléments finis pour les problèmes de diffraction des ondes électromagnétiques	7
Introduction au chapitre I	8
1.1 Les équations de Maxwell	11
1.2 La formulation faible adaptée aux problèmes de diffraction	13
1.3 Application de la méthode FEM en champ diffracté: validation et cas limites . . .	33
Conclusions du chapitre I	41
2 Application de la méthode au filtrage spectral dans le visible	43
Introduction au chapitre II	44
2.1 Fonction de filtrage	47
2.2 Fonction de focalisation et de réflexion non spéculaire	92
Conclusions du chapitre II	96
3 Extension de la FEM à l'analyse modale de structures électromagnétiques dispersives et dissipatives	99
Introduction au chapitre III	100
3.1 Le problème spectral en présence de dispersion	105
3.2 Validation numérique de la méthode	115
3.3 Application aux cristaux photoniques bidimensionnels métalliques de Drude . . .	122
3.4 Étude spectrale des structures ouvertes: introduction de PMLs dispersives	145
Conclusions du chapitre III	169
Conclusions et Perspectives	171
Annexes	175

A Spectres de réseaux de nanoparticules métalliques en or.	177
A.1 Spectres de réseaux mono-dimensionnels de rubans d'or	177
A.2 Spectres de réseaux bi-dimensionnels de nanocylindres d'or à section circulaire .	191
B Calcul de dyades de dépolarisation statique	203
B.1 Introduction	203
B.2 Fonction de Green statique du dioptre plan.	203
B.3 Calcul de la dyade de dépolarisation statique pour un cylindre droit à section circulaire dans le vide.	207
B.4 Calcul de la dyade de dépolarisation statique pour un cylindre droit à section elliptique dans le vide.	211
B.5 Calcul de la dyade de dépolarisation d'un cylindre droit à section elliptique posé sur un dioptre plan.	214
Bibliographie	221

REMERCIEMENTS

“Les étoiles sont éclairées pour que chacun puisse un jour retrouver la sienne.”

Antoine de Saint-Exupéry / Le Petit Prince

Les travaux présentés dans cette Thèse ont été réalisés dans le cadre du Projet ANR Planissimo qui est mené en collaboration entre deux laboratoires de recherche, le C2N (Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies) et l’Institut Fresnel ainsi que le groupe industriel Groupe PSA.

Mes premiers remerciements se dirigent vers mes deux directeurs de Thèse, Guillaume Demésy, Enseignant-Chercheur de l’université d’Aix-Marseille au sein de l’équipe ATHENA de l’Institut Fresnel et Boris Gralak, Chargé de Recherche du CNRS au sein de l’équipe Epsilon. Sans leur encadrement consciencieux et complémentaire, regorgeant de qualités tant humaines que scientifiques, ces travaux n’auraient jamais pu voir le jour. Je leur exprime ma plus profonde gratitude pour leur disponibilité, dont j’ai certainement abusé, et leur bienveillance, qui m’ont permis de ne pas trop me disperser au cours de ces trois années.

Au sein de l’Institut Fresnel, Anne-Laure Fehrembach, Gérard Tayeb et Evgueni Popov de l’équipe CLARTÉ, ont su me faire partager leurs connaissances de l’électromagnétisme. Je tiens à les remercier du temps, des conseils et des discussions passionnantes qu’ils m’ont accordés. J’exprime aussi ma reconnaissance à André Nicolet de l’équipe ATHENA pour tous les éclaircissements qu’il a pu me fournir en fin connaisseur des arcanes de la Méthode des Éléments Finis. Je tiens également à remercier Thomas Begou, Christophe Hecquet ainsi que le reste de l’équipe RCMO d’avoir réalisé le filtre nécessaire au démonstrateur du projet. Enfin, je tiens à remercier Stefan Enoch de m’avoir accueilli au sein de son laboratoire.

Au C2N, je tiens tout d’abord à remercier Béatrice Dagens, porteuse du projet Planissimo et également membre du jury de cette Thèse. Sa capacité à allier une compréhension fine des phénomènes physiques, à ses connaissances technologiques de fabrication ainsi qu’à ses compétences en gestion de projet, a été la source d’une ambiance de travail collaboratif des plus efficaces et agréables. Je remercie également Matthias Grangier et Hervé Bertin de toutes les discussions fructueuses que nous avons eues concernant la fabrication et la caractérisation

des échantillons fabriqués par leur soins. Je remercie enfin Philippe Gogol de m'avoir accueilli chaleureusement dans son bureau pendant une semaine au sein du C2N et de m'avoir fait visiter les moyens de fabrication et de caractérisation du laboratoire.

Du côté du Groupe PSA, je remercie David Barat, Docteur Ingénieur et membre du jury de cette Thèse, de m'avoir permis de bien comprendre les besoins techniques des composants optiques innovants nécessaires au bon fonctionnement des systèmes de réalité augmentée des Viseurs Tête Haute pour l'automobile, ce qui a été primordial pour conduire l'optimisation du design des filtres optiques réalisée au cours de ces travaux.

D'autres collaborations scientifiques annexes ont eu lieu autour de travaux liés à ceux de cette Thèse et notamment une avec l'Unité Mixte de Recherche POEMS où j'ai eu la chance de rencontrer Anne-Sophie Bonnet-BenDhia, membre du jury de cette Thèse et également rapporteur de ces travaux. Je tiens à la remercier de toute l'attention qu'elle a portée à la lecture de ce manuscrit ainsi que de ses nombreuses remarques qui ont contribué à améliorer la qualité de celui-ci. Au sein de la même unité, je remercie également Camille Carvalho et Christophe Hazard de toute l'aide qu'ils ont pu me fournir.

Je remercie Philippe Lalanne de m'avoir fait l'honneur de présider mon jury de Thèse et de l'enthousiasme qu'il a su me communiquer à l'égard de mes travaux, en acceptant notamment de me recevoir au LP2N à Bordeaux. Je remercie également Rémi Faggiani, son Doctorant, de m'avoir fourni des résultats provenant de ces simulations à l'issue de cette visite.

Je remercie Olivier Gauthier-Lafaye, du LAAS à Toulouse, d'avoir accepté de faire partie de mon jury et également d'avoir rapporté les travaux de cette Thèse.

Je souhaite remercier et témoigner mon amitié aux personnes sans qui l'expérience de vie au labo n'aurait pas été aussi agréable et ouverte sur le monde. Alberto, Hilton, Paulina, Carolina, Louwrens, Sarah, Carsten, Wiktor, Susmita, Juan, Naveen, Simona, Martin, Marco, Ugo, Callum, Vincent, Benjamin, Mauricio, Jessica, David, Maël, Maëlle, Quentin, Xavier, Olivier,... votre compagnie m'est et me sera toujours des plus enrichissantes.

Un merci chaleureux à tous ceux qui ont contribué à mon épanouissement au cours de ces trois années ensoleillées par le climat phocéen: Jade, Julien et Léo, Matthieu, Sophie et Romain, Anaïs et Laurent, Manue, Rémi et Jade, Alice, Fred, Zoé, Colin, Magali et Raphaël, Aude, Amaury et Timothée...

Merci à mes amis et notamment Ludo, Pilly et Zabeth, J.-B. Augros, la J.-B.H., Nico S., Arno, Jacky, Le Gui, Alex, Nico B., ...

Merci à mes parents, ma sœur et mon frère de leur éternel soutien et pour leur relecture de ce manuscrit qui leur a valu quelques maux de tête.

Je remercie enfin tendrement Barbara pour son accompagnement affectueux au cours de la rédaction de ce manuscrit.

INTRODUCTION

Les nanostructures métalliques permettent de manipuler efficacement la lumière à une échelle inférieure à celle de sa longueur d'onde [18]. Basées sur l'utilisation de l'interaction résonante entre un rayonnement électromagnétique et les électrons libres situés à la surface d'un objet métallique placé dans un environnement diélectrique (appelé plasmon de surface), ces structures donnent lieu à de multiples applications potentielles. De manière non exhaustive, on peut citer les domaines de la spectroscopie de fluorescence, de la Spectroscopie Raman [19–21], de la génération d'effets non-linéaires [22, 23] (effet Kerr, génération de seconde harmonique...), de la photovoltaïque [24, 25], des biocapteurs [26], et aussi du filtrage optique [27–33]. Cette dernière application de la “plasmonique” n'est pas nouvelle. Sans en comprendre les mécanismes, dès l'antiquité, la coloration des verres était effectuée par évaporation de métaux, en réalité nanoparticulaires, dans une matrice en silice. Ainsi suivant la forme et la densité des nanoparticules métalliques ainsi mêlées au verre, celui-ci prenait différentes teintes et couleurs qui variaient également en fonction des conditions de son éclairage. Par exemple, la Coupe de Lycurgue, un magnifique objet décoratif romain datant du IV^{vième} siècle après J.-C., faite de verre contenant un alliage de nanoparticules d'or et d'argent, révèle une couleur rouge quand elle est éclairée par derrière (en “transmission”) tandis qu'elle apparaît verte en étant éclairée de face (en “réflexion”, voire les photographies de la figure 0.1).



Fig. 0.1 – La Coupe de Lycurgue (IV^{vième} siècle - British Museum) éclairée de face à gauche et par derrière à droite. Photographies: British Museum Images

L'utilisation de nanostructures métalliques permet donc de manipuler et filtrer différemment la lumière en fonction de différents paramètres tels que le matériau métallique employé, les dimensions et géométries des nanoparticules, leurs densités et leurs organisations dans l'espace ainsi que les conditions d'éclairement de celles-ci. C'est pourquoi elles sont pressenties comme pouvant être utilisées dans la réalisation de composants optiques planaires, par exemple pour des applications dans le domaine de la réalité augmentée des Visuels Tête Haute (VTH) pour l'automobile. En effet, dans ce domaine d'application, les composants optiques employés doivent posséder deux fonctions principales: une fonction de filtrage optique, permettant de réfléchir la source lumineuse de l'image à projeter et ceci tout en gardant des propriétés de transparence globale pour que le conducteur puisse voir son environnement de conduite, et une fonction de focalisation, permettant de former l'image virtuelle de la source dans le champ de vision du conducteur et ceci sans déformer la scène extérieure de conduite. La figure suivante 0.2 présente ainsi un schéma de principe du composant optique planaire à réaliser en condition d'utilisation.

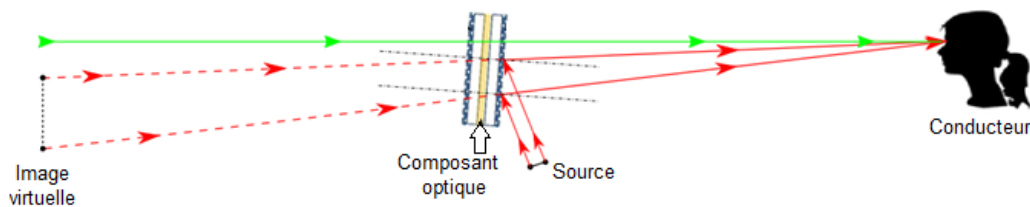


Fig. 0.2 – Schéma de principe du composant optique idéal à réaliser en condition d'utilisation. Le rayon en vert représente un rayon lumineux en provenance de la scène extérieure de conduite traversant le composant optique qui apparaît comme transparent pour le conducteur. Les rayons rouges représentent des rayons lumineux en provenance de la source. Le composant optique permet de les réfléchir et de former une image virtuelle de la source qui vient se superposer à la scène extérieure de conduite observée par le conducteur.

Afin de mener à bien la réalisation de tels composants, une étape préalable de modélisation numérique du comportement électromagnétique des nanostructures métalliques est nécessaire. L'Institut Fresnel, laboratoire d'accueil de cette Thèse de Doctorat, possède une expérience significative dans ce domaine avec des développements effectués pour plusieurs méthodes numériques dédiées à la modélisation des phénomènes électromagnétiques [1], tels que la méthode de transformée de coordonnées (ou méthode C [34, 35]), la méthode modale de Fourier [36] (plus connue sous la dénomination anglaise suivante *Rigorous Coupled Wave Method RCWA* [37, 38]), la méthode modale exacte [39–41], la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD [42, 2]), la méthode des harmoniques sphériques combinée aux "lattice sums" [43], la méthode différentielle [44], la méthode intégrale [45], la méthode des sources fictives [46] et la Méthode des Éléments Finis (FEM, [47–49]). Parmi toutes les méthodes précédemment citées, la FEM se démarque par sa versatilité vis-à-vis de la géométrie des structures pouvant être simulées. De plus, les développements récents de cette méthode, effectués au sein de l'Institut, en ce qui concerne la modélisation des nanostructures périodiques de l'espace

(réseaux de diffraction, cristaux photoniques, métamatériaux), sont applicables à la conception des composants optiques réalistes requis pour l'application VTH. En effet, l'utilisation de structures spatialement périodiques de nanoparticules métalliques permet d'utiliser les propriétés des réseaux de diffraction ainsi constitués pour réfléchir la lumière de façon cohérente dans les différents ordres de diffraction réfléchis, et ainsi de réaliser une fonction de filtrage en réflexion cohérente nécessaire à la réalisation de la fonction de focalisation du composant optique à concevoir. Le design du composant peut alors être scindé en deux parties, l'une pour le filtrage, l'autre pour la focalisation. L'aspect filtrage sera alors traité par l'utilisation de réseaux de nanoparticules métalliques sub-longueur d'onde opérant dans l'ordre spéculaire réfléchi, et l'aspect focalisation, par l'emploi de composants optiques planaires plus classiques tels que des lentilles de Fresnel. L'utilisation de nanostructures électromagnétiques (diélectriques ou métalliques) pour la réalisation de la fonction de focalisation a également été envisagée. En effet, les métamatériaux permettent de contrôler les champs électromagnétiques [50] à l'échelle sub-longueur d'onde. Basés sur le concept de réfraction négative [51], ces métamatériaux permettent ainsi la réalisation potentielle de capes d'invisibilité [52, 53] ou de super-lentilles qui focalisent un point source en un point image [54]. Leurs déclinaisons surfaciques appelées métasurfaces permettent de contrôler localement la phase discontinue d'une onde plane à leurs interfaces [55] et ainsi de pouvoir réaliser des lentilles plates qui permettent de focaliser une onde plane en un point image [56–61]. Néanmoins, bien que permettant potentiellement d'obtenir des résolutions d'image sub-longueur d'onde, ce n'est pas cette solution qui a été envisagée à court-terme. Nous en expliquerons les raisons plus loin, quand cet aspect de focalisation sera traité 2.2.

C'est donc dans ce contexte que s'inscrit cette Thèse de Doctorat qui vise à utiliser et développer la FEM afin de mener à bien le design de composants optiques de filtrage basés sur l'utilisation de nanoparticules métalliques organisées en réseaux de diffraction.

Dans un premier chapitre (1), la formulation FEM dite en "champ diffracté" pour les réseaux de diffraction mono et bidimensionnels développée au cours de la Thèse de Guillaume Demésy [125] sera rappelée et la validité des résultats de son implémentation sera testée par comparaison avec les résultats de méthodes numériques complètement indépendantes sur deux configurations électromagnétiques extrêmement résonantes. La première consiste en un réseau bidimensionnel de nanocônes d'or déposé sur un substrat également en or et illuminé dans des conditions d'absorption totale de la lumière incidente. La seconde est un réseau bidimensionnel de nanocylindres diélectriques éclairé en incidence normale à une longueur d'onde correspondant à un zéro de la réflexion du réseau. Cette seconde configuration montrera les limites de la FEM en termes de convergence.

Dans le deuxième chapitre (2), l'implémentation de la formulation FEM en "champ diffracté" sera appliquée à la conception des composants optiques de filtrage requis pour l'application

VTH. Les résultats de la FEM ayant été validés dans la configuration extrêmement résonante du réseau de nanocônes d'or du chapitre 1, cette méthode a pu être appliquée aux configurations moins résonantes étudiées dans ce chapitre. Ainsi, une étude paramétrique sera conduite sur deux types de réseaux de nanoparticules métalliques:

- des réseaux monodimensionnels de rubans métalliques qui, selon la polarisation de la lumière incidente, sont globalement transparents ou réfléchissants pour une partie du spectre lumineux et,
- des réseaux bidimensionnels de nanocylindres métalliques qui conservent également des propriétés de transparence globale et permettent de réfléchir deux parties distinctes du spectre, toujours en fonction de la polarisation de la source lumineuse.

L'étude paramétrique explorera notamment l'impact des matériaux nécessaires à la fabrication, du matériau métallique employé, de la périodicité des réseaux de diffraction, des dimensions des nanoparticules métalliques et des conditions d'éclairement des structures (polarisation et conditions d'incidence de la lumière). Elle sera alors utilisée afin de conduire au design de différentes structures optimisées pour l'application VTH, à savoir quatre configurations de réseaux monodimensionnels de rubans d'argent et deux configurations de réseaux bidimensionnels de nanocylindres d'argent à section elliptique. Enfin, concernant la fonction de focalisation, un agencement astucieux de différents composants d'optiques classiques (lentilles et prismes) et du composant de filtrage dont le design a été optimisé par la FEM sera présenté. Cet agencement permet de pouvoir focaliser l'image provenant de la source de l'afficheur VTH tout en ne déformant pas l'image de la scène extérieure passant au travers de ce dispositif.

Enfin, dans le dernier chapitre (3), il est tentant d'effectuer une analyse paramétrique de ce même type de structures, basée sur une étude de ses résonances intrinsèques [62]. À cet effet, une extension de la FEM au calcul modal des structures électromagnétiques dispersives et dissipatives sera développée. Les matériaux métalliques étant intrinsèquement électriquement dispersifs et dissipatifs, l'opérateur de Maxwell associé au problème aux valeurs propres à résoudre pour effectuer l'analyse modale de ces structures, est non-linéaire en fréquence et non-Hermitien. Ainsi, l'implémentation numérique au travers la FEM de ce problème aux valeurs propres apparaît comme extrêmement compliquée à aborder. Afin de linéariser cet opérateur vis-à-vis de la fréquence, le formalisme dit de "champs auxiliaires" introduit par A. Tip dès 1998 [63, 64], et plus particulièrement une variante de ce formalisme dite "de résonance", développée par la suite par Boris Gralak [126], basée sur une modélisation de la permittivité relative des métaux comme somme de résonances de Drude et de Drude-Lorentz, sera introduit. Ce "formalisme de résonance" sera implémenté numériquement aux éléments finis et les résultats de cette implémentation seront testés sur différentes configurations électromagnétiques bidimensionnelles. Dans un premier temps, nous considérerons une cavité fermée à deux domaines dont la permittivité relative d'un des domaines est modélisée par une

résonance de Drude-Lorentz. Les spectres obtenus numériquement à l'aide de la FEM sur cette configuration seront comparés aux spectres obtenus semi-analytiquement. Dans un second temps, la méthode sera appliquée à l'étude de cristaux photoniques bidimensionnels de tiges métalliques de Drude à section carrée et circulaire. Les résultats de la FEM sur ces cristaux seront comparés à des résultats existants dans la littérature, permettant ainsi de valider les résultats de la méthode et de conduire une étude sur les spectres de ces cristaux photoniques. Enfin dans un dernier temps, dans le but d'une future extension de la méthode développée à l'étude des structures ouvertes, une étude concernant l'impact de couches parfaitement adaptées (PMLs), sur le spectre, obtenu analytiquement puis numériquement par la FEM, d'une structure électromagnétique relativement simple sera conduite.

CHAPITRE 1

LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS POUR LES PROBLÈMES DE DIFFRACTION DES ONDES ÉLECTROMAGNÉTIQUES

INTRODUCTION AU CHAPITRE I

Comme mentionné précédemment, les méthodes de modélisation numérique de la diffraction des ondes électromagnétiques sont nombreuses. Nous avons déjà cité en introduction les méthodes les plus communément usitées pour le calcul du champ électromagnétique diffracté par les réseaux de diffraction monodimensionnels telles que la méthode modale de Fourier (FMM [36] ou RCWA [37, 38]), la méthode différentielle [44], très proche de la méthode précédente ou la méthode C [34, 35]. Toutes ces méthodes sont basées sur la transposition du problème consistant à résoudre les équations de Maxwell en régime harmonique, à la résolution d'un problème défini dans l'espace de Fourier spatial discret. Le champ électromagnétique est projeté sur un ensemble de fonctions de base afin de réduire les équations aux dérivées partielles de Maxwell (les équations aux dérivées partielles mises en jeu dans la description du comportement physique des structures) à un ensemble d'équations différentielles ordinaires. Cette projection est effectuée en deux étapes. Premièrement, le champ électromagnétique d'un réseau de diffraction étant quasi-périodique, il est décomposé en série de Rayleigh. Deuxièmement, les coefficients périodiques des équations de Maxwell (la fonction permittivité dans le cas de la FMM et de la méthode différentielle et la fonction définie par le profil géométrique du réseau dans le cas de la méthode C) sont décomposés en série de Fourier spatiale. Lorsque ces coefficients périodiques sont discontinus, beaucoup d'harmoniques de Fourier sont nécessaires pour obtenir une convergence des résultats. Ainsi dans le cas de la méthode-C, les profils de réseaux lamellaires sont impossibles à modéliser. Dans le cas de la FMM et de la méthode différentielle, des problèmes peuvent survenir lorsque le contraste de permittivité des matériaux est élevée. Bien que des solutions existent pour contourner ces difficultés, il est possible de se tourner vers une méthode de modélisation complètement différente, à savoir la méthode des éléments finis (FEM). Cette méthode d'analyse numérique permet de résoudre des équations aux dérivées partielles à la base de la modélisation de nombreux problèmes physiques. En électromagnétisme, comme mentionné précédemment, ces équations aux dérivées partielles sont les équations de Maxwell. La FEM possède l'avantage de pouvoir décrire le comportement physique d'objets possédant une géométrie très complexe de par l'utilisation de maillages non structurés de l'espace. Ainsi, elle permet théoriquement de modéliser la majeure partie des structures électromagnétiques d'intérêt, ainsi que celles possédant des caractéristiques difficiles à modéliser par d'autres méthodes numériques (les structures comportant des matériaux à

gradient d'indice par exemple). Elle est également adaptée à la résolution de problèmes modaux qui nous intéresseront plus loin (*c.f.* chapitre 3). Néanmoins, cette versatilité a un coût qui se traduit par les demandes de cette méthode en ressources de calcul. En effet, la taille du système à résoudre est liée au nombre de tétraèdres présents au sein du maillage de la structure. Afin que la convergence des calculs soit correcte, il est nécessaire que les calculs soient effectués sur, au moins, deux ou trois nœuds du maillage par période du champ électromagnétique au sein du domaine considéré. Ainsi, les structures électromagnétiques possédant des résonances intrinsèques au caractère ondulatoire de la modélisation du champ électromagnétique, les longueurs d'onde à ces résonances, dans les différents domaines de la structure, peuvent devenir très faibles et le nombre d'inconnues associées au problème à résoudre, très élevé. Malgré cette forte exigence en termes de ressources, c'est cette méthode qui a été retenue pour la modélisation numérique des structures électromagnétiques étudiées tout au long de cette Thèse.

Dans ce chapitre, nous rappellerons, dans un premier temps, les équations de Maxwell qui sont à la base de toute modélisation électromagnétique. Par la suite, deux formulations rigoureuses de la FEM, précédemment développées au sein de l'Institut Fresnel, adaptées aux problèmes de diffraction des réseaux périodiques mono dimensionnels et bidimensionnels seront exposées. Le concept de Couches Parfaitement Adaptées (Perfectly Matched Layer PML) qui permet de simuler l'espace libre sera également introduit. Enfin, la FEM et ces deux formulations dites en "champ diffracté" seront appliquées à deux types de structures électromagnétiques complexes:

- des réseaux bidimensionnels de nano-cônes d'or dont l'utilisation peut conduire à une exaltation géante ultra localisée des champs électromagnétiques [65],
- des réseaux bidimensionnels de cylindres diélectriques pouvant être utilisés pour une application de filtrage à forte tolérance angulaire [66].

La validité des résultats ainsi obtenus sera ensuite étudiée en confrontant ceux-ci à des résultats obtenus à l'aide de méthodes de simulation complètement indépendantes, à savoir la méthode-C et la FMM, et ceci dans le but de pouvoir valider l'applicabilité de la FEM et de ces deux formulations à l'étude de tout type de réseaux mono et bidimensionnels de nanoparticules métalliques. Les limitations de la méthode précédemment évoquées seront également exposées.

Contenu du Chapitre

1.1	Les équations de Maxwell	11
1.1.1	Les équations de Maxwell macroscopiques en régime temporel	11
1.1.2	Les équations de Maxwell macroscopiques en régime harmonique	12
1.2	La formulation faible adaptée aux problèmes de diffraction	13
1.2.1	Diffraction par des réseaux mono-dimensionnels : Formulation scalaire de la FEM	13
1.2.1.1	Description du problème et notations	13
1.2.1.2	Découplage des champs	16
1.2.1.3	Problème de diffraction et problème radiatif à sources localisées équivalent	17
1.2.1.4	Couches Parfaitement adaptées (PML)	19
1.2.1.5	Formulation faible	21
1.2.1.6	Maillage et éléments finis	23
1.2.1.7	Bilan énergétique du réseau de diffraction	25
1.2.2	Diffraction par des réseaux bi-dimensionnels : Formulation vectorielle de la FEM	27
1.2.2.1	Description du problème et notations	27
1.2.2.2	Problème de diffraction et problème radiatif à sources localisées équivalent	28
1.2.2.3	Formulation faible	30
1.2.2.4	Maillage et éléments finis	30
1.2.2.5	Bilan énergétique du réseau de diffraction	31
1.3	Application de la méthode FEM en champ diffracté: validation et cas limites . . .	33
1.3.1	Validation des résultats de la FEM pour les résonances intervenant dans un réseau bi-périodique de nano-cônes d'or	33
1.3.1.1	Géométrie, conditions d'éclairement et méthodes de simulation	34
1.3.1.2	Absorption totale de la lumière à la résonance : validation des résultats FEM	35
1.3.2	Limites de la FEM en champ diffracté: Résultats obtenus la résonance d'un réseau bi-périodique de cylindres diélectriques	37
1.3.2.1	Géométrie, conditions d'éclairement et méthode de simulation	38
1.3.2.2	Résonance du réseau de cylindres diélectriques: limites des résultats obtenus via la FEM	38

1.1 Les équations de Maxwell

Les équations de Maxwell décrivent le comportement du rayonnement électromagnétique. Cette section constitue un rappel de ces équations en régimes temporel et harmonique ainsi que des équations constitutives qui modélisent l'interaction du rayonnement électromagnétique avec des objets macroscopiques.

1.1.1 Les équations de Maxwell macroscopiques en régime temporel

Les champs électromagnétiques sont classiquement décrits par quatre champs vectoriels dépendant de l'espace \mathbf{r} et du temps t : \mathbf{E} le champ électrique, \mathbf{H} le champ magnétique, \mathbf{D} l'induction électrique (ou déplacement) et \mathbf{B} l'induction magnétique. Les équations de Maxwell relient les quatre champs électromagnétiques à leurs sources macroscopiques ρ (densité de charges libres) et \mathbf{J} (densité de courants libres) qui dépendent elles aussi de l'espace \mathbf{r} et du temps t :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}, t), & \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= 0, & \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \mathbf{J}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (1.1.1)$$

En présence d'un matériau macroscopique, les champs $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ sont reliés aux champs $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ à travers les relations constitutives :

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t), & \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^t ds \chi_e(\mathbf{r}, t-s) \mathbf{E}(\mathbf{r}, s), \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{M}(\mathbf{r}, t), & \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \int_{-\infty}^t ds \chi_m(\mathbf{r}, t-s) \mathbf{H}(\mathbf{r}, s). \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

avec ϵ_0 la permittivité du vide et μ_0 la perméabilité du vide. Les champs de polarisation \mathbf{P} et de magnétisation \mathbf{M} caractérisent la réponse du matériau considéré aux champs électromagnétiques \mathbf{E} et \mathbf{H} à travers la susceptibilité électrique χ_e et la susceptibilité magnétique χ_m . Ils représentent donc les sources microscopiques de champs électromagnétiques du matériau considéré. Il est important de noter que la polarisation et la magnétisation d'un matériau ne sont pas instantanées et qu'elles dépendent des champs \mathbf{E} et \mathbf{H} à tous les instants précédents. Cette conséquence du principe de causalité peut se traduire par les relations suivantes :

$$t < 0 \Rightarrow \chi_{e,m}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1.1.3)$$

1.1.2 Les équations de Maxwell macroscopiques en régime harmonique

Afin d'établir les équations de Maxwell macroscopiques en régime harmonique (fréquence ω), il est tout d'abord nécessaire d'introduire les tenseurs de permittivité diélectrique relative $\epsilon_r(\mathbf{r}, \omega)$ et de perméabilité magnétique relative $\mu_r(\mathbf{r}, \omega)$:

$$\begin{aligned}\epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) &= 1 + \int_{\mathbb{R}} dt \exp[-i\omega t] \chi_e(\mathbf{r}, t) = 1 + \int_0^{\infty} dt \exp[-i\omega t] \chi_e(\mathbf{r}, t), \\ \mu_r(\mathbf{r}, \omega) &= 1 + \int_{\mathbb{R}} dt \exp[-i\omega t] \chi_m(\mathbf{r}, t) = 1 + \int_0^{\infty} dt \exp[-i\omega t] \chi_m(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\tag{1.1.4}$$

En appliquant une transformation de Fourier temporelle (dépendance en $\exp[-i\omega t]$) aux équations constitutives 1.1.2, celles-ci deviennent:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{D}}(\omega, t) &= \epsilon_0 \epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega), \\ \tilde{\mathbf{B}}(\omega, t) &= \mu_0 \mu_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega).\end{aligned}\tag{1.1.5}$$

Les tenseurs de permittivité diélectrique relative $\epsilon_r(\mathbf{r}, \omega)$ et de perméabilité magnétique relative $\mu_r(\mathbf{r}, \omega)$ sont des caractéristiques intrinsèques au matériau considéré et leur dépendance à la fréquence ω traduit le phénomène de dispersion de ce matériau. En appliquant une décomposition de Fourier aux équations de Maxwell 1.1.1, les équations de Maxwell en régime harmonique sont obtenues:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot [\epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)] &= \tilde{\rho}(\mathbf{r}, \omega), & \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) &= i\omega \mu_0 \mu_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega), \\ \nabla \cdot [\mu_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] &= 0, & \nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) &= \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \epsilon_0 \epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega).\end{aligned}\tag{1.1.6}$$

Enfin, en l'absence de sources macroscopiques ($\rho(\mathbf{r}, t) = 0$ et $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0$), ces équations deviennent:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot [\epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)] &= 0, & \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) &= i\omega \mu_0 \mu_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega), \\ \nabla \cdot [\mu_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] &= 0, & \nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) &= -i\omega \epsilon_0 \epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega).\end{aligned}\tag{1.1.7}$$

Par la suite, travaillant en régime harmonique, nous omettrons le tilde de la transformée de Fourier pour alléger les notations. Les dépendances fréquentielle et spatiale des champs seront volontairement omises mais devront être présentes à l'esprit du lecteur. Ainsi les champs électrique et magnétique en régime harmonique seront notés \mathbf{E} et \mathbf{H} .

1.2 La formulation faible adaptée aux problèmes de diffraction

Les formulations FEM décrites dans cette section sont celles développées au cours de la thèse de Guillaume Demésy [125]. Elles permettent le calcul du champ électromagnétique diffracté par des réseaux de diffraction mono- [67] ou bi-dimensionnels [68], dont le motif périodique possède une géométrie arbitraire, imbriqués dans un empilement multi-couches et éclairés par une onde plane de fréquence ω , d'incidence et de polarisation quelconques [69]. Dans un premier temps, la formulation scalaire adaptée à l'étude de la diffraction d'une onde plane par un réseau mono-périodique sera rappelée. La généralisation aux problèmes de diffraction des réseaux bi-dimensionnels (cas vectoriel) sera présentée dans une seconde partie.

1.2.1 Diffraction par des réseaux mono-dimensionnels : Formulation scalaire de la FEM

1.2.1.1 Description du problème et notations

Soient \hat{x} , \hat{y} et \hat{z} , les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonal O_{xyz} .

Le problème physique à résoudre est le suivant :

- le système est invariant suivant l'axe O_z ,
- le réseau considéré est une structure rigoureusement périodique selon l'axe O_x , c'est à dire présentant un nombre infini de périodes suivant cette axe. L'élément diffractif d'une cellule élémentaire possède une géométrie quelconque,
- le réseau est imbriqué dans un empilement multi-couches possédant un nombre fini de couches suivant l'axe O_y ,
- cet empilement multi-couches est placé entre un substrat et un superstrat semi-infinis (domaines non-bornés),
- cette structure est éclairée par une onde plane de fréquence ω , dont les sources sont situées à l'infini, d'incidence non conique (le vecteur d'onde incident est situé dans le plan O_{xy}). Il est alors possible se ramener à deux cas de polarisation scalaires s et p définis ci-après.

L'utilisation de la méthode des éléments finis reposant sur le maillage d'une cellule de dimensions finies, la résolution numérique du problème physique précédemment décrit impose donc de ramener les "problèmes physiques d'infinis" à "un problème numérique fini" par différentes techniques exposées ci-dessous et représentées par la figure 1.2.1:

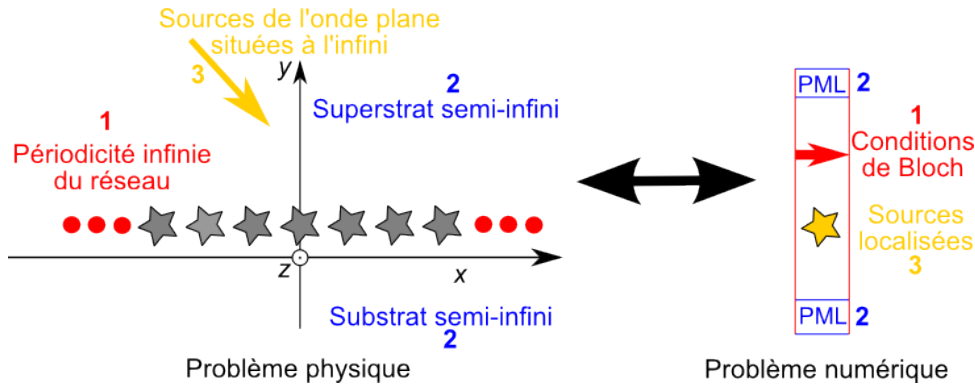


Fig. 1.2.1 – Principe de levée des "problèmes d'infinis" pour l'étude numérique de la diffraction d'une onde plane par un réseau mono-périodique via la FEM.

1. L'utilisation de conditions aux limites de Bloch (ou de quasi-périodicité), rendant compte de la périodicité infinie du réseau suivant O_x , permet de borner la cellule de calcul suivant O_x en ne considérant qu'une seule période du réseau. Il est à noter que l'onde plane incidente étant elle-même pseudo-périodique, l'emploi de ces conditions aux limites est possible.
2. L'utilisation de Couches Parfaitement Adaptées (PML pour Perfectly Matched Layers), qui peuvent être interprétées comme des transformations géométriques complexes adaptées au problème considéré, permettant de transformer les domaines non-bornés que sont le substrat et le superstrat en deux domaines bornés suivant l'axe O_y .
3. La transformation du problème de diffraction, où la source de l'onde plane incidente est située à l'infini, en un problème de rayonnement équivalent, dont les sources sont localisées à l'intérieur de l'élément diffractif du réseau, lui-même contenu dans la cellule de calcul ainsi définie.

Le problème considéré est traité en régime harmonique (dépendance temporelle en $\exp[-i\omega t]$). On note $k_0 := \omega/c$, où $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ est la vitesse de la lumière dans le vide. Les champs électromagnétiques sont représentés par des vecteurs complexes notés \mathbf{E} et \mathbf{H} . Il est supposé que les champs de tenseurs de permittivité relative ϵ_r et de perméabilité relative μ_r sont diagonaux et peuvent s'écrire de la façon suivante:

$$\epsilon_r = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mu_r = \begin{bmatrix} \mu_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.2.1)$$

où ϵ_{xx}, \dots , et μ_{zz} sont des fonctions des variables d'espace x et y à valeurs éventuellement complexes. Le fait que ces fonctions puissent être à valeurs complexes permet de réaliser l'étude de réseaux de diffraction mettant en jeu des matériaux à pertes. Les structures mono-périodiques (de période d) étudiées sont décomposées en plusieurs sous-domaines:

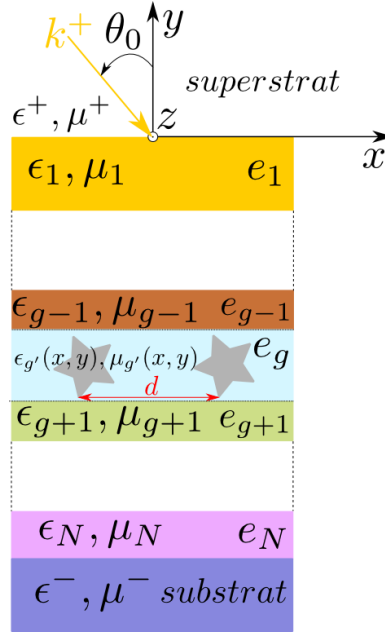


Fig. 1.2.2 – Schéma et notations des réseaux mono-périodique étudiés.

- Le superstrat ($y > y_0$): il est supposé linéaire, homogène, isotrope et sans perte, de permittivité diélectrique relative ϵ^+ et de perméabilité relative μ^+ . On note $k^+ := k_0 \sqrt{\epsilon^+ \mu^+}$ le module du vecteur d'onde correspondant.
- L'empilement multi-couches ($y_0 < y < y_N$): il est constitué de N couches linéaires, homogènes et isotropes, de permittivité diélectrique relative ϵ_n , de perméabilité relative μ_n et d'épaisseur e_n , n entier variant de 1 à N . On note $k_n := k_0 \sqrt{\epsilon_n \mu_n}$ le vecteur d'onde associé à la couche n .
- le domaine modulé périodiquement ($y_{g-1} < y < y_g$): il est imbriqué dans la g^{ime} couche linéaire, homogène et isotrope, de permittivité diélectrique relative ϵ_g et de perméabilité relative μ_g de l'empilement décrit ci-dessus. Il peut être hétérogène et anisotrope. Ainsi ce domaine est décrit par deux champs de tenseurs de permittivité diélectrique relative et de perméabilité relative qui dépendent des variables d'espace x et y : $\epsilon_{g'}(x, y)$ et $\mu_{g'}(x, y)$. La périodicité des motifs de ce domaine correspond à la périodicité du réseau mono-dimensionnel et est notée d .
- Le substrat ($y < y_N$): il est supposé linéaire, homogène et isotrope, de permittivité diélectrique relative ϵ^- et de perméabilité relative μ^- . On note $k^- := k_0 \sqrt{\epsilon^- \mu^-}$.

La structure décrite est représentée schématiquement par la figure 1.2.2. Elle est éclairée par une onde plane incidente de vecteur d'onde $\mathbf{k}^+ = \alpha \hat{\mathbf{x}} + \beta^+ \hat{\mathbf{y}} = k^+ (\sin[\theta_0] \hat{\mathbf{x}} - \cos[\theta_0] \hat{\mathbf{y}})$. Deux cas de polarisation sont considérés:

- le cas de polarisation s : le champ électrique \mathbf{E}_e^0 incident est polarisé linéairement suivant l'axe O_z : $\mathbf{E}_e^0 = A_e^0 \exp[i\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}] \hat{\mathbf{z}}$ où A_e^0 est un nombre complexe quelconque. Le champ

magnétique associé est noté \mathbf{H}_e^0 et vit dans le plan O_{xy} . Le champ électromagnétique associé au champ incident est noté $(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)$ et vaut donc $(\mathbf{E}_e^0, \mathbf{H}_e^0)$.

- le cas de la polarisation p : le champ magnétique \mathbf{H}_m^0 incident est polarisé linéairement suivant l'axe O_z : $\mathbf{H}_m^0 = A_m^0 \exp[i\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}] \hat{\mathbf{z}}$ où A_m^0 est un nombre complexe quelconque. Le champ électrique associé est noté \mathbf{E}_m^0 et vit dans le plan O_{xy} . Le champ électromagnétique associé au champ incident est noté $(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)$ et vaut donc $(\mathbf{E}_m^0, \mathbf{H}_m^0)$.

Ainsi le problème de diffraction à résoudre consiste à trouver l'unique couple de champ électromagnétique (\mathbf{E}, \mathbf{H}) solution des équations de Maxwell en régime harmonique:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\boldsymbol{\mu}_r\mathbf{H}, \quad (1.2.2a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon_0\boldsymbol{\epsilon}_r\mathbf{E}, \quad (1.2.2b)$$

tel que le champ diffracté par la structure $(\mathbf{E}_d, \mathbf{H}_d) := (\mathbf{E} - \mathbf{E}_0, \mathbf{H} - \mathbf{H}_0)$ satisfasse une Condition d'Onde Sortante (COS) et où \mathbf{E} et \mathbf{H} sont des fonctions quasi-périodiques de période d selon l'axe O_x . Pour rappel, une fonction $u(x, y)$ est dite quasi-périodique de période d suivant l'axe O_x s'il existe une fonction $u_{\#}(x, y)$ tel que $u(x, y) = u_{\#}(x, y) \exp[i\alpha x]$ où $u_{\#}(x, y) = u_{\#}(x + d, y)$ est une fonction périodique de période d .

1.2.1.2 Découplage des champs

Dans le cas d'une incidence non conique et pour des matériaux à tenseurs de perméabilité et permittivité relative diagonales (qui correspond au cas considéré), le problème de diffraction est décomposé dans les deux cas fondamentaux de polarisation s et p . Dans le cas de la polarisation s , le champ électrique est recherché et est polarisé linéairement suivant l'axe O_z et $\mathbf{E} = e(x, y)\hat{\mathbf{z}}$. Dans le cas de la polarisation p , le champ magnétique est recherché et est polarisé linéairement suivant l'axe O_z et $\mathbf{H} = h(x, y)\hat{\mathbf{z}}$. En notant:

$$\tilde{\boldsymbol{\delta}} = \begin{bmatrix} \delta_{xx} & 0 \\ 0 & \delta_{yy} \end{bmatrix}, \quad \text{avec } \delta = \{\epsilon, \mu\}, \quad (1.2.3)$$

la matrice 2×2 extraite de $\boldsymbol{\delta} = \{\boldsymbol{\epsilon}_r, \boldsymbol{\mu}_r\}$, les fonctions e et h sont solutions d'équations différentielles similaires. Le problème de diffraction revient à trouver u tel que :

$$\mathcal{L}_{\xi, \chi}(u) := \nabla \cdot (\boldsymbol{\xi} \nabla u) + k_0^2 \chi u = 0 \quad (1.2.4)$$

où

$$u = e, \quad \boldsymbol{\xi} = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_r^T / \det(\tilde{\boldsymbol{\mu}}_r) \quad \text{et} \quad \chi = \epsilon_{zz} \quad (1.2.5)$$

dans le cas de polarisation s et

$$u = h, \quad \boldsymbol{\xi} = \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_r^T / \det(\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_r) \quad \text{et} \quad \chi = \mu_{zz} \quad (1.2.6)$$

dans le cas de polarisation p .

1.2.1.3 Problème de diffraction et problème radiatif à sources localisées équivalent

Le problème de diffraction tel qu'il est décrit par l'équation 1.2.4 n'est pas adapté à la FEM. Afin de ramener ce problème à un problème radiatif, la fonction inconnue u est décomposée en une somme de deux fonctions u_1 et u_2^d :

- u_1 correspond à la solution au problème de diffraction associé au simple empilement multi-couches (sans la région modulée périodiquement) et peut être calculée analytiquement,
- u_2^d est solution d'un problème radiatif dont les sources sont localisées au sein de l'élément diffractif de la région modulée périodiquement.

Soient ξ_1 et χ_1 , le champ de tenseur et la fonction associés au problème de diffraction de l'empilement multi-couches. Soit u_0 la restriction de u_{inc} au domaine associé au superstrat. Le problème de diffraction peut s'écrire:

$$\mathcal{L}_{\xi,\chi}(u) = 0 \quad \text{tel que} \quad u^d := u - u_0 \quad \text{satisfasse une COS.} \quad (1.2.7)$$

La fonction u_1 correspondant à la solution du problème de diffraction associé à l'empilement multi-couches est l'unique solution de l'équation suivante:

$$\mathcal{L}_{\xi_1,\chi_1}(u_1) = 0 \quad \text{tel que} \quad u_1^d := u_1 - u_0 \quad \text{satisfasse une COS.} \quad (1.2.8)$$

Cette fonction peut-être explicitée par un calcul analytique basé sur un formalisme matriciel [3] et est dorénavant supposée connue. Une nouvelle fonction inconnue u_2^d peut dès lors être introduite de la façon suivante:

$$u_2^d := u - u_1 = u^d - u_1^d \quad (1.2.9)$$

où u_2^d apparaît comme une différence de deux champs diffractés et satisfait ainsi naturellement une COS en tant que différence de deux champs diffractés. Par linéarité de $\mathcal{L}_{\xi,\chi}$, il est alors possible de réécrire l'équation 1.2.7:

$$\mathcal{L}_{\xi,\chi}(u) = \mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_2^d) + \mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_1) = 0 \Leftrightarrow \mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_2^d) = -\mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_1). \quad (1.2.10)$$

Sous cette forme, $\mathcal{S}_1 = \mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_1)$ apparaît comme un terme source connu. De plus, ce terme source possède un support borné par l'élément diffractif du réseau. En effet, il est possible d'écrire \mathcal{S}_1 sous la forme:

$$\mathcal{S}_1 = \mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_1) = \mathcal{L}_{\xi,\chi}(u_1) - \underbrace{\mathcal{L}_{\xi_1,\chi_1}(u_1)}_{=0} = \mathcal{L}_{\xi-\xi_1,\chi-\chi_1}(u_1). \quad (1.2.11)$$

Ainsi, comme les champs de tenseurs ξ et ξ_1 et les fonctions χ et χ_1 ne diffèrent qu'au sein de l'élément diffractif, le support de ce terme source est confiné au sein de celui-ci.

Il convient à présent d'exprimer le terme source \mathcal{S}_1 . Au travers d'un formalisme matriciel non détaillé ici, u_1 peut être aisément calculé [4] et s'exprime sous la forme:

$$u_1(x, y) = u_0(x, y) + \exp[i\alpha x] \begin{cases} r \exp[i\beta^+ y] & \text{pour } y > 0 \\ v_n^c + v_n^p & \text{pour } y_n < y < y_{n-1} \\ t \exp[-i\beta^- y] & \text{pour } y < y_N \end{cases} \quad \text{avec } 1 \leq n \leq N \quad (1.2.12)$$

où

$$\begin{aligned} u_0 &= A_{e,m}^0 \exp[-i\alpha x] \exp[-i\beta^+ y] \quad \text{pour } y > 0 \quad \text{et } 0 \quad \text{sinon} \\ v_n^c &= u_n^p \exp[-i\beta_n(y - y_n)] \\ v_n^p &= u_n^c \exp[i\beta_n(y - y_n)] \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

avec $\beta_n^2 = k_n^2 - \alpha^2$. Les coefficients de réflexion r et de transmission t ainsi que les coefficients complexes u_n^p et u_n^c sont obtenus en utilisant un formalisme matriciel. Les exposants p et c illustrent la nature propagative ou contra-propagative des ondes planes définies par v_n^p et v_n^c .

Dans la région modulée périodiquement (d'indice g), u_1 est la somme de deux ondes planes $v_g^p \exp[i\alpha x]$ et $v_g^c \exp[i\alpha x]$, ainsi de par la linéarité de l'opérateur $\mathcal{L}_{\xi, \chi}$, le terme source \mathcal{S}_1 peut être décomposé en deux parties:

$$\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_1^p + \mathcal{S}_1^c \quad (1.2.14)$$

avec $\mathcal{S}_1^p = \mathcal{L}_{\xi - \xi_1, \chi - \chi_1}(v_g^p \exp[i\alpha x])$ et $\mathcal{S}_1^c = \mathcal{L}_{\xi - \xi_1, \chi - \chi_1}(v_g^c \exp[i\alpha x])$. Les deux termes sources \mathcal{S}_1^p et \mathcal{S}_1^c peuvent être détaillés sous une forme plus explicite:

$$\mathcal{S}_1^p = u_g^p \left(i\nabla \cdot \left[\left(\xi^{g'} - \xi^g \right) \mathbf{k}^{g,p} \exp[i\mathbf{k}^{g,p} \cdot \mathbf{r}] \right] + k_0^2 \left(\chi^{g'} - \chi^g \right) \exp[i\mathbf{k}^{g,p} \cdot \mathbf{r}] \right) \quad (1.2.15)$$

et

$$\mathcal{S}_1^c = u_g^c \left(i\nabla \cdot \left[\left(\xi^{g'} - \xi^g \right) \mathbf{k}^{g,c} \exp[i\mathbf{k}^{g,c} \cdot \mathbf{r}] \right] + k_0^2 \left(\chi^{g'} - \chi^g \right) \exp[i\mathbf{k}^{g,c} \cdot \mathbf{r}] \right) \quad (1.2.16)$$

avec $\mathbf{k}^{g,p}$ le vecteur d'onde associé à l'onde propagative et $\mathbf{k}^{g,c}$ le vecteur d'onde associé à l'onde contra-propagative se propageant dans la couche g de l'empilement multi-couches (*c.f.* Eqs. 1.2.12 et 1.2.13).

Le problème de diffraction associé à l'équation 1.2.4 a ainsi été transformé en un problème de radiation associé à l'équation 1.2.10, à sources \mathcal{S}_1 localisées au sein de l'élément diffractif de la couche des sillons. La propagation depuis ces sources s'effectue vers les deux régions semi-infinies du système que sont le substrat et le superstrat justifiant ainsi l'utilisation de deux PMLs afin de borner ces domaines et de capter le rayonnement électromagnétique émis depuis les sources \mathcal{S}_1 sans qu'aucune réflexion ne vienne parasiter la région d'intérêt située entre les deux PMLs.

1.2.1.4 Couches Parfaitement adaptées (PML)

L'emploi de la FEM dans les problèmes électromagnétiques ouverts (tel que la modélisation des réseaux de diffraction) se heurte à un problème majeur qu'est la troncature des domaines non-bornés (dans notre cas le substrat et le superstrat). Le champ électromagnétique calculé u_2^d satisfait une COS et rayonne vers les infinis du problème. C'est pour traiter ce problème non borné que les PMLs (Perfectly Matched Layers) ont été introduites par Bérenger en 1994 [70]. Les PMLs sont des couches d'épaisseur finie qui englobent la région d'intérêt de la structure modélisée. Ces couches sont non-réfléchissantes et absorbent totalement toutes les ondes se propageant à l'intérieur de celles-ci. Depuis la formalisation de l'Optique de Transformation, la façon la plus naturelle d'appréhender une PML est de la considérer comme une transformation géométrique complexe de l'espace qui se traduit par des propriétés matérielles équivalentes (ϵ_s, μ_s) [71]. Ainsi, même si les matériaux constituant les domaines non bornés de l'espace ont des propriétés matérielles transparentes, isotropes et homogènes, celles des PMLs correspondantes sont à pertes, anisotropes et possiblement inhomogènes. Ces transformations conduisent à des matériaux équivalents qui possèdent la même impédance que le milieu initial (de par le fait que ϵ_r et μ_r sont transformés de la même façon). Cette propriété assure que les PMLs sont non-réfléchissantes. De plus, en choisissant correctement les paramètres de la transformation géométrique complexe, le matériau équivalent des PMLs possède des propriétés d'absorption de toutes les ondes satisfaisant une COS au sein de la zone d'intérêt. Les domaines non-bornés peuvent ainsi être tronqués sous la condition que la frontière artificielle extérieure de la PML soit située dans une région où le champ est suffisamment amorti par celle-ci.

Afin de formaliser l'utilisation de PMLs et des transformations géométriques complexes de l'espace, une règle simple peut être énoncée [5]: lorsque l'on change un système de coordonnées, il suffit de remplacer les propriétés matérielles du matériau du domaine initial (ϵ_r, μ_r) par des propriétés matérielles équivalentes (ϵ_s, μ_s) données par:

$$\delta_s = J_s^{-1} \delta J_s^{-T} \det(J_s) \quad \text{avec} \quad \delta = \{\epsilon_r, \mu_r\} \quad (1.2.17)$$

et où J_s est appelée matrice jacobienne étirée et est constituée des dérivées partielles des nouvelles coordonnées par rapport aux anciennes, et J_s^{-T} est la transposée de l'inverse de J_s . Ainsi, une PML peut être vue comme une application sur un espace complexe \mathbb{C}^3 .

Trois systèmes de coordonnées vont être utilisés:

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

Dans le cas de l'étude des réseaux de diffraction mono-périodiques, le champ diffracté calculé par la FEM rayonne depuis l'élément diffractif vers le substrat et le superstrat supposés isotropes. Ce sont donc ce substrat et superstrat qui vont être tronqués avec des PMLs rectangulaires (ou cartésiennes) selon l'axe O_y . Le changement de coordonnées va seulement affecter la variable y . En effet, c'est suivant cette direction de propagation que le champ diffracté va être absorbé. La matrice jacobienne étirée va donc être exprimée comme :

$$J_s = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & s_y(y) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.2.18)$$

où $s_y(y)$ est une fonction à valeurs complexes telle que:

$$y_s(y) = \int_0^y dy' s_y(y'). \quad (1.2.19)$$

En injectant l'expression de J_s dans l'équation 1.2.17, l'expression des tenseurs de permittivité et perméabilité équivalents est obtenue:

$$\delta_s = \begin{bmatrix} s_y \delta_{xx} & \bar{\delta}_a & 0 \\ \delta_a & s_y^{-1} \delta_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \delta_{xx} \end{bmatrix}, \quad \text{avec } \delta = \{\epsilon, \mu\} \quad (1.2.20)$$

Un nouveau champ électromagnétique $\mathbf{F}_s = (\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$ appelé champ substitué, solution de l'équation 1.2.4 avec $\xi = \xi_s$ et $\chi = \chi_s$ est alors introduit. Ce champ est égal au champ $\mathbf{F} = (\mathbf{E}, \mathbf{H})$ dans la région d'intérêt (tel que $\Upsilon_*^+ < y < \Upsilon_*^-$, *c.f.* Figure 1.2.3) si $s_y(y) = 1$ dans cette région [72]. A l'intérieur des PMLs, s_y est choisie avec $\text{Im}(s_y) > 0$ de telle façon que le champ \mathbf{F}_s converge exponentiellement vers 0 quand y tend vers $\pm\infty$, contrairement à \mathbf{F} . Par le changement de coordonnées complexes, les ondes planes propagatives dans l'espace libre (substrat ou superstrat) deviennent donc évanescentes dans les PMLs. On peut noter que le champ \mathbf{F}_s est d'énergie finie, ce qui est une condition nécessaire pour lui associer une formulation faible aux éléments finis. Pour l'étude du problème de diffraction par les réseaux mono-périodiques, la fonction d'étirement complexe suivante est choisie :

$$s_y(y) = \begin{cases} \zeta^- & \text{si } y < \Upsilon_*^- \\ 1 & \text{si } \Upsilon_*^- < y < \Upsilon_*^+ \\ \zeta^+ & \text{si } y > \Upsilon_*^+ \end{cases} \quad \text{avec } \zeta^\pm \in \mathbb{C} \text{ et } \text{Im}(\zeta^\pm) > 0, \quad (1.2.21)$$

et ainsi la fonction à valeurs complexes $y_s(y_C)$ définie par l'équation 1.2.19 est donnée par:

$$y_s(y_C) = \begin{cases} \Upsilon_*^- + \zeta^-(y_C - \Upsilon_*^-) & \text{si } y_C < \Upsilon_*^- \\ y_C & \text{si } \Upsilon_*^- < y_C < \Upsilon_*^+ \\ \Upsilon_*^+ + \zeta^+(y_C - \Upsilon_*^-) & \text{si } y_C > \Upsilon_*^+ \end{cases}. \quad (1.2.22)$$

Soit une onde plane u_n d'un ordre propagatif ou évanescent du substrat (ordre transmis se "propageant" donc dans le sens des y décroissants) :

$$u_n(x, y) := t_n \exp[i(\alpha x - \beta_n^- y)] \quad (1.2.23)$$

Son expression dans le systèmes de coordonnées complexes étirées et dans la PML du substrat est:

$$u_{n,s}^-(x_c, y_c) = u_n^-(x(x_c), y_s(y_c)) = t_n \exp[i\alpha x_c] \exp[-i\beta_n^-(\Upsilon_*^- + \zeta^-(y_C - \Upsilon_*^-))]. \quad (1.2.24)$$

En notant, $\zeta^- = \zeta^{-'} + i\zeta^{-''}$ et $\beta_n^- = \beta_n^{-'} + i\beta_n^{-''}$, un ordre propagatif est caractérisé par le fait que $\beta_n^{-'} > 0$ et $\beta_n^{-''} = 0$. Pour un ordre évanescent, $\beta_n^{-'} = 0$ et $\beta_n^{-''} > 0$. En étudiant, la dépendance de $u_{n,s}^-(x_c, y_c)$ à y_c qui est donnée par la fonction : $U_{n,s}^-(y_c) = t_n \exp[-i\beta_n^- \zeta^- y_C]$, et en extrayant la partie oscillante (donc propagative) : $U_{n,s}^{p,-}(y_c) = t_n \exp[(\beta_n^{-'} \zeta^{-''} + \beta_n^{-''} \zeta^{-'}) y_C]$, le choix de ζ^- dans le corps des complexes à partie imaginaire positive s'impose afin que lorsque y_c tend $-\infty$, $U_{n,s}^{p,-}(y_c)$ décroisse exponentiellement vers 0 dans une PML infinie. Le même raisonnement dans le superstrat conduit à la même conclusion pour ζ^+ . Ainsi, pour toutes les études de problèmes de diffraction qui suivront, $\zeta^\pm = a + ib$ avec $a = b = 1$ seront choisis comme coefficients d'étirement dans les PMLs. Leurs épaisseurs, notées e^+ pour la PML du superstrat et e^- pour le substrat, seront choisies de telle façon que $U_{n,s}^{p,-}(y_c)$ ait suffisamment décro. Pratiquement, une longueur égale à la longueur d'onde de l'onde plane incidente sera choisie. Il est dorénavant possible de définir la cellule de calcul $\Omega = [-d/2; d/2] \times [\Upsilon_*^-; \Upsilon_*^+]$ où $\Upsilon_*^- = \Upsilon_*^- - e^-$ et $\Upsilon_*^+ = \Upsilon_*^+ + e^+$ (c.f. figure 1.2.3).

1.2.1.5 Formulation faible

Le résidu associée au problème de diffraction considéré est obtenue en multipliant l'équation 1.2.10 par la conjuguée d'une fonction test u' puis en intégrant par partie l'expression obtenue:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\xi, \chi}(u_2^d, u') := & - \int_{\Omega} d\Omega [(\xi \nabla u_2^d) \nabla \bar{u}' - k_0^2 \chi u_2^d \bar{u}'] + \int_{\partial\Omega} dS \bar{u}' (\xi \nabla u_2^d) \cdot \hat{n} \\ & + \int_{\Omega} d\Omega (\nabla \cdot [(\xi - \xi_1) \nabla u_1] \bar{u}' + k_0^2 (\chi - \chi_1) u_1 \bar{u}'), \end{aligned} \quad (1.2.25)$$

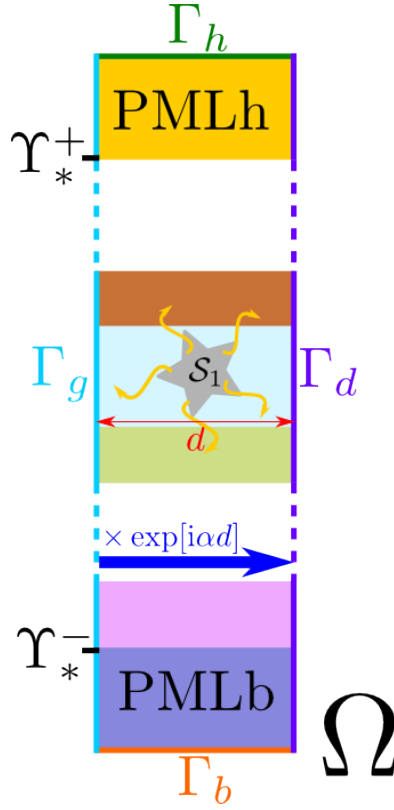


Fig. 1.2.3 – Schéma de la cellule de calcul Ω d'un réseau de diffraction mono-périodique.

où \hat{n} est le vecteur unitaire normal à $\partial\Omega$.

En dénotant que:

$$\int_{\Omega} d\Omega \nabla \cdot [(\xi - \xi_1) \nabla u_1 \bar{u}'] = \int_{\partial\Omega} dS (\xi - \xi_1) \nabla u_1 \bar{u}' \cdot \hat{n}, \quad (1.2.26)$$

et que $(\xi - \xi_1)$ est, dans tous les cas traités ici, nulle sur le bord de Ω , alors l'expression 1.2.26 est nulle:

$$\int_{\Omega} d\Omega \nabla \cdot [(\xi - \xi_1) \nabla u_1] \bar{u}' = 0. \quad (1.2.27)$$

De plus, cette expression 1.2.27 peut être réécrite de la façon suivante:

$$\int_{\Omega} d\Omega \nabla \cdot [(\xi - \xi_1) \nabla u_1 \bar{u}'] = \int_{\Omega} d\Omega \nabla \cdot [(\xi - \xi_1) \nabla u_1] \bar{u}' + \int_{\Omega} d\Omega (\xi - \xi_1) \nabla u_1 \cdot \nabla \bar{u}' = 0, \quad (1.2.28)$$

et ainsi:

$$\int_{\Omega} d\Omega \nabla \cdot [(\xi - \xi_1) \nabla u_1] \bar{u}' = - \int_{\Omega} d\Omega (\xi - \xi_1) \nabla u_1 \cdot \nabla \bar{u}'. \quad (1.2.29)$$

Le résidu donné par l'équation 1.2.25 se réécrit alors comme suit:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\xi, \chi}(u_2^d, u') := & - \int_{\Omega} d\Omega [(\xi \nabla u_2^d) \nabla \bar{u}' - k_0^2 \chi u_2^d \bar{u}'] + \int_{\partial\Omega} dS \bar{u}' (\xi \nabla u_2^d) \cdot \hat{n} \\ & - \int_{\Omega} d\Omega (\xi - \xi_1) \nabla u_1 \cdot \nabla \bar{u}' + \int_{\Omega} d\Omega k_0^2 (\chi - \chi_1) u_1 \bar{u}', \end{aligned} \quad (1.2.30)$$

Afin d'obtenir la formulation faible associée à ce résidu, il convient d'annuler le terme de bord de celui-ci. Le terme de bord de l'équation 1.2.25 est nul si les conditions aux limites suivantes sont imposées sur les différentes frontières $\partial\Omega$ du domaine Ω :

1. *conditions de Dirichlet homogène*: u_d^2 est directement imposé sur les frontières Γ_h et Γ_b des PMLs: la fonction de poids doit être choisie nulle sur ces frontières intérieures. C'est cette condition qui sera utilisée en pratique sur les frontières des PMLs.
2. *conditions de Neumann homogènes*: $(\xi \nabla u_d^2) \cdot \hat{n} = 0$. La fonction u_d^2 est alors une inconnue à déterminer sur les frontières concernées (Γ_h et Γ_g). Ces conditions pourraient être utilisées si on voulait laisser la norme du champ libre en bout de PMLs. Elles ne seront pas utilisées en pratique.
3. *conditions de Bloch*: u_d^2 est inconnue sur Γ_g , la valeur de u_d^2 en un point de Γ_d est imposée égale à la valeur du point lui correspondant sur Γ_g multipliée par le déphasage $\exp[i\alpha d]$ [73]. La quasi-périodicité de la fonction u_d^2 et de sa dérivée ainsi que le sens des normales extérieures à Ω sur Γ_g et Γ_d assurent la nullité du terme de bord.

Les différentes conditions aux limites alors fixées imposent l'espace de fonction dans lequel est choisie la solution au problème de diffraction.

En notant:

- $L^2(\Omega, d, \alpha)$, l'espace des fonctions quasi-périodiques de période d , de coefficient de quasi-périodicité α , d'énergie finie sur Ω ,
- $H^1(\Omega, \nabla, d, \alpha)$, le sous-espace des fonctions de $L^2(\Omega, d, \alpha)$ dont le gradient est d'énergie finie sur Ω ,
- $H_0^1(\Omega, \nabla, d, \alpha)$, le sous-espace des fonctions de $H^1(\Omega, \nabla, d, \alpha)$ nulles sur les frontières intérieures Γ_h et Γ_b des PMLs du domaine Ω ,

alors la solution au problème de diffraction revient à trouver u_d^2 dans $H_0^1(\Omega, \nabla, d, \alpha)$ tel que:

$$\mathcal{R}_{\xi, \chi}(u_d^2, u') = 0, \quad \forall u' \in H_0^1(\Omega, \nabla, d, \alpha), \quad (1.2.31)$$

L'existence et l'unicité d'une solution à l'équation 1.2.31 est alors garantie par le lemme de Lax-Milgram [74].

1.2.1.6 Maillage et éléments finis

La résolution numérique du problème de diffraction par la FEM est basée sur la formulation faible exposée dans le paragraphe 1.2.1.5. La solution recherchée u_2^d du problème est

classiquement projetée sur une base de fonctions discrètes $w_i \in H_0^1(\Omega, \nabla, d, \alpha)$ faite d'éléments de Lagrange associés au maillage triangulaire du domaine Ω . La fonction $u_2^{d,I}$ définie comme:

$$u_2^{d,I}(x, y) := \sum_{i \in I} z_i w_i(x, y) \quad (1.2.32)$$

est alors une approximation discrète de u_2^d où I est un ensemble d'entiers définis à partir du maillage de Ω . Les coefficients complexes z_i sont les inconnues du problème discret. Les w_i sont des éléments de Lagrange d'ordre 1 (fonction de base du maillage) et sont définis comme suit:

- à chaque nœud M_i du maillage est associé 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 jusqu'aux nœuds voisins.
- w_i est continue et à support borné.

En pratique, des éléments de Lagrange d'ordre 2 sont utilisés lors des simulations numériques. Ils sont construits de la même manière à l'exception près que l'interpolation réalisée entre les nœuds M_i du maillage n'est non plus linéaire mais quadratique. Dans le cadre de la formulation variationnelle dite de Galerkin employée, les fonctions de test u' de l'équation 1.2.31 sont aussi les fonctions w_i de l'équation 1.2.32. Ainsi, le système algébrique à résoudre est obtenu en introduisant la décomposition discrète de l'équation 1.2.32 dans la formulation faible définie par l'équation 1.2.31. Le nombre de scalaires z_i ou nombre de degrés de libertés (DDL) du système est généralement très élevé. Il correspond au rang de la matrice associée au système algébrique à résoudre. Les fonctions de base du maillage étant nulles sur pratiquement tout le domaine Ω , cette matrice est néanmoins très creuse. Des algorithmes puissants adaptés à l'algèbre des matrices creuses permettent la résolution de problèmes de grande taille par la FEM. Plus de détails pourront être trouvés dans [5].

En ce qui concerne l'implémentation pratique de la FEM, deux logiciels distribués sous les termes de la GNU General Public License (GPL) ont été utilisés :

- Gmsh [75] comme générateur de maillage et outils de visualisation,
- GetDP [76] comme moteur éléments finis. GetDP est compilé avec la bibliothèque PETSc [133] intègre la plupart des solveurs les plus performants pour l'inversion des matrices creuses. En pratique, le solveur utilisé est MUMPS [77] car une bonne performance de parallélisation a été obtenue à l'aide de celui-ci. GetDP est également compilé avec la bibliothèque SLEPc [134] qui est basée sur PETSc et représente l'état de l'art en termes de solveurs aux valeurs propres pour matrices creuses (qui seront utilisés plus loin dans le cadre de l'analyse modale de structures électromagnétiques dispersives).

Pour rappel, toutes les simulations ont été réalisées à l'aide d'une station de travail équipée d'un processeur INTEL® Xeon E5-2687W multicœurs (32 threads) et de 192 Go de RAM.

1.2.1.7 Bilan énergétique du réseau de diffraction

Après avoir résolu le problème de diffraction, la carte de champ électromagnétique diffracté u^d est obtenue au sein de la région d'intérêt. Les efficacités de diffraction associées aux différents ordres propagatifs du réseau ainsi que les pertes par effet Joule au sein des éléments absorbants de la structure peuvent être déduites de cette carte de champ. Tout d'abord, de par la quasi-périodicité de u^d suivant l'axe O_x , il est possible de le décomposer en série de Rayleigh dans le substrat et le superstrat:

$$u^d(x, y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n^d(y) \exp[i\alpha_n x], \quad \text{pour } y < y_N \text{ et } y > 0, \quad (1.2.33)$$

avec

$$u_n^d(y) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} dx u^d(x, y) \exp[-i\alpha_n x], \quad \text{et } \alpha_n = \alpha + \frac{2\pi}{d}n. \quad (1.2.34)$$

De plus, en injectant l'expression de u_d (Eq. 1.2.33) dans l'équation de Helmholtz, les coefficients u_n^d de Rayleigh sont obtenus dans le substrat et le superstrat:

$$u_n^d(y) = \begin{cases} s_n \exp[-i\beta_n^+ y] + r_n \exp[i\beta_n^+ y] & \text{pour } y > 0, \\ q_n \exp[i\beta_n^- y] + t_n \exp[-i\beta_n^- y] & \text{pour } y < y_N, \end{cases} \quad \text{avec } \beta_n^\pm = k^{\pm 2} - \alpha_n^2. \quad (1.2.35)$$

La dépendance temporelle étant choisie en $\exp[-i\omega t]$, afin que chaque u_n^d satisfasse la COS vérifiée par u^d , les coefficients s_n et q_n doivent être nuls. Ainsi, à une altitude $y = y_C$ fixée, l'expression des coefficients r_n et t_n est obtenue en combinant les équations 1.2.34 et 1.2.35:

$$\begin{cases} r_n = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} dx u^d(x, y_C) \exp[-i(\alpha_n x + \beta_n^+ y_C)] & \text{pour } y_C > 0, \\ t_n = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} dx u^d(x, y_C) \exp[-i(\alpha_n x - \beta_n^- y_C)] & \text{pour } y_C < y_N. \end{cases} \quad (1.2.36)$$

Les efficacités de diffraction des ordres transmis dans le substrat T_n et réfléchis dans le superstrat R_n sont déduites des expressions de t_n et r_n de l'équation 1.2.36. Leur définition est rappelée ci-dessous:

$$\begin{cases} R_n := r_n \bar{r}_n \frac{\beta_n^+}{\beta_n^-} & \text{pour } y_C > 0, \\ T_n := t_n \bar{t}_n \frac{\beta_n^-}{\beta_n^+} \frac{\gamma^+}{\gamma^-} & \text{pour } y_C < y_N, \end{cases} \quad \text{avec } \gamma^\pm = \begin{cases} \mu^\pm & \text{dans le cas de polarisation } s, \\ \epsilon^\pm & \text{dans le cas de polarisation } p \end{cases}. \quad (1.2.37)$$

Ces efficacités ne dépendent pas de l'altitude y_C choisie. Leur calcul pratique s'effectue par intégration des résultats numériques ($u^d(x, y_C)$) grâce à la méthode des trapèzes pour un nombre N_{int} d'altitudes différentes dans le substrat et le superstrat, puis en effectuant la moyenne arithmétique de ces résultats. Typiquement, N_{int} sera fixé à 50.

Pour compléter le bilan d'énergie du réseau de diffraction, il reste à calculer les pertes par effet Joule dans les différents éléments absorbants de la structure.

Pour un élément absorbant Ω_p de la structure considérée, la perte par effet Joule, notée Q_p , est définie comme le rapport entre la puissance de l'onde plane incidente, notée P^0 , et la puissance dissipée au sein de Ω_p , notée P_p^d :

$$Q_p = \frac{P_p^d}{P^0}. \quad (1.2.38)$$

La puissance incidente, P_0 , est donnée par la partie réelle du flux du vecteur de Poynting complexe incident, $\mathbf{\Pi}^0 = \frac{1}{2} \mathbf{E}^0 \times \overline{\mathbf{H}^0}$, à travers la surface $\Sigma_0 := \{y = \Upsilon_*^+\}$:

$$P_0 = \operatorname{Re} \left[\int_{\Sigma_0} dS \mathbf{\Pi}^0 \cdot \hat{\mathbf{n}} \right], \quad (1.2.39)$$

où $\hat{\mathbf{n}}$ est la normale extérieure à Σ_0 et en notant $\nu = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu^+}{\epsilon_0 \epsilon^+}}$:

$$P_0 = -\frac{1}{2} \eta d \cos[\theta_0], \quad \text{avec} \quad \eta = \begin{cases} |A_e^0|^2 \nu^{-1} & \text{dans le cas de polarisation } s, \\ |A_m^0|^2 \nu & \text{dans le cas de polarisation } p. \end{cases} \quad (1.2.40)$$

La puissance dissipée P_p^d dans le domaine Ω_p , en régime harmonique et en l'absence de courant dans le domaine, est obtenue en intégrant la densité d'énergie électromagnétique W_{em} dans le domaine considéré et prenant sa partie réelle:

$$P_p^d = \operatorname{Re} \left[\int_{\Omega_p} dS W_{em} \right] = \operatorname{Re} \left[i \frac{\omega}{2} \int_{\Omega_p} dS (\mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{D}} + \mathbf{B} \cdot \overline{\mathbf{H}}) \right]. \quad (1.2.41)$$

Dans le cas de matériaux à pertes homogènes, isotropes, non magnétiques et de permittivité relative $\epsilon_r = \epsilon' + i\epsilon''$, la puissance dissipée au sein de Ω_p peut donc s'écrire:

$$P_p^d = \frac{\omega}{2} \epsilon_0 \int_{\Omega_p} dS \epsilon'' |\mathbf{E}|^2, \quad (1.2.42)$$

et les pertes par effet Joule au sein de l'élément absorbant Ω_p , $Q_p = \frac{P_p^d}{P^0}$ sont désormais connues. Une fois ces différentes quantités calculées, un bilan d'énergie global du réseau de diffraction peut-être effectué afin de vérifier l'auto-consistance des résultats numériques obtenus par la FEM. En effet par conservation de l'énergie électromagnétique, la somme de toutes les quantités énergétiques calculées doit être égale à 1:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} R_n + \sum_{n \in \mathbb{Z}} T_n + \sum_{\Omega_p \in \Omega} Q_p = R + T + Q = 1. \quad (1.2.43)$$

1.2.2 Diffraction par des réseaux bi-dimensionnels : Formulation vectorielle de la FEM

Dans cette sous-section, une généralisation de la méthode appliquée au réseau de diffraction mono-périodique au cas bi-périodique est présentée. Dans le cas bi-périodique, on ne peut plus se ramener aux cas dits scalaires s et p , où le champ électromagnétique inconnu ne possède qu'une seule composante. L'inconnue est donc de nature vectorielle et l'on recherche ses trois composantes. La généralisation à ce cas vectoriel a également été développée au cours de la thèse de Guillaume Demésy [125] et est fondée sur les mêmes bases théoriques que l'étude des réseaux de diffraction mono-dimensionnels avec néanmoins quelques différences qui sont exposées tout au long de cette sous-section.

1.2.2.1 Description du problème et notations

Soient \hat{x} , \hat{y} et \hat{z} , les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonal O_{xyz} . Le problème considéré est toujours traité en régime harmonique (dépendance temporelle en $\exp[-i\omega t]$). Les champs électromagnétiques sont toujours représentés par des vecteurs complexes \mathbf{E} et \mathbf{H} . La figure 1.2.4 présente schématiquement le type de réseau étudié. Les structures bi-périodiques, de période d_x selon O_x et d_y selon O_y , sont décomposées en plusieurs sous-domaines:

- Le superstrat ($z > z_0$): il est supposé linéaire, homogène, isotrope et sans perte, de permittivité diélectrique relative ϵ^+ et de perméabilité relative μ^+ . On note $k^+ := k_0\sqrt{\epsilon^+\mu^+}$ le module du vecteur d'onde correspondant.
- L'empilement multi-couches ($z_0 < z < z_N$): il est constitué de N couches homogènes et isotropes, de permittivité diélectrique relative ϵ_n , de perméabilité relative μ_n et d'épaisseur e_n , n entier variant de 1 à N . On note $k_n := k_0\sqrt{\epsilon_n\mu_n}$ le vecteur d'onde associé à la couche n .
- le domaine modulé périodiquement ($z_{g-1} < z < z_g$) noté Ω_S : il est imbriqué dans la g^{ime} couche (ϵ_g, μ_g) de l'empilement décrit ci-dessus. Il peut être hétérogène mais sera considéré comme isotrope. Ainsi ce domaine est décrit par deux champs scalaires de permittivité diélectrique relative et de perméabilité relative qui dépendent des variables d'espace x, y et z : $\epsilon_{g'}(x, y, z)$ et $\mu_{g'}(x, y, z)$. Les périodicités des motifs de ce domaine correspondent aux périodicités du réseau bi-dimensionnel et sont notées d_x selon O_x et d_y selon O_y .
- Le substrat ($z < z_N$): il est supposé linéaire, homogène et isotrope, de permittivité diélectrique relative ϵ^- et de perméabilité relative μ^- . On note $k^- := k_0\sqrt{\epsilon^-\mu^-}$.

Toutes les permittivités relatives présentées peuvent être complexes autorisant l'étude de matériaux à pertes diélectriques. Le champ électrique incident éclairant la structure est noté :

$$\mathbf{E}^{inc} = \mathbf{A}_e^0 \exp[i\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{r}] \quad (1.2.44)$$

où

$$\mathbf{k}^+ = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 = k^+ \\ \gamma_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin[\theta_0] \cos[\varphi_0] \\ -\sin[\theta_0] \sin[\varphi_0] \\ -\cos[\theta_0] \end{pmatrix} \quad (1.2.45)$$

et

$$\mathbf{A}_e^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_x^0 \\ \mathbf{E}_y^0 = \mathbf{A}_e^0 \\ \mathbf{E}_z^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos[\Psi_0] \cos[\theta_0] \cos[\varphi_0] - \sin[\Psi_0] \sin[\varphi_0] \\ \cos[\Psi_0] \cos[\theta_0] \sin[\varphi_0] + \sin[\Psi_0] \cos[\varphi_0] \\ -\cos[\Psi_0] \sin[\theta_0] \end{pmatrix} \quad (1.2.46)$$

avec $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$, $\theta_0 \in [0, \frac{\pi}{2}]$ et $\Psi_0 \in [0, \pi]$. Comme le champ magnétique \mathbf{H} peut être déduit du champ électrique \mathbf{E} à partir de l'équation 1.2.2a ou inversement avec l'équation 1.2.2b, le champ électrique \mathbf{E} sera arbitrairement choisi comme inconnue. En injectant l'équation 1.2.2a dans l'équation 1.2.2b, le champ électrique \mathbf{E} , solution du problème de diffraction, obéit à l'équation de propagation vectorielle suivante :

$$\mathcal{L}_{\epsilon_r, \mu_r}(\mathbf{E}) := -\nabla \times [\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}] + k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} = 0 \quad (1.2.47)$$

tel que le champ diffracté par la structure satisfasse une COS et que le champ électrique total \mathbf{E} soit une fonction quasi-périodique suivant l'axe O_x et l'axe O_y .

1.2.2.2 Problème de diffraction et problème radiatif à sources localisées équivalent

Tout comme dans le cas de l'étude des réseaux mono-périodiques, il est nécessaire de transformer le problème de diffraction en un problème radiatif à sources localisées au sein de l'élément diffractif du réseau bi-périodique. La méthodologie reste la même.

Le problème de diffraction à résoudre revient à rechercher l'unique champ de vecteurs \mathbf{E} , quasi-périodique selon O_x et O_y , solution de :

$$\mathcal{L}_{\epsilon_r, \mu_r}(\mathbf{E}) = 0 \quad \text{tel que} \quad \mathbf{E}^d := \mathbf{E} - \mathbf{E}_0 \quad \text{satisfasse une COS,} \quad (1.2.48)$$

où ϵ_r et μ_r sont les champs scalaires de permittivité relative associés à la structure totale et \mathbf{E}_0 la restriction de \mathbf{E}^{inc} au superstrat :

$$\mathbf{E}_0 := \begin{cases} \mathbf{E}^{inc} & \text{pour } z > z_0 = 0, \\ 0 & \text{pour } z < z_0 = 0. \end{cases} \quad (1.2.49)$$

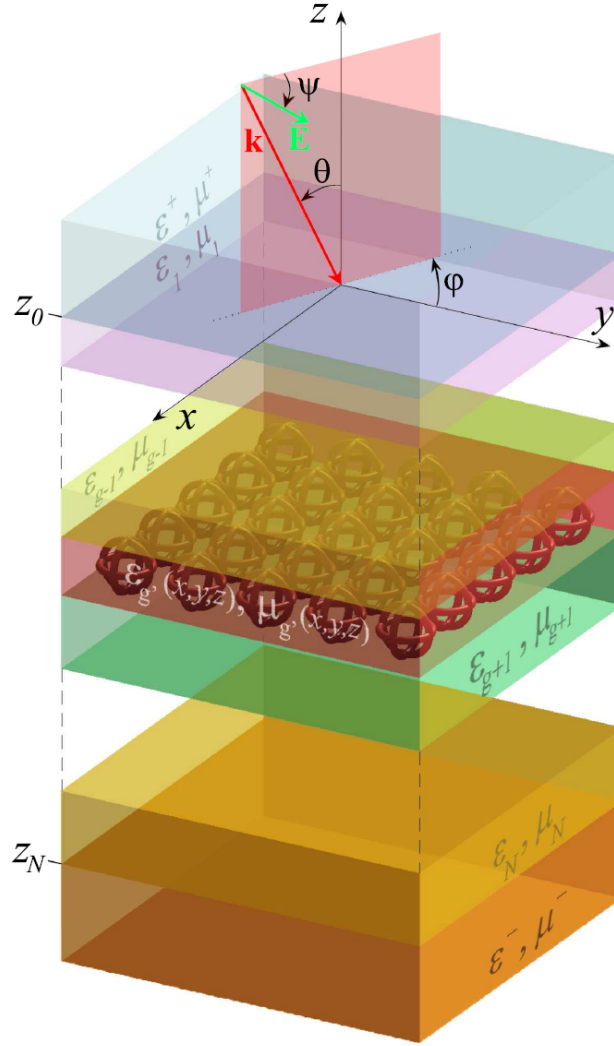


Fig. 1.2.4 – Schéma des réseaux bi-périodiques étudiés et notations associées.

On introduit \mathbf{E}_1 , le champ de vecteur solution (supposé connu, *c.f.* Annexe A de [125]) du problème annexe associé au cas vectoriel de la diffraction par l'empilement multicouche seul défini par:

$$\mathcal{L}_{\epsilon_1, \mu_1^{-1}}(\mathbf{E}_1) = 0 \quad \text{tel que} \quad \mathbf{E}_1^d := \mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_0 \quad \text{satisfasse une COS,} \quad (1.2.50)$$

où ϵ_1 et μ_1 sont les champs scalaires de permittivité relative associés à la structure de l'empilement multicouche seul. Il est alors possible de réécrire l'équation 1.2.48:

$$\mathcal{L}_{\epsilon_r, \mu_r}(\mathbf{E}_2^d) = -\mathcal{L}_{\epsilon_r - \epsilon_1, \mu_r^{-1} - \mu_1^{-1}}(\mathbf{E}_1), \quad (1.2.51)$$

où $\mathbf{E}_2^d := \mathbf{E} - \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}^d - \mathbf{E}_1^d$ et où $\mathcal{S}_1 := -\mathcal{L}_{\epsilon_r - \epsilon_1, \mu_r^{-1} - \mu_1^{-1}}(\mathbf{E}_1)$ est un champ de vecteurs connu qui peut être interprété comme un terme source dont le support est borné par l'élément de diffraction de la région modulée périodiquement.

Enfin, des PMLs tri-dimensionnelles adaptées au substrat et au superstrat sont calculées et utilisées selon les mêmes principes que ceux énoncés au paragraphe 1.2.1.4.

1.2.2.3 Formulation faible

Le résidu associée au problème de diffraction considéré est obtenue en multipliant scalairement l'équation 1.2.51 par les conjugués de vecteurs de poids \mathbf{E}' choisis dans l'ensemble des fonctions quadri-bi-périodiques d'énergie finie dans Ω et de rotationnel d'énergie finie dans Ω (noté $H_0^1(\nabla \times, \Omega, [d_x, d_y], [\alpha_0, \beta_0])$):

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\mathbf{E}_2^d, \mathbf{E}') := & \int_{\Omega} d\Omega \left(-\nabla \times [\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}_2^d] \cdot \overline{\mathbf{E}'} + k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E}_2^d \cdot \overline{\mathbf{E}'} \right) \\ & + \int_{\Omega} d\Omega \left(-\nabla \times [(\mu_r^{-1} - \mu_1^{-1}) \nabla \times \mathbf{E}_1] \cdot \overline{\mathbf{E}'} + k_0^2 (\epsilon_r - \epsilon_1) \mathbf{E}_1 \cdot \overline{\mathbf{E}'} \right). \end{aligned} \quad (1.2.52)$$

En intégrant par partie l'équation 1.2.52 et en utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, on obtient alors:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\mathbf{E}_2^d, \mathbf{E}') = & \int_{\Omega} d\Omega \left(-\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}_2^d \cdot \nabla \times \overline{\mathbf{E}'} + k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E}_2^d \cdot \overline{\mathbf{E}'} \right) - \int_{\partial\Omega} dS \left(\hat{\mathbf{n}} \times [\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}_2^d] \right) \\ & - \int_{\Omega} d\Omega \left(\mu_r^{-1} - \mu_1^{-1} \right) \nabla \times \mathbf{E}_1 \cdot \nabla \times \overline{\mathbf{E}'} + \int_{\Omega} d\Omega k_0^2 (\epsilon_r - \epsilon_1) \mathbf{E}_1 \cdot \overline{\mathbf{E}'}, \end{aligned} \quad (1.2.53)$$

où $\hat{\mathbf{n}}$ est le vecteur unitaire de la normale extérieure à la surface considérée.

Les conditions aux limites suivantes sont fixées sur les différentes frontières du domaines:

- des conditions de Bloch sont imposées selon O_x et O_y rendant compte de la quasi-bi-périodicité des champs,
- des conditions de Neumann homogènes sont appliquées sur la frontière extérieure des PMLs orthogonale à O_z .

Ces conditions définissent ainsi le sous espace de fonctions $H_0^1(\Omega, \nabla \times, [d_x, d_y], [\alpha_0, \beta_0])$ dans lequel est choisi la solution \mathbf{E}_d^2 . La solution \mathbf{E}_d^2 de la formulation faible associée au résidu 1.2.53 du problème de radiation équivalent de l'équation 1.2.51 est l'unique élément de $H_0^1(\Omega, \nabla \times, [d_x, d_y], [\alpha_0, \beta_0])$ vérifiant:

$$\forall \mathbf{E}' \in H_0^1(\Omega, \nabla \times, [d_x, d_y], [\alpha_0, \beta_0]), \quad \mathcal{R}(\mathbf{E}_d^2, \mathbf{E}') = 0, \quad (1.2.54)$$

dont l'existence et l'unicité sont une fois de plus garanties par le lemme de Lax-Milgram [74].

1.2.2.4 Maillage et éléments finis

Le maillage m du domaine de la cellule de calcul Ω est effectué en décomposant son volume en un nombre fini de tétraèdres et ceci tout en respectant la règle suivante : 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 dits nodaux (ou de Lagrange) associés aux nœuds du maillage m ne permet pas de traduire de discontinuités de champ au passage d'un élément à un autre. La composante normale du champ \mathbf{E} étant discontinue à la traversée d'une interface entre deux matériaux de propriétés optiques (ϵ_r, μ_r) différentes, ces éléments sont inadaptés à la modélisation du problème vectoriel tridimensionnel ici défini. L'emploi d'éléments finis particuliers pour le cas vectoriel est donc de rigueur. Ce sont des éléments d'arêtes (ou formes de Whitney, adaptées par Bossavit [78]). Ils imposent la continuité des composantes tangentielles du champ \mathbf{E} tout en autorisant la discontinuité de leur composante normale. Les degrés de liberté du système algébrique final ne sont dès lors plus associés aux nœuds du maillage m (comme c'est le cas pour les éléments de Lagrange utilisés dans le cas scalaire). Les éléments d'arête w_a interprètent les degrés de liberté comme les circulations des champs de vecteurs à approximer le long des arêtes du maillage m . À partir des vecteurs de base w et des degrés de liberté ϑ définis sur les arêtes \mathcal{A} du maillage m , l'approximation de $\mathbf{E}_2^{d,m}$ sur le maillage tétraédrique m de Ω s'écrit:

$$\mathbf{E}_2^{d,m} = \sum_{a \in \mathcal{A}} \vartheta_a w_a. \quad (1.2.55)$$

Les vecteurs de test \mathbf{E}' de la formulation faible définie par l'équation 1.2.54 sont choisis dans le même espace que la solution $\mathbf{E}_2^d: H_0^1(\Omega, \nabla \times, [d_x, d_y], [\alpha_0, \beta_0])$. En injectant l'expression de $\mathbf{E}_2^{d,m}$ de l'équation 1.2.55 dans la formulation faible définie par l'équation 1.2.54, le système algébrique final est obtenu. Sa résolution s'effectue de la même façon que dans le cas scalaire (c.f. 1.2.1.6).

1.2.2.5 Bilan énergétique du réseau de diffraction

Après résolution du problème de diffraction par la FEM, les composantes complexes du champ électrique diffracté \mathbf{E}^d défini par l'équation 1.2.48 sont connues en tout point de la cellule du volume de calcul Ω . Il est alors possible de remonter aux efficacités de diffraction des ordres transmis et réfléchis par le réseau ainsi qu'aux pertes par effet Joule associées aux différents éléments absorbants de la structure à partir de ces composantes.

Pour rappel, la fonction $\mathbf{E}^d := \mathbf{E} - \mathbf{E}_0$ étant définie comme la différence de deux fonctions quasi-périodiques selon les axes O_x et O_y , elle est elle-même une fonction quasi-périodique et ainsi ses composantes complexes sont décomposables en série de Rayleigh suivant les axes O_x et O_y . Pour la composante E_x^d , on peut donc écrire:

$$E_x^d(x, y, z) = \sum_{(n,m) \in \mathbb{Z}} u_{n,m}^{d,x}(z) \exp[-i(\alpha_n x + \beta_m y)], \quad (1.2.56)$$

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

$$u_{n,m}^{d,x}(z) = \frac{1}{d_x d_y} \int_{-d_x/2}^{d_x/2} dx \int_{-d_y/2}^{d_y/2} dy E_x^d(x, y, z) \exp[-i(\alpha_n x + \beta_m y)]. \quad (1.2.57)$$

En injectant l'expression 1.2.57 dans l'équation de Helmholtz 1.2.47 vérifiée par E_x^d dans toute la structure, exceptée la région modulée périodiquement, l'expression des coefficients de Rayleigh dans le substrat et le superstrat est obtenue :

$$u_{n,m}^{d,x}(z) = e_{n,m}^{x,p} \exp[-i\gamma_{n,m}^{\pm} z] + e_{n,m}^{x,c} \exp[-i\gamma_{n,m}^{\pm} z] \quad (1.2.58)$$

avec $\gamma^{\pm 2} = k^{\pm 2} - \alpha_n^2 - \beta_m^2$ et $\gamma_{n,m}^{\pm}$ (ou $-i\gamma_{n,m}^{\pm}$) positif. $u_{n,m}^{d,x}$ est donc composé d'une onde plane propagative (exposant p , propagation dans le sens des z décroissants) et contra-propagative (exposant c , propagation dans le sens des z croissants). De plus, les COS du champ diffracté E_d imposent que:

$$\forall (n, m) \in \mathbb{Z}^2 \begin{cases} e_{n,m}^{x,p} = 0 & \text{pour } z > z_0 \\ e_{n,m}^{x,c} = 0 & \text{pour } z < z_N \end{cases}. \quad (1.2.59)$$

Ainsi, comme dans le cas scalaire (c.f. 1.2.1.7), l'équation 1.2.57 permet de déterminer les coefficients $e_{n,m}^{x,c}$ (respectivement $e_{n,m}^{x,p}$) par double intégration numérique (méthode des trapèzes) d'une coupe de champ à une altitude z_C arbitrairement fixée dans le superstrat (respectivement substrat). Toute cette méthode de calcul reste bien entendu valable pour les composantes E_y^d et E_z^d du champ et les coefficients $e_{n,m}^{y,\{c,p\}}$ et $e_{n,m}^{z,\{c,p\}}$ s'obtiennent numériquement de la même manière.

Les efficacités de diffraction des différents ordres transmis et réfléchis du réseau sont alors définies comme:

$$\forall (n, m) \in \mathbb{Z}^2 \begin{cases} R_{n,m} = \frac{\gamma_{n,m}^+}{\gamma_0} e_{n,m}^c(z_C) \cdot \overline{e_{n,m}^c(z_C)} & \text{pour } z_C > z_0 \\ T_{n,m} = \frac{\gamma_{n,m}^-}{\gamma_0} e_{n,m}^p(z_C) \cdot \overline{e_{n,m}^p(z_C)} & \text{pour } z_C < z_N \end{cases}, \quad (1.2.60)$$

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

Afin de compléter le bilan d'énergie du réseau, il reste à calculer les pertes dues à l'effet Joule au sein des différents éléments absorbants du réseau. Soit Ω_p , un domaine volumique de la structure contenant un diélectrique à pertes, isotrope, de permittivité complexe $\epsilon_r = \epsilon' + i\epsilon''$ et non-magnétique $\mu_r = 1$. Soit $\hat{\mathbf{n}}$ le vecteur unitaire de la normale extérieure à sa surface fermée S_p . En conduisant le même raisonnement que dans le cas scalaire (c.f. sous-section 1.2.1.7, les pertes par effet Joule Q_p au sein de Ω_p sont obtenues en calculant:

$$Q_p = \frac{1}{2} \int_{\Omega_p} d\Omega_p \omega \epsilon'' |\mathbf{E}|^2. \quad (1.2.61)$$

La FEM donnant accès à la carte de champ de E au sein des différents volumes de la structure et notamment ceux contenant des matériaux absorbants, cette quantité est calculée facilement et ainsi connaissant également les efficacités de diffractions des ordres propagatifs transmis et réfléchis du réseau, un bilan d'énergie complet de la structure est accessible:

$$\sum_{n,m} R_{n,m} + \sum_{n,m} T_{n,m} + \sum_p Q_p = 1. \quad (1.2.62)$$

Ce bilan d'énergie constitue, comme dans le cas scalaire, une vérification de la validité des résultats numériques obtenus grâce à la FEM.

1.3 Application de la méthode FEM en champ diffracté: validation et cas limites

Dans cette section, la validation et les limites éventuelles des résultats numériques obtenus par la FEM en champ diffracté sont exposées pour deux structures:

- un réseau bi-périodiques de nanocônes d'or déposés sur un substrat en or [65],
- un réseau bi-périodiques de cylindres diélectriques déposés sur un substrat en verre [66].

Ces différentes structures sont fondamentalement différentes, l'une incorporant du métal donc des pertes et un facteur de qualité moindre, l'autre des diélectriques sans pertes et un facteur de qualité très élevé. La validation des résultats FEM s'effectue par comparaison numérique avec deux méthodes complètement indépendantes: la méthode de transformation de coordonnées (C-Method [34, 35]) pour le réseau de nanocônes d'or et la FMM (Fourier Modal Method ou RCWA [36–38]) pour le réseau de cylindres diélectriques.

1.3.1 Validation des résultats de la FEM pour les résonances intervenant dans un réseau bi-périodique de nanocônes d'or

Dans cette sous-section, nous allons valider les résultats de la formulation FEM en champ diffracté de la sous-section 1.2.2 obtenus à la résonance d'un réseau de nanocônes d'or en les comparant aux résultats numériques obtenus avec une méthode de simulation complètement indépendante, à savoir la méthode de transformation de coordonnées [34, 35]. Ces réseaux bi-périodiques à sillons profonds sont le siège de phénomènes d'exaltation de champs électromagnétiques géante corrélée à une absorption totale de la lumière. Une étude plus détaillée des phénomènes physiques présents au sein de ces structures a fait l'objet d'une publication [65]. Ces résultats ne seront pas consignés dans ce travail de thèse. En se plaçant dans les

conditions d'éclairement de résonance du réseau où l'exaltation géante a lieu, les phénomènes sont extrêmes et les longueurs d'onde au sein du métal sont très faibles. Le facteur de qualité de la résonance est très élevé de par l'effet de pointe mais reste limité du fait de l'emploi d'un métal à pertes. Un accord entre les résultats de simulations de deux méthodes complètement différentes nous a permis de valider les résultats de celles-ci pour des conditions d'éclairement arbitraire (angle d'incidence et polarisation).

1.3.1.1 Géométrie, conditions d'éclairement et méthodes de simulation

L'onde plane incidente possède une longueur d'onde λ et un angle d'incidence polaire θ_0 . L'angle azimutal φ est nul. Le champ électrique incident est polarisé dans le plan d'incidence de l'onde (polarisation p) et son amplitude est fixée à 1 V.m^{-1} . Le superstrat est constitué d'air. Les réseaux de diffraction simulés possèdent une périodicité bidimensionnelle $d = d_x = d_y = 500 \text{ nm}$ le long des deux directions x et y . Cette période relativement faible vis-à-vis de la longueur d'onde incidente choisie ($\lambda \simeq 632.8 \text{ nm}$) assure que la structure ne supporte que l'ordre de diffraction spéculaire $(0, 0)$ réfléchi du réseau. La cellule élémentaire du réseau simulé est constituée d'un cône d'or déposé sur un substrat de $t = 100 \text{ nm}$ d'or. L'angle entre la génératrice et la base du cône est fixé à 40.2° . De façon à s'affranchir des artefacts numériques potentiellement dus aux singularités de champ à la pointe des cônes, ceux-ci ont été tronqués et recouverts de calottes sphériques de 7.74 nm de rayon. Le rayon de celles-ci a été choisi de tel façon que les calottes sphériques soient tangentes à la surface des cônes tronqués. Cette géométrie de cônes avec des pointes arrondies a été choisie pour assurer que ni la forme, ni le rayon de courbure de la calotte ne dépendent de la hauteur du cône. Les cônes possèdent une hauteur $h = 205 \text{ nm}$ et un rayon de base $r = 247 \text{ nm}$. Les paramètres de la géométrie du réseau de cônes ont été choisis pour que le réseau absorbe totalement la lumière incidente à $\lambda = 632.8 \text{ nm}$. Le schéma de la figure 1.3.1 représente le réseau simulé.

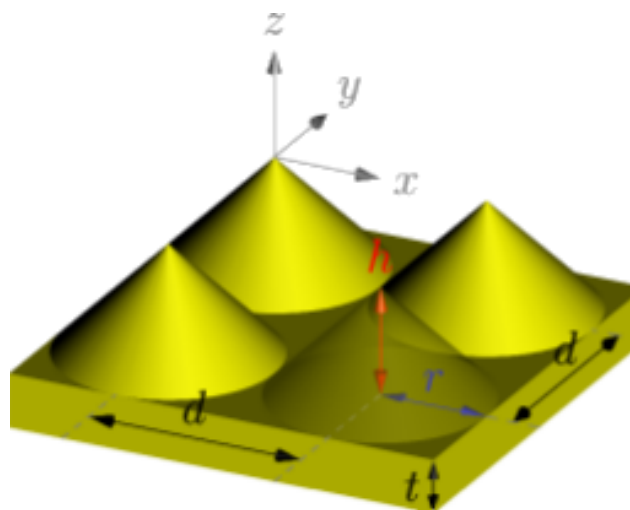


Fig. 1.3.1 – Schéma du réseau de nano-cônes d'or simulé.

En ce qui concerne les méthodes de simulation employées pour ces réseaux, la FEM et la formulation en champ diffracté décrite dans la sous-section 1.2.2 est utilisée. Les résultats de la FEM ont ensuite été comparés à une méthode de simulation complètement indépendante, à savoir la méthode de transformation de coordonnées (ou méthode C [34, 35]) comme expliqué dans la prochaine sous-section 1.3.1.2. Quand λ vaut 632.8 nm, l'indice de réfraction de l'or est égale à $n_{Au} = 0.161952 + i3.21$. En présence de dispersion, les valeurs choisies pour la permittivité diélectrique relative de l'or sont celles de [6].

1.3.1.2 Absorption totale de la lumière à la résonance : validation des résultats FEM

Comme le réseau ne supporte que l'ordre de diffraction spéculaire réfléchi, seul l'efficacité de diffraction de cet ordre ($R_{0,0}$) sera analysée. Les figures 1.3.2 et 1.3.3 présentent les résultats numériques de dépendance angulaire et spectrale de la réflectivité obtenus via la FEM et via la méthode de transformation de coordonnées pour les réseaux (méthode C[34, 35]). La figure

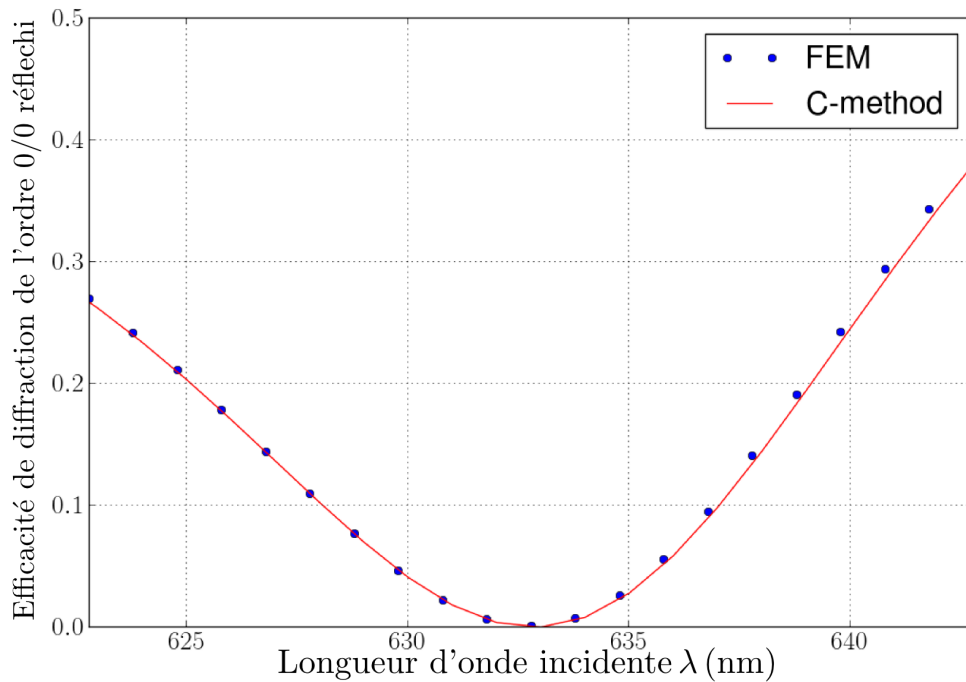


Fig. 1.3.2 – Efficacité de diffraction de l'ordre spéculaire réfléchi en fonction de la longueur d'onde de l'onde plane incidente λ , ± 10 nm autour de la longueur d'onde d'absorption totale pour $\theta_0 = \theta_p = 5.86^\circ$ pour les deux méthodes de simulation employées.

1.3.2 présente la dépendance spectrale de la réflectivité autour de $\lambda = 632.8$ nm pour un angle d'incidence polaire $\theta_0 = 5.86^\circ$. L'absorption totale de la lumière incidente est atteinte à la longueur d'onde de résonance $\lambda = 632.8$ nm. Les résultats de simulations des deux méthodes numériques sont en excellent accord. La dépendance angulaire de la réflectivité présentée par la figure 1.3.3 confirme que l'absorption totale de la lumière a lieu lorsque $\theta_0 = 5.86^\circ$ et $\lambda = 632.8$ nm. Les résultats de simulations des deux méthodes numériques sont de nouveau en excellent

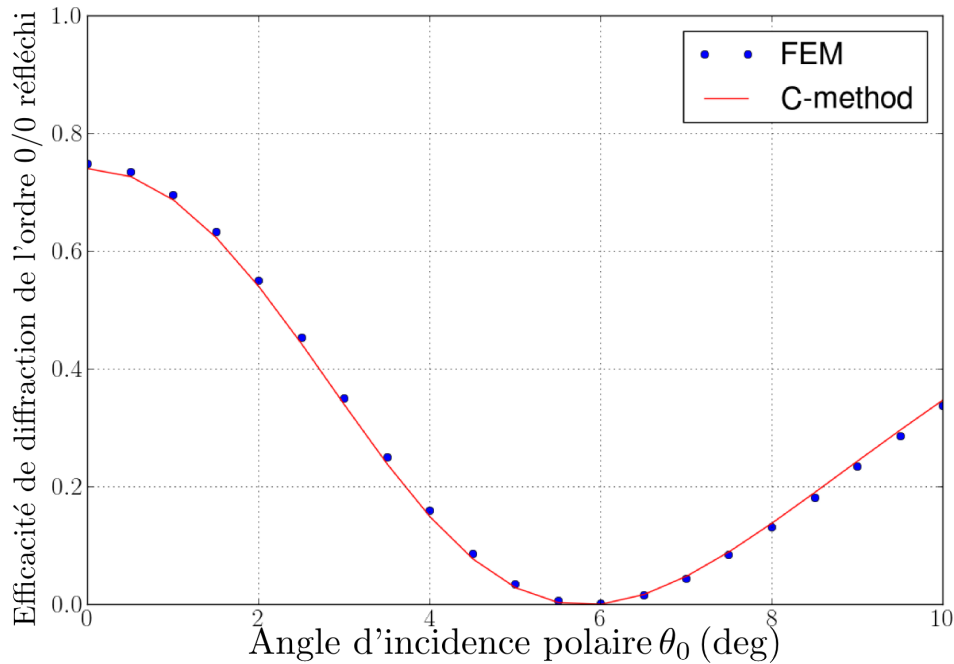


Fig. 1.3.3 – Efficacité de diffraction de l'ordre spéculaire réfléchi en fonction de l'angle polaire d'incidence $\theta_0 \in [0^\circ, 10^\circ]$, pour $\lambda = 632.8$ nm pour les deux méthodes de simulation employées.

accord.

Ainsi, dans cette sous-section, la validité des résultats numériques obtenus à l'aide de la FEM en champ diffracté a été montrée par comparaison avec les résultats numériques obtenus via la méthode de transformation de coordonnées. Ces deux méthodes sont complètement différentes: alors que la FEM permet d'obtenir directement les cartes de champs au sein de la structure électromagnétique et ainsi de remonter aux efficacités de diffraction du réseau et aux pertes au sein des éléments absorbants, la méthode de transformation de coordonnées donne quant à elle accès aux efficacités de diffraction et permet alors de remonter aux cartes de champs au sein de la structure et aux pertes.

Un des avantages de la FEM réside dans la possibilité de simuler la diffraction d'un élément diffractif seul (dans notre cas un cône seul) ce qui n'est pas possible via la méthode de transformation de coordonnées. Par exemple, la figure suivante 1.3.4 représente la carte de vecteur de Poynting total dans le plan O_{xz} pour deux cônes uniques de hauteurs différentes et ceci pour les mêmes conditions d'éclairage que définies en 1.3.1.1. L'obtention de ces cartes de champs pour des cônes uniques a été d'intérêt crucial pour la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu au sein des structures de réseaux de nanocônes d'or conduisant aux phénomènes d'exaltation de champs géante [65].

En ce qui concerne les simulations effectuées par la FEM, le caractère fortement résonant de la structure a conduit à un maillage fin de la cellule de calcul du réseau qui est elle-même déjà relativement grande. Ainsi, toute la mémoire vive (192 Go) de la station de calcul utilisée a été allouée pour l'inversion d'un problème à 3 millions de degrés de liberté. La taille de ce

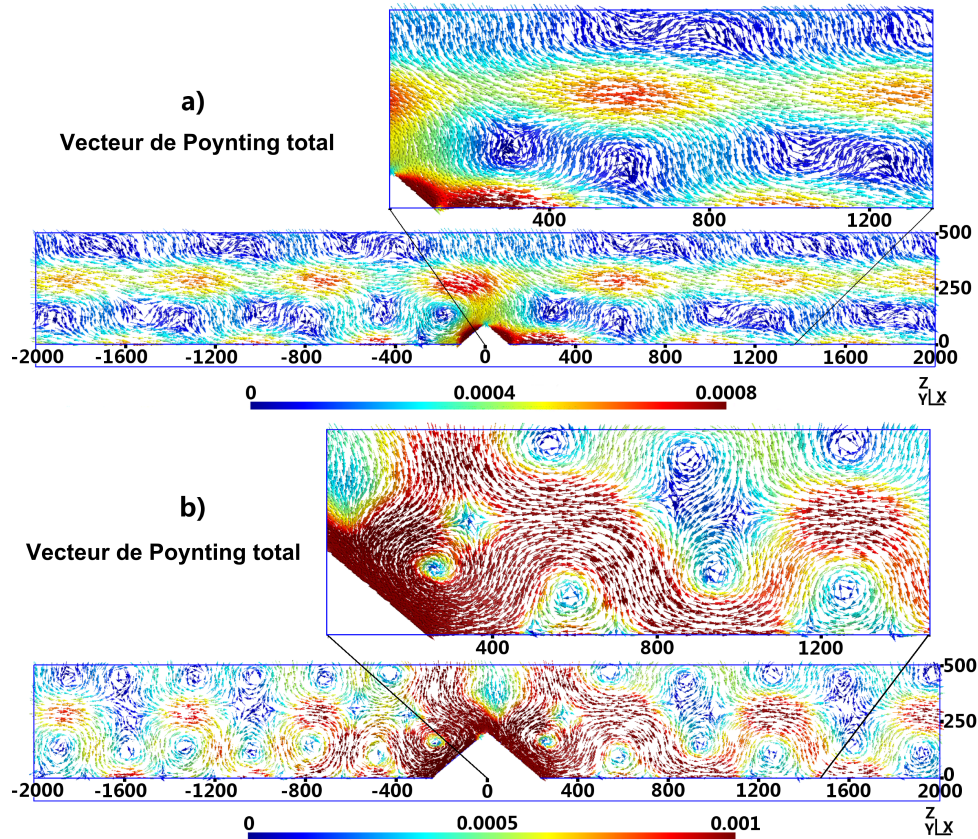


Fig. 1.3.4 – Vecteur de Poynting total pour deux hauteurs de cônes différentes, $h = 95$ nm (a) et $h = 205$ nm (b), dans le plan O_{xz} .

problème ne sera pas dépassée pour toutes les simulations effectuées au cours de cette Thèse. La validité des résultats de simulations obtenus et notamment ceux à résonance (qui est extrêmement forte pour un réseau bidimensionnel métallique) nous permet donc de nous assurer de la légitimité des résultats pouvant être obtenus pour la majorité des structures de réseaux de diffraction mono et bidimensionnels de nanoparticules métalliques.

1.3.2 Limites de la FEM en champ diffracté: Résultats obtenus la résonance d'un réseau bi-périodique de cylindres diélectriques

Dans cette sous-section, nous allons montrer la limite des résultats de la formulation FEM en champ diffracté de la sous-section 1.2.2 obtenus à la résonance d'un réseau de cylindres diélectriques. Néanmoins, en comparant ces résultats et notamment les cartes de champs électriques totales à ceux obtenus avec une méthode de simulation complètement indépendante à savoir la méthode FMM (ou RCWA), un accord qualitatif a pu être observé, permettant de valider les tendances des résultats de la FEM bien que ceux-ci n'aient pas convergé. L'étude des réseaux de cylindres diélectriques pouvant être utilisés pour des applications de filtrage à forte

tolérance angulaire a fait l'objet d'une publication [66]. Cette étude est avant tout basée sur les résultats de la FMM. Bien que ceux de la FEM aient été utilisés afin de valider les tendances, ils n'ont pas été utilisés.

1.3.2.1 Géométrie, conditions d'éclairement et méthode de simulation

La structure étudiée est un réseau bi-périodique de cylindres diélectriques verticaux à section circulaire orientés suivant l'axe O_z et est représentée par la figure 1.3.5. Ses périodes suivant les axes O_x et O_y sont égales à $d_x = d_y = 1\mu\text{m}$. La hauteur des cylindres vaut $h = 491\text{ nm}$ et leur diamètre vaut $\Phi = 795\text{ nm}$. L'onde plane incidente possède une incidence normale et son champ électrique est polarisé linéairement dans le plan O_{xz} . Sa longueur d'onde λ est choisie pour que, près de l'incidence normale, aucun ordre autre que les ordres spéculaires transmis et réfléchis $(0, 0)$ ne se propagent dans le substrat et dans le superstrat. Le substrat est constitué de verre d'indice de réfraction $n_s = 1.5$. Les cylindres sont constitués d'un diélectrique d'indice de réfraction $n_f = 3.47$ et sont déposés sur le substrat. Ils sont entourés par de l'air qui constitue également le superstrat.

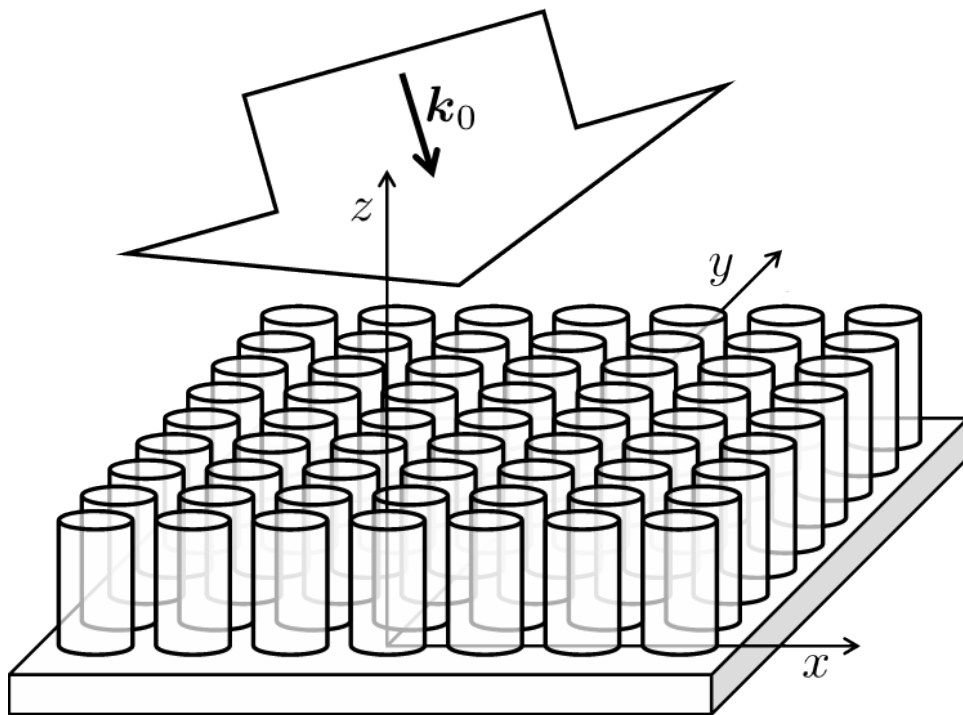


Fig. 1.3.5 – Schéma du réseau de cylindres diélectriques simulé.

1.3.2.2 Résonance du réseau de cylindres diélectriques: limites des résultats obtenus via la FEM

La figure suivante 1.3.6 présente le bilan d'énergie de la structure pour une onde plane d'incidence en incidence normale aux alentours de la longueur d'onde de résonance évaluée

par la FEM à 1547 nm. En observant la figure 1.3.6, on peut constater que les résultats sont

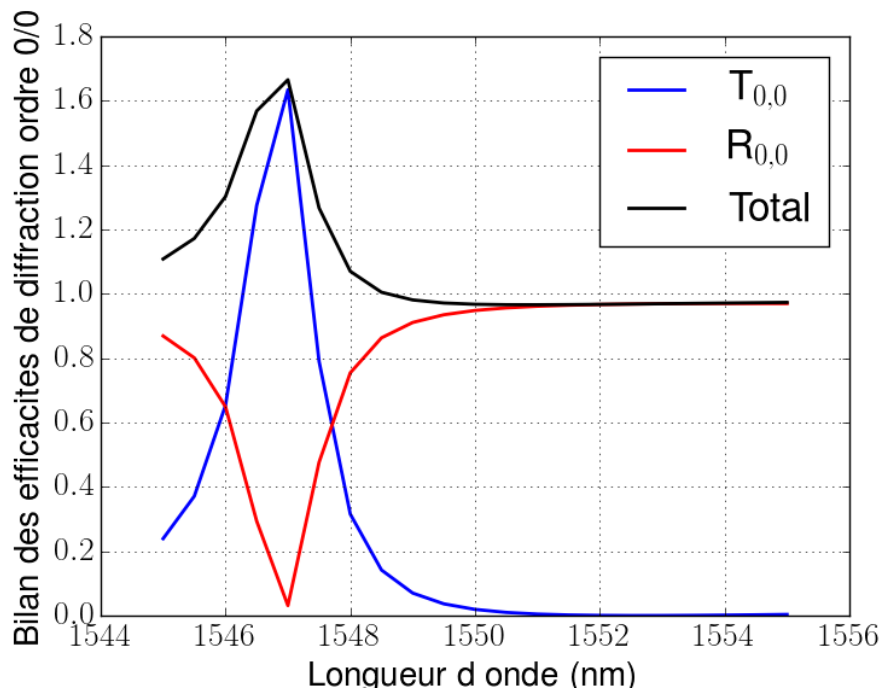


Fig. 1.3.6 – Bilan d'énergie obtenu à l'aide de la FEM pour la structure de réseau de cylindres diélectriques.

corrects hors résonance (le bilan d'énergie est correct à quelques % près pour des longueurs d'onde supérieures à 1552 nm). Néanmoins, à résonance (1547 nm), le bilan d'énergie n'est pas satisfaisant. Ces bilans d'énergie non-unitaires sont surprenants car il peut être en effet montré qu'au niveau discret des éléments finis, la conservation de l'énergie est vérifiée ([129], p.25). Les erreurs des bilans d'énergie pourraient provenir de la technique d'obtention des valeurs des différentes composantes des efficacités de diffraction. Celles-ci sont en effet obtenues au travers de cartes de champs dont les valeurs sont interpolés depuis les cartes de champs brutes issus de la FEM. Ces interpolations des valeurs des champs pourraient être à l'origine des écarts observés à résonance dans le cas considéré. Néanmoins, la carte de champ électrique total à résonance obtenue par la FEM pour cette structure a été comparée à celle obtenue à l'aide de la méthode numérique de simulation FMM et un accord qualitatif a tout de même été observé. La convergence des résultats de la FMM avait, au préalable, été vérifiée. La figure 1.3.7 présente cette comparaison. Pour améliorer la précision des résultats de la FEM, plusieurs solutions sont possibles:

- augmenter la finesse du maillage ce qui nécessite une machine de calcul possédant plus de mémoire vive,
- utiliser les deux symétries présentes pour la condition d'éclairement en incidence normale choisie afin de réduire la dimension de la cellule de calcul et ainsi raffiner le maillage sur une cellule de volume diminué ce qui permettrait d'augmenter la précision des calculs.

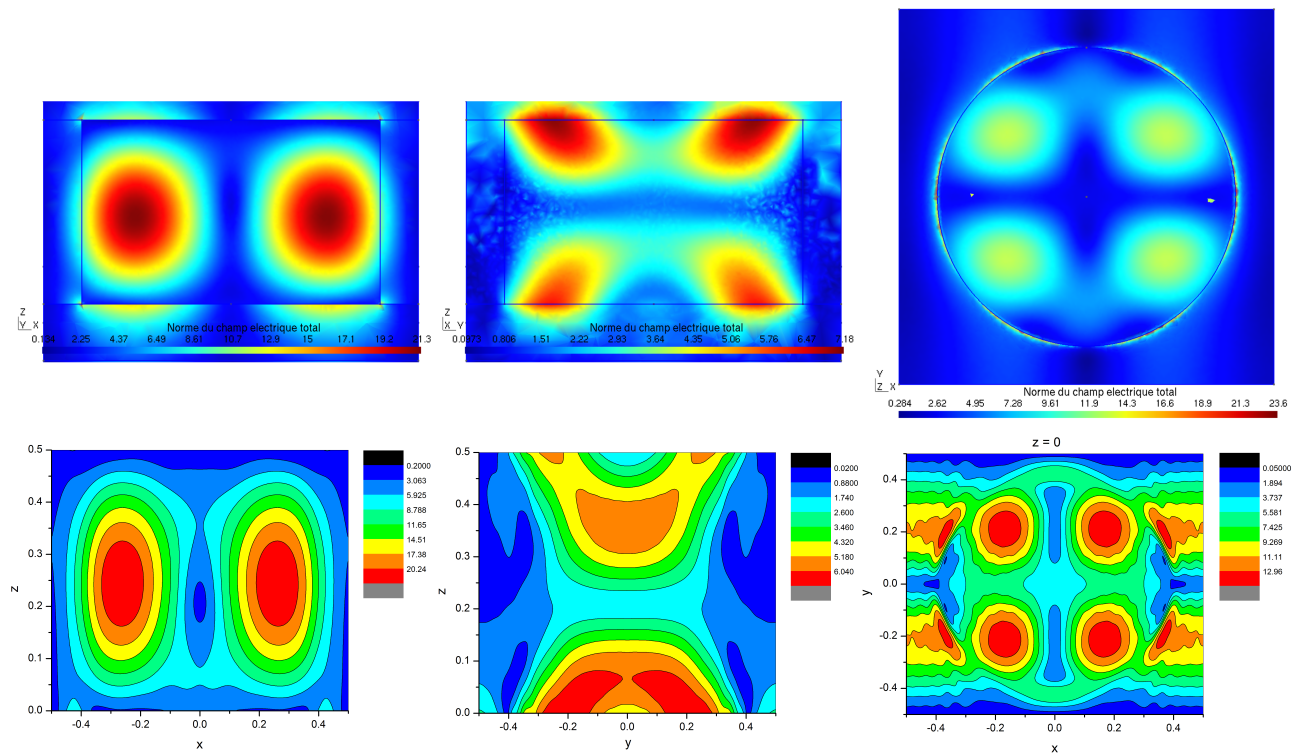


Fig. 1.3.7 – Comparaison des cartes de la norme du champ électrique total à la résonance obtenues avec la FEM (en haut) et la FMM (en bas) pour trois coupes différentes le plan O_{xz} à gauche, le plan O_{yz} au milieu, le plan O_{xy} à la base du cylindre (à l’interface substrat/cylindre) à droite.

Bien que quantitativement faux, les résultats de la FEM ont néanmoins pu appuyer les résultats obtenus par la FMM sur ce type de structure. Comme mentionné précédemment, ces résultats ont fait l’objet d’une publication [66] qui concerne l’étude, au travers d’une analyse modale, des phénomènes physiques mis en jeu à résonance dans ce type de structures, qui peuvent être utilisées pour des applications de filtrage à forte tolérance angulaire. Ils ne seront pas relatés dans ce manuscrit.

CONCLUSIONS DU CHAPITRE I

Dans ce chapitre, les formulations FEM en champ diffracté pour les réseaux de diffraction mono et bidimensionnels précédemment développées à l'Institut Fresnel ont été rappelées. Le concept de PML en tant que transformation géométrique complexe de l'espace a été introduit. La formulation FEM 3D et son implémentation numérique à travers les logiciels Gmsh et GetDP a ensuite été validée pour une configuration de réseau de diffraction bidimensionnel de nano-cônes d'or. La validation s'est faite à travers la comparaison des résultats avec ceux d'une méthode complètement indépendante, à savoir la méthode de transformation de coordonnées. La validité de ces résultats dans une configuration extrêmement résonante de réseaux métalliques de diffraction nous permet de nous assurer de la conformité des résultats numériques de la méthode appliquée à deux types de réseaux métalliques nettement moins résonants qui font l'objet du chapitre suivant (réseaux monodimensionnels de rubans et réseaux bidimensionnels de nanocylindres). La limite de la formulation FEM 3D en champ diffracté a également été montrée dans un cas ultra-résonant impliquant des matériaux diélectriques sans pertes.

CHAPITRE 2

APPLICATION DE LA MÉTHODE AU FILTRAGE SPECTRAL DANS LE VISIBLE

INTRODUCTION AU CHAPITRE II

Comme mentionné en introduction générale, un des objectifs appliqués de cette Thèse est de démontrer la possibilité de réalisation de composants optiques planaires basés sur des nanostructures métalliques (plasmoniques). Ces composants peuvent trouver de multiples applications en particulier dans le cadre de la réalité augmentée, comme pour les optiques de Viseur Tête Haute (VTH). Par exemple, le constructeur automobile Groupe PSA, partenaire industriel du projet PLANISSIMO dans lequel s'inscrit cette Thèse, cherche à afficher directement dans le champ de vision du conducteur un certain nombre d'informations relatives à son environnement de conduite. Ainsi, ces composants optiques doivent posséder deux fonctions principales (*c.f.* figure .1):

- une fonction de filtrage optique: le composant optique doit posséder des propriétés de réflexion à une (ou plusieurs) longueur d'onde de travail correspondant à la (aux) longueur(s) d'onde de la source de projection du Viseur Tête Haute afin de réfléchir l'image projetée sur le pare-brise ou sur une lame dédiée à l'affichage. Ce composant optique doit également posséder des propriétés de transparence globale sur le spectre visible afin de garantir que le conducteur utilisant le VTH puisse voir la scène (l'environnement extérieur de conduite) se situant derrière la VTH,
- une fonction de focalisation optique: l'image réfléchi par le pare-brise ou la lame du VTH doit idéalement être projetée dans le champ de vision du conducteur sans que celui-ci n'ait à quitter l'œil de la route et ceci sans accommodation. Ainsi, le composant optique doit posséder des propriétés de focalisation de l'image réfléchi tout en garantissant que l'image provenant de l'environnement extérieur de conduite ne soit idéalement pas déformée par le VTH.

Les nanostructures plasmoniques incorporent des nanoparticules métalliques (typiquement de l'or ou de l'argent) dont les propriétés optiques dépendent fortement de la nature du métal employé, de la forme et de la taille des nanoparticules, de leur arrangement dans l'espace, des conditions d'éclairement de celle-ci (longueur d'onde, incidence et polarisation), *etc ...*

Dans la première partie de ce chapitre, la possibilité d'utilisation de réseaux de nanoparticules plasmoniques pour réaliser la fonction de filtrage est étudiée via la formulation FEM exposée au chapitre 1. Dans la seconde partie de ce chapitre, une configuration astucieuse, mettant

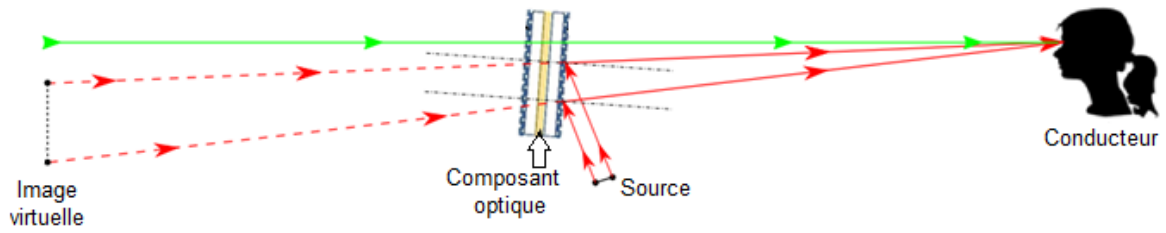


Fig. .1 – Schéma de principe du composant optique idéal à réaliser en condition d'utilisation. Le rayon en vert représente un rayon lumineux en provenance de la scène extérieure de conduite traversant le composant optique qui apparaît comme transparent pour le conducteur. Les rayons rouges représentent des rayons lumineux en provenance de la source. Le composant optique permet de les réfléchir et de former une image virtuelle de la source qui vient se superposer à la scène extérieure de conduite observée par le conducteur.

en jeu des composants d'optique classique (lentilles et prismes classiques ou de Fresnel), est présentée afin de réaliser la fonction de focalisation optique du composant et de permettre une réflexion non-spéculaire de l'image à projeter.

Contenu du Chapitre

2.1	Fonction de filtrage	47
2.1.1	Introduction	47
2.1.2	Filtrage par réseau de rubans métalliques	48
2.1.2.1	Géométries initiales et influence des couches de conduction et de l'encapsulation dans la silice	50
2.1.2.2	Analyse de la carte de champ à résonance des réseaux de rubans	56
2.1.2.3	Influence de la largeur des rubans	57
2.1.2.4	Influence de la hauteur des rubans	58
2.1.2.5	Influence de la périodicité du réseau	60
2.1.2.6	Influence de l'angle d'incidence θ_0 de l'onde plane d'illumination	61
2.1.2.7	Synthèse des différents paramètres d'influence du filtrage	62
2.1.2.8	Optimisation de filtre avec rubans en argent pour l'application VTH	64
2.1.2.9	Conclusions intermédiaires	67
2.1.3	Design de filtre de nanocylindres	68
2.1.3.1	Matériaux et géométrie générique des réseaux de nanocylindres.	69
2.1.3.2	Conditions d'illumination.	69
2.1.3.3	Comparaison de résultats de simulations avec des résultats de mesures en transmission.	70
2.1.3.4	Analyse paramétrique et design des propriétés des filtres	72
2.1.3.5	Homogénéisation des structures de nanocylindres	81
2.1.3.6	Conclusions intermédiaires	85
2.1.4	Premières réalisations expérimentales, conclusions et perspectives sur le design de filtres pour l'application VTH par l'utilisation de réseaux de nanoparticules métalliques.	87
2.2	Fonction de focalisation et de réflexion non spéculaire	92

2.1 Fonction de filtrage

2.1.1 Introduction

La réalisation de composants optiques de filtrage dans le domaine visible grâce à des nanostructures plasmoniques a déjà fait l'objet de multiples études dans la littérature. Dans [28], des nano-disques métalliques (en argent ou en or), de différents diamètres, et organisés en réseau sont déposés sur un film métallique (en argent ou en or) lui-même déposé sur un substrat en Silicium. La couleur réfléchi par cette nanostructure dépendant du diamètre des nano-disques, une image en couleur a été imprimée avec une résolution allant jusqu'à la limite de diffraction optique. Dans [29], un réseau dense de nanofils d'argent est déposé sur un substrat de quartz pour créer des filtres optiques réfléchissants à des longueurs d'onde choisies du domaine visible dépendant de la géométrie du réseau et des fils. Cependant, dans les deux publications précédentes, les propriétés de transmission des structures fabriquées sont pratiquement nulles, rendant l'utilisation de ces solutions inadéquate à l'application VTH.

Des fonctions de filtrage en transmission sur le spectre visible avec une haute résolution spatiale ont été obtenues dans [31], où l'utilisation de nano-résonateurs plasmoniques formés par des réseaux de structures constituées d'empilement sub-longueur d'onde de Métal-Isolant-Métal (MIM), permet de manipuler efficacement la lumière et de contrôler les propriétés du spectre en transmission des filtres. Dans [32], des filtres colorés par soustraction de couleur sont réalisés avec une seule couche nanostructurée de métal, grâce au phénomène contre-intuitif de transmission extraordinaire.

Les réalisations qui se rapprochent le plus de la fonction de filtrage du composant optique à concevoir sont rapportées dans [30] et [33]. Dans [30], des nanoparticules Core-Shell, dont le cœur est en silice et dont la coquille est en argent, sont mélangées dans une matrice en polymère transparente liquide. Cette solution transparente est déposée sur une plaque de verre puis en séchant devient un film composite solide. Les nanoparticules plasmoniques Core-Shell résonant à certaines longueurs d'onde qui dépendent du diamètre du cœur et de la coquille, la plaque de verre et son film en polymère sont capables de supporter une fonction d'afficheur, globalement transparent, en utilisant la diffusion des nanoparticules à leurs longueurs d'onde de résonance. Le même principe est utilisé dans [33] mais avec des nanocubes d'argent déposés sur une couche mince de TiO_2 , elle-même déposée sur un substrat en verre.

Bien que dans ces deux dernières publications, la réalisation d'un afficheur transparent par l'utilisation de nanoparticules métalliques soit démontrée, le phénomène mis en jeu est la diffusion des nanoparticules métalliques. Ainsi, l'image projetée, réfléchi par le dispositif, sera obligatoirement formée dans le plan formé par la structure. Aussi, afin de réfléchir les images projetées de façon cohérente et ainsi de pouvoir focaliser celles-ci en modelant le front d'onde du faisceau réfléchi, il convient d'utiliser des réseaux de diffraction et notamment les différents ordres de diffraction en réflexion formés par le réseau. En combinant les propriétés de

résonance des nanoparticules métalliques et leur organisation en réseau permettant la réflexion cohérente des images projetées (notamment dans l'ordre spéculaire réfléchi du réseau), il serait alors possible de focaliser les images réfléchies par la structure en utilisant une fonction de focalisation indépendante de la fonction de filtrage.

Dans cette section, les propriétés de deux types de réseaux de nanoparticules métalliques sont étudiées via la formulation FEM présentée dans le chapitre 1:

- des réseaux mono-dimensionnels de nano-rubans métalliques à section rectangulaire,
- des réseaux bi-dimensionnels de nano-cylindres métalliques à section elliptique.

Seule la réflexion spéculaire de ces filtres sera étudiée pour l'application VTH. L'angle polaire de l'onde plane incidente éclairant les réseaux sera donc généralement fixé à $\theta_0 = 45^\circ$, l'angle de travail de l'application VTH du projet Planissimo. Ainsi, la période des réseaux considérés sera volontairement choisie comme faible, de l'ordre de 250 nm, afin d'éviter la formation d'ordres propagatifs non-spéculaires sur le domaine visible (qui potentiellement pourraient gêner les autres usagers de la route) et la perte d'énergie lumineuse au sein de ces ordres. Différentes études des paramètres d'influence des structures sur les propriétés des réseaux sont conduites dans ce chapitre, notamment l'influence des matériaux utilisés pour la fabrication, de la géométrie des nanoparticules, de la périodicité du réseau, de la polarisation de la lumière incidente, *etc...* Des règles générales de conception de filtres globalement transparents et réfléchissants à certaines longueurs d'onde par des structures de réseaux de nanoparticules métalliques pour l'application VTH seront tirées de ces études. Des comparaisons entre les résultats de simulations et de mesures sur échantillons réalisés à l'Institut d'Électronique Fondamentale (IEF-ParisSud) seront également présentées.

2.1.2 Filtrage par réseau de rubans métalliques

On souhaite, dans cette partie, trouver le jeu de paramètres optimal d'un réseau de rubans métalliques (hauteur, largeur, espacement, matériaux des rubans et matériaux environnant) permettant de conduire à un composant optique de filtrage semi-réfléchissant et globalement transparent. Il est important de garder à l'esprit que certaines contraintes sont inhérentes à la fabrication de tels réseaux comme la présence de couche de conduction, de couche d'accroche, d'une encapsulation du réseau... Dans un premier temps, à partir d'une géométrie fixée de rubans métalliques, on cherche à évaluer l'effet de ces contraintes de fabrication sur les spectres de ces réseaux. Dans un second temps, une étude paramétrique est menée sur les paramètres du réseau seul afin de comprendre leur effet respectif sur les spectres en réflexion. Enfin, une conclusion intermédiaire présentera les résultats à retenir de ces différentes études.

Les réseaux mono-dimensionnels de rubans simulés possèdent la géométrie générique suivante (depuis la couche inférieure vers la couche supérieure):

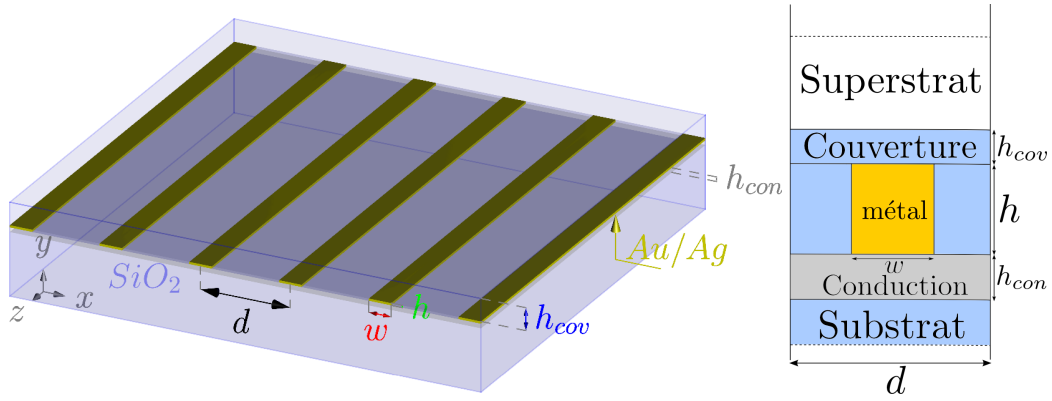


Fig. 2.1.1 – Schéma des réseaux mono-périodiques de rubans étudiés en 3D (à gauche) et en 2D (à droite) dans le plan O_{xy} .

- le substrat constitué de verre (silice amorphe SiO_2) considéré comme semi-infini (donc tronqué par une PML) de permittivité ϵ^- ,
- une couche dite de conduction d'épaisseur h_{con} constituée d'ITO (Indium Thin Oxide) ou de verre: la couche d'ITO est optionnelle et est utilisée lors de la fabrication des échantillons comme couche conductrice permettant d'évacuer les charges accumulées sur la surface lors de la lithographie par faisceau d'électrons,
- une couche comprenant l'élément diffractant (les rubans de largeur w et de hauteur h) constituée de:
 - du matériau encapsulant les rubans,
 - des rubans,
- une couche dite de couverture de hauteur h_{cov} ,
- le superstrat constitué d'air (de vide) considéré comme semi-infini (également tronqué par une PML) de permittivité $\epsilon^+ = 1$.

Cette géométrie est représentée par le schéma de la figure 2.1.1. La périodicité de ces réseaux est notée d .

La méthode de simulation utilisée est basée sur la formulation FEM 2D décrite dans la section 1.2.1 du chapitre 1. Le réseau est illuminé par une onde plane $\mathbf{E}_0 = \mathbf{A}_0 \exp[i \mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{x}]$, où le vecteur d'onde \mathbf{k}^+ est contenu dans le plan O_{xy} et est défini par $\|\mathbf{k}^+\| = k^+ = k_0 = \omega/c$ et l'angle $\theta_0 \in [0, \pi/2[$. Cette onde plane incidente est dite polarisée en p si le champ électrique est contenu dans le plan d'incidence et polarisée en s si le champ électrique est perpendiculaire à ce plan (*c.f.* figure 2.1.2). Les résultats des simulations sont présentés en termes de bilan énergétique du réseau simulé pour λ variant sur le spectre visible, *i.e.* $\lambda \in [380, 780]$ nm.

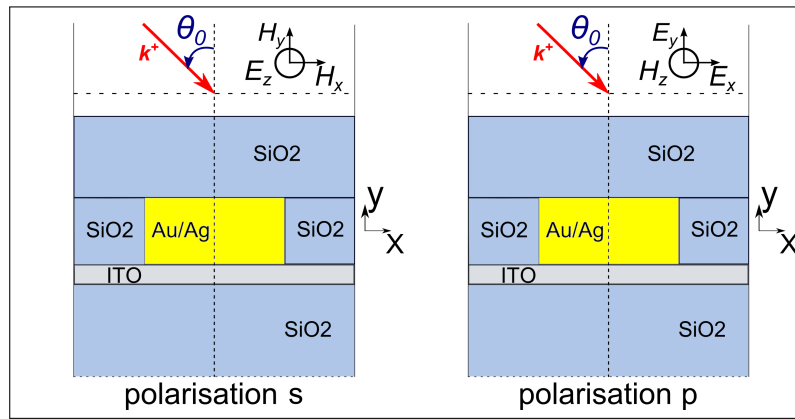


Fig. 2.1.2 – Schéma des conditions d'illumination.

2.1.2.1 Géométries initiales et influence des couches de conduction et de l'encapsulation dans la silice

Dans cette section, en partant d'une géométrie fixée de réseaux de rubans d'or (périodicité d , largeur w et hauteur h des rubans) et de conditions d'illumination fixées conduisant à un pic en réflexion sur le spectre visible, les influences d'une encapsulation en silice, de l'adjonction d'une couche de conduction en ITO puis du dépôt d'une couche de couverture en silice sur les spectres des bilans énergétiques des réseaux sont étudiées. La géométrie initiale choisie est un réseau de rubans d'or. Le substrat est en verre (SiO_2). L'angle d'incidence de l'onde plane θ_0 est fixé à 45° pour se rapprocher des conditions d'utilisation de la VTH. Les deux cas de polarisation s et p sont considérés. La périodicité d est fixée à 250 nm, la largeur des rubans à $w = 67$ nm et leur hauteur à $h = 20$ nm. La largeur w et la hauteur h ont, quant à elles, été choisies de telle façon qu'en polarisation p , un pic en réflexion (R_0) dû à la résonance plasmonique des rubans soit observé sur le spectre visible.

Quatre agencements de ces rubans, allant d'une configuration technologiquement naïve vers une configuration réaliste, ont été simulés et sont schématisés par la figure 2.1.3:

- Configuration (a): les rubans d'or sont posés sur le substrat, il n'y a ni couche de conduction, ni couche de couverture. La couche située à l'extérieur des rubans est constituée d'air.
- Configuration (b): les rubans d'or sont entourés par de la silice, il n'y a ni couche de conduction, ni couche de couverture. La couche située à l'extérieur des rubans est donc constituée de silice.
- Configuration (c): les rubans sont posés sur une couche de conduction constituée d'ITO (Indium Thin Oxide) de hauteur $h_{con} = 40$ nm, la couche située à l'extérieur des rubans est constituée de silice et il n'y a pas de couche de couverture.
- Configuration (d): les rubans sont posés sur une couche de conduction constituée d'ITO de hauteur $h_{con} = 40$ nm, la couche située à l'extérieur des rubans est constituée de silice et une couche de couverture en silice de hauteur $h_{cov} = 100$ nm est présente.

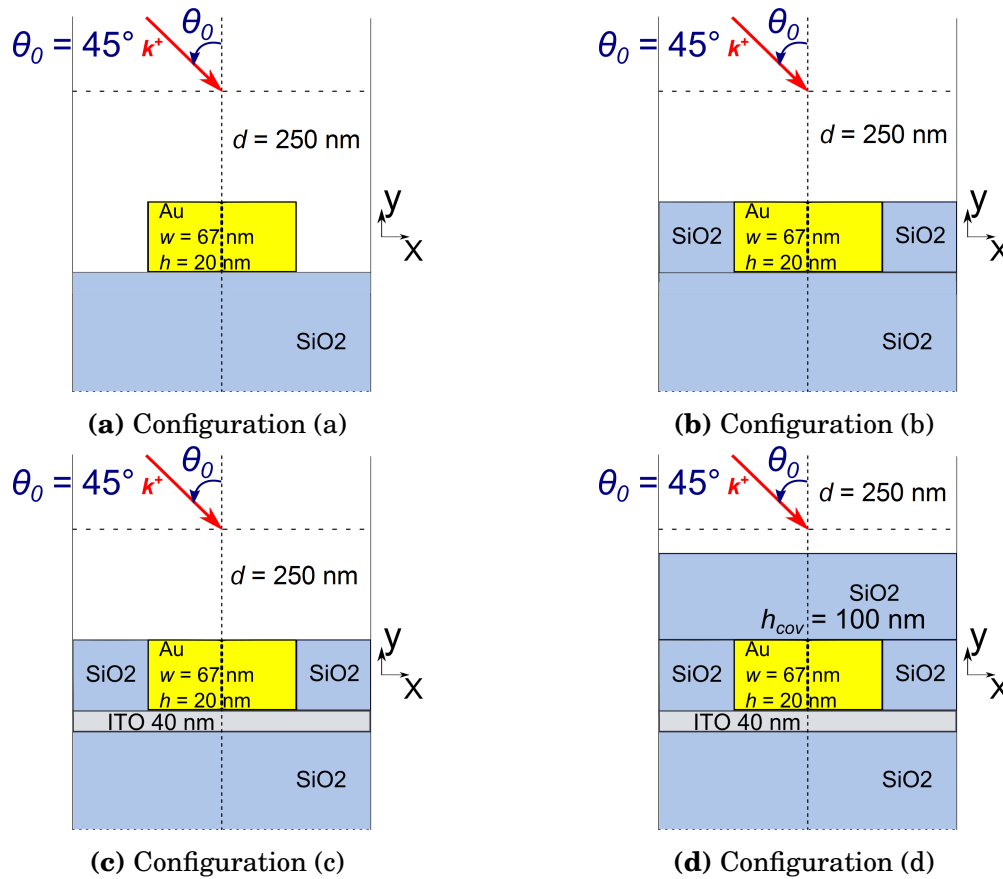


Fig. 2.1.3 – Schéma des configurations de réseaux de rubans (a), (b), (c) et (d).

Les indices optiques utilisés lors de ces simulations proviennent de données expérimentales tabulées de la littérature: [7] pour la silice, [79] pour l'or et de [130] pour l'ITO. Tous les matériaux de la structure sont considérés comme non-magnétiques ($\mu_r = 1$).

Les figures suivantes 2.1.4 à 2.1.7 présentent les bilans d'énergie de ces quatre réseaux sur le spectre visible pour les deux cas de polarisations. L'énergie incidente se décompose en efficacités de diffraction des différents ordres réfléchis et transmis du réseau ainsi qu'en contribution à l'absorption dans les différents éléments absorbants (rubans et couche de conduction en ITO). Le tableau 2.1 présente les résultats des différentes valeurs moyennes des efficacités totales en transmission et en réflexion (l'efficacité des ordres non-spéculaires étant négligeable $< 7\%$) ainsi que l'absorption dans les rubans d'or et dans la couche de conduction sur le spectre 380-780 nm. On notera également les extremas des valeurs de la réflexion, de la transmission et de l'absorption dans les rubans et dans la couche de conduction à la résonance pour la polarisation p et ce pour les quatre configurations.

La périodicité du réseau d , les dimensions des rubans d'or h et w et l'angle d'incidence θ_0 étant fixés, les seuls paramètres d'influence sur les résultats de simulation sont:

- la polarisation de l'onde plane incidente,
- la présence ou non de silice autour des rubans d'or,

Configuration	Efficacité évaluée	Polarisation			
		<i>s</i>	<i>p</i>		
		Moyenne sur le spectre (%)	Moyenne sur le spectre (%)	Résonance	
Longueur d'onde (nm)	Extremum à la résonance (%)				
Rubans d'or Période $d = 250\text{nm}$ $h_{rub} = 20\text{ nm}$ $w_{rub} = 67\text{ nm}$	Réflexion	17,2	5,3	580	18
	Transmission	76,3	79,8	570	40
	Absorption Rubans	6,5	14,9	565	42
(b) Rubans entourés par le substrat	Réflexion	13,9	9,7	590	30
	Transmission	80	72,3	580	26
	Absorption Rubans	6,1	18	575	48
(c) Rubans entourés par le substrat ITO 40 nm	Réflexion	25,1	17,1	632	40
	Transmission	67,1	61,9	624	20
	Absorption Rubans	3,4	13,7	614	30
	Absorption ITO	4,4	7,3	633	14
(d) Rubans entourés par le substrat ITO 40 nm Couverture SiO2 100 nm	Réflexion	5	13,4	653	36
	Transmission	84,6	61,5	643	17
	Absorption Rubans	4,8	17,1	631	34
	Absorption ITO	5,6	8	650	15

Tab. 2.1 – Tableau de synthèse des résultats de simulations sur les configurations (a), (b), (c) et (d) de réseaux de rubans d'or.

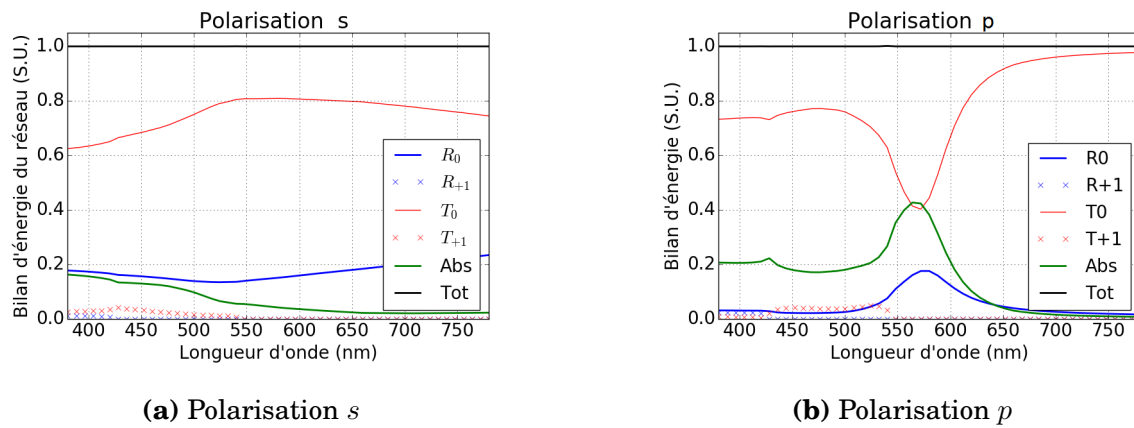


Fig. 2.1.4 – Spectres des efficacités de diffraction et absorption dans le réseau en configuration (a).

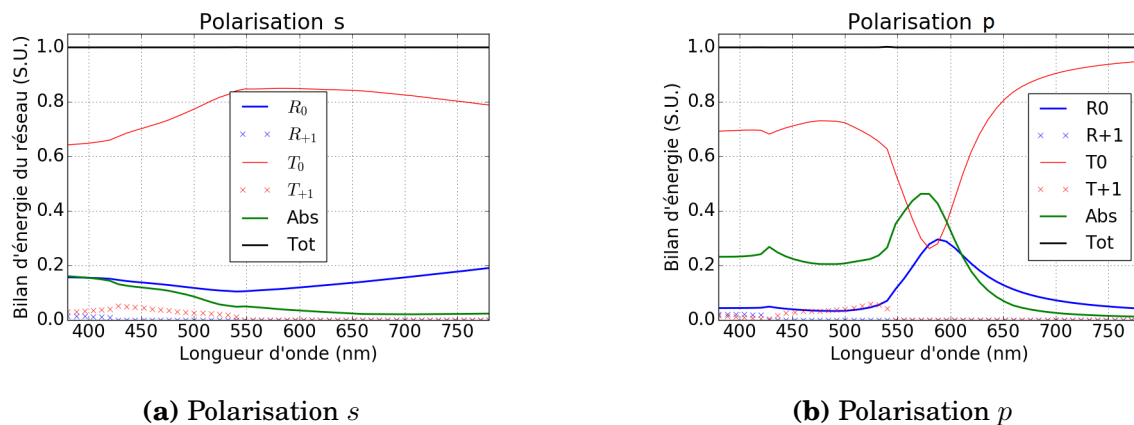


Fig. 2.1.5 – Spectres des efficacités de diffraction et absorption dans le réseau en configuration (b).

- la présence ou non de la couche de conduction en ITO,
- la présence ou non de la couche de couverture en silice.

L'influence de chacun de ces paramètres est analysée ci-dessous.

Dans toutes les configurations simulées, on remarque tout d'abord qu'un large pic en réflexion est présent seulement en polarisation p de l'onde incidente. En polarisation s , ce pic en réflexion à la résonance plasmonique des rubans d'or n'est pas présent et la transmission de l'onde est globalement bonne pour l'ensemble du spectre en longueur d'onde. Cette caractéristique de filtrage en fonction de la polarisation de l'onde incidente est due à l'utilisation de structure à périodicité 1D (rubans infinis d'or périodique suivant l'axe O_x). **Cette caractéristique est particulièrement intéressante dans le cadre de l'application VTH.** En choisissant une source de lumière incidente polarisée linéairement en polarisation p , on peut profiter des effets de résonance plasmonique des rubans d'or pour cette polarisation p afin de réfléchir cette source. La lumière extérieure, non polarisée, ne sera, quant à elle, que partiellement filtrée (par la résonance plasmonique présente pour la composante p de la lumière), il est donc possible de

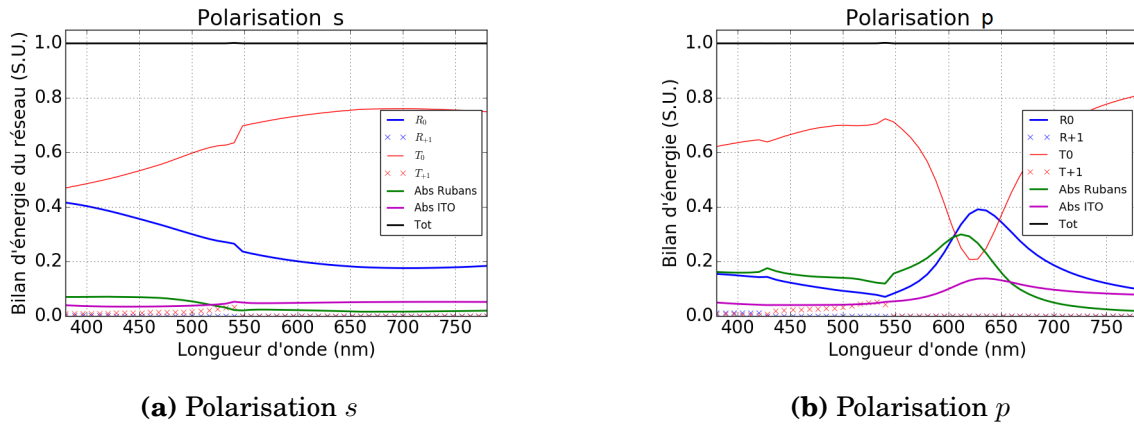


Fig. 2.1.6 – Spectres des efficacités de diffraction et absorption dans le réseau en configuration (c).

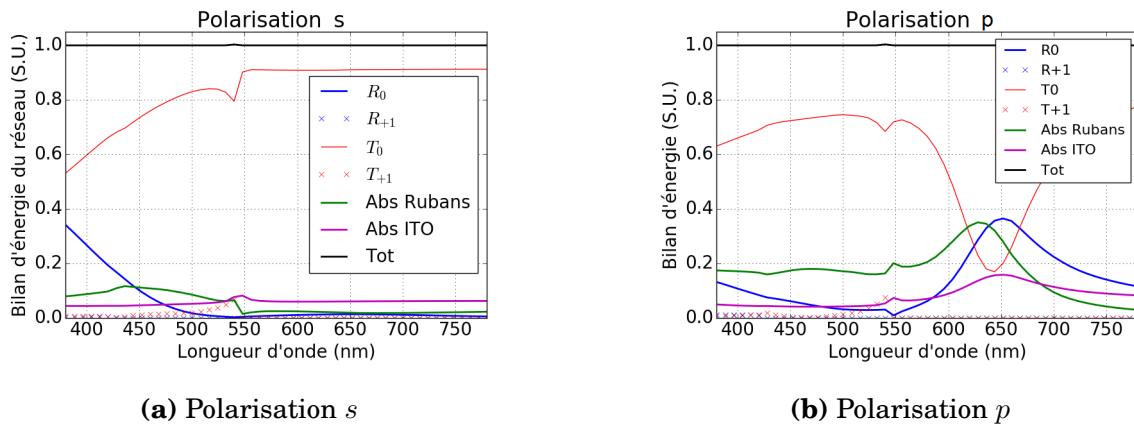


Fig. 2.1.7 – Spectres des efficacités de diffraction et absorption dans le réseau en configuration (d).

créer un filtre relativement transparent pour la lumière extérieure et ceci même à la résonance du réseau de rubans d'or qui ne réfléchira ou n'absorbera que la composante p de la lumière extérieure et sera relativement transparent sur tout le spectre pour la composante s .

On peut également remarquer que dans toutes les configurations simulées, l'énergie perdue dans les ordres de diffraction non-spéculaires est faible (de l'ordre de quelques %). Deux ordres de diffraction sont présents sur les différents spectres des quatre configurations simulées:

- l'ordre 1 en réflexion pour des longueurs d'onde inférieures à environ 425 nm. Cette valeur de longueur d'onde pour laquelle l'ordre 1 réfléchi du réseau est rasant peut être facilement vérifiée par la simple formule des réseaux en réflexion: $\lambda_{1r} = a(n^+ \sin[\theta_0] - n^- \sin[\theta_r])$ avec $n^+ = 1$ pour le vide, $a = 250$ nm, $\theta_0 = \pi/4$ et $\theta_r = -\pi/2$, on retrouve $\lambda_{1r} = 426$ nm,
- l'ordre 1 en transmission pour des longueurs d'onde inférieures à environ 550 nm. De même, cette valeur de longueur d'onde pour laquelle l'ordre 1 transmis du réseau est rasant peut être facilement vérifiée par la formule des réseaux en transmission avec un

substrat en silice: $\lambda_{1t} = a(n^+ \sin[\theta_0] - n^- \sin[\theta_t])$ avec $n^+ = 1$ pour le vide, $n^- = 1,5$ pour la silice, $a = 250$ nm, $\theta_0 = \pi/4$ et $\theta_t = -\pi/2$, on retrouve $\lambda_{1t} = 550$ nm.

Ces ordres de diffraction seront négligés dans la suite de l'analyse.

En comparant les résultats de simulation entre les configurations (a) et (b), l'effet de la présence de silice autour des rubans d'or sur le substrat est étudié. On constate tout d'abord que la résonance est décalée vers le rouge d'une dizaine de nanomètres, passant d'une longueur d'onde de centrage de 580 à 590 nm (cf tableau 2.1). On constate aussi que l'extrema de la réflexion à la résonance en polarisation p est augmentée de 12% (passant de 18 à 30 %). Il en est de même pour le niveau de transmission intégré sur tout le spectre en polarisation s qui passe de 76 à 80%. Le niveau d'absorption dans les rubans sur tout le spectre dans cette même polarisation est quant à lui très légèrement diminué passant de 6,5 à 6,1%. Néanmoins, en polarisation p , le niveau de transmission intégré sur tout le spectre diminue de 80 à 72% et le niveau d'absorption augmente de 15 à 18%.

De même, en comparant les résultats de simulation entre les configurations (b) et (c), l'effet de l'ajout d'une couche de conduction en ITO de 40 nm est étudié. La résonance en polarisation p est de nouveau décalée vers le rouge mais cette fois d'environ 40 nm, passant d'une longueur d'onde de centrage de 590 à 632 nm. Comme attendu, l'ajout de cette couche de conduction absorbante a pour effet d'augmenter la perte d'énergie par absorption sur tout le spectre (l'absorption totale moyennée sur tout le spectre pour les deux polarisations passe de 12 à 15%). En effet, à résonance, on obtient un confinement du champ au pied du ruban (c.f. figure 2.1.8b) et le champ électromagnétique est ainsi concentré dans la couche absorbante en ITO. Ainsi, les niveaux de transmission intégrés sur tout le spectre sont nettement diminués et ceci quelle que soit la polarisation (de 80 à 67 % pour la polarisation s et de 72 à 62 % pour la polarisation p). Il est à noter que la diminution de la transmission est particulièrement marquée en polarisation s aux faibles longueurs d'onde du spectre considéré. Il conviendra donc d'essayer de s'affranchir de cette couche de conduction dans les étapes de fabrication des réseaux.

Enfin, en comparant les résultats de simulation entre les configurations (c) et (d), l'impact de l'ajout d'une couche de couverture en silice de 100 nm est étudié. Son effet principal est de relever les niveaux de transmission sur tout le spectre et notamment en polarisation s aux faibles longueurs d'onde du spectre considéré. En effet, en polarisation s , la transmission moyenne intégrée sur tout le spectre passe de 67 à 85%. **La couche de couverture en silice agit donc principalement comme couche anti-reflet** et est très bénéfique pour l'application VTH. Elle a également pour effet de décaler les résonances en réflexion vers le rouge d'environ 20 nm, passant ainsi d'une longueur d'onde de centrage de 632 nm à 653 nm.

2.1.2.2 Analyse de la carte de champ à résonance des réseaux de rubans

Afin d'analyser le type de résonance mis en jeu dans les réseaux de rubans métalliques, la carte de la norme du champ électrique total à la résonance du réseau de rubans d'or dans la configuration a (éclairage par une onde plane de longueur d'onde $\lambda = 572$ nm en polarisation p , d'angle d'incidence $\theta_0 = 45^\circ$) est présentée et comparée à celle d'un ruban d'or unique et de mêmes dimensions, déposé sur un substrat de SiO_2 pour le même éclairage. La figure suivante 2.1.8 présente ces cartes de champ. Pour rappel: le pas du réseau d est fixé à 250 nm, les rubans d'or sont de dimensions $h = 20$ nm et $w = 67$ nm et sont déposés sur un substrat en silice, il n'y a ni couche de conduction, ni couche de couverture. La couche située à l'extérieur des rubans est constituée d'air.

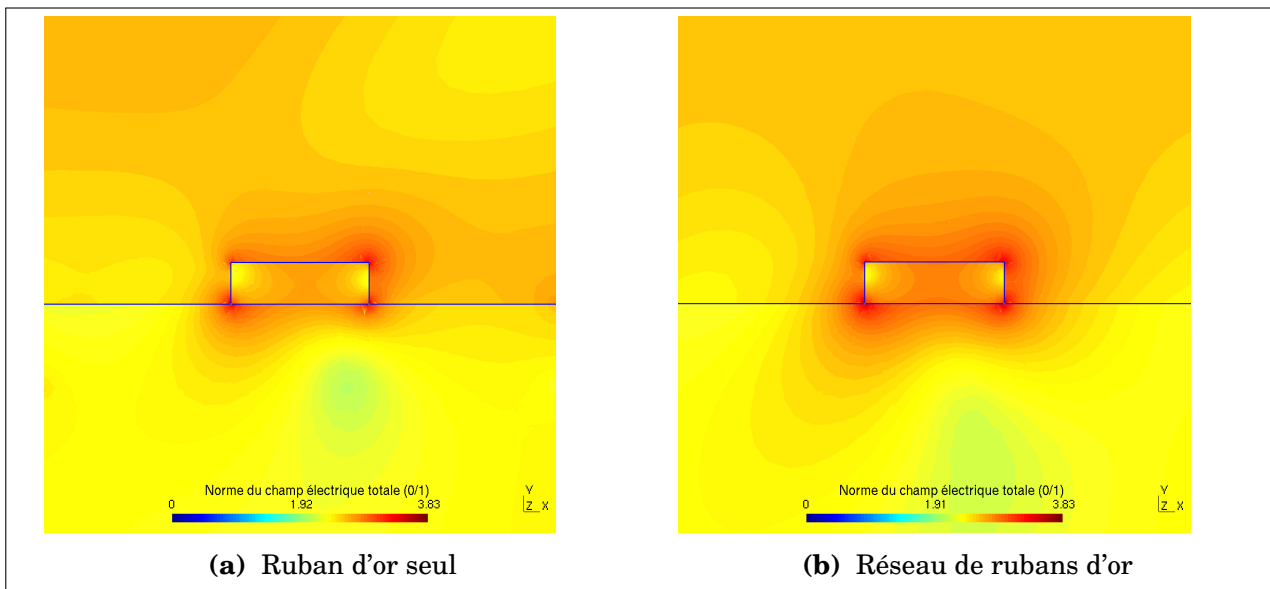


Fig. 2.1.8 – Comparaison des cartes de la norme du champ électrique à la résonance (572 nm) pour un ruban d'or seul (à gauche) et un réseau de rubans d'or (à droite) de la configuration 1.

On remarque sur la figure précédente 2.1.8 que les cartes de la norme du champ électrique totale sont visuellement et quantitativement identiques pour le ruban seul et le réseau de rubans. Ainsi le mode de résonance mis en jeu (mode quadripolaire du ruban avec une forte concentration du champ aux 4 coins) est le même dans ces deux cas. Ainsi, l'effet de résonance des rubans dans le cas d'un réseau peut donc être attribué à un effet de résonance de ruban seul. Aucun effet collectif ne semble donc être mis en jeu. Le calcul numérique des "quasi-modes" [62, 127] de résonance du réseau de rubans et du ruban seul permettrait de s'assurer que cette assertion est correcte. Le développement d'une méthode numérique de calcul des modes de structures électromagnétiques ouvertes, dispersives et dissipatives via la FEM fait ainsi l'objet du chapitre 3.

2.1.2.3 Influence de la largeur des rubans

Dans cette section, l'influence de la largeur des rubans du réseau va être analysée en partant de la configuration (a) de la section 2.1.2.1. La hauteur des rubans du réseau est donc fixée à $h = 20$ nm, la périodicité du réseau à $d = 250$ nm et les rubans sont directement déposés sur le substrat en silice sans couche de conduction ni couche de couverture. Les mêmes simulations que précédemment ont été effectuées pour des largeurs de rubans variant entre $w \in [50, 140]$ nm par pas de 10 nm et ceci avec les mêmes conditions d'éclairement (onde plane de longueur d'onde $\lambda \in [380, 780]$ nm, d'angle d'incidence $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s et p). Le groupe de structures simulées est présenté par la figure 2.1.9. Il est à noter que seuls les ordres spéculaires

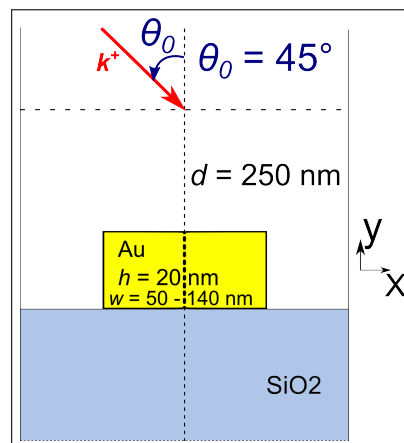


Fig. 2.1.9 – Schéma du groupe de structures considérées pour l'étude de l'influence de la largeur des rubans.

(R_0 et T_0) sont considérés car les autres ordres sont négligeables en terme d'efficacité sur tout le spectre visible. Les deux figures suivantes présentent les résultats de ces simulations en termes de spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion et transmission ainsi que l'absorption et ceci en fonction de la largeur des rubans en polarisation s (figure 2.1.10) et en polarisation p (figure 2.1.11). En polarisation p , sur la figure 2.1.11, il est observé

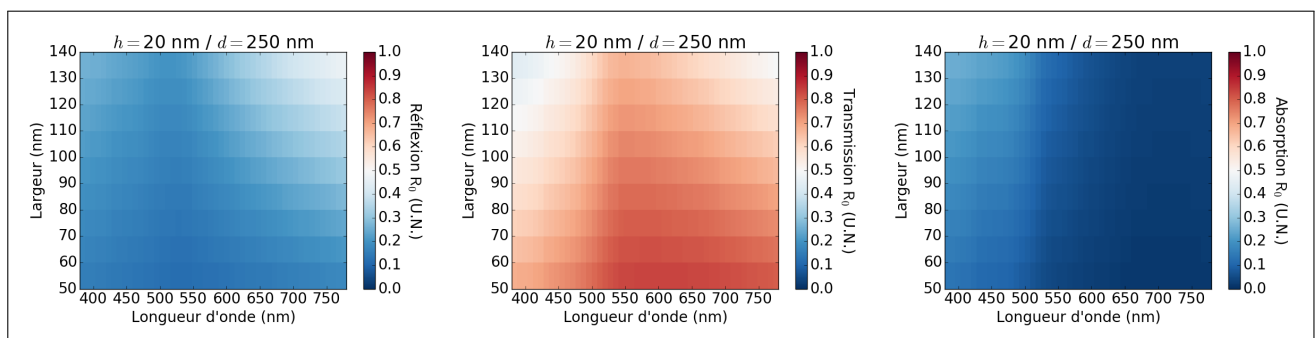


Fig. 2.1.10 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures considérées avec $h = 20$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

que, pour une hauteur h de rubans fixée, quand leur largeur w augmente, le pic en réflexion s'intensifie, se décale vers le rouge et que sa largeur de bande augmente. Cette intensification et

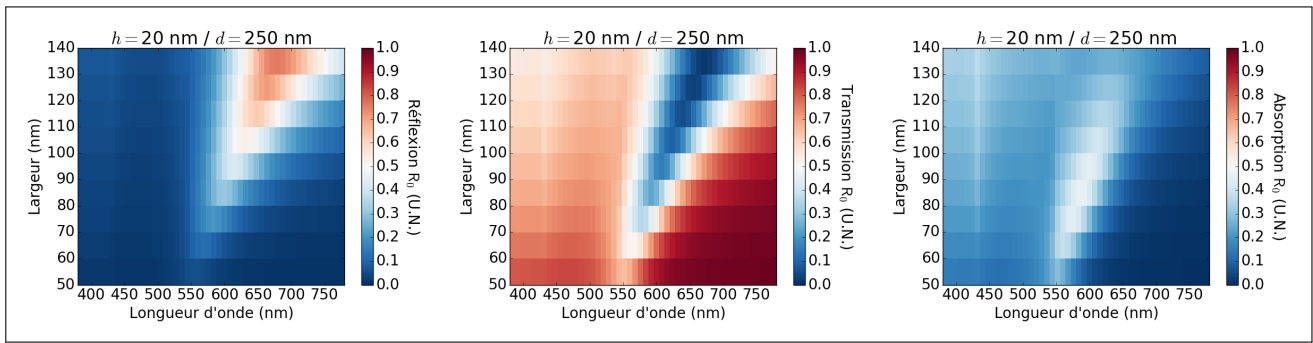


Fig. 2.1.11 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures considérés avec $h = 20$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

élargissement du pic ne sont pas corrélés à une augmentation de l’absorption où un maximum de celle-ci est observé aux environs de 600 nm pour une largeur d’environ 90 nm. **Il est donc possible de choisir la longueur d’onde de réflexion du filtre en polarisation p en maîtrisant la largeur des rubans d’or** tout en conservant à l’esprit que **plus les rubans seront larges, plus la réflexion sera forte, de large bande et décalée vers le rouge**. Ce constat reste valide pour toutes les hauteurs de rubans simulées, $h \in [10, 50]$ nm, les spectres de ces configurations étant consignés en annexe A.1.1. En polarisation s , sur la figure 2.1.10, il est observé que, pour une hauteur h de rubans fixée, quand leur largeur w augmente, la transmission diminue sur tout le spectre et notamment aux faibles et fortes longueurs d’onde (<500 nm et >700 nm). Il conviendra donc de **choisir une largeur de rubans la plus faible possible** (qui mène néanmoins à un pic en réflexion efficace en polarisation p) pour garder le meilleur niveau de transmission sur tout le spectre pour cette polarisation et ainsi conserver une transparence globale de la structure pour l’application VTH.

2.1.2.4 Influence de la hauteur des rubans

A présent, l’influence de la hauteur des rubans du réseau est analysée en partant de la configuration (a) de la section 2.1.2.1. La largeur des rubans du réseau est donc fixée à $w = 70$ nm, la périodicité du réseau à $d = 250$ nm et les rubans sont directement déposés sur le substrat en silice sans couche de conduction ni couche de couverture. Les mêmes simulations que précédemment ont été effectuées pour des hauteurs de rubans variant entre $h \in [10, 50]$ nm par pas de 5 nm et toujours avec les mêmes conditions d’éclairement (onde plane de longueur d’onde $\lambda \in [380, 780]$ nm, d’angle d’incidence $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s et p). Le groupe de structures simulées est présenté par la figure 2.1.12. Une fois de plus, seuls les ordres spéculaires (R_0 et T_0) sont considérés. Les deux figures suivantes présentent les résultats de ces simulations en termes de spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion et transmission ainsi que l’absorption et cette fois ci en fonction de la hauteur des rubans en polarisation s (figure 2.1.13) et en polarisation p (figure 2.1.14). En polarisation p , sur la figure 2.1.14, il est constaté que, pour une largeur w de rubans fixée, quand leur hauteur h augmente, le pic

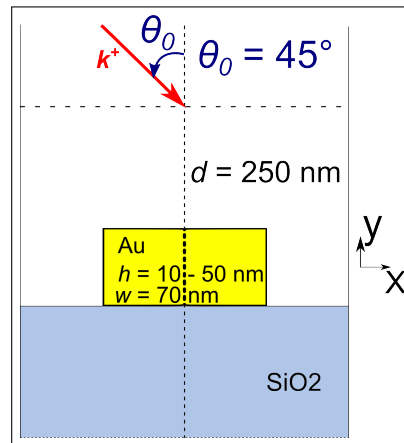


Fig. 2.1.12 – Schéma du groupe de structures considérées pour l'étude de l'influence de la hauteur des rubans.

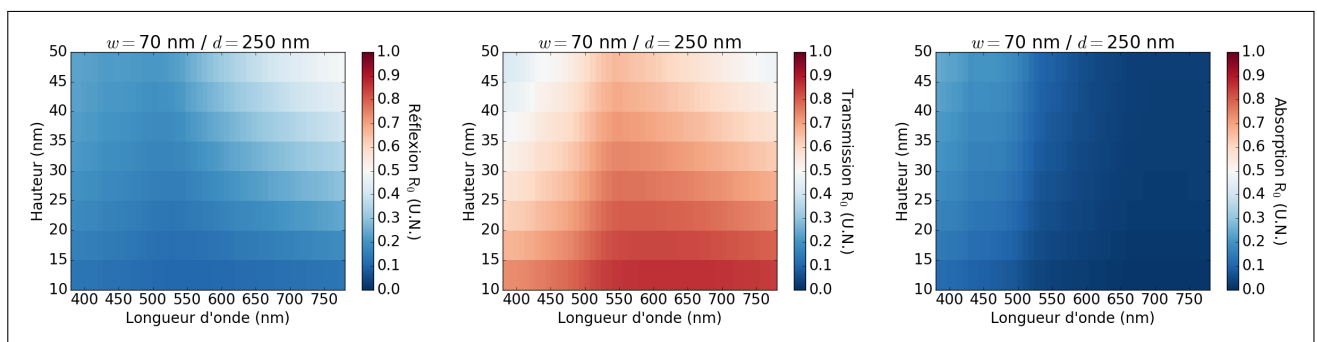


Fig. 2.1.13 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures considérés avec $w = 70$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

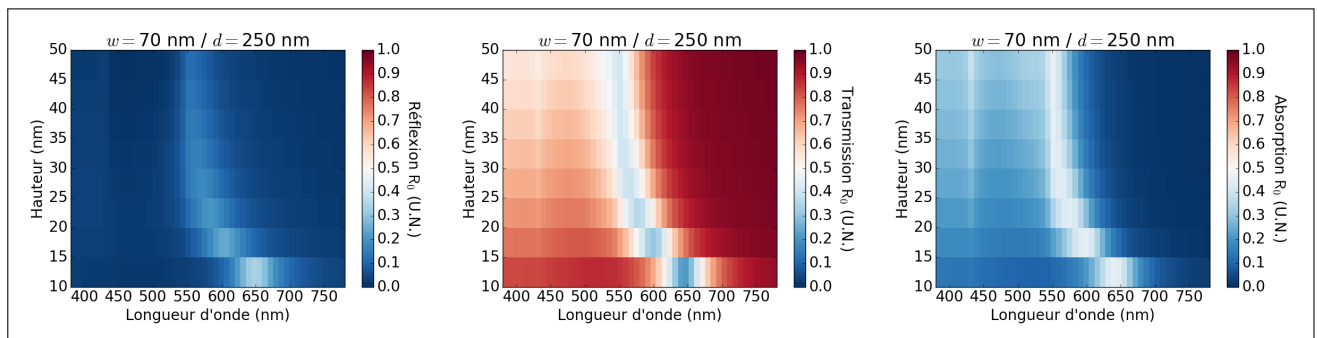


Fig. 2.1.14 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures considérés avec $w = 70$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

en réflexion diminue très légèrement en intensité, se décale vers le bleu et garde la même largeur de bande. **Le contrôle de la position spectrale du pic en réflexion peut donc aussi s'effectuer en maîtrisant la hauteur des rubans.** Ce constat est valide pour toutes les largeurs de rubans simulées, $w \in [50, 140]$ nm, les spectres de ces configurations étant consignés en annexe A.1.2.

En polarisation s , sur la figure 2.1.13, il est observé que quand la hauteur des rubans augmente, la transmission diminue sur tout le spectre et notamment aux faibles et fortes longueurs d'onde

(<500 nm et >700 nm). Il conviendra donc de **choisir une hauteur de rubans la plus faible possible pour garder le meilleur niveau de transmission** sur tout le spectre pour cette polarisation et pour que le pic en réflexion dans l'autre polarisation soit le plus efficace possible.

2.1.2.5 Influence de la périodicité du réseau

L'influence de la périodicité du réseau est maintenant étudiée. Nous partons toujours de la configuration (a) de la section 2.1.2.1, la largeur des rubans du réseau est donc fixée à $w = 67$ nm et la hauteur à $h = 20$ nm. La périodicité du réseau varie, quant à elle, dans $d \in [150, 300]$ nm par pas de 25 nm. Les rubans sont toujours directement déposés sur le substrat en silice sans couche de conduction ni couche de couverture. Le groupe de structures simulées est présenté par la figure 2.1.15. Les simulations sont effectuées avec les mêmes conditions d'éclairement (onde plane de longueur d'onde $\lambda \in [380, 780]$ nm, d'angle d'incidence $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s et p). Seuls les ordres spéculaires (R_0 et T_0) sont considérés. Les deux figures suivantes

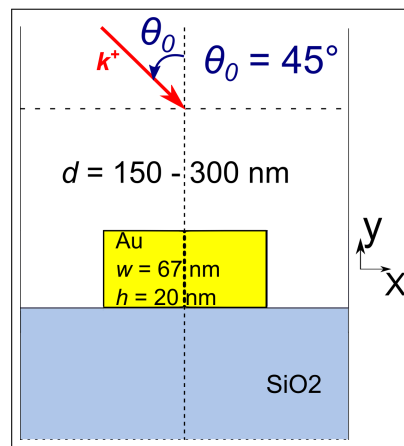


Fig. 2.1.15 – Schéma du groupe de structures considérées pour l'étude de l'influence de la périodicité.

présentent les spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion et transmission ainsi que l'absorption pour ce groupe de structure en polarisation s (figure 2.1.16) et en polarisation p (figure 2.1.17) pour les conditions d'illumination définies précédemment. En

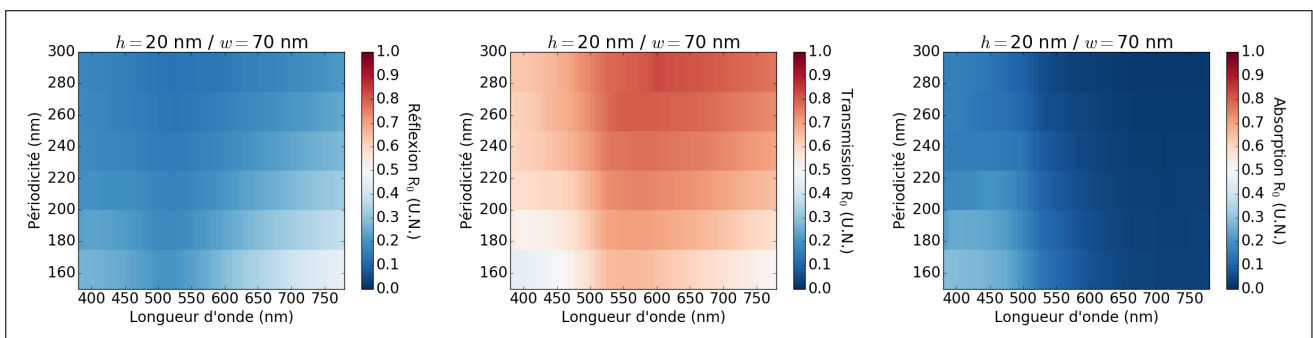


Fig. 2.1.16 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures considérés avec $w = 67$ nm, $h = 20$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

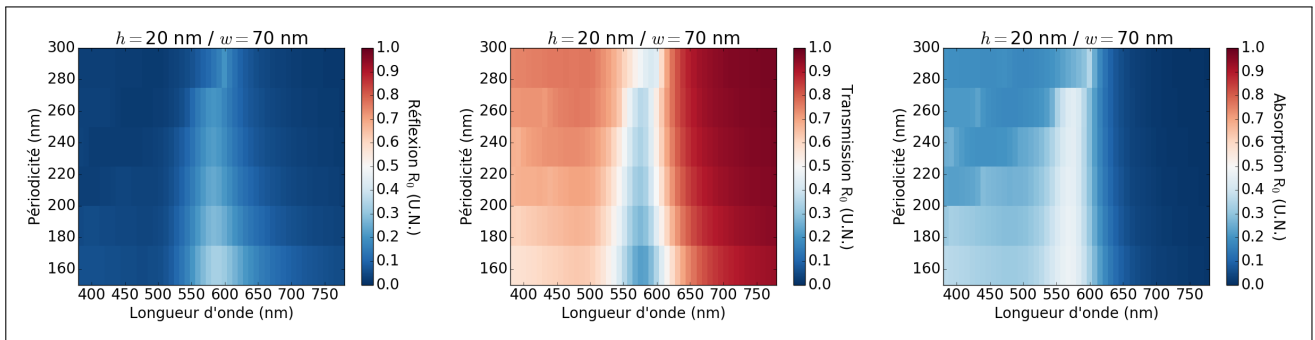


Fig. 2.1.17 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures considérés avec $w = 67$ nm, $h = 20$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

polarisation p , sur la figure 2.1.17, il est constaté que, pour des dimensions fixées h et w de rubans, une augmentation de la périodicité d du réseau conduit à de faibles variations de la longueur d’onde centrale du pic en réflexion. **Ceci confirme que la fréquence de résonance est principalement gouvernée par les dimensions et la géométrie des rubans.** Cette affirmation est en accord avec l’analyse effectuée en section 2.1.2.2 où il est constaté que la résonance mis en jeu dans les rubans n’est pas due à un effet collectif mais seulement à une résonance des rubans isolés. On peut également constater sur la figure 2.1.17 que l’intensité du pic en réflexion ainsi que sa largeur de bande diminuent quand la périodicité d augmente.

En polarisation s , sur la figure 2.1.16, une augmentation de la périodicité d du réseau (correspondant à une diminution du taux de remplissage de métal dans la cellule du réseau) pour des dimensions fixées de rubans conduit à une diminution de la réflexion globale sur tout le spectre et ainsi à une plus forte transmission, l’absorption n’étant que faiblement impactée.

2.1.2.6 Influence de l’angle d’incidence θ_0 de l’onde plane d’illumination

Afin d’étudier la tolérance angulaire du filtrage obtenu par les structures de réseaux de rubans, des simulations où l’angle d’incidence de l’onde plane d’illumination varie ($\theta_0 \in [40^\circ, 50^\circ]$ par pas de 2° , $\pm 5^\circ$ autour de l’angle d’utilisation de la lame du VTH) ont été effectuées pour la structure en configuration (a) de la section 2.1.2.1 en polarisation s et en polarisation p . Les résultats de ces simulations sont présentés par la figure 2.1.18 pour la polarisation s et par la figure 2.1.19 pour la polarisation p . Sur ces deux figures, il est constaté que les spectres ne varient que très peu en fonction de l’angle d’incidence θ_0 dans l’intervalle d’angle considéré. Le pic en réflexion en polarisation p utile pour l’application reste centré à la longueur d’onde en condition d’utilisation nominale (590 nm pour une incidence à $\theta_0 = 45^\circ$) et varie légèrement en intensité en fonction de θ_0 . La transparence globale obtenue en polarisation s est elle aussi conservée.

La tolérance angulaire des filtres de réseaux de rubans est donc satisfaisante pour l’application VTH autour de l’angle d’incidence de travail permettant ainsi l’utilisation d’une source étendue et les mouvements de la tête du conducteur.

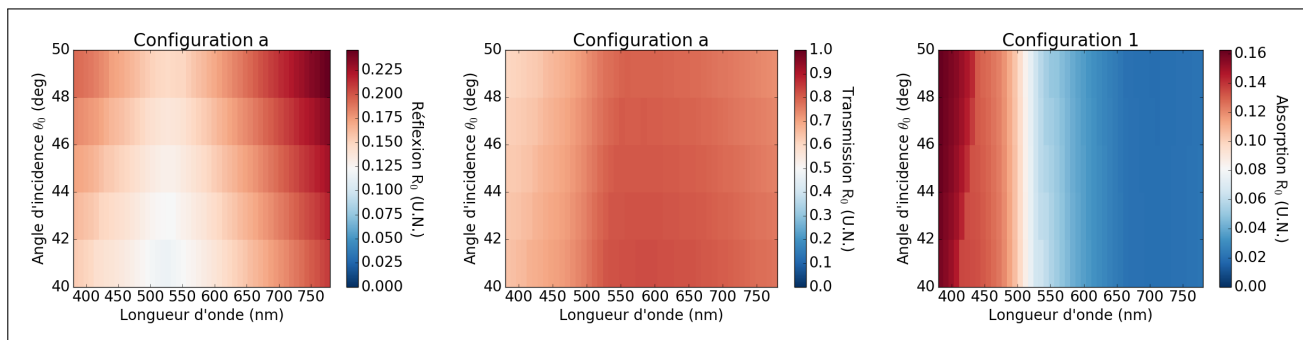


Fig. 2.1.18 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour la structure en configuration (a) pour $\theta_0 \in [40^\circ, 50^\circ]$ en polarisation s .

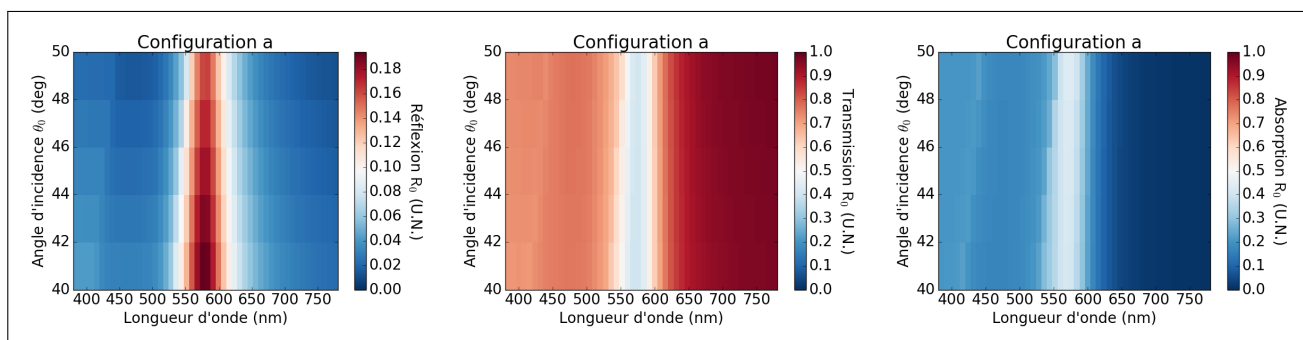


Fig. 2.1.19 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour la structure en configuration (a) pour $\theta_0 \in [40^\circ, 50^\circ]$ en polarisation p .

2.1.2.7 Synthèse des différents paramètres d’influence du filtrage

Un bilan des différentes études paramétriques menées jusqu’ici sur les propriétés de transmission et de réflexion des réseaux de rubans métalliques est présenté par le tableau suivant 2.2. Dans toute cette étude, l’onde plane incidente illuminant la structure possédait un vecteur d’onde contenu dans le plan d’invariance de la structure avec un angle d’incidence polaire fixé à $\theta_0 = 45^\circ$. Les influences d’une couche de conduction en ITO et de l’encapsulation dans la silice y sont rappelées ainsi que celles de la géométrie des rubans (largeurs et hauteurs), de la périodicité du réseau et d’une variation de $\pm 5^\circ$ de l’angle d’incidence θ_0 de l’onde plane autour de l’angle de travail de 45° . Leurs impacts sur les seules quantités d’intérêts sont rappelés pour les deux cas de polarisation de la lumière incidente, c’est-à-dire, celui sur la transmission globale sur tout le spectre visible pour la polarisation s et celui sur l’intensité et la position spectrale du pic en réflexion ainsi que la transmission globale sur le spectre visible pour la polarisation p .

		Polarisation		
		<i>s</i>	<i>p</i>	
Réseaux monodimensionnels de rubans d'or		Transmission globale sur le spectre visible	Transmission globale sur le spectre visible	Pic en réflexion
			Position et largeur spectrale	Intensité
Influence des matériaux	Couche de conduction en ITO de 40 nm	Diminution d'environ 10%	Diminution d'environ 10%	Plus efficace d'environ 10%
	Encapsulation dans 100 nm de silice	Augmentation d'environ 15 %	Niveau identique	Diminution de 5%
Géométrie des rubans	Augmentation de la largeur	Diminution	Diminution	Augmentation de l'intensité
	Augmentation de la hauteur	Diminution	Diminution	Diminution légère
Augmentation de la périodicité du réseau		Augmentation	Augmentation	Diminution
Variation de $\theta_0 \pm 5^\circ$ autour de 45°		Pas d'impact	Pas d'impact	Très peu d'impact (quelques %)

Tab. 2.2 – Tableau de synthèse de l'étude paramétrique menée sur les réseaux monodimensionnels de rubans d'or.

2.1.2.8 Optimisation de filtre avec rubans en argent pour l'application VTH

Dans toutes les simulations effectuées précédemment sur les réseaux de rubans d'or, aucun pic en réflexion efficace ne possède une position spectrale en-dessous d'environ 600 nm. De plus, en encapsulant les rubans dans une couche de SiO_2 , ces pics en réflexion vont être décalés spectralement vers le rouge comme observé en section 2.1.2.1. Ainsi, comme cette couche de couverture est nécessaire afin de garantir l'intégrité de la structure, aucun pic en réflexion ne pourra être obtenu avec de l'or dans le spectre des faibles longueurs d'onde du visible (bleu-jaune) mais que celui-ci sera principalement observé pour des fortes longueurs d'onde (rouge aux alentours de 700 nm). Ainsi, afin de couvrir tout le spectre visible, il convient d'utiliser l'argent qui possède une fréquence plasma plus faible que celle de l'or, les pics en réflexion pour des structures de réseaux de rubans en argent étant ainsi situés plus bas dans le spectre visible. Dans cette section, quatre configurations optimisées de réseaux de rubans d'argent directement déposés sur un substrat en silice et encapsulés dans celle-ci avec une couverture de 200 nm sont présentées. Ces quatre configurations permettent d'obtenir quatre filtres globalement transparents sur tout le spectre en polarisation s et semi-réfléchissants à quatre longueurs d'onde différentes du spectre visible en polarisation p pour une incidence de l'illumination fixée à $\theta_0 = 45^\circ$. Pour les quatre configurations, la périodicité du réseau est fixée à $d = 200$ nm. La hauteur de la couche de couverture en silice est de $h_{cov} = 200$ nm. L'indice optique choisi pour l'argent lors des simulations provient de [7].

La figure suivante 2.1.20 présente un schéma de ces quatre configurations optimisées. Toutes les dimensions des structures sont indiquées sur cette figure.

Structure R1: Filtrage à 590 nm Les dimensions des rubans d'argent sont les suivantes : hauteur $h = 15$ nm et largeur $w = 75$ nm. Les spectres des efficacités de diffraction obtenus pour l'ordre spéculaire ainsi que l'absorption dans les rubans en polarisation s et p sont présentés par la figure suivante 2.1.21.

En polarisation p :

Le pic en réflexion est centré à 590 nm. Son efficacité est de 70% au maximum. Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 55%.

En polarisation s :

Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 76%.

Structure R2: Filtrage à 480 nm Les dimensions des rubans d'argent sont les suivantes : hauteur $h = 30$ nm et largeur $w = 60$ nm. Les spectres des efficacités de diffraction obtenus pour l'ordre spéculaire ainsi que l'absorption dans les rubans en polarisation s et p sont présentés par la figure suivante 2.1.22.

En polarisation p :

Le pic en réflexion est centré à 480 nm. Son efficacité est de 60% au maximum. Le niveau de

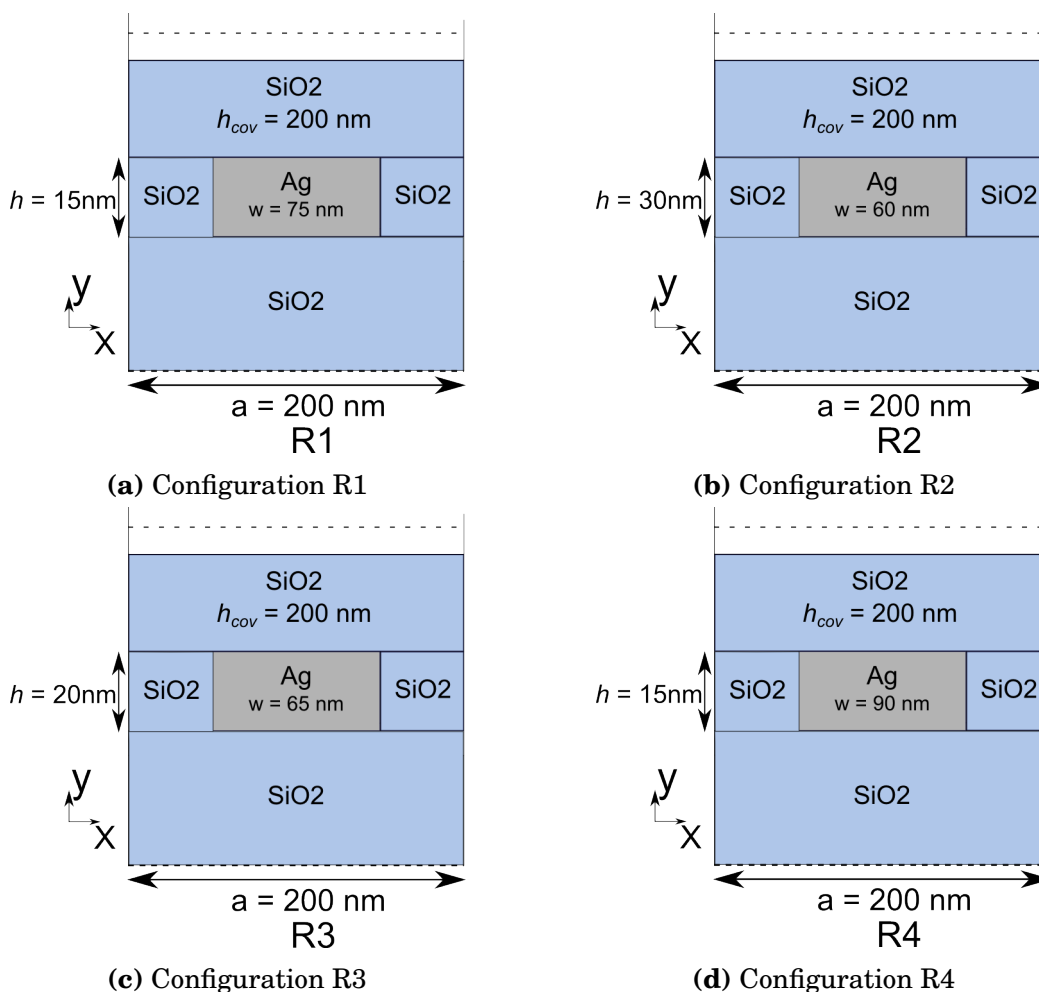


Fig. 2.1.20 – Schéma des configurations de réseaux de rubans d'argent optimisées pour l'application VTH R1 à R4.

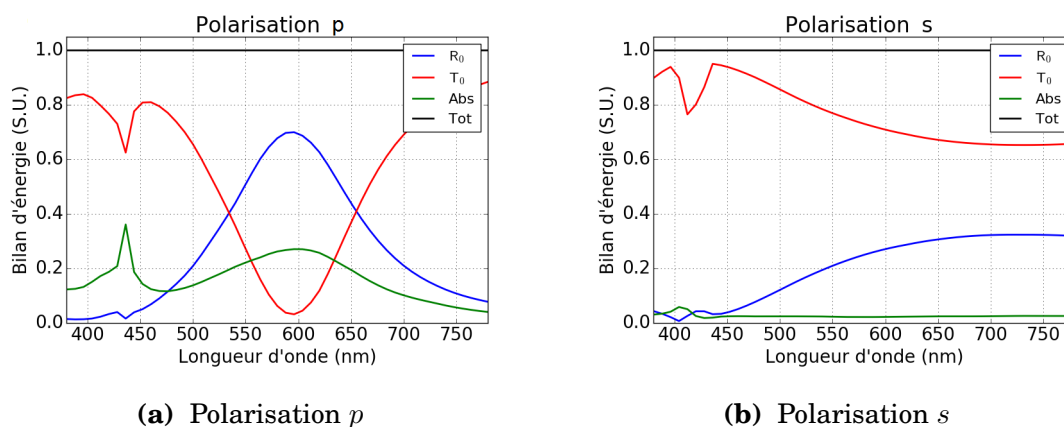


Fig. 2.1.21 – Spectre des efficacités de transmission et de réflexion des ordres spéculaires et d'absorption pour le réseau R1 en polarisation p (à gauche) et s (à droite).

transmission intégré sur tout le spectre est de 66%.

En polarisation s :

Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 69%.

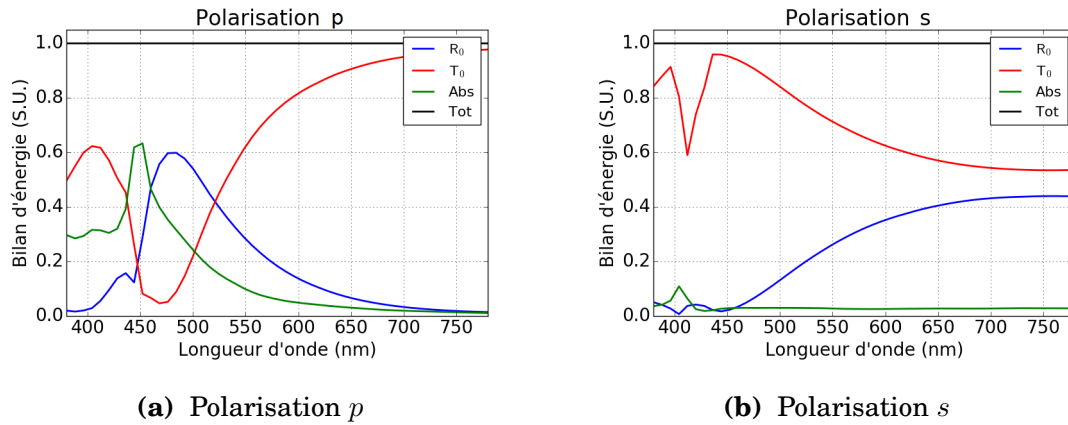


Fig. 2.1.22 – Spectre des efficacités de transmission et de réflexion des ordres spéculaires et d'absorption pour le réseau R2 en polarisation p (à gauche) et s (à droite).

Structure R3: Filtrage à 525 nm Les dimensions des rubans d'argent sont les suivantes : hauteur $h = 20\text{nm}$ et largeur $w = 65\text{nm}$. Les spectres des efficacités de diffraction obtenus pour l'ordre spéculaire ainsi que l'absorption dans les rubans en polarisation p et s sont présentés par la figure suivante 2.1.23.

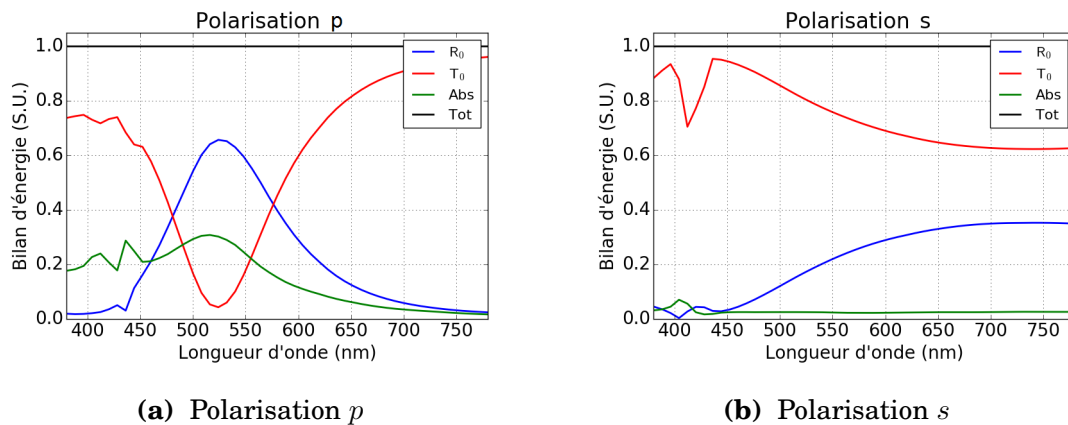


Fig. 2.1.23 – Spectre des efficacités de transmission et de réflexion des ordres spéculaires et d'absorption pour le réseau R3 en polarisation p (à gauche) et s (à droite).

En polarisation p :

Le pic en réflexion est centré à 525 nm. Son efficacité est de 65% au maximum. Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 63%.

En polarisation s :

Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 74%.

Structure R4: Filtrage à 640 nm Les dimensions des rubans d'argent sont les suivantes : hauteur $h = 15\text{nm}$ et largeur $w = 90\text{nm}$. Les spectres des efficacités de diffraction obtenus pour l'ordre spéculaire ainsi que l'absorption dans les rubans en polarisation s et p sont présentés par la figure suivante 2.1.24.

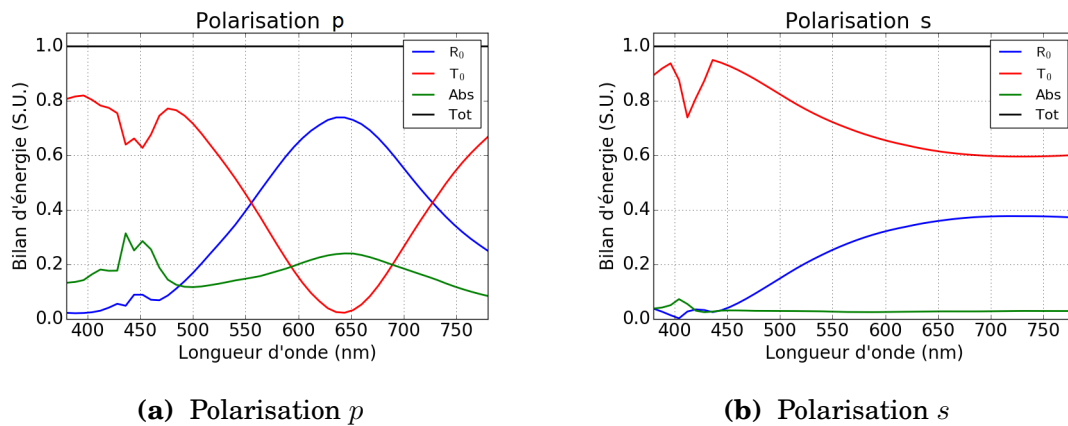


Fig. 2.1.24 – Spectre des efficacités de transmission et de réflexion des ordres spéculaires et d'absorption pour le réseau R4 en polarisation p (à gauche) et s (à droite).

En polarisation p :

Le pic en réflexion est centré à 640 nm. Son efficacité est de 74% au maximum. Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 45%.

En polarisation s :

Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre est de 72%.

2.1.2.9 Conclusions intermédiaires

Plusieurs conclusions intermédiaires peuvent être tirées des différentes études menées dans cette sous-section.

Tout d'abord, la géométrie de réseaux mono-dimensionnels de rubans métalliques permet un filtrage sélectif en fonction de la polarisation de la lumière incidente. Cette caractéristique est particulièrement intéressante dans le cadre de l'application VTH. En choisissant une source de lumière incidente dont le champ électrique est polarisé linéairement dans le plan d'invariance de la structure, on peut profiter des effets de résonance plasmonique des rubans métalliques pour cette polarisation afin de réfléchir la source. La lumière extérieure, non polarisée, ne sera, quant à elle, que partiellement filtrée (par la résonance plasmonique présente pour cette composante de polarisation de la lumière). Le filtre sera ainsi relativement transparent pour la lumière extérieure et ceci même à la résonance du réseau de rubans métalliques.

Ensuite, afin de couvrir tout le spectre visible, le choix de l'argent s'impose comme matériau pour les rubans métalliques. L'or, bien que disposant d'une très bonne tenue à la corrosion, possède une fréquence plasma trop haute dans le spectre visible et ainsi ne permet pas la réalisation de filtres semi-réfléchissants dans les parties de faibles longueurs d'onde du spectre lumineux (bleu). Ainsi, l'argent lui sera donc préféré.

Lors de la fabrication, il sera nécessaire de s'affranchir autant que possible de tout matériau absorbant tel que l'ITO afin de garder une transparence la plus faible possible. Une encapsulation des réseaux (dans de la silice par exemple) a pour effet de décaler spectralement la

longueur d'onde de résonance en réflexion vers le rouge pour la composante de polarisation réfléchi par le réseau. En ce qui concerne l'autre composante de polarisation de la lumière, cette encapsulation permet de relever les niveaux de transmission du filtre, notamment aux faibles longueurs d'onde du spectre lumineux, en agissant comme une couche anti-reflet et est donc bénéfique pour l'application visée.

La périodicité des réseaux choisie devra être relativement faible (de l'ordre de 200 nm) afin de réaliser une réflexion spéculaire cohérente à la longueur d'onde résonance des rubans sans perte d'énergie dans d'autres ordres de diffraction des réseaux.

On retiendra également que cette longueur d'onde de résonance est principalement gouvernée par les dimensions des rubans, les résonances mises en jeu dans le réseau ne dépendant en effet pas d'un effet collectif mais d'une résonance isolée des rubans. Pour une hauteur fixée de rubans, plus les rubans sont larges, plus la réflexion est forte, de large bande et décalée vers le rouge. Pour une largeur fixée de rubans, quand la hauteur des rubans augmente, la réflexion est légèrement plus faible, de même largeur de bande et est décalée vers le bleu. Aussi, pour garder un niveau de transparence le plus fort possible et ceci pour les deux composantes de polarisation, il conviendra de choisir une hauteur et une largeur de rubans les plus faibles possibles mais conduisant néanmoins à une réflexion efficace et positionnée spectralement à une longueur d'onde d'intérêt.

La tolérance angulaire des filtres a été vérifiée pour un angle d'incidence de l'onde plane d'illumination variant de $\pm 5^\circ$ autour de l'angle d'incidence nominale de l'application VTH (45°). Celle-ci est satisfaisante pour l'application visée et permet donc l'utilisation d'une source étendue et les mouvements de la tête du conducteur.

Enfin les designs de quatre structures de filtres semi-réfléchissants à quatre longueurs d'onde différentes (480, 520, 590 et 640 nm) constituées de réseaux de rubans d'argent encapsulés dans de la silice ont été optimisés. Les filtres possèdent une transmission globale variant entre 60 et 70% et des efficacités de réflexion à la résonance variant de 60 à 75%. Ainsi, les réseaux de rubans métalliques d'argent constituent une piste prometteuse pour la réalisation de filtres optiques optimisés pour les applications VTH.

2.1.3 Design de filtre de nanocylindres

Dans cette section, la formulation FEM 3D décrite en section 1.2.2 du chapitre 1 est exploitée pour conduire l'étude des paramètres d'influence de réseaux de nano-plots métalliques à section elliptique sur les propriétés de filtrage de ces réseaux et sur leur absorption. Cette analyse paramétrique est ensuite utilisée pour conduire au design de filtres optimisés pour l'application VTH. Afin de mieux comprendre le comportement des résonances des nanoparticules, un modèle analytique d'homogénéisation quasi-statique basé sur l'approximation de Maxwell-Garnett est confronté aux résultats de simulation.

2.1.3.1 Matériaux et géométrie générique des réseaux de nanocylindres.

Les réseaux considérés sont des réseaux carrés bidimensionnels de nanoparticules métalliques déposées sur un substrat de verre (SiO_2). La périodicité du réseau suivant les deux directions x et y est notée a . Un nano-cylindre, d'or (Au) ou d'argent (Ag), à section elliptique de hauteur h et de diamètre d_x et d_y (suivant les directions x et y respectivement) se situe sur chaque nœud du réseau. Pour les besoins de fabrication, une couche mince optionnelle d'ITO de hauteur h_{ITO} peut être ajoutée sur le substrat, de même qu'une seconde couche optionnelle d'attache en Titane de hauteur h_{Ti} située en bas des nano-cylindres. Ces réseaux peuvent également être encapsulés dans une couche de couverture en SiO_2 de hauteur h_{cov} depuis le haut des nano-cylindres. La figure 2.1.25 présentent deux schémas des structures considérées. Le réseau

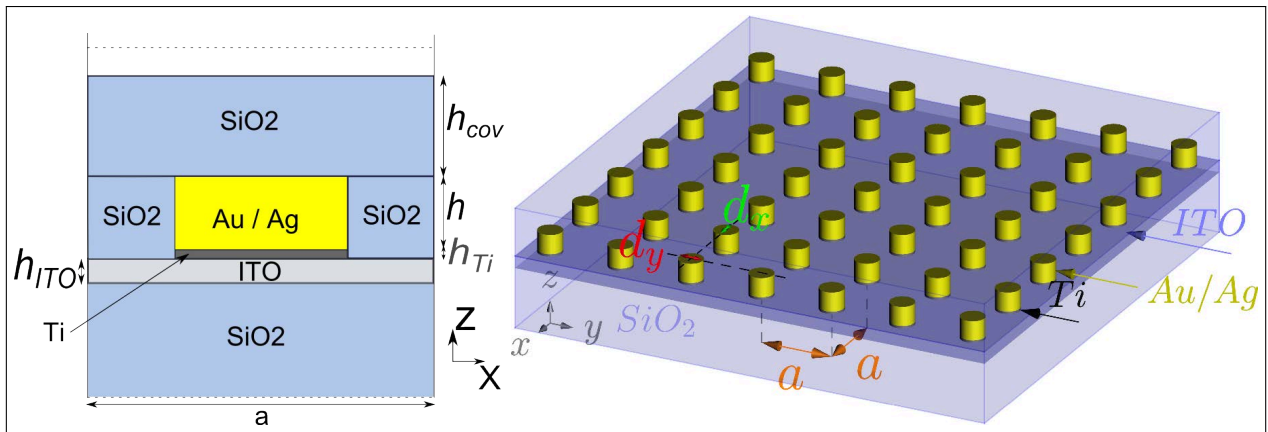


Fig. 2.1.25 – Schémas des réseaux de nanoparticules considérés.

considéré est placé dans un superstrat semi-infini constitué d'air de permittivité relative $\epsilon^+ = 1$. Le substrat de silice SiO_2 également semi-infini possède une permittivité relative ϵ^- . Tous les matériaux de la structure sont considérés comme non-magnétiques ($\mu_r = 1$).

Les indices de réfraction des différents matériaux choisis pour les simulations ont été tirés de [8] pour SiO_2 , [79] pour l'or, [7] pour l'argent et [80] pour le titane.

2.1.3.2 Conditions d'illumination.

Le réseau est illuminé par une onde plane $\mathbf{E}_0 = \mathbf{A}_0 \exp[i \mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{x}]$, où le vecteur d'onde \mathbf{k}^+ est défini par $\|\mathbf{k}^+\| = k^+ = k_0 = \omega/c$ et les deux angles $\theta_0 \in [0, \pi/2]$ et $\Psi_0 \in [0, 2\pi]$. Ainsi \mathbf{k}^+ est dans le plan O_{xz} si $\Psi_0 = 0$ et dans le plan O_{yz} si $\Psi_0 = \pi/2$. Cette onde plane incidente est dite p -polarisée si le champ électrique est contenu dans le plan d'incidence et s -polarisée si le champ électrique est perpendiculaire à ce plan (c.f. figure 2.1.26).

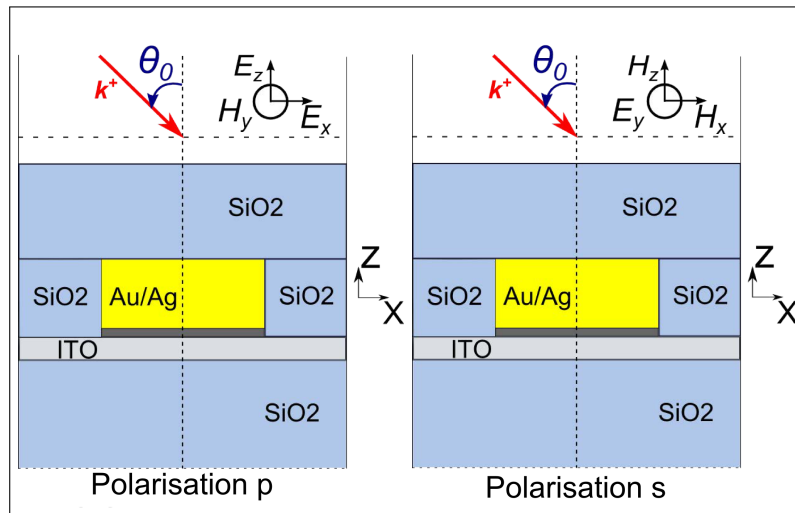


Fig. 2.1.26 – Schéma des conditions d'illumination pour une vecteur d'onde contenu dans le plan O_{xz} ($\Psi_0 = 0$).

	a (nm)	d_x (nm)	d_y (nm)
S1	200	91	129
S2	250	87	125
S3	300	84	122

Tab. 2.3 – Dimensions moyennes exactes des réseaux S1-S2-S3 réalisés.

2.1.3.3 Comparaison de résultats de simulations avec des résultats de mesures en transmission.

Afin de vérifier l'acuité des résultats numériques, les propriétés de transmission en incidence normale de trois échantillons fabriqués à l'IEF ont été mesurées. Un substrat de SiO₂ du commerce couvert par une couche de 40 nm d'ITO a été utilisé. Sur cette couche mince d'ITO, une couche d'accroche de titane de 4 nm ainsi qu'une couche mince d'or de 40 nm ont été déposées par évaporation par faisceau d'électrons. Les nanocylindres d'or ont ensuite été réalisés par lithographie par faisceau d'électrons. Un microscope électronique à balayage (MEB) a ensuite été utilisé afin d'imager les réseaux réalisés et de mesurer les dimensions des nanocylindres elliptiques ainsi réalisés. Trois réseaux de nanocylindres d'or avec trois périodicités carrées différentes ont été réalisés: S1 ($a = 200$ nm), S2 ($a = 250$ nm) et S3 ($a = 300$ nm). Les diamètres d_x et d_y des nanocylindres réalisés pour les trois structures S1-S2-S3 sont approximativement égaux à 80 et 120 nm respectivement (*c.f.* Tableau 2.3 pour les dimensions moyennes exactes). La figure 2.1.27 présente un schéma et une image MEB d'un des réseaux réalisés. La caractérisation optique des échantillons fabriqués est basée sur une mesure de transmission des filtres. Une source polychromatique (Lampe Xénon) illumine l'échantillon à travers un monochromateur et un polariseur. La source illuminant l'échantillon est alors considérée localement sur l'échantillon comme une onde plane monochromatique de longueur d'onde choisie entre 400 et 1100 nm et est polarisée linéairement. La mesure en transmission est alors effectuée grâce à un banc de mesure optique angulo-spectrale en réflexion et en

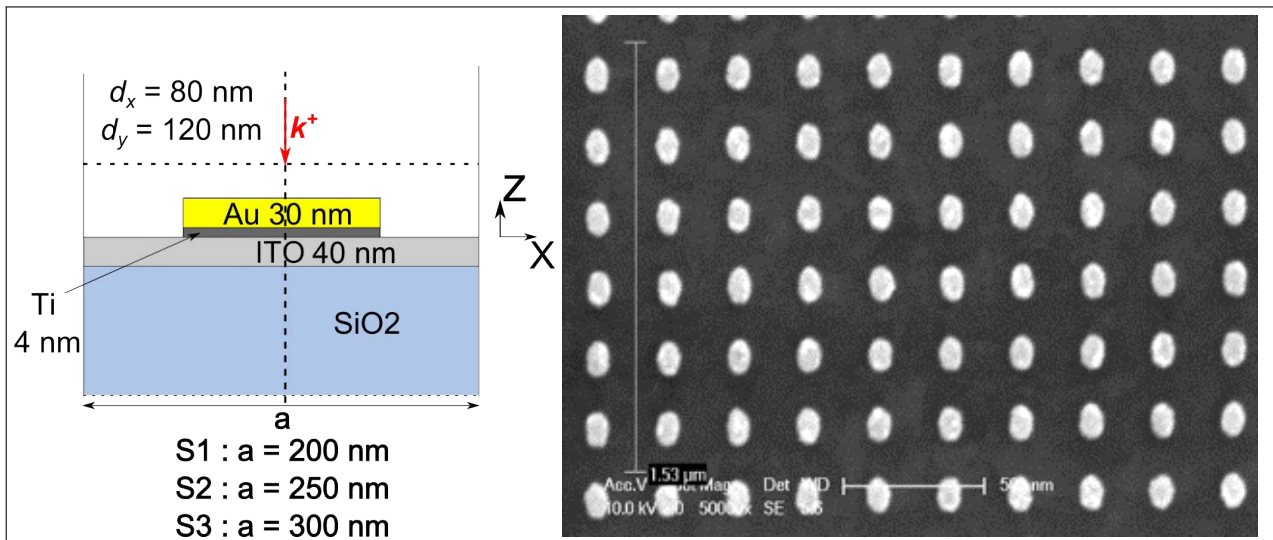


Fig. 2.1.27 – Schéma et image MEB d'une des structures réalisées S1-S2-S3.

transmission. Il est à noter que la mesure en transmission d'un échantillon est normalisée par une mesure en transmission réalisée sur un substrat de SiO_2 seul.

Les mesures en transmission sur les structures S1-S2-S3 ont été réalisées en incidence normale avec un champ électrique polarisé suivant la direction y (polarisation s) et suivant la direction x (polarisation p) pour des longueurs d'onde situées entre 500 et 1100 nm. Ces mesures ont été comparées avec des résultats de simulations où l'efficacité de transmission du réseau a également été normalisée par la transmission du substrat seul. Ces comparaisons sont présentées par la figure 2.1.28. Il est à noter que l'indice de réfraction de l'or choisi pour

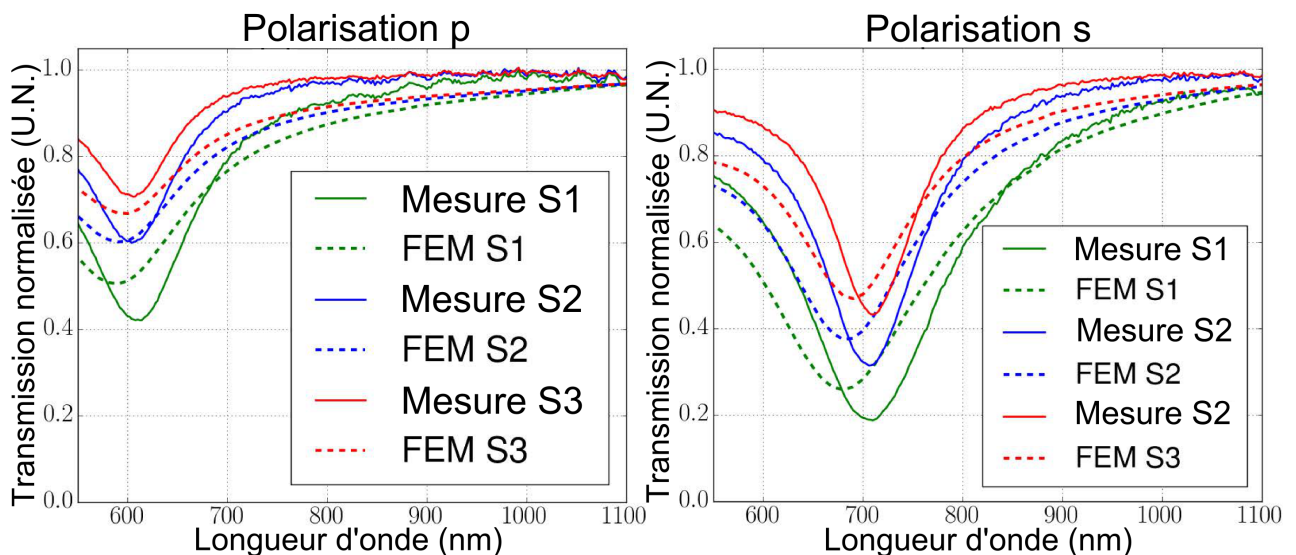


Fig. 2.1.28 – Comparaison entre les résultats de simulations FEM (pointillé) et les mesures (traits pleins) en transmission pour les trois échantillons fabriqués S1-S2-S3.

les simulations est déterminé grâce à des mesures effectuées sur échantillons à l'aide d'un ellipsomètre. Ces mesures de permittivité sont confrontées aux valeurs tirées de [79] dans la figure 2.1.29. Sur cette figure, une petite différence est constatée pour les longueurs d'onde

supérieures à 900 nm. La figure 2.1.28 montre un accord qualitatif et quantitatif excellent entre

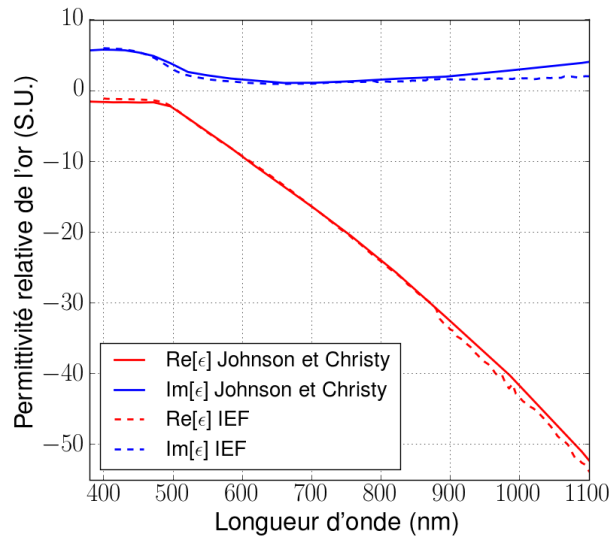


Fig. 2.1.29 – Comparaison de la permittivité relative de l'or mesurée à l'IEF à celle tirée de [79] entre 380 et 1100 nm.

les résultats de mesures et de simulations. Les différences restantes peuvent être expliquées notamment par la forme imparfaite des nanocylindres fabriqués (forme des coins, flancs non verticaux...).

2.1.3.4 Analyse paramétrique et design des propriétés des filtres

Dans cette section, l'influence des différents paramètres de la structure (nature du métal, paramètres géométriques et polarisation de l'onde incidente) est analysée pour une illumination avec une incidence oblique $\theta_0 = 45^\circ$ correspondant à l'incidence choisie pour l'application VTH. Cette analyse sera ensuite utilisée pour optimiser le design de structures de réseau de nanocylindres pour l'application VTH, le but étant d'obtenir différentes résonances sur le spectre visible avec un minimum de pertes optiques soit un maximum de la transmission globale moyenne sur tout le spectre.

Dans la section 2.1.3.3 ainsi que dans le cas des analyses effectuées sur les réseaux de rubans, il a été constaté que les structures de nanocylindres en or conduisent à des résonances aux alentours de 700 nm. Ainsi, afin de couvrir tout le spectre visible pour le pic en réflexion, dans le premier paragraphe de cette section, le matériau constituant les nanocylindres est l'argent, les résonances plasmoniques de ce métal se situant plus bas que l'or en termes de longueur d'onde. Dans le second paragraphe, la présence d'absorption est analysée en partant des structures de référence en or S1-S2-S3. Enfin, dans le dernier paragraphe, des structures optimisées pour l'application VTH sont proposées.

A. Influence des diamètres des cylindres et de la polarisation incidente sur les longueurs d'onde de résonance. Les géométries considérées dans ce paragraphe sont simil-

aires à celles de la section 2.1.3.3 (c.f. figure 2.1.30) avec les mêmes couches en ITO et en titane. Les simulations sont effectuées pour une onde plane possédant un vecteur d'onde contenu dans

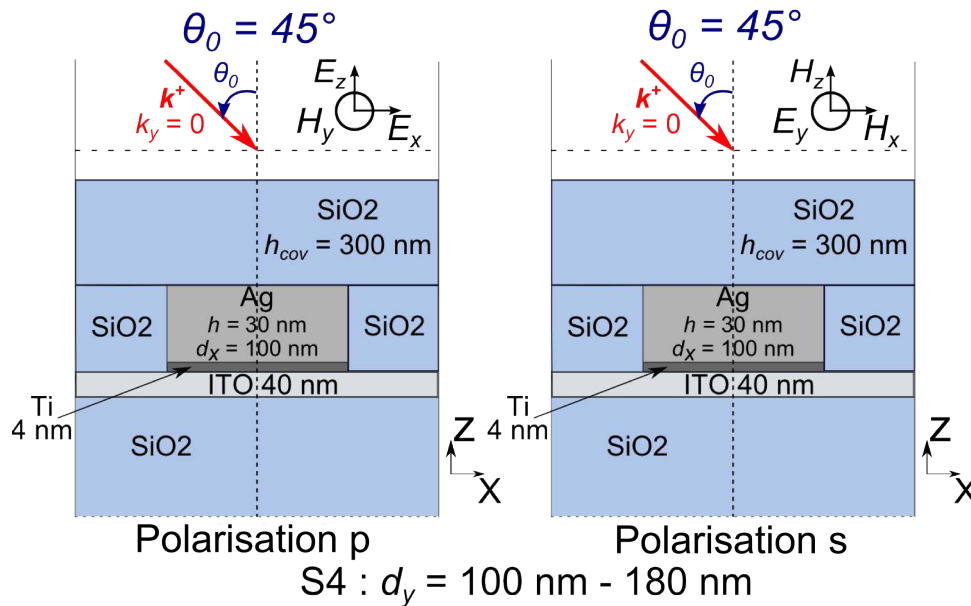


Fig. 2.1.30 – Schéma du groupe de structures S4 et conditions d'illumination considérées.

le plan O_{xz} ($k_y = 0$), où l'angle d'incidence polaire par rapport à la normale du substrat est fixé à $\theta_0 = 45^\circ$. Les deux cas de polarisation s et p sont considérés (c.f. figure 2.1.30). Les simulations sont effectuées pour des longueurs d'onde parcourant le spectre visible soit de 380 à 780 nm. La figure 2.1.31 présente les efficacités de transmission de l'ordre spéculaire pour différents diamètres d_y de cylindres et pour les polarisations s et p. Les efficacités de diffraction de l'ordre spéculaire en réflexion correspondantes sont présentées par la figure 2.1.32. Dans les

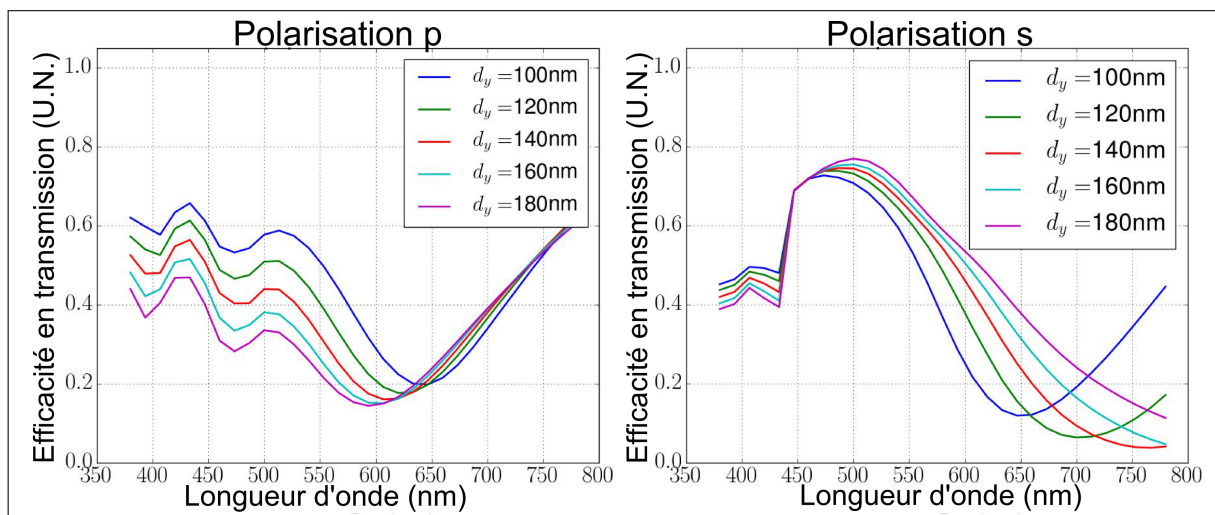


Fig. 2.1.31 – Efficacités de diffraction de l'ordre spéculaire en transmission pour le groupe de structures S4.

conditions d'éclairement définies, l'onde plane incidente possède un vecteur d'onde contenu dans le plan O_{xz} ($k_y = 0$). Ainsi, lorsque l'onde plane incidente est polarisée en p, le champ électrique "voit" le petit axe d_x des nanocylindres elliptiques tandis que lorsqu'elle est polarisée en s, le

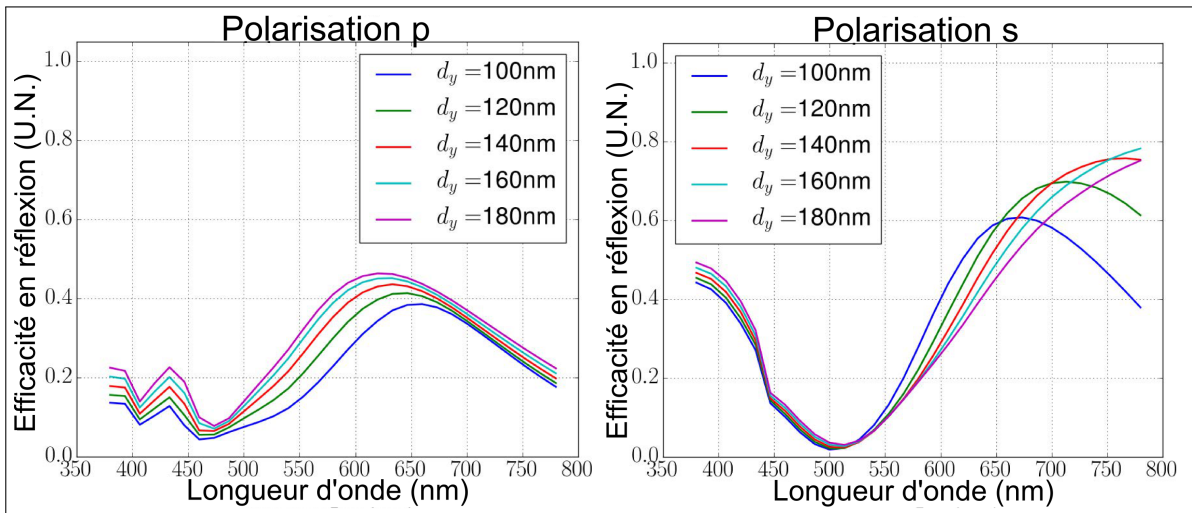


Fig. 2.1.32 – Efficacités de diffraction de l'ordre spéculaire en réflexion pour le groupe de structures S4.

champ électrique "voit" le grand axe d_y . On peut observer dans les figures 2.1.31 et 2.1.32 que les résonances survenant pour la polarisation p se font à une longueur d'onde plus faible et moins efficacement que celles survenant en polarisation s . Ceci peut être traduit en d'autres termes: **le plus le champ électrique incident rencontre une forte quantité de métal, le plus la résonance est prononcée et décalée spectralement vers le rouge** comme cela a déjà été constaté dans le cas des réseaux mono-dimensionnels de rubans métalliques. Aussi, dans les deux cas de polarisation, une augmentation du diamètre d_y des cylindres conduit à une résonance plus forte et plus large spectralement ce qui est consistant avec une augmentation de la quantité de métal. En augmentant d_y , on peut également constater que le pic en réflexion dans la polarisation p est décalé spectralement vers le bleu, tandis que celui de la polarisation s est décalé vers le rouge. Ainsi, les deux résonances présentes dans les deux cas de polarisation ne sont pas totalement indépendantes mais les tendances générales décrites ci-dessus restent cependant valides. Ces effets de géométrie et de polarisation permettent donc toujours de manipuler la position et la largeur spectrale des résonances observées dans les réseaux de nanocylindres métalliques et ainsi de choisir une configuration de réseau de nanocylindres conduisant à un pic en réflexion efficace à la longueur d'onde de travail désirée pour l'application VTH.

B. Absorption et influence des paramètres géométriques. Afin d'obtenir une forte transmission sur tout le spectre visible, il convient de réduire autant que ce peut l'absorption au sein des réseaux de nanocylindres. Dans ce paragraphe, l'influence de la quantité de métal sur l'absorption est étudiée en détail.

En décomposant le bilan d'énergie de la structure S2 obtenue grâce aux simulations FEM (c.f. figure 2.1.33), on peut constater que l'absorption est importante au sein des couches en ITO et en titane. Ces matériaux ne jouant aucun rôle dans la fonction de filtrage et étant seulement utilisés afin de faciliter la fabrication des échantillons, il convient de supprimer ces couches afin

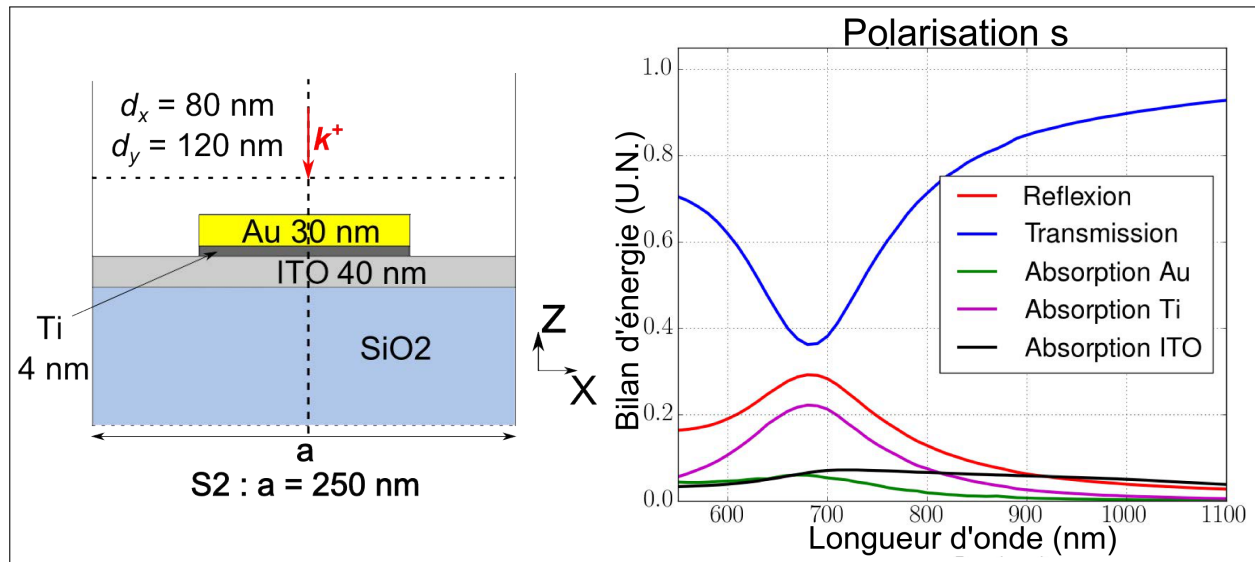


Fig. 2.1.33 – Décomposition du bilan d'énergie totale pour la structure S2 pour une incidence normale en polarisation s .

de réduire l'absorption au sein des différentes structures. Ainsi les études sur l'absorption et l'influence des paramètres géométriques vont être conduites sur des réseaux de nanocylindres d'or directement déposés sur un substrat de SiO_2 .

L'influence de la quantité de métal dans les structures est étudiée en augmentant le taux de remplissage de métal de celles-ci en utilisant deux groupes de structures. Dans le premier groupe de structure S5 (c.f. figure 2.1.34), le diamètre des nanocylindres augmente ainsi que leur hauteur tandis que la périodicité carrée des réseaux a est fixée. Inversement, dans le groupe de structure S6 (c.f. figure 2.1.34), la périodicité carrée a des réseaux augmente tandis que les dimensions des nanocylindres sont fixées. Aussi, pour diminuer le nombre de paramètres d'influence, les nanocylindres considérés possèdent une section circulaire ($d_x = d_y$). L'onde plane incidente illuminant la structure possède un vecteur d'onde contenu dans le plan O_{xz} ($k_y = 0$) avec un angle d'incidence polaire fixé à $\theta_0 = 45^\circ$ et est polarisé en s . Dans un premier temps,

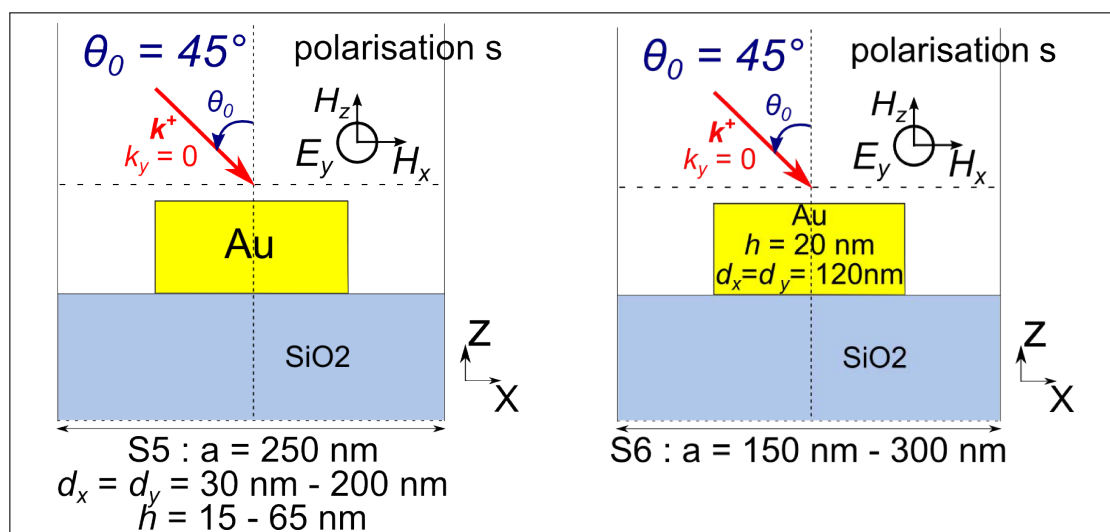


Fig. 2.1.34 – Schémas des structures S5 (à gauche) et S6 (à droite).

l'influence du diamètre et de la hauteur des nanocylindres sur le spectre du bilan d'énergie est analysée (groupe de structures S5). Il est à noter que seuls les ordres spéculaires ($R_{0,0}$ et $T_{0,0}$) sont considérés car les autres ordres sont négligeables en terme d'efficacité sur tout le spectre visible. La périodicité carrée du réseau est fixée à $a = 250$ nm. La hauteur des nanocylindres d'or varie de 15 à 65 nm par pas de 5 nm et le diamètre des nanocylindres varie de 30 à 200 nm par pas de 10 nm. Afin d'étudier l'influence du diamètre des cylindres, la hauteur du plot est fixée à $h = 30$ nm. La prochaine figure 2.1.35 présente les spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion et transmission ainsi que l'absorption pour ce groupe de structure ($a = 250$ nm, $h = 30$ nm et $d_x = d_y \in [30, 200]$ nm) et les conditions d'illumination précédemment définies. Sur cette figure, il est observé que, pour une hauteur h de nanocylindres

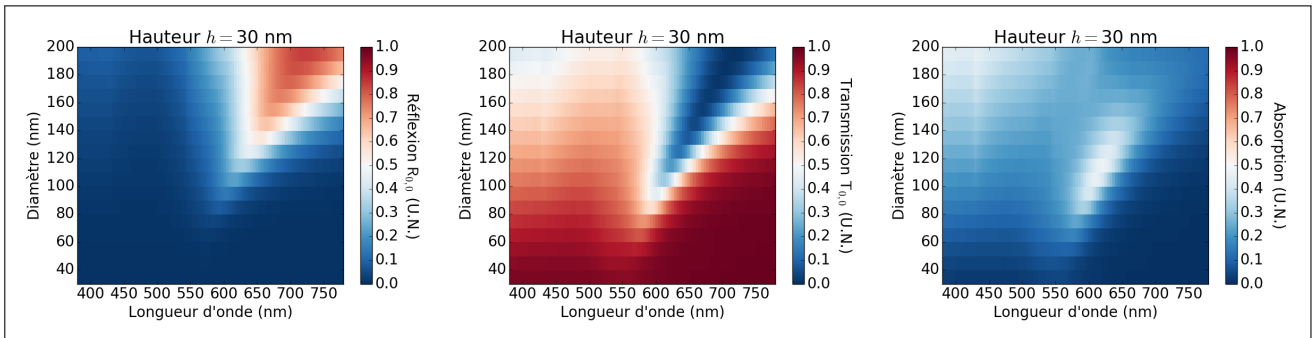


Fig. 2.1.35 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 30$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

fixée, quand le diamètre augmente, le pic en réflexion s'intensifie, se décale vers le rouge et que sa largeur de bande augmente. Cette intensification et élargissement du pic ne sont pas corrélés à une augmentation de l'absorption où un maximum de celle-ci est observé entre 600 et 650 nm pour un diamètre d'environ 110 nm. Comme précédemment constaté, **il est donc possible de choisir la longueur d'onde de réflexion du filtre en maîtrisant le diamètre des nanocylindres**. Ce constat reste valide pour toutes les hauteurs de nanocylindres simulées, $h \in [15, 65]$ nm, les spectres de ces configurations étant présentés en annexe A.2.1.

À présent, l'influence de la hauteur des nanocylindres va être étudiée en fixant le diamètre à $d_x = d_y = 140$ nm. La prochaine figure 2.1.36 présente les spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion et transmission ainsi que l'absorption pour ce groupe de structure ($a = 250$ nm, $d_x = d_y = 140$ nm et $h \in [15, 65]$ nm). Sur cette figure, il est observé que, pour un diamètre de cylindre fixé, quand la hauteur du plot augmente, le pic en réflexion diminue très légèrement en intensité, se décale vers le bleu et garde à peu près la même largeur de bande. **Le contrôle de la position spectrale du pic en réflexion peut donc aussi s'effectuer en maîtrisant la hauteur des nanocylindres**. Ce constat est valide pour tous les diamètres de nanocylindres simulés, $d_x = d_y \in [30, 200]$ nm, les spectres de ces configurations étant présentés en annexe A.2.1.1.

Dorénavant la géométrie des nanocylindres est fixée afin d'analyser l'influence de la périodicité carrée a des réseaux. Leur hauteur est fixée à $h = 20$ nm et leur diamètre à $d_x = d_y = 120$

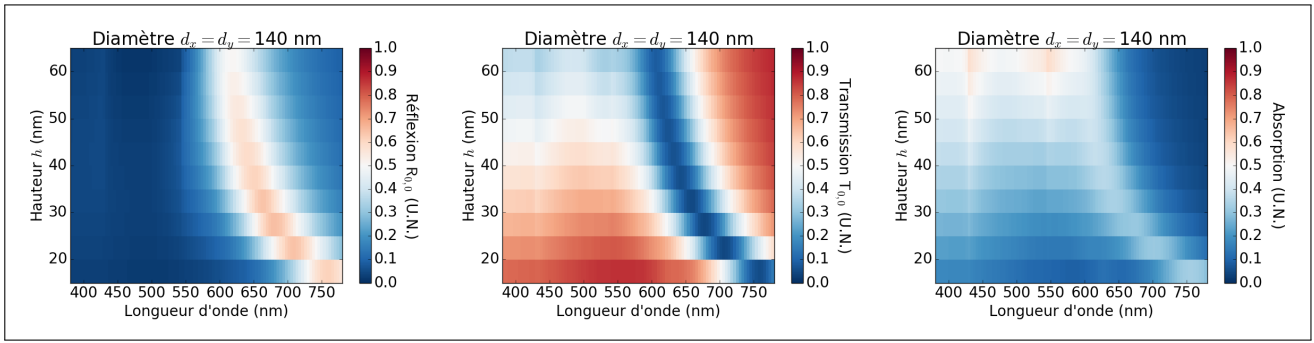


Fig. 2.1.36 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 140$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

nm. La périodicité carrée a varie de 150 à 300 nm par pas de 25 nm (groupe de structures S6 *c.f.* figure 2.1.34). Les conditions d’illumination restent les mêmes (à savoir $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ et polarisation s). La prochaine figure 2.1.37 présente les spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion et transmission ainsi que l’absorption pour ce groupe de structure et pour ces conditions d’illumination. Sur cette figure, il est constaté que, pour des

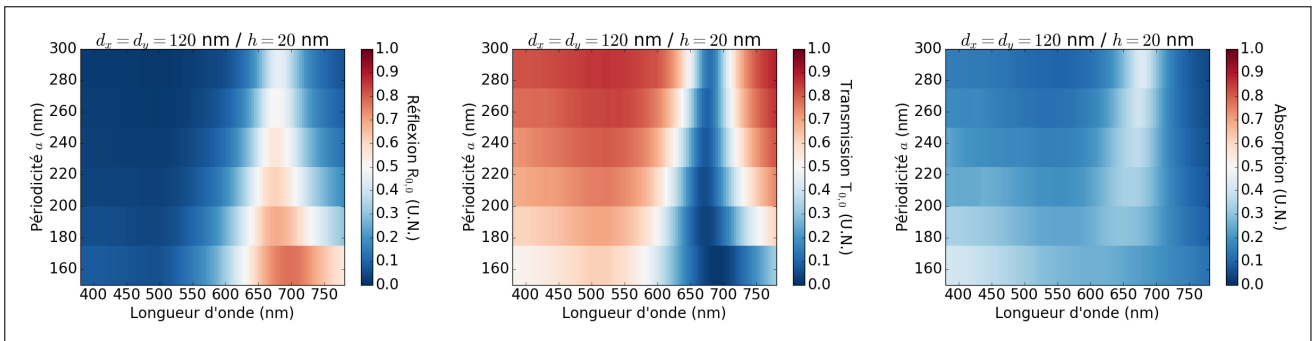


Fig. 2.1.37 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour le groupe de structures S6 avec $h = 20$ nm et $d_x = d_y = 120$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

dimensions fixées de nanocylindres, une augmentation de la périodicité carrée a du réseau conduit à de faibles variations de la longueur d’onde centrale du pic en réflexion. Ceci confirme que la fréquence de résonance est principalement gouvernée par les dimensions et la géométrie des nanocylindres. Il est aussi observé que l’intensité du pic en réflexion ainsi que sa largeur de bande diminuent quand la périodicité carrée a augmente. En ce qui concerne l’absorption, celle-ci est plus forte à la résonance quand la période a augmente ce qui est consistant avec une diminution en intensité du pic en réflexion.

Il est important de remarquer que pour toutes les structures du groupe S5-S6 simulées, aucun pic en réflexion efficace ne possède une position spectrale en-dessous d’environ 650 nm. De plus, en encapsulant les nanocylindres dans une couche de SiO_2 , ces pics en réflexion vont être décalés spectralement vers le rouge comme précédemment observé pour les rubans (*c.f.* 2.1.2.1). Ainsi, comme cette couche de couverture est nécessaire afin de garantir l’intégrité de la structure, aucun pic en réflexion ne pourra être obtenu avec de l’or dans le spectre des

faibles longueurs d'onde du visible (bleu-jaune) mais que celui-ci sera principalement observé pour des fortes longueurs d'onde (rouge aux alentours de 700 nm comme pour les structures S2 fabriquées). Ainsi, comme déjà souligné précédemment, afin de couvrir tout le spectre visible, il convient d'utiliser l'argent qui possède une fréquence plasma plus faible que l'or, les pics en réflexion pour des structures de nanocylindres en argent étant ainsi situés plus bas dans le spectre visible.

En conclusion de ce paragraphe, nous retiendrons que:

1. une forte absorption est présente dans les matériaux utilisés pour la fabrication des structures tels que l'ITO ou le titane. Il conviendra donc de s'affranchir de leur utilisation au cours du procédé de fabrication afin de minimiser l'absorption et de garantir une bonne efficacité pour le pic en réflexion. À noter qu'il est possible de s'affranchir de la couche d'accroche en titane en dépolissant le substrat,
2. l'utilisation de l'or ne permet pas de couvrir tout le spectre visible en termes de position spectrale du pic en réflexion. L'utilisation de l'argent est nécessaire afin de pouvoir réfléchir des couleurs situées dans les faibles longueurs d'onde du spectre visible,
3. la fréquence de résonance des structures, pour laquelle le pic en réflexion est positionné spectralement, est principalement déterminée par les dimensions et la géométrie de la nanoparticule de la cellule élémentaire du réseau. Plus le champ électrique incident "voit" de métal, plus cette résonance est efficace, large spectralement et décalée vers le rouge,
4. le taux de remplissage de la cellule du réseau (rapport entre la surface de la section du cylindre et de la surface d'une cellule élémentaire du réseau a^2) gouverne l'intensité de la résonance ainsi que l'absorption au sein de la structure.

C. Synthèse des différents paramètres d'influence du filtrage. Tout comme dans le cas des réseaux monodimensionnels de rubans métalliques en or, un bilan des différentes études paramétriques menées jusqu'ici sur les propriétés de transmission et de réflexion des réseaux de nanocylindres d'or à section circulaire est présenté par le tableau suivant 2.4. Dans toute cette étude, l'onde plane incidente illuminant la structure possédait un vecteur d'onde contenu dans le plan O_{xz} ($k_y = 0$) avec un angle d'incidence polaire fixé à $\theta_0 = 45^\circ$ et était polarisé en s . Les influences de la géométrie des cylindres (diamètres et hauteurs) et de la périodicité du réseau sur la transmission globale, l'intensité et la position et largeur spectrale du pic en réflexion sont rappelés pour les conditions d'illumination définies.

D. Réseaux de nanocylindres d'argent à section elliptique optimisés pour l'application VTH. À partir des conclusions énoncées dans la sous-section précédente, deux designs de filtres semi-réfléchissants basés sur des structures de réseaux bidimensionnels de nanocylindres en argent à section elliptique, encapsulés dans du verre sans couche en ITO et sans titane ont été proposés à l'IEF afin d'obtenir les caractéristiques requises pour l'application VTH. Ces

Réseaux bidimensionnels de nanocylindres d'or à section circulaire	Pic en réflexion			Transmission globale sur le spectre visible
	Intensité	Position spectrale	Largeur spectrale	
Augmentation du diamètre	Augmentation	Décalage vers le rouge	Élargissement	Diminution
Augmentation de la hauteur	Diminution légère	Décalage vers le bleu	Même largeur	Diminution
Augmentation de la périodicité carrée	Diminution	Même position	Diminution de la largeur	Augmentation

Tab. 2.4 – Tableau de synthèse de l'étude paramétrique menée sur les réseaux bidimensionnels de nanocylindres à section circulaire d'or.

deux designs conduisent à des pics spéculaires en réflexion sur le domaine visible. La section elliptique des nanocylindres permet l'obtention de deux pics en réflexion à deux longueurs d'onde différentes et ceci pour une seule structure selon la polarisation de la source d'illumination. Les structures proposées possèdent des caractéristiques de transparence globale sur le spectre visible.

Le premier filtre F1 est constitué d'un réseau de nanocylindres d'argent de hauteur $h = 30$ nm et de diamètres $d_x = 80$ nm et $d_y = 60$ nm. Le substrat est en silice et les nanocylindres sont encapsulés dans la silice avec une couche de couverture de hauteur $h_{cov} = 200$ nm au-dessus des nanocylindres. La périodicité carrée du réseau est égale à $a = 200$ nm.

Le second filtre F2 est constitué d'un réseau de nanocylindres d'argent de hauteur $h = 40$ nm et de diamètres $d_x = 100$ nm et $d_y = 60$ nm. Le substrat est en silice et les nanocylindres sont encapsulés dans la silice avec une couche de couverture de hauteur $h_{cov} = 200$ nm au-dessus des nanocylindres. La périodicité carrée du réseau est égale à $a = 200$ nm.

La figure 2.1.38 présente un schéma de chacune de ces structures. Pour les deux structures, le vecteur d'onde incident est tantôt contenu dans le plan O_{xz} avec $k_y = 0$, tantôt dans le plan O_{yz} avec $k_x = 0$, avec un angle d'incidence polaire fixé à l'angle de travail de la spécification du cahier des charges de la VTH *i.e.* $\theta_0 = 45^\circ$. Les deux cas de polarisation (s et p) sont considérés. Les deux prochaines figures 2.1.39 et 2.1.40 présentent les composantes du bilan d'énergie de ces deux structures pour les conditions d'illumination définies.

Pour la structure F1 (*c.f.* figure 2.1.39), deux longueurs d'onde centrales des pics en réflexion sont obtenues : 525 nm et 590 nm. Leur efficacité dépend des conditions d'éclairement avec un niveau de réflexion maximum de 58% pour le pic à 525 nm et de 70% pour le pic à 590 nm. Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre (moyenne sur les deux polarisations s et p pour les deux plans d'incidence) est d'environ 74%.

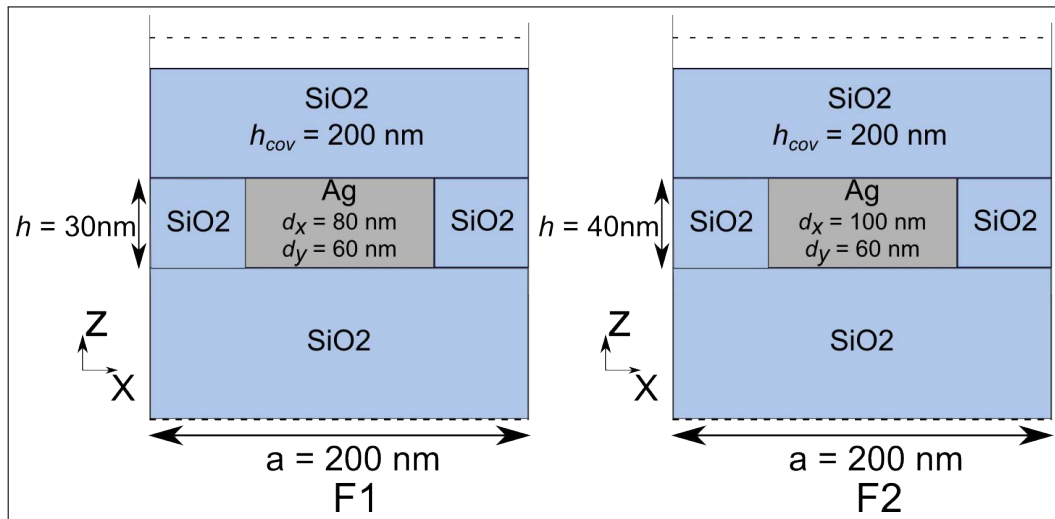


Fig. 2.1.38 – Schémas des structures F1/F2 optimisées pour la fonction de filtrage de l'application VTH.

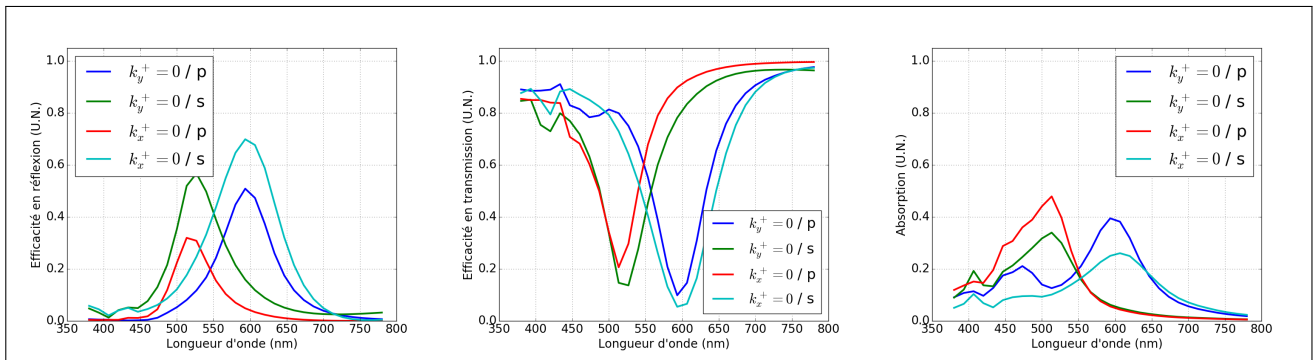


Fig. 2.1.39 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour la structure F1 ($a = 200$ nm, $h = 30$ nm, $d_x = 80$ nm, $d_y = 60$ nm, $h_{cov} = 200$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$).

Pour la structure F2 (c.f. figure 2.1.39), deux longueurs d'onde centrales des pics en réflexion

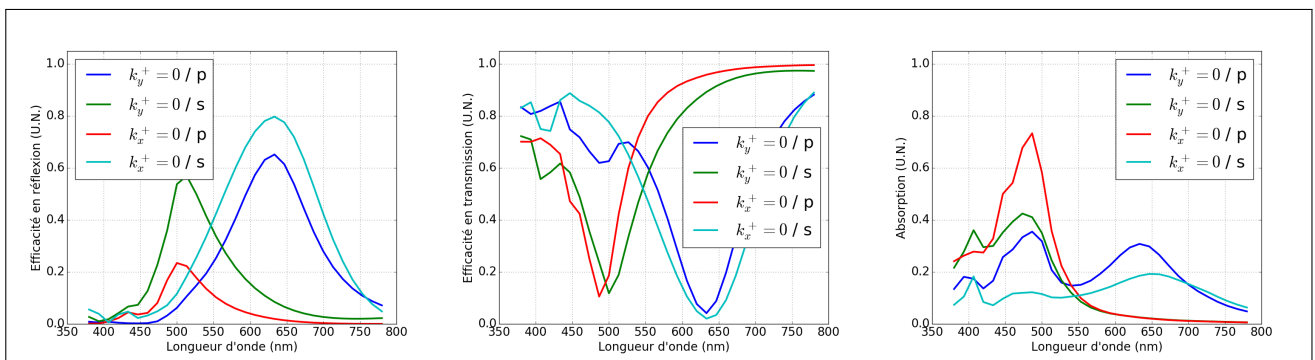


Fig. 2.1.40 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche) et transmission (au milieu) et absorption (à droite) pour la structure F2 ($a = 200$ nm, $h = 40$ nm et, $d_x = 100$ nm, $d_y = 60$ nm, $h_{cov} = 200$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$).

sont obtenues : 520 nm et 633 nm. Leur efficacité dépend également des conditions d'éclairement avec un niveau de réflexion maximum de 58% pour le pic à 520 nm et de 80% pour le pic à 633 nm. Le niveau de transmission intégré sur tout le spectre (moyenne sur les deux polarisations s

et p pour les deux plans d'incidence) est d'environ 64%.

2.1.3.5 Homogénéisation des structures de nanocylindres

Dans cette sous-section, les propriétés des réseaux de nanoparticules cylindriques à section elliptique sont modélisées en utilisant la technique d'homogénéisation quasi-statique de type Maxwell-Garnett [9]. Cette technique a déjà été utilisée dans [81] et [122] pour des nanoparticules elliptiques.

Dans notre cas, nous considérons que la couche du réseau contenant les nanoparticules métalliques (région des sillons) peut être modélisée par un milieu anisotrope dont les composantes de la permittivité relative effective $\epsilon_j (j = x, y, z)$ sont données par l'expression suivante :

$$\epsilon_j - \epsilon_m = \epsilon_m \frac{f(\epsilon_p - \epsilon_m)}{\epsilon_m + L_j(\epsilon_p - \epsilon_m)} \left[1 - L_j \frac{f(\epsilon_p - \epsilon_m)}{\epsilon_m + L_j(\epsilon_p - \epsilon_m)} \right]^{-1}, \quad (2.1.1)$$

où ϵ_p est la permittivité relative de la nanoparticule, ϵ_m la permittivité relative du milieu environnant, f le taux de remplissage de métal dans la cellule considérée et L_j les composantes de la dyade de dépolarisation de l'axe considéré ($j = x, y, z$). Le calcul de ces composantes est bien connu dans le cas de nanoparticules de forme ellipsoïdale ou de nanoparticules cylindriques à section elliptique [82, 10]. Dans notre cas, la cellule élémentaire à homogénéiser est décrite par le schéma de la figure 2.1.41. Cette cellule élémentaire est une boîte rectangulaire dans

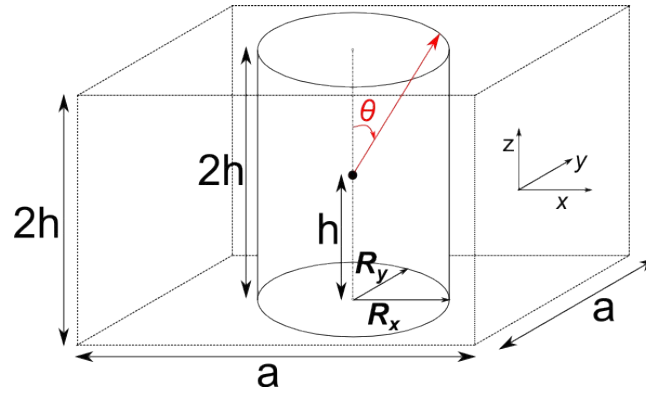


Fig. 2.1.41 – Schéma de la cellule élémentaire à homogénéiser.

laquelle est incluse un cylindre de hauteur $2h$ orienté suivant O_z , à section elliptique dont les rayons de l'ellipse sont R_x et R_y suivant les axes O_x et O_y respectivement. La hauteur de la boîte est la même que la hauteur du cylindre et sa base est la cellule carrée du réseau (carré de côté a). Ainsi le taux de remplissage de métal f est le rapport entre la section du cylindre elliptique et l'aire du carré de base de la cellule *i.e.* $f = \pi R_x R_y / a^2$.

Le calcul et l'expression des composantes de la dyade de dépolarisation L_j pour cette cellule élémentaire ainsi que celle contenant un cylindre circulaire sont reportés en annexe B. Après obtention numérique des différents facteurs de dépolarisation, les composantes de la permittivité relative effective de la couche du réseau contenant les cylindres sont calculées à partir de

l'équation 2.1.1.

Ce modèle effectif a été appliqué à deux cellules élémentaires de cotés $a = 200$ nm et de hauteur $2h$ de silice contenant:

- un cylindre en argent de hauteur $2h = 30$ nm à section elliptique de rayons $R_x = 40$ nm et $R_y = 30$ nm correspondant ainsi à une cellule élémentaire de la région des sillons de la structure optimisée F1 de la sous-section 2.1.3,
- un cylindre en argent de hauteur $2h = 40$ nm à section elliptique de rayons $R_x = 50$ nm et $R_y = 30$ nm correspondant ainsi à une cellule élémentaire de la région des sillons de la structure optimisée F2.

Pour la structure F1, les valeurs numériques des composantes de la dyade de dépolarisation ont été obtenues grâce aux équations détaillées en annexe: $L_x = 0.16$, $L_y = 0.24$ et $L_z = 0.60$ ainsi que pour la structure F2: $L_x = 0.16$, $L_y = 0.32$ et $L_z = 0.52$. Les permittivités relatives anisotropes effectives sur le spectre visible de la couche homogénéisée de la région des sillons des réseaux F1 et F2 ont ainsi pu être obtenues à partir de l'équation 2.1.1 et des indices de l'argent et de la silice. Ils sont représentés par la figure 2.1.42. Sur la figure précédente, on

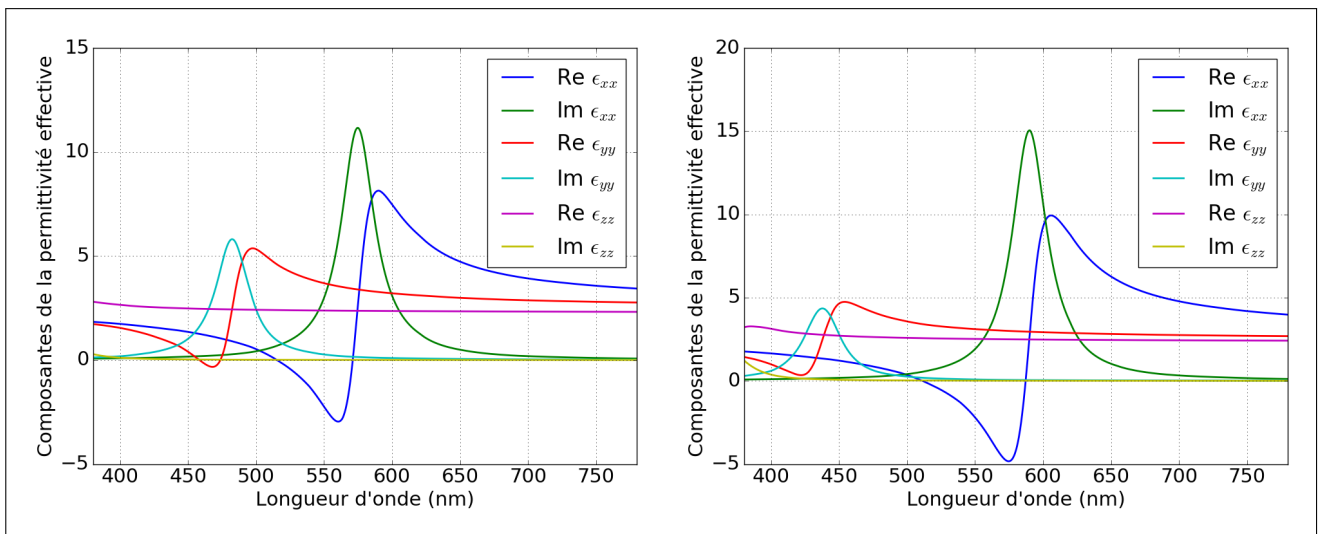


Fig. 2.1.42 – Composantes de la permittivité effective anisotrope pour la cellule élémentaire des structures F1 (à gauche) et F2 (à droite).

peut constater que deux résonances correspondant aux deux axes de la section elliptique sont observées pour chacune des permittivités. Pour la structure F1, la résonance suivant l'axe O_x (grand axe de l'ellipse) est positionnée spectralement aux alentours de 575 nm et la résonance suivant l'axe O_y (petit axe de l'ellipse) aux alentours de 480 nm. De plus, la résonance suivant l'axe O_y est plus forte que celle suivant O_x . Ceci est en accord avec les constats énoncés dans la sous-section 2.1.3, à savoir que plus la quantité de métal vue par le champ électrique est grande, plus la résonance est forte et décalée spectralement vers le rouge. Le même constat est observé pour la structure F2 avec une résonance plus forte suivant l'axe O_x positionnée spectralement aux alentours de 575 nm contre 440 nm suivant l'axe O_y .

Dorénavant, les structures correspondant aux structures multicouches F1 et F2 sont considérées. Les résultats de simulations FEM obtenus pour les structures F1 et F2 dans la sous-section 2.1.3 sont comparés aux coefficients de réflexion et transmission de structures multicouches composées (de haut en bas):

1. du milieu incident (de l'air)
2. d'une couche de 200 nm de SiO_2 correspondant à la couche de couverture des structures F1 et F2,
3. d'une couche homogénéisée de 30 nm pour la structure F1 et de 40 nm pour F2, de permittivités effectives anisotropes données par la figure 2.1.42 (gauche pour F1 et droite pour F2) correspondant à la région des sillons de chacune de ces structures,
4. d'un substrat en SiO_2 .

Ceux-ci ont été calculés pour une onde plane incidente contenue soit dans le plan O_{xz} ($k_y = 0$), soit dans le plan O_{yz} ($k_x = 0$) avec un angle d'incidence polaire fixé à $\theta_0 = 45^\circ$. Les deux cas de polarisation (s et p) sont considérés. La comparaison des valeurs des coefficients de réflexion et de transmission des structures homogénéisées aux efficacités de réflexion et de transmission obtenues par la FEM est présentée par la figure 2.1.43 pour la structure F1 et 2.1.44 pour la structure F2.

L'accord entre les simulations FEM et les résultats d'homogénéisation est relatif, notamment

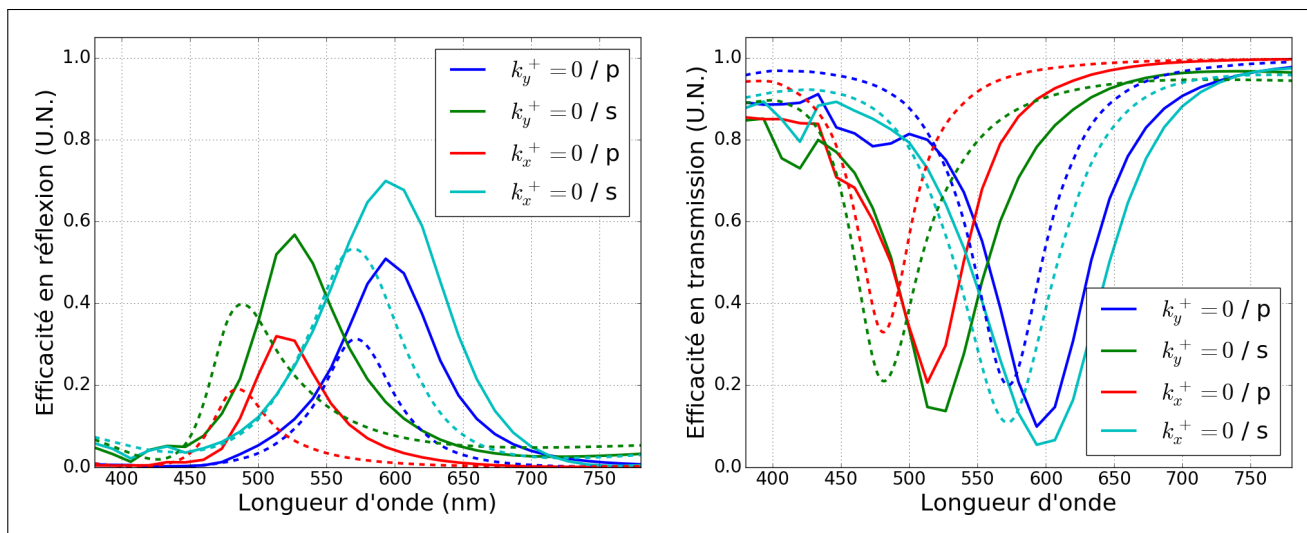


Fig. 2.1.43 – Réflexion (à gauche) et transmission (à droite) obtenues avec la méthode FEM (traits pleins) et le modèle d'homogénéisation quasi-statique (traits pointillés) pour la structure F1.

en ce qui concerne la fréquence de résonance où des différences de 50 nm sur la longueur d'onde de centrage de celle-ci sont observées. Ces écarts peuvent être expliqués par les trop grandes dimensions des nanoparticules considérées qui, pour que l'approximation quasi-statique soit valable, doivent être beaucoup plus petites que la longueur d'onde dans le matériau.

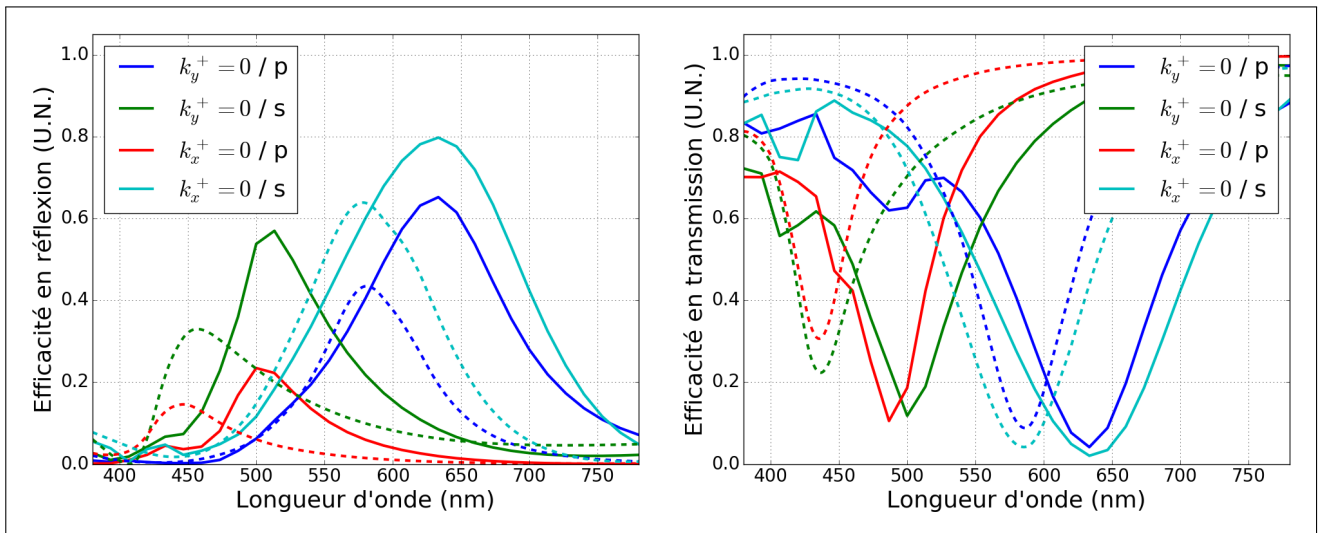


Fig. 2.1.44 – Réflexion (à gauche) et transmission (à droite) obtenues avec la méthode FEM (traits pleins) et le modèle d’homogénéisation quasi-statique (traits pointillés) pour la structure F2.

Afin de vérifier cette affirmation, la technique d’homogénéisation a été appliquée à six réseaux de nanocylindres d’or à section circulaire placés dans l’air. La hauteur des nanocylindres est fixée à $h = 30$ nm. Les rayons des cylindres sont fixés à 1, 2, 5, 10, 20 et 50 nm pour des périodicités respectivement fixées à 4.1, 8.1, 20.3, 40.6, 81.3 et 203.3 nm afin que le taux de remplissage de la cellule d’homogénéisation soit fixe ($f = 0.19$). Des simulations FEM ont été effectuées pour ces six réseaux éclairés par une onde plane incidente d’angle d’incidence $\theta_0 = 45^\circ$ contenue dans le plan O_{xz} ($k_y = 0$), en polarisation s et p et pour des longueurs d’onde dans le spectre visible. Les bilans d’énergie FEM et notamment les efficacités en transmission et réflexion des réseaux sont comparés aux coefficients de réflexion et transmission de structures multicouches composées (de haut en bas):

1. du milieu incident (de l’air)
2. d’une couche homogénéisée de 30 nm pour les six réseaux,
3. d’un substrat d’air.

Les résultats de cette étude sont présentés par la figure 2.1.45 pour la polarisation p et par la figure 2.1.46 pour la polarisation s . Sur ces figures, il est constaté que plus la taille des particules est grande, plus les écarts entre les résultats exacts de la FEM et les résultats d’homogénéisation sont importants, avec un excellent accord entre les deux résultats obtenus pour les nanocylindres de rayons de 1 et 2 nm, ce qui confirme l’hypothèse concernant l’origine des écarts observés sur les résultats d’homogénéisation des structures F1 et F2 (*c.f.* figures 2.1.43 et 2.1.44).

Malgré leur précision relative pour les tailles de particules considérées dans la réalisation des filtres, les résultats obtenus par la technique d’homogénéisation sont instantanés et permettent d’obtenir des tendances générales et ainsi d’économiser du temps de calcul avant de raffiner

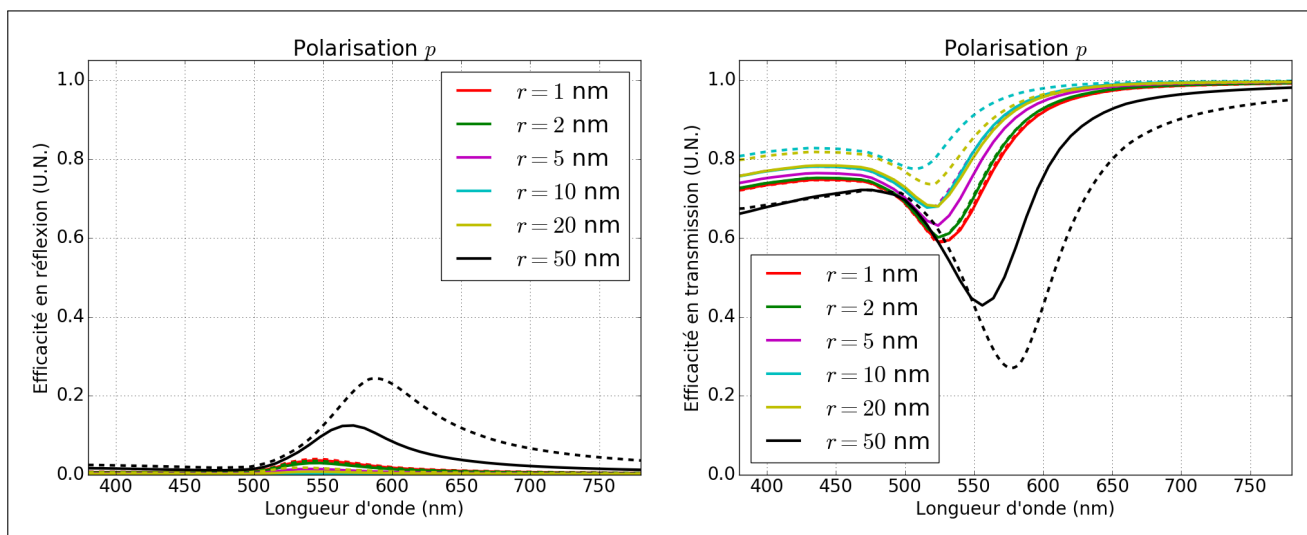


Fig. 2.1.45 – Réflexion (à gauche) et transmission (à droite) obtenues avec la méthode FEM (traits pleins) et le modèle d’homogénéisation quasi-statique (traits pointillés) en polarisation p pour les six réseaux considérés.

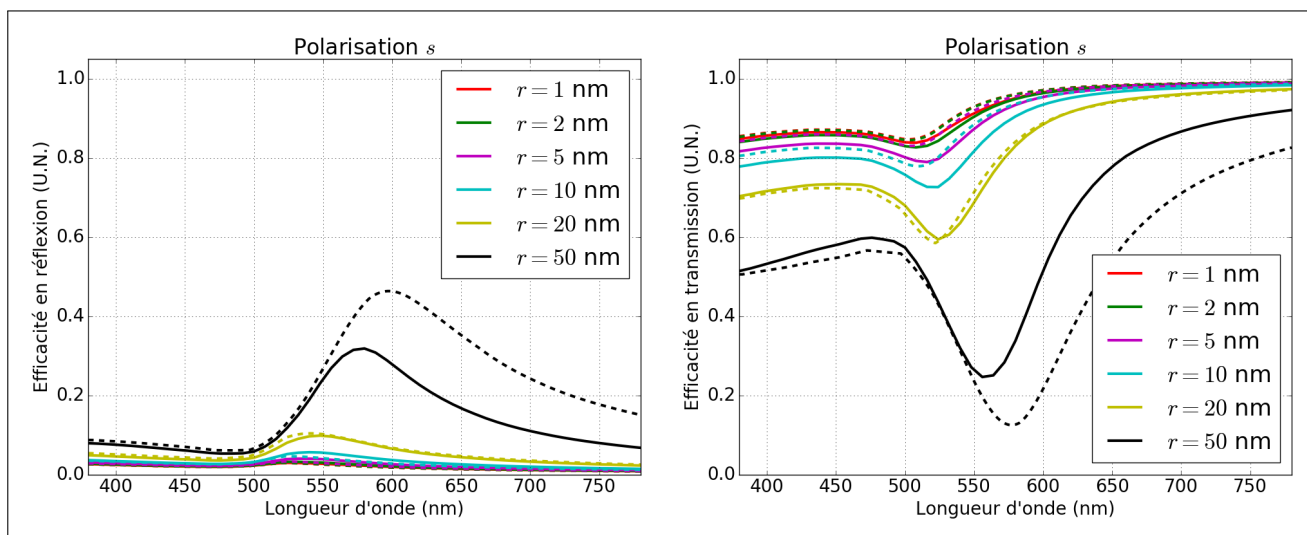


Fig. 2.1.46 – Réflexion (à gauche) et transmission (à droite) obtenues avec la méthode FEM (traits pleins) et le modèle d’homogénéisation quasi-statique (traits pointillés) en polarisation s pour les six réseaux considérés.

les designs grâce à la méthode FEM beaucoup plus gourmande en ressource. Afin d’améliorer la précision des résultats d’homogénéisation, il est possible de dériver un modèle plus précis où les nanocylindres sont directement déposés sur un substrat et ceci sans couche de couverture qui correspondrait par exemple au cas des groupes de structures S5 et S6. Ce modèle d’homogénéisation quasi-statique est présenté en annexe B.

2.1.3.6 Conclusions intermédiaires

Dans cette sous-section, différentes études ont été menées concernant le design de filtres semi-réfléchissants et globalement transparents pour l’application VTH par l’utilisation de réseaux bidimensionnels de nanocylindres métalliques à section elliptique. Plusieurs conclusions peuvent être tirées de ces études.

En premier lieu, une comparaison des résultats de simulations avec des résultats de mesures en transmission, en incidence normale, sur des échantillons constitués de réseaux bidimensionnels de nanocylindres d'or à section elliptique réalisés à l'IEF, a montré un excellent accord. Cela a permis de valider expérimentalement les résultats de simulation obtenus au travers de la formulation FEM en champ diffracté et également les valeurs d'indice optique employées pour ces simulations.

Comme constaté dans le cas des réseaux monodimensionnels de rubans métalliques, l'utilisation de l'or ne permet pas de couvrir tout le spectre visible en termes de position spectrale du pic en réflexion. Une nouvelle fois, l'argent devra être choisi comme matériau de fabrication des nanocylindres.

En ce qui concerne les procédés de fabrication, la présence de matériaux comme l'ITO pour l'évacuation des charges lors de la phase de lithographie ou le titane comme couche d'accroche métallique a pour effet d'augmenter de façon drastique l'absorption au sein de la structure. Il conviendra donc de s'affranchir de leur utilisation au cours du procédé de fabrication. Par exemple, la couche d'accroche en titane peut être supprimée en dépolissant le substrat ce qui permet de déposer directement l'argent sur celui-ci.

De même que dans le cas des rubans, la longueur d'onde de résonance en réflexion est principalement déterminée par les dimensions et la géométrie de la nanoparticule de la cellule élémentaire du réseau. Ainsi plus le champ électrique incident "voit" une quantité importante de métal, plus cette résonance en réflexion est efficace, large spectralement et décalée vers le rouge. Il est important de noter que cette propriété permet de choisir la couleur de réflexion du filtre en fonction de la polarisation de la lumière incidente. Par exemple, en prenant une source d'illumination étendue spectralement et polarisée linéairement, en faisant tourner la polarisation de cette source, la couleur réfléchi par le filtre va varier entre la couleur de faible longueur d'onde, correspondant à la résonance de la nanoparticule quand le champ électrique qui "voit" le petit axe du nanocylindre elliptique, à l'autre couleur de forte longueur d'onde qui correspond à la résonance de la nanoparticule quand le champ électrique qui "voit" le grand axe du nanocylindre elliptique. En jouant ainsi sur la polarisation de la source incidente et les dimensions des nanoparticules, il est possible de choisir plusieurs longueurs d'onde de centrage en réflexion pour le même filtre et ainsi de réaliser des filtres semi-réfléchissants pour plusieurs couleurs et possédant des caractéristiques de transparence globale sur le spectre visible.

Le taux de remplissage de la cellule du réseau gouverne l'intensité de la résonance ainsi que l'absorption au sein de la structure. Comme la périodicité carrée du réseau doit être choisie comme relativement faible (environ 200 nm) afin d'éviter la présence d'ordres de diffraction autres que les ordres spéculaires et la perte d'énergie lumineuse au sein de ceux-ci, les dimensions des nanoparticules devront être choisies les plus faibles possibles (tout en s'assurant qu'un pic en réflexion efficace est tout de même présent sur le spectre) afin de garantir une bonne transparence globale du filtre.

La réponse des nanocylindres métalliques à section elliptique à la lumière incidente a, par

ailleurs, été modélisée à l'aide d'un modèle d'homogénéisation quasi-statique de type Maxwell-Garnett. Ce modèle, bien que possédant une précision limitée (les différentes dimensions des nanocylindres étant trop grandes devant la longueur d'onde de la lumière incidente), a confirmé les affirmations énoncées concernant la position spectrale et l'efficacité des résonances des particules en fonction de la polarisation de la lumière incidente (à savoir que plus le champ électrique incident "voit" une quantité importante de métal, plus la résonance est efficace, large spectralement et décalée vers le rouge).

Enfin, deux designs de filtres à base de réseaux de nanocylindres à section elliptique en argent encapsulés dans de la silice et optimisés pour l'application VTH ont été proposés. Ces filtres conduisent à des pics en réflexion efficaces (entre 60 et 80 %) à différentes longueurs d'onde (520, 590 et 633 nm) et possèdent une bonne transparence globale sur le spectre visible (entre 65 et 75%).

Les résultats présentés concernant le design de filtres optiques à base de réseaux bidimensionnels de nanocylindres métalliques à section circulaire ont fait l'objet d'une publication [27].

2.1.4 Premières réalisations expérimentales, conclusions et perspectives sur le design de filtres pour l'application VTH par l'utilisation de réseaux de nanoparticules métalliques.

Dans cette section, la possibilité de réalisation de composants planaires de filtrage optique possédant des propriétés de réflexion à une ou plusieurs longueurs d'onde ainsi que des propriétés de transparence globale sur le spectre visible via l'utilisation de nanostructures plasmoniques a été démontrée par l'emploi de la FEM en champ diffracté. Deux types de structures ont été étudiés (réseaux monodimensionnels de rubans métalliques et réseaux bidimensionnels à périodicité carrée de cylindres métalliques à section elliptique). Ces structures ne constituent néanmoins pas une référence pour la réalisation des fonctions de filtrage requises. L'utilisation de nanoparticules métalliques avec des géométries plus complexes permettrait notamment d'obtenir des propriétés de filtrages en réflexion à plus de longueurs d'onde en gardant à l'esprit la règle de conception suivante "pour une source lumineuse polarisée linéairement, plus le champ électrique incident rencontre une quantité importante de métal, plus la résonance en réflexion est efficace, large spectralement et décalée vers le rouge". En ce qui concerne l'organisation en réseau des nanoparticules, d'autres pavages de l'espace pourraient également être étudiés.

Du côté pratique, la fabrication de premiers réseaux de nanoparticules métalliques a été effectuée à l'IEF. L'encapsulation a été faite dans du PMMA et non dans de la silice. Comme

le dépôt de silice s'effectue à 300°C, celui-ci peut potentiellement modifier les propriétés de la couche d'argent déposée, ainsi l'encapsulation dans du PMMA a été choisie car son indice optique est proche de celui de la silice et son dépôt s'effectue à 180°C. Pour tous les échantillons présentés par la suite, aucune couche en titane ou en ITO n'est présente et la métallisation est directement effectuée sur substrat en silice.

Les premiers réseaux de rubans d'argent souffrent d'un problème de tenue dans le temps comme observé sur la figure 2.1.47. L'épaisseur d'argent déposée (16 nm) ne semble pas être suffisante pour permettre une bonne tenue de ces rubans. En effet, une épaisseur d'argent minimum de 20 nm serait nécessaire pour que la couche soit stable [83]. En ce qui concerne les propriétés

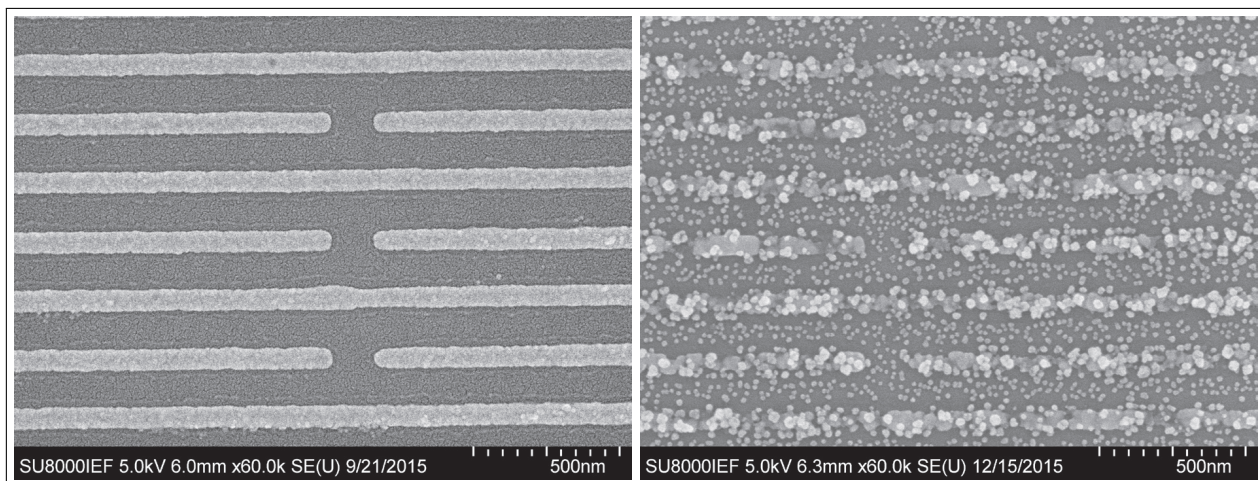


Fig. 2.1.47 – Images MEB d'un réseau de rubans d'argent de 16 nm d'épaisseur déposé sur un substrat en verre et encapsulé dans du PMMA le jour de la métallisation (à gauche) et trois mois plus tard (à droite).

optiques de ces réseaux, un pic en réflexion a bien été observé lors de la mesure des spectres effectués à l'IEF. Néanmoins, la stabilité dans le temps des spectres n'est pas bonne et ceci à cause de l'évolution de la couche d'argent déposée. Le pic en réflexion se décale vers le rouge, s'élargit et perd en intensité. Aucune comparaison avec les résultats de simulations FEM en champ diffracté n'est donc possible.

En ce qui concerne les réseaux bidimensionnels de nanocylindres à section elliptique, un premier échantillon comprenant 12 configurations différentes a été fabriqué. Nous ne détaillerons pas ici les géométries exactes de ces configurations, ni les spectres mesurés à l'IEF. Néanmoins, pour informations qualitatives, l'échantillon comprend des structures de réseaux de nanocylindres à section elliptique de bi-périodicité carré d'environ 200 nm et des structures où l'arrangement des nanocylindres est pseudo-aléatoire (avec le même taux de remplissage que pour les réseaux). Un exemple de ces arrangements est présenté par la figure 2.1.48. Les différents diamètres mesurés des nanocylindres à section elliptique varie entre 57 et 93 nm et leur épaisseur est d'environ 30 nm. Nous présentons seulement des photographies de l'échantillon réalisé. La figure 2.1.49 présente une photographie de l'échantillon en lumière naturelle montrant ainsi la transparence globale à 45° des différents filtres qui sont tout de même légèrement colorés. La figure 2.1.50 présente une photographie de l'échantillon éclairé à 45° par une source spectralement étendue

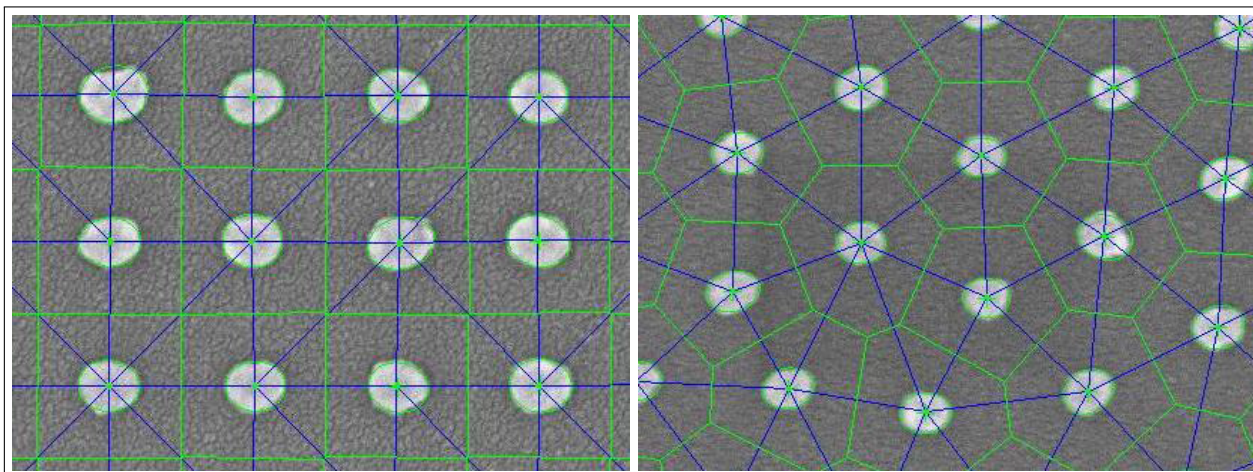


Fig. 2.1.48 – Images MEB d’un réseau de nanocylindres d’argent à section elliptique (à gauche) et de nanocylindres d’argent à section elliptique arrangés pseudo-aléatoirement (à droite).



Fig. 2.1.49 – Photographie de l’échantillon à 45° en lumière naturelle montrant la transparence globale des réseaux.

et polarisée linéairement, soit en s , et soit en p , avec un plan d’incidence dans le grand axe des ellipses des nanocylindres et dans le petit axe, soit quatre configurations d’éclairement. Sur cette figure, on peut observer la différence de la couleur réfléchiée en fonction du plan d’incidence de la source et de sa polarisation. On peut également noter que l’intensité de la lumière réfléchiée n’est pas la même suivant les différentes conditions d’éclairement. Ainsi chaque réseau réalisé possède deux couleurs réfléchiées avec deux intensités différentes suivant les conditions d’éclairement conformément aux résultats des différentes simulations effectuées sur ce type de réseaux (voir par exemple la figure 2.1.39).

Au vue des images des premiers échantillons réalisés, les résultats sont prometteurs. Bien qu’une légère teinte colorée soit présente en transmission, la lumière d’une source polarisée

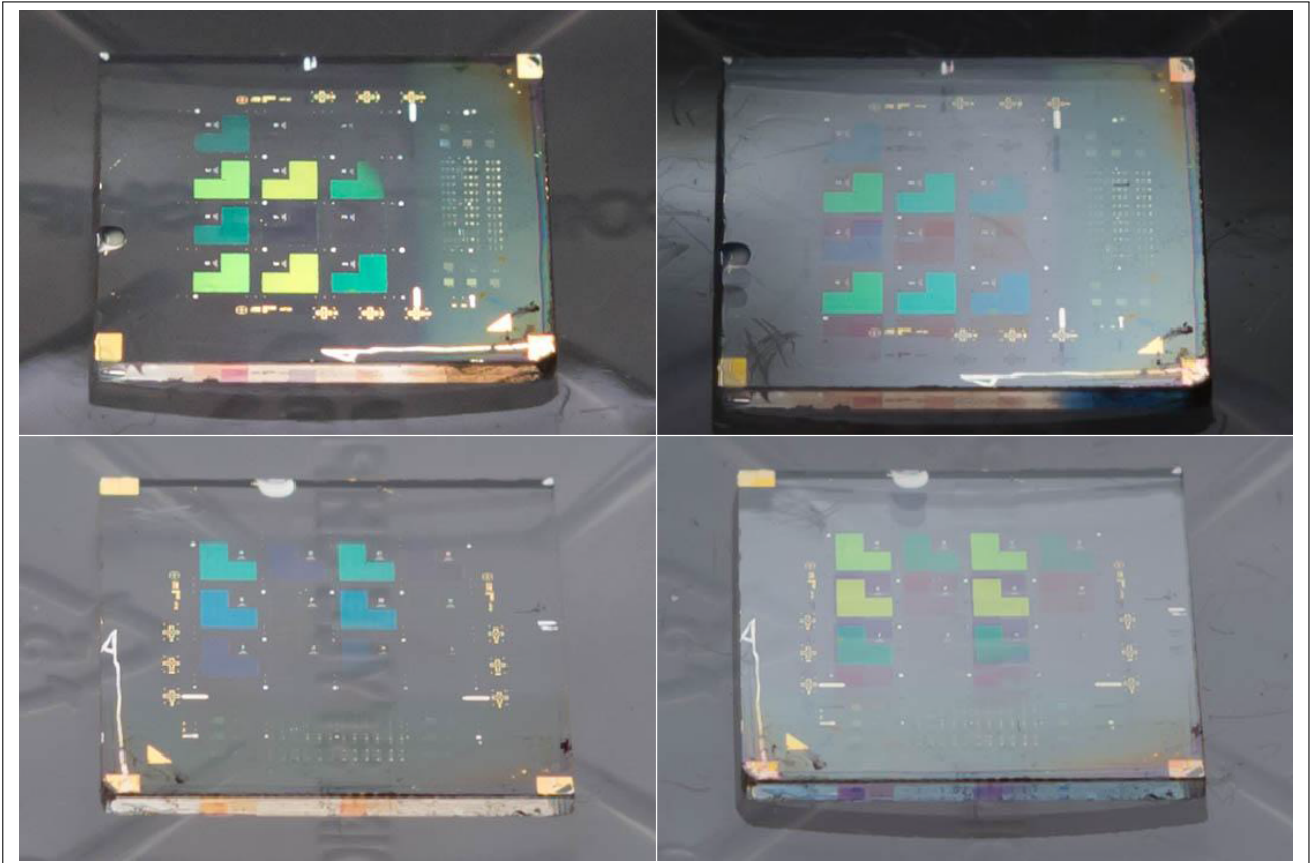


Fig. 2.1.50 – Photographie de l'échantillon éclairé à 45° par une source spectralement étendue et polarisée linéairement : en p à droite et en s à gauche. Les images du haut sont prises avec le plan d'incidence parallèle au grand axe des ellipses, celles du bas avec le plan d'incidence parallèle au petit axe (l'échantillon a été tourné de 90°).

linéairement est réfléchi efficacement et ceci pour deux couleurs différentes permettant ainsi une fonction d'affichage multicolore pour le Viseur Tête Haute.

Quelques pistes de travaux complémentaires peuvent être dégagées pour la réalisation de la fonction de filtrage du projet PLANISSIMO par l'utilisation de nanostructures plasmoniques:

- la réalisation de simulations FEM en champ diffracté avec une modélisation rigoureuse des réseaux effectivement réalisés est envisageable (modélisation exacte de la géométrie des nanoparticules obtenue par imagerie au MEB, emploi des valeurs d'indices optiques mesurés à l'IEF par ellipsométrie) afin d'affiner les résultats de simulation et le design des filtres,
- l'étude de l'emploi d'une couche diélectrique d'encapsulation bas indice est possible (et en cours chez Groupe PSA) afin d'éviter que les résonances ne se décalent trop dans la partie rouge du spectre visible,
- l'étude de l'emploi possible d'un réseau de nanoparticules métalliques couplé avec une couche guidante diélectrique à haut indice en-dessous de celui-ci qui permettrait d'obtenir un mode guidé à l'intérieur de cette couche et ainsi d'affiner la largeur spectrale des résonances et d'obtenir une meilleure transparence globale,

- la réalisation d'un algorithme de simulation colorimétrique prenant comme entrées les différents spectres mesurés des filtres réalisés et permettant de rendre compte de la couleur perçue par le conducteur.

Enfin, nous mentionnerons que l'optimisation numérique du design de réseaux résonants diélectriques [84–86] pour réaliser la fonction de filtrage du projet PLANISSIMO est également en cours d'étude. L'emploi de ce type de réseaux permettrait d'obtenir des largeurs de bandes en réflexion nettement plus étroites et ainsi de conserver une meilleure transmission sur tout le spectre visible. Néanmoins, l'inconvénient de ce type de filtre optique réside dans leur très faible tolérance angulaire qui rend leur utilisation possible mais difficile dans le cadre d'une application de type VTH.

2.2 Fonction de focalisation et de réflexion non spéculaire

Pour l'application VTH, une fois la fonction de filtrage optique effectivement réalisée, il est nécessaire de concevoir un composant optique possédant une fonction de focalisation permettant de projeter dans le champ de vision du conducteur l'image réfléchi de façon cohérente par le composant de filtrage optique précédemment conçu et ceci sans déformation de la scène extérieure de conduite. Pour ce faire, des composants de focalisation optique sont donc nécessaires. Afin de limiter l'encombrement du système, ces composants de focalisation doivent être les plus plats possibles et c'est assez naturellement que l'on peut penser à utiliser des métasurfaces extrêmement fines (de l'ordre de la centaine de nanomètres) qui peuvent posséder des résolutions sub-longueur d'onde [56–58, 60, 61]. Cependant, il est nécessaire de rappeler que le système optique à concevoir pour l'application VTH doit posséder des propriétés de transparence globale. Les métasurfaces plasmoniques pour la réalisation de composants de focalisation optique planaires à base de nanoparticules métalliques telles que l'or ou l'argent sont, à ce jour, généralement limitées en terme de transparence de par l'absorption présente au sein du métal [59]. Les métasurfaces diélectriques ne sont quant à elles pas limitées par ce phénomène d'absorption et permettent potentiellement d'obtenir une bonne transparence globale. Néanmoins, dans la littérature, les lentilles réalisées par des métasurfaces diélectriques pour le domaine visible et proche visible possèdent des focales (quelques centaines de microns) bien inférieures à celle requises pour l'application VTH (de l'ordre d'une dizaine de mètres) [57, 58, 87]. Ces lentilles sont, pour le moment, des concentrateurs de champ et ne sont pas destinées à imager une scène en lumière naturelle. D'autre part, les possibilités technologiques de fabrication de telles lentilles ne permettent pas de réaliser celles-ci à faibles coûts sur des surfaces étendues. Ainsi, le design de composants optiques de focalisation dans le domaine visible par l'utilisation de métasurfaces pourrait constituer à lui seul un projet d'étude et ne sera donc pas poursuivi dans le cadre de ce Travail de Doctorat.

Les travaux effectués pour la fonction de focalisation et de réflexion non spéculaire du projet concernent donc un agencement astucieux de différents composants optiques (dont l'un des composants possède les propriétés de filtrage requis pour le VTH) afin de pouvoir focaliser à l'infini (ou à une distance donnée) l'image projetée au niveau de l'œil de l'utilisateur de la VTH. Cet agencement fait l'objet d'un brevet déposé [131] dont les principales innovations sont résumées dans cette section. Le lecteur pourra se référer à ce brevet pour plus de détails.

L'invention concerne un dispositif permettant de:

- former une image virtuelle en réflexion de la source de rétroprojection (objet) émettant dans une ou plusieurs bandes spectrales centrées sur des longueurs d'onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ et de largeurs $\Delta\lambda_1, \Delta\lambda_2, \dots, \Delta\lambda_n$ possiblement polarisées (source LED, matrice de cristaux

liquides rétroéclairée LCD),

- tout en ayant en transmission aucune propriété particulière de focalisation, et ceci avec un niveau de transmission spectrale intégrée sur le spectre du visible (380-780 nm) très élevé.

Le dispositif permet ainsi à un utilisateur de:

- voir l'image de l'objet (faisceau lumineux de la source de rétroéclairage) en réflexion se former de l'autre côté du dispositif (lame ou parebrise) et,
- se superposer à la scène, qui n'est pas modifiée en transmission par le dispositif.

Elle s'appuie sur l'utilisation de deux composants d'optique mince aux propriétés à la fois de focalisation et de déflexion (lentille + prisme) entre lesquels un filtre spectral en réflexion est intercalé. C'est ce filtre spectral en réflexion qui peut être réalisé par l'utilisation de réseaux de nanoparticules métalliques et qui fait l'objet de l'étude de la section précédente 2.1. Un des deux composants, situé en avant du filtre semi-réfléchissant, permet la déflexion et la focalisation de l'image réfléchie avec des relations de conjugaisons possiblement non conventionnelles. L'autre, situé en arrière du filtre, permet d'annuler les effets du premier composant optique et ainsi d'annuler la déflexion et de « défocaliser » la scène réelle avant passage au travers du composant optique situé en avant du filtre pour permettre d'assurer une bonne visibilité de cette scène au travers du dispositif total par le conducteur. L'introduction de prismes dans les deux composants optiques minces précédemment décrits permet de rajouter un degré de liberté dans l'orientation et le positionnement de la source de rétroprojection et par conséquent du dispositif de réalité augmentée compact. Ils permettent la formation d'une image virtuelle en réflexion « hors axe » et autorisent ainsi un maximum de possibilités en ce qui concerne le positionnement et l'intégration des différents composants du dispositif mais aussi en ce qui concerne le positionnement de cette image virtuelle.

Le système (*c.f.* figure 2.2.1) est composé :

- d'une lame dite de « filtrage spectral en réflexion » ayant des propriétés réfléchissantes centrées sur la longueur d'onde λ_i , de largeur $\Delta\lambda_i$ et ceci avec un niveau de transmission spectrale intégrée sur le spectre du visible très élevée (élément 20 sur les figures 2.2.1 et 2.2.3). Ce filtre semi-réfléchissant peut être réalisé à l'aide de réseaux de nanoparticules plasmoniques (comme étudié en détails dans la section 2.1), de filtres à réseau résonant diélectrique, de multicouches,... Cette lame dite de « filtrage spectral en réflexion » fait l'objet d'un brevet déposé [132].
- d'un composant d'optique mince de déflexion et de focalisation convergente (prisme de Fresnel + lentille de Fresnel ou prisme + lentille plate micro-nano-structurés) (élément 30 sur les figures 2.2.1 et 2.2.3). Sur le schéma 2.2.2, une vue de coupe du composant optique mince (30) est présentée : le prisme de déflexion est en rouge et la lentille de focalisation en vert. Le dispositif a ensuite été découpé afin d'obtenir un profil de « Fresnel » compact.

- d'un composant d'optique mince de « défocalisation » (prisme + lentille de Fresnel ou prisme + lentille plate micro-nano-structurés) (élément 40 sur les figures 2.2.1 et 2.2.3) annulant également la déflexion. Le composant optique mince (40) compense ainsi les effets du composant optique mince (30). Il est donc constitué de la structure complémentaire à celle proposée pour le composant optique (30).

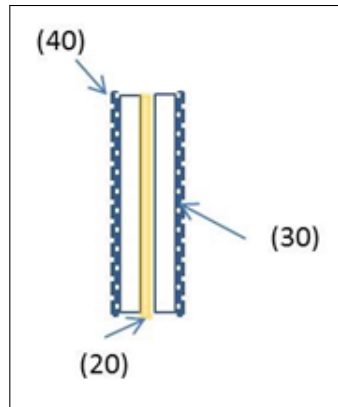


Fig. 2.2.1 – Schéma de principe du système.

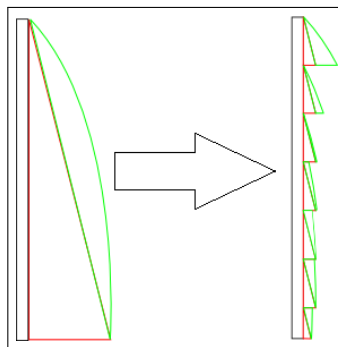


Fig. 2.2.2 – Vue de coupe du composant optique mince (30). Le prisme de déflexion est en rouge et la lentille de focalisation en vert. Le dispositif (à gauche) a ensuite été découpé afin d'obtenir un profil de « Fresnel » compact (à droite).

Le schéma 2.2.3 présente une configuration d'utilisation du dispositif présenté par la figure 2.2.1.

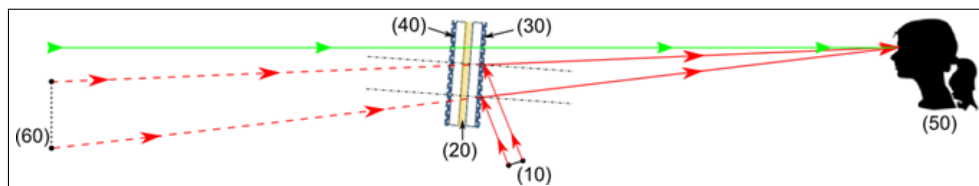


Fig. 2.2.3 – Configuration d'utilisation du dispositif présenté par la figure 2.2.1

En ce qui concerne l'image projetée (réfléchiée et virtuelle): Le dispositif de projection d'image (10), qui peut être un projecteur (LED, laser) ou un écran (LCD), “envoie une image” en

direction du « filtre spectral en réflexion » (20). En termes d'optique géométrique, les rayons en provenance de cette source (en rouge sur le schéma) passent une première fois au travers du composant optique mince (30) puis sont réfléchis par le filtre (20) et enfin repassent une seconde fois à travers le composant d'optique mince (30) possédant une focale et une déflexion telle que l'image virtuelle (60) est formée à grande distance et visible par l'œil de l'utilisateur (50) pour une distance œil-système de l'ordre de 1 m. La convergence et la déflexion du composant optique mince (30) doivent être calibrées en tenant compte du fait que les rayons passent deux fois au travers de celui-ci, son effet étant donc doublé. À noter que les images provenant de l'extérieur et aux longueurs d'onde situées dans la bande de réjection du filtre (20) pourraient ne pas être transmises, et donc ne pas être observables par le conducteur, mais ceci ne devrait pas avoir d'influence sur l'image observée en transmission tant que la bande passante du filtre (20) est suffisamment étroite (quelques nm à dizaines de nm).

En ce qui concerne l'image transmise au travers du filtre provenant de l'extérieur:

Les rayons en provenance de l'extérieur (en vert sur le schéma) passent à travers le composant optique mince (40) puis à travers le filtre (20) puis à travers le composant optique mince (30) permettant ainsi de rediriger et de refocaliser ces rayons à l'infini en direction de l'utilisateur (50).

La faible épaisseur des différents composants mis en jeu permet de limiter la déformation des images passant au travers du dispositif total (faible effet de grossissement).

CONCLUSIONS DU CHAPITRE II

Dans ce chapitre, la FEM et les formulations en champ diffracté existantes ont été utilisées pour étudier les propriétés de réseaux de rubans et de nanocylindres métalliques et ceci afin d'optimiser le design de composants intégrant la fonction de filtrage du projet PLANISSIMO. Les résultats de simulations obtenus ont pu être validés par comparaison avec des résultats de mesures expérimentales. L'étude des propriétés des réseaux de nanocylindres à l'aide des résultats de simulations FEM a pu également être confrontée à une étude d'homogénéisation quasi-statique de type Maxwell-Garnett et un accord qualitatif a pu être constaté. Les premières réalisations de composants de filtrage par des nanostructures plasmoniques ont suivi ces études et les premiers résultats sont encourageants. Affiner les caractéristiques spectrales de ces filtres nécessiterait une optimisation en profondeur du design des composants. Pour ce faire, une toute autre approche que celle suivie au cours de ce chapitre est envisageable. Dans notre cas, afin d'étudier les paramètres d'influence des structures, nous avons travaillé en fixant les conditions d'éclairage pour une longueur d'onde parcourant le spectre visible. En faisant varier les paramètres géométriques et les matériaux présents, nous avons alors mieux compris comment les bilans d'énergie étaient impactés par ces changements et ainsi pu conduire l'optimisation. L'approche complémentaire consisterait à effectuer une analyse paramétrique modale des mêmes structures. En retrouvant les quasi-modes de celles-ci et en étudiant l'influence des différents paramètres géométriques et des matériaux sur la position des modes dans le plan complexe (celle-ci donnant des informations sur la position spectrale et la largeur de bande des résonances), nous serions en mesure de comprendre encore plus finement les mécanismes mis en jeu et aussi de mener une optimisation plus efficace. De plus, une étude modale ne nécessite pas de fixer la fréquence complexe de la lumière incidente mais seulement son vecteur d'onde réel. Ainsi, pour un angle d'incidence fixé, une fois l'analyse modale effectuée pour une structure, les cartes de champs peuvent être retrouvées pour n'importe quelle longueur d'onde [62] et à partir de là, le spectre du bilan d'énergie correspondant. Néanmoins, l'analyse modale des structures étudiées est un défi numérique en soi. Tout d'abord, ces structures comprennent des matériaux dispersifs et à pertes, le problème spectral correspondant est donc non-linéaire et non-Hermitien et ainsi l'analyse modale est extrêmement difficile à effectuer. De surcroît, les structures sont ouvertes et nécessitent donc d'être modélisées à l'aide de PMLs. L'impact de ces PMLs sur l'étude spectrale numérique des structures électromagnétiques ouvertes n'a

fait l'objet que de peu d'études dans la littérature. C'est ainsi que l'objet du chapitre suivant est de mieux définir le cadre de l'analyse modale numérique à travers la FEM des structures électromagnétiques ouvertes dispersives et dissipatives.

Concernant la fonction de focalisation du projet, un agencement astucieux de différents composants d'optiques classiques (lentilles et prismes) et du composant de filtrage de design optimisé par la FEM a été proposé. Cet agencement a fait l'objet d'un brevet déposé [131]. Un démonstrateur de principe du brevet est également en cours de réalisation.

En résumé, dans ce chapitre, les différentes formulations FEM en champ diffracté du chapitre 1 ont été utilisées pour conduire au design de réseaux de nanoparticules métalliques qui, une fois réalisés, ont démontré la possibilité de réalisation de composants optiques planaires possédant les propriétés de filtrage requis pour une application VTH. La possible réalisation de la fonction de focalisation requise pour cette application serait alors basée sur un agencement de ces réseaux avec des composants d'optique classique.

CHAPITRE 3

EXTENSION DE LA FEM À L'ANALYSE

MODALE DE STRUCTURES

ÉLECTROMAGNÉTIQUES DISPERSIVES ET

DISSIPATIVES

INTRODUCTION AU CHAPITRE III

C'est en 1678 que pour la première fois une théorie ondulatoire de la lumière fût proposée par Christian Huygens. Cette vision de la lumière comme une "vibration" était radicalement opposée à celle de Newton et sa vision "moléculaire". Néanmoins, le succès de Newton et de son traité "Opticks" de 1704 occulta pendant un temps cette conception ondulatoire au profit de la vision corpusculaire. En 1801, Young et son expérience bien connue des "Fentes d'Young" remet de nouveau au goût du jour la question de la nature de la lumière. Puis, c'est dans les années 1810 que Augustin-Jean Fresnel, se référant à Huygens tout en apportant des concepts radicalement différents, fonde les bases de l'optique ondulatoire moderne. Il faudra dès lors attendre 1865 et la synthèse des équations de Maxwell (présentées au chapitre 1.1 de cette Thèse) pour comprendre que les ondes lumineuses ne sont que des ondes électromagnétiques et que la lumière visible n'est qu'une partie du spectre de rayonnement électromagnétique. Ainsi, Maxwell a donné un cadre mathématique précis à la description de l'électromagnétisme et de l'optique ondulatoire unifiant ainsi deux théories jusqu'ici disjointes.

Comme dans tout phénomène vibratoire, la notion de résonance intervient donc dans la description des systèmes électromagnétiques. Une résonance peut être interprétée comme un état privilégié de répartition de l'énergie au sein d'un système physique. C'est une caractéristique intrinsèque au système considéré. Ainsi l'étude d'un système physique ondulatoire peut se réduire à retrouver toutes les résonances de ce système.

Une résonance est décrite par un mode propre de résonance qui est composé d'une fréquence propre de résonance (ω_n valeur propre) associée à un champ propre (vecteur propre) de la quantité physique observée. Mathématiquement parlant, elle est associée à un problème spectral qui consiste en la résolution des équations qui décrivent le phénomène physique étudié sans source d'excitation et dans le cadre du système mis en jeu. Ces équations sont associées à un opérateur mathématique et la description d'un système physique revient à conduire l'étude spectrale de l'opérateur mis en jeu dans le cadre du système étudié. En électromagnétisme, les quantités physiques observées sont les champs électromagnétiques \mathbf{E} et \mathbf{H} et les équations régissant le comportement du rayonnement en présence d'un milieu matériel sont les équations de Maxwell associées aux équations constitutives (voir 1.1). En l'absence de source d'excitation, ces équations sont rappelées au chapitre 1 de cette Thèse (*c.f.* 1.1.7). Ainsi, l'étude d'une structure électromagnétique revient à conduire l'étude spectrale de l'opérateur de Maxwell

associé à ces équations 1.1.7. Si le système est conservatif (l'énergie totale du système est conservée), le problème spectral est dit auto-adjoint ou Hermitien. Dans ce cas, l'ensemble des fréquences propres du système (spectre) est réel et l'ensemble des vecteurs propres associés aux fréquences propres du système sont d'énergie finie et constitue une base orthonormée de l'espace des solutions. Le système est alors totalement décrit par le spectre associé à cette base. Si le système est dissipatif (de l'énergie est dissipée au sein du système à pertes, soit par effet Joule, soit par radiation du système vers le reste de l'univers), le problème spectral ainsi que l'opérateur associé est non-auto-adjoint ou non-Hermitien, les fréquences propres sont généralement complexes ($\omega_n = \omega'_n + i\omega''_n$). La partie réelle de la fréquence propre $\omega'_n > 0$ est la fréquence de résonance et sa partie imaginaire $\omega''_n < 0$ correspond à la largeur de bande de la résonance. Cette partie imaginaire est associée au temps de vie de la résonance. En effet, en régime temporel harmonique, décrit dans l'espace de Fourier avec une convention en $\exp[-i\omega t]$, cette partie imaginaire se traduit dans l'expression de la dépendance temporelle de l'énergie du mode propre associé par une exponentielle décroissante $\exp(-|\omega''_n|t)$. Ainsi, plus le module de cette partie imaginaire est fort, plus la dissipation d'énergie est prononcée, les pertes fortes, la largeur de bande large et le temps de vie du mode propre associé faible. On peut ainsi définir un facteur de qualité d'un mode comme $Q = \frac{\omega'_n}{|\omega''_n|}$ qui traduit la finesse d'une résonance. Il est à noter qu'au sein du système dissipatif, les pertes peuvent avoir deux origines bien distinctes: les pertes par effet Joule qui traduisent la dissipation de l'énergie d'un système au sein même de celui-ci (par exemple des pertes par frottements internes au sein d'un système mécanique) et les pertes par rayonnement qui traduisent la dissipation de l'énergie d'un système par fuites vers le reste de l'univers. En électromagnétisme, les modes de résonance associés à ses "modes à fuites" [88] possèdent des appellations différentes dans la littérature. Ils sont connus sous le nom de quasi-modes [62, 89], de quasi-normal modes [90, 91], d'état résonant (resonant states [92, 93]). Nous noterons que dans le cas d'une structure ouverte à pertes Joule, il est difficile d'attribuer la part des pertes due aux pertes radiatives et celle due aux pertes par effet Joule. Les vecteurs propres associés au problème modal de ces structures à pertes ne sont plus d'énergie finie (celle-ci augmentant exponentiellement dans l'espace libre ou temporellement au sein des éléments absorbants de la structure) et l'ensemble de ceux-ci ne constituent plus une base orthonormée des solutions associées au problème modal. Décomposer une solution générale sur différents modes propres associés à la structure fait alors l'objet d'un traitement particulier, nettement moins trivial que dans le cas sans pertes, et qui n'est pas l'objet de ce travail. Il a néanmoins déjà fait l'objet d'études par différentes méthodes tel que les "Quasimodal expansions" [62] ou les "Resonant State Expansion" [94–96]. L'une d'elle à d'ailleurs fait l'objet d'un chapitre de la Thèse de doctorat de Benjamin Vial [127] menée au sein de l'Institut Fresnel.

Dans ce chapitre, nous allons principalement nous intéresser à la dépendance fréquentielle de l'opérateur de Maxwell. Les nanostructures que nous avons étudiées au chapitre précédent 2 incorporent du métal tel que l'argent ou l'or. Ces métaux sont des matériaux à pertes op-

tiques qui se traduisent alors toujours par une forte dispersion au sein de ceux-ci. En effet, de par le principe de causalité [97], la permittivité relative d'un matériau est une fonction complexe analytique de la fréquence complexe (de partie imaginaire négative). Les relations de Kramers-Kronig [11, 98] (conséquence de ces propriétés analytiques) permettent ainsi de relier la dépendance fréquentielle de la partie réelle de la permittivité relative d'un matériau à sa partie imaginaire et ainsi, pertes et dispersion sont intrinsèquement liées. Comme nous le verrons par la suite, en présence de ces matériaux dispersifs et dissipatifs, l'opérateur de Maxwell est non-linéaire en fréquence et non-Hermitien et le problème aux valeurs propres à résoudre, afin d'effectuer l'analyse spectrale de celui-ci, nécessite un traitement particulier. C'est donc dans le but de linéariser l'opérateur de Maxwell vis-à-vis de la fréquence que le formalisme des champs auxiliaires développé par A. Tip va être introduit puis implémenté numériquement à travers la FEM. La validité des résultats obtenus à travers cette implémentation va être alors vérifiée en comparant les résultats de la FEM obtenus sur une structure électromagnétique simple (cavité dispersive et dissipative fermée) au spectre de la même structure obtenu analytiquement. La méthode sera ensuite appliquée à l'étude des spectres de différents cristaux photoniques bidimensionnels constitués de tiges métalliques de Drude. Les spectres obtenus par la FEM seront également comparés à de précédents résultats de la littérature afin de s'assurer de leur validité. Enfin, dans le but d'étendre la méthode numérique d'analyse modale FEM développée aux structures électromagnétiques ouvertes, une étude spectrale analytique et numérique sera conduite sur une structure électromagnétique simple contenant des PMLs "classiques" ou dispersives simulant l'espace libre.

Dans ce chapitre, toutes les structures étudiées sont bidimensionnelles.

Contenu du Chapitre

3.1	Le problème spectral en présence de dispersion	105
3.1.1	Description du problème spectral et notations	105
3.1.2	Les champs auxiliaires et le formalisme de résonance	107
3.1.2.1	Résonance de Drude-Lorentz seule	108
3.1.2.2	Résonance de Drude seule	110
3.1.2.3	Somme de résonances	111
3.1.2.4	Formalisme pour une structure à plusieurs domaines	111
3.1.3	Formulation faible associée	112
3.2	Validation numérique de la méthode	115
3.2.1	Relations de dispersion et fréquences propres du système considéré	115
3.2.1.1	Polarisation s	115
3.2.1.2	Polarisation p	117
3.2.2	Confrontation des résultats analytiques aux résultats de la FEM	117
3.2.2.1	Polarisation s	118
3.2.2.2	Polarisation p	119
3.3	Application aux cristaux photoniques bidimensionnels métalliques de Drude	122
3.3.1	Analyse et comparaison des résultats FEM avec ceux issus de [123] et [104]	124
3.3.1.1	Polarisation s	124
3.3.1.2	Polarisation p	132
3.3.2	Analyse et comparaison des résultats FEM avec ceux issus de [105]	134
3.3.2.1	Présentation des résultats de [105]	134
3.3.2.2	Comparaison avec les résultats de la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance	135
3.3.3	Conclusions intermédiaires	144
3.4	Étude spectrale des structures ouvertes: introduction de PMLs dispersives	145
3.4.1	Description de la structure et du problème spectral considérés	146
3.4.2	Relation de dispersion en polarisation s	148
3.4.3	Calcul analytique des fréquences propres de la structure	150
3.4.3.1	Fréquences propres des modes à fuite du domaine Ω_3	150
3.4.3.2	Fréquences propres des modes de PMLs des domaines Ω_1 et Ω_5	151
3.4.3.3	Illustration numérique: confirmation des expressions analytiques des modes de la structure étudiée	154
3.4.4	Implémentation FEM de la structure et études modales numériques des PMLs	156
3.4.4.1	Cas de PMLs non dispersives	156

3.4.4.2	Cas de PMLs dispersives	160
3.4.5	Conclusions intermédiaires	167

3.1 Le problème spectral en présence de dispersion

3.1.1 Description du problème spectral et notations

Soient \hat{x} , \hat{y} et \hat{z} , les vecteurs unitaires des axes du système de coordonnées orthogonal O_{xyz} et (x, y, z) les coordonnées du vecteur \mathbf{r} .

Le problème spectral se traite en régime harmonique avec une dépendance temporelle en $\exp[-i\omega t]$ où ω est la fréquence complexe. Les champs électromagnétiques sont représentés par des vecteurs complexes notés \mathbf{E} et \mathbf{H} . Nous considérons des structures bidimensionnelles, invariantes suivant l'axe O_z , ainsi le vecteur \mathbf{r} de coordonnées spatiales (x, y, z) est réduit aux seules coordonnées (x, y) . La structure étant invariante suivant l'axe O_z , dans le cas non-conique (\mathbf{k} se situe dans le plan d'invariance de la structure), les champs électromagnétiques ne dépendent que des variables x et y , ainsi $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(x, y)$ et $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}(x, y)$.

Soit Ω le domaine de la structure considérée, un sous-ensemble fermé de \mathbb{R}^2 de frontière $\partial\Omega$. Ce domaine peut être composé de plusieurs sous-domaines $\Omega_j \subset \Omega$ de frontières $\partial\Omega_j$ tels que $\Omega = \bigcup_j \Omega_j$. Pour chaque sous-domaine Ω_j , la fonction caractéristique: $l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) = 1$ si $\mathbf{r} \in \Omega_j$ et $l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) = 0$ sinon, est introduite. Chaque sous-domaine Ω_j est constitué d'un matériau linéaire, homogène, isotrope et non magnétique (le tenseur de perméabilité relative de la structure totale est donc le tenseur identité: $\boldsymbol{\mu}_r = l_d$). Chacun des matériaux constituant les sous-domaines est supposé comme ayant une réponse électrique dispersive et dissipative en fréquence. Le tenseur de permittivité relative complexe ϵ_j dans chaque sous-domaine Ω_j s'écrit donc:

$$\boldsymbol{\epsilon}_j(\omega) = \epsilon_j(\omega)l_d, \quad (3.1.1)$$

et ainsi le champ de tenseur de permittivité relative de la structure totale s'écrit:

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r})\boldsymbol{\epsilon}_j(\omega)l_d. \quad (3.1.2)$$

La dépendance fréquentielle de chaque champ ϵ_j est modélisée par une superposition de résonance de Drude et/ou de Drude-Lorentz [12]:

$$\epsilon_j(\omega) = \epsilon_{\infty_j} - \sum_k \frac{\omega_{p,jk}^2}{\omega^2 + i\gamma_{D,jk}\omega - \omega_{D,jk}^2}, \quad (3.1.3)$$

la résonance de Drude étant obtenue en fixant $\omega_{D,jk} = 0$. Il est important de noter que ces fonctions de ω sont analytiques dans le demi-plan supérieur des fréquences complexes et satisfont ainsi le principe de causalité. Le comportement des structures incorporant des matériaux causaux purement dispersifs (sans absorption) peut également être modélisé en considérant la

limite pour la constante d'amortissement du modèle $\gamma_{D,jk} \rightarrow 0$.

Cette modélisation a été choisie car elle est particulièrement pertinente pour décrire la dispersion de la permittivité relative dans le domaine visible des métaux incorporés (Argent, Or) dans les structures étudiées tout au long de cette Thèse [99]. À titre d'exemple, la figure suivante 3.1.1 présente la comparaison des valeurs de la permittivité relative de l'or en fonction de la longueur d'onde de référence issues de [79] et celles issues de la modélisation suivante avec des valeurs optimisées tirées de [99] des différents paramètres du modèle, pour le spectre visible:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_D^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} - \frac{\Delta\omega_L^2}{\omega^2 - \omega_L^2 + i\gamma_L\omega} \quad (3.1.4)$$

avec $\epsilon_\infty = 6.15991$, $\omega_D = 1.34759 \times 10^{16} \text{ rad.s}^{-1}$, $\gamma_D = 7.20958 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$, $\omega_L = 4.66171 \times 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$, $\gamma_L = 1.66938 \times 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$ et $\Delta\epsilon = 2.07122$.

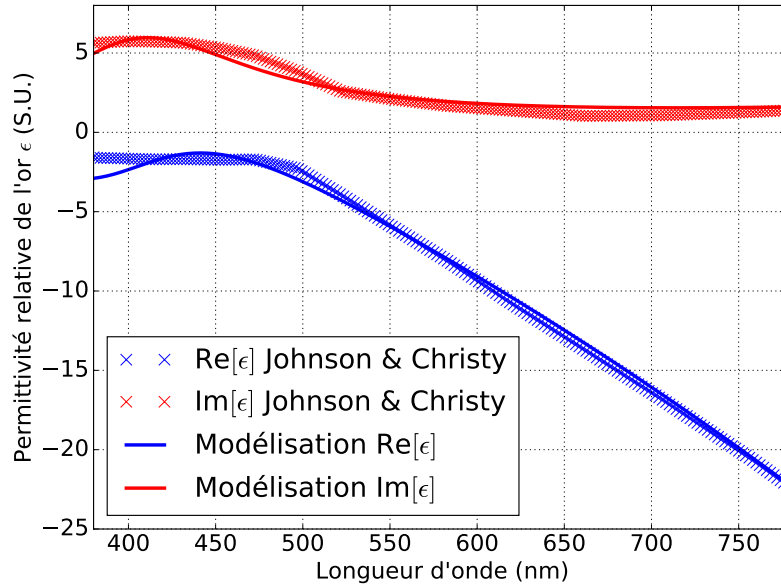


Fig. 3.1.1 – Comparaison, pour le spectre visible, des valeurs de la permittivité relative de l'or en fonction de la longueur d'onde issues de [79] et celles issues de la modélisation donnée par l'expression 3.1.4, avec des valeurs de paramètres de modèle optimisées tirées de [99].

Le problème spectral à traiter revient à calculer les valeurs propres ω_n et les vecteurs propres associés $(\mathbf{E}_n, \mathbf{H}_n)$ des équations de Maxwell sans sources (*c.f.* 1.1.7) qui s'écrivent dans notre cas:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega), \quad (3.1.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega).$$

Ces équations peuvent être condensées par l'expression matricielle suivante:

$$\mathbf{M}_0(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{F}_0(\mathbf{r}, \omega) = \omega\mathbf{F}_0(\mathbf{r}, \omega), \quad (3.1.6)$$

avec

$$\mathbf{M}_0(\mathbf{r}, \omega) = \begin{bmatrix} 0 & i\epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \omega)/\epsilon_0 \nabla \times \\ -i/\mu_0 \nabla \times & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.1.7)$$

et

$$\mathbf{F}_0(\mathbf{r}, \omega) = \begin{bmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \end{bmatrix}. \quad (3.1.8)$$

Dans cette expression, ω apparaît clairement comme valeur propre de l'opérateur de Maxwell \mathbf{M}_0 et \mathbf{F}_0 comme vecteur propre associé. En présence de dispersion, ce problème aux valeurs propres est non-linéaire en fréquence car l'opérateur \mathbf{M}_0 dépend de ω à travers la dépendance de ϵ^{-1} . En présence d'absorption, l'opérateur \mathbf{M}_0 est également non-Hermitien et les fréquences propres associées sont complexes. L'implémentation numérique au travers la FEM de ce problème aux valeurs propres non-linéaire et non-Hermitien apparaît comme difficile à mener. Il conviendrait d'obtenir au minimum un problème aux valeurs propres polynomial (voir par exemple l'expression 3.3.9) afin de pouvoir résoudre celui-ci à l'aide des bibliothèques PETSc [133] et SLEPc [134]. C'est donc dans le but de linéariser l'opérateur de Maxwell vis à vis de la fréquence que le formalisme des champs auxiliaires et plus précisément un formalisme légèrement modifié dit de "résonance" est introduit dans la section suivante.

3.1.2 Les champs auxiliaires et le formalisme de résonance

Le formalisme des champs auxiliaires a initialement été introduit par A. Tip en 1998 [63, 64]. Il est basé sur l'adjonction de champs dits "auxiliaires" aux champs électromagnétiques classiques. Lorsque les champs électromagnétiques classiques perdent de l'énergie dans un système dissipatif, ces champs auxiliaires gagnent une énergie qui compense exactement celle de ces pertes. Ainsi, l'énergie totale du système considéré est conservée. Cette conservation conduit à une équation d'évolution temporelle unitaire pour la somme de tous les champs considérés et à la construction de l'unique extension linéaire en fréquence et hermitienne de l'opérateur de Maxwell [100]. Ce formalisme est décrit dans le cas de matériaux modélisés par une résonance purement dispersive (sans absorption) dans [101]. Dans cette section, un formalisme légèrement modifié et dit de "résonance" développé par Boris Gralak [126] dont l'emploi ne permet pas de se ramener à un opérateur autoadjoint est présenté. Il s'avère néanmoins très pertinent pour l'étude des structures comprenant des matériaux dispersifs et dissipatifs dont la permittivité peut être modélisée par une somme de résonance de Drude/Drude-Lorentz comme c'est le cas pour le modèle de permittivité relative considéré (*c.f.* équation 3.1.3) et permet notamment de se ramener à l'étude d'un problème aux valeurs propres linéaire dont l'implémentation numérique au travers la FEM est possible.

3.1.2.1 Résonance de Drude-Lorentz seule

Dans ce paragraphe, la permittivité relative du matériau considéré est constituée d'une seule résonance de Drude-Lorentz donnée par l'équation 3.1.9:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma_D\omega - \omega_D^2}. \quad (3.1.9)$$

En introduisant $\omega_r = \sqrt{\omega_D^2 - \gamma_D^2/4}$ et $\omega_\pm = \pm\omega_r - i\gamma_D/2$, l'expression 3.1.9 peut être réécrite:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{2\omega_r} \left[\frac{1}{(\omega - \omega_+)} - \frac{1}{(\omega - \omega_-)} \right]. \quad (3.1.10)$$

La susceptibilité diélectrique χ_e correspondante est retrouvée en appliquant la transformée de Fourier temporelle inverse de $\epsilon(\omega) - \epsilon_\infty$ définie comme:

$$\chi_e(t) = -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} d\omega \frac{\exp(-i\omega t)\omega_p^2}{[\omega - \omega_+][\omega - \omega_-]}. \quad (3.1.11)$$

Pour les temps négatifs, l'intégrale est calculée en appliquant le théorème de Cauchy et en choisissant un chemin d'intégration fermé contenant l'axe réel et le demi-plan supérieur des fréquences complexes ω (partie imaginaire positive). Comme la fonction sous l'intégrale de l'équation 3.1.11 ne possède aucun pôle dans ce demi-plan ($\text{Im}[\omega_\pm] < 0$), la susceptibilité diélectrique est nulle, conformément au principe de causalité. Pour les temps positifs, l'intégrale est calculée en choisissant un chemin d'intégration fermé contenant l'axe réel et le demi-plan inférieur des fréquences complexes ω (partie imaginaire négative). La fonction sous l'intégrale possède deux pôles dans ce demi-plan ω_\pm . En appliquant le théorème des résidus de Cauchy, la susceptibilité diélectrique de la résonance de Drude-Lorentz est obtenue:

$$\begin{aligned} \chi_e(t) &= \frac{\omega_p^2}{2i\omega_r} (\exp[-i\omega_- t] - \exp[-i\omega_+ t]) \\ \chi_e(t) &= \frac{\omega_p^2}{\omega_r} \exp[-t\gamma_D/2] \sin[\omega_r t]. \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

Les équations de Maxwell sans sources en régime temporel pour le matériau considéré s'écrivent:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial [\epsilon_0 \epsilon_\infty \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)]}{\partial t}, \end{cases} \quad (3.1.13)$$

Dans les expressions précédentes, on peut remarquer que ϵ_∞ est considéré comme une permittivité relative constante qui agit directement sur le champ électrique \mathbf{E} mais pas sur le champ de polarisation \mathbf{P} . Ce choix a été fait car l'expression du champ de polarisation \mathbf{P} nécessite un convolution temporelle pour pouvoir poser une formulation rigoureuse du problème (*c.f.*

équation 3.1.14). Le champ de polarisation est alors donné par l'expression:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \int_{-\infty}^t ds \chi_e(\mathbf{r}, t - s) \mathbf{E}(\mathbf{r}, s). \quad (3.1.14)$$

En utilisant l'expression de la susceptibilité de l'équation 3.1.12, l'expression de la dérivée temporelle du champ de polarisation est obtenue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^t ds \chi_e(\mathbf{r}, t - s) \mathbf{E}(\mathbf{r}, s) \\ &= \epsilon_0 \chi(\mathbf{r}, 0) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \epsilon_0 \int_{-\infty}^t ds \frac{\partial \chi_e}{\partial t}(\mathbf{r}, t - s) \mathbf{E}(\mathbf{r}, s) \\ &= \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{2\omega_r} \omega_+ \int_{-\infty}^t ds \exp[-i\omega_+(t - s)] \mathbf{E}(\mathbf{r}, s) \\ &\quad - \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{2\omega_r} \omega_- \int_{-\infty}^t ds \exp[-i\omega_-(t - s)] \mathbf{E}(\mathbf{r}, s). \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

Dans cette expression, les deux champs auxiliaires suivants apparaissent naturellement:

$$\mathbf{A}_L^\pm(\mathbf{r}, t) = \mp i \frac{\omega_p}{\sqrt{2}\omega_r} \omega_\pm \int_{-\infty}^t ds \exp[-i\omega_\pm(t - s)] \mathbf{E}(\mathbf{r}, s), \quad (3.1.16)$$

et la dérivée temporelle du champ de polarisation devient:

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = i\epsilon_0 \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} [\mathbf{A}_L^+(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_L^-(\mathbf{r}, t)]. \quad (3.1.17)$$

Les équations de Maxwell en régime temporel peuvent alors être mises sous la forme suivante:

$$\begin{cases} \epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - i \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \epsilon_0 [\mathbf{A}_L^+(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_L^-(\mathbf{r}, t)], \\ \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial \mathbf{A}_L^\pm}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \mp i \frac{\omega_p \omega_\pm}{\sqrt{2}\omega_r} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - i\omega_\pm \mathbf{A}_L^\pm(\mathbf{r}, t). \end{cases} \quad (3.1.18)$$

En régime harmonique, elles sont obtenues en appliquant une transformée de Fourier temporelle aux équations 3.1.18:

$$\begin{cases} -i\omega \epsilon_0 \epsilon_\infty \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) - i \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \epsilon_0 [\mathbf{A}_L^+(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{A}_L^-(\mathbf{r}, \omega)], \\ -i\omega \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \\ -i\omega \mathbf{A}_L^\pm(\mathbf{r}, \omega) = \mp i \frac{\omega_p \omega_\pm}{\sqrt{2}\omega_r} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega_\pm \mathbf{A}_L^\pm(\mathbf{r}, \omega). \end{cases} \quad (3.1.19)$$

Ces équations peuvent être condensées par la formule suivante

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) \mathbf{F}(\omega, \mathbf{r}) = \omega \mathbf{F}(\omega, \mathbf{r}), \quad (3.1.20)$$

en utilisant des notations matricielles avec:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{i}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \nabla \times & \frac{\omega_p}{\sqrt{2} \epsilon_\infty} & \frac{\omega_p}{\sqrt{2} \epsilon_\infty} \\ -i/\mu_0 \nabla \times & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\omega_p}{\sqrt{2} \omega_r} \omega_+ & 0 & \omega_+ & 0 \\ -\frac{\omega_p}{\sqrt{2} \omega_r} \omega_- & 0 & 0 & \omega_- \end{bmatrix}, \quad (3.1.21)$$

et

$$\mathbf{F}(\omega, \mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}) \\ \mathbf{H}(\omega, \mathbf{r}) \\ \mathbf{A}_L^+(\omega, \mathbf{r}) \\ \mathbf{A}_L^-(\omega, \mathbf{r}) \end{bmatrix}. \quad (3.1.22)$$

Il est important de remarquer que l'opérateur M défini par l'expression 3.1.21 est indépendant de la fréquence complexe ω . Le problème spectral à résoudre a donc bien été linéarisé. On peut également constater que l'opérateur M ainsi défini est non-Hermitien contrairement à celui défini dans le cadre des champs auxiliaires de A. Tip [63, 64]. Il est néanmoins possible de montrer que le spectre de cet opérateur est borné dans l'espace des fréquences complexes par une limite inférieure de la partie imaginaire négative égale à $-\gamma_D/2$ [126, 102].

3.1.2.2 Résonance de Drude seule

Dans ce paragraphe, la permittivité relative du matériau considéré est constituée d'une seule résonance de Drude donnée par l'équation 3.1.23:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)}. \quad (3.1.23)$$

Dans ce cas, le même raisonnement que celui appliqué dans la sous-section précédente conduit à la définition d'un unique champ auxiliaire donné par l'expression suivante en régime temporel:

$$\mathbf{A}_D(\mathbf{r}, t) = -2i \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^t ds \exp[-\gamma_D(t-s)] \mathbf{E}(\mathbf{r}, s). \quad (3.1.24)$$

Les équations de Maxwell en régime temporel peuvent alors être mises sous la forme suivante:

$$\begin{cases} \epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - i \frac{\omega_p \epsilon_0}{\sqrt{2}} \mathbf{A}_D(\mathbf{r}, t), \\ \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial \mathbf{A}_D}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = -2i \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \gamma_D \mathbf{A}_D(\mathbf{r}, t). \end{cases} \quad (3.1.25)$$

En régime harmonique, ces équations deviennent:

$$\begin{cases} -i\omega\epsilon_0\epsilon_\infty\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) = \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r},\omega) - i\frac{\omega_p\epsilon_0}{\sqrt{2}}\mathbf{A}_D(\mathbf{r},\omega), \\ -i\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r},\omega) = -\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},\omega), \\ -i\omega\mathbf{A}_D(\mathbf{r},\omega) = -2i\frac{\omega_p}{\sqrt{2}}\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) - \gamma_D\mathbf{A}_D(\mathbf{r},\omega). \end{cases} \quad (3.1.26)$$

En utilisant les mêmes notations matricielles que précédemment, une expression condensée de ces équations est obtenue:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r})\mathbf{F}(\omega, \mathbf{r}) = \omega\mathbf{F}(\omega, \mathbf{r}), \quad (3.1.27)$$

avec

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{i}{\epsilon_0\epsilon_\infty}\nabla \times & \frac{\omega_p}{\sqrt{2}\epsilon_\infty} \\ -\frac{i}{\epsilon_0\epsilon_\infty}\nabla \times & 0 & 0 \\ \frac{\mu_0\omega_p}{2\sqrt{2}} & 0 & -i\gamma_D \end{bmatrix}, \quad (3.1.28)$$

et

$$\mathbf{F}(\omega, \mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}) \\ \mathbf{H}(\omega, \mathbf{r}) \\ \mathbf{A}_D(\omega, \mathbf{r}) \end{bmatrix}. \quad (3.1.29)$$

De même que pour une résonance de Drude-Lorentz, l'opérateur \mathbf{M} défini par l'expression 3.1.28 est indépendant de la fréquence complexe ω , mais n'est pas non plus auto-adjoint. Le spectre de cet opérateur est également borné dans l'espace des fréquences complexes par une limite inférieure de la partie imaginaire négative égale à $-\gamma_D/2$ [126, 102].

3.1.2.3 Somme de résonances

Dans le cas général d'une somme de résonances de Drude et/ou de Drude-Lorentz de l'équation 3.1.3, l'extension de l'opérateur de Maxwell est construite de la même manière que précédemment en ajoutant un couple de champs auxiliaires défini par l'équation 3.1.16 pour chaque résonance de Drude-Lorentz et un champ auxiliaire unique défini par l'équation 3.1.24 pour chaque résonance de Drude. Dans [102], une limite inférieure, pour la partie imaginaire des fréquences complexes du spectre de l'opérateur de Maxwell étendu et associé à une somme de résonances, est également dérivée.

3.1.2.4 Formalisme pour une structure à plusieurs domaines

Dans le cas d'une structure Ω comprenant plusieurs sous-domaines Ω_j constitués de différents matériaux dispersifs, les paramètres caractéristiques qui permettent de modéliser la permittivité relative de la structure (comme ϵ_∞ , ω_p , ω_r , γ_D et ω_D pour une résonance de Drude-Lorentz) sont constants au sein de chaque sous-domaine Ω_j . Il est alors possible de définir ces paramètres

(ici, par exemple, ϵ_∞) comme fonctions constantes par morceaux de l'espace:

$$\epsilon_\infty(\mathbf{r}) = \sum_j \mathbb{1}_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \epsilon_{\infty_j}. \quad (3.1.30)$$

3.1.3 Formulation faible associée

Dans cette sous-section, une formulation faible pour la FEM est adaptée dans le cadre du formalisme de résonance de Drude-Lorentz présenté précédemment. Ainsi, deux champs auxiliaires \mathbf{A}_L^+ et \mathbf{A}_L^- définis par l'équation 3.1.16 sont introduits. La dépendance spatiale de tous les paramètres de la résonance de Drude-Lorentz du cadre du formalisme de résonance est omise (par exemple, $\epsilon_\infty(\mathbf{r})$ est simplement noté ϵ_∞).

Il est rappelé que les structures considérées sont bidimensionnelles (invariantes suivant l'axe O_z). Généralement, ces problèmes électromagnétiques bidimensionnels sont résolus de façon scalaire en scindant ceux-ci en deux cas de polarisation (comme dans le cas de la formulation FEM bidimensionnelle présentée au chapitre 1) et choisissant comme inconnue, pour chacun de ces cas de polarisation, une composante du champ électrique ou magnétique qui n'est pas contenue dans le plan d'invariance de la structure. Ainsi, cette inconnue est une fonction scalaire complexe et continue dans tout le domaine de la structure. Deux cas de polarisation linéaire sont traditionnellement considérés:

- la polarisation s : le champ électrique est polarisé suivant la direction z , $\mathbf{E} = E_z(x, y)\hat{z}$ et le champ magnétique est contenu dans le plan O_{xy} : $\mathbf{H} = H_x(x, y)\hat{x} + H_y(x, y)\hat{y}$,
- la polarisation p : le champ magnétique est polarisé suivant la direction z , $\mathbf{H} = H_z(x, y)\hat{z}$ et le champ électrique est contenu dans le plan O_{xy} : $\mathbf{E} = E_x(x, y)\hat{x} + E_y(x, y)\hat{y}$,

Dans le cas du formalisme de résonance donné par l'équation 3.1.21, le vecteur propre de Maxwell généralisé \mathbf{F} est constitué de quatre champs vectoriels qui appartiennent au même espace fonctionnel. Dans le cas bidimensionnel que nous traitons, en prenant par exemple le cas de polarisation p , il apparaît naturel de choisir des éléments nodaux afin de discrétiser le champ magnétique $\mathbf{H} = H_z(x, y)\hat{z}$ et de choisir des éléments d'arêtes afin de discrétiser le champ électrique situé dans le plan d'invariance de la structure $\mathbf{E} = E_x\hat{x} + E_y\hat{y}$ et donc possiblement discontinue aux interfaces. Cependant, la quantité physique correspondante aux inconnues associées aux éléments d'arêtes est la circulation du champ électrique le long des arêtes d'un des triangles du maillage. Elle est donc naturellement associée au flux de $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$ à travers la face de ce même triangle et non à la valeur de \mathbf{H} aux nœuds du triangle. Ainsi, afin de garder \mathbf{E} et \mathbf{H} comme inconnues et de résoudre le système total de l'équation 3.1.21, il serait certainement plus sain d'employer un espace de discrétisation dual comme par exemple une grille cubique de Yee [42] ou d'effectuer la résolution du système avec le champ électrique \mathbf{E} discrétisé avec des éléments d'arêtes (circulation de \mathbf{E} le long des arêtes du maillages) et le champ magnétique $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$ discrétisé avec des éléments de faces (flux de \mathbf{B} à travers la face

des triangles du maillage). Enfin, une dernière alternative pour s'affranchir de ce problème consiste très classiquement à combiner les équations de Maxwell pour former les "équations de Helmholtz généralisées" qui mettent en jeu soit l'inconnue \mathbf{E} soit \mathbf{H} . En choisissant d'éliminer \mathbf{H} et de ne travailler qu'avec \mathbf{E} , le système d'équation 3.1.31 est ainsi obtenu:

$$\begin{cases} \omega^2 \epsilon_\infty \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = c^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \omega \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} [\mathbf{A}_L^+(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{A}_L^-(\mathbf{r}, \omega)], \\ \omega \mathbf{A}_L^+(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\omega_p \omega_+}{\sqrt{2} \omega_r} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \omega_+ \mathbf{A}_L^+(\mathbf{r}, \omega), \\ \omega \mathbf{A}_L^-(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{\omega_p \omega_-}{\sqrt{2} \omega_r} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \omega_- \mathbf{A}_L^-(\mathbf{r}, \omega). \end{cases} \quad (3.1.31)$$

Le prix à payer pour ne conserver qu'une seule inconnue est un retour à un problème aux valeurs propres non-linéaire. Néanmoins, quel que soit le nombre de résonances de Drude-Lorentz choisi pour la modélisation de la permittivité relative, l'ordre polynomial de ce système non-linéaire restera quadratique. La résolution de tels problèmes aux valeurs propres quadratiques est désormais très performante notamment par l'utilisation d'algorithmes d'algèbres linéaires pour les matrices creuses tels que ceux développés dans la bibliothèque SLEPc [134].

Il a alors été choisi de travailler avec le champ électrique \mathbf{E} . Travailler avec \mathbf{H} est possible, mais ferait apparaître dans le système 3.1.31 des rotationnels de champs auxiliaires. Les matériaux étant non-magnétiques, les différents champs auxiliaires sont intrinsèquement électriques et sont des images de la polarisation présente au sein des matériaux électriquement dispersifs et dissipatifs. Il est donc plus naturel de travailler avec ceux-ci plutôt qu'avec leur rotationnel.

Le résidu associée au système d'équations 3.1.31 choisi est alors obtenue en projetant ses

équations sur un vecteur de champs vectoriels de poids $\mathbf{F}' = \begin{bmatrix} \mathbf{E}' \\ \mathbf{A}_L^{+'} \\ \mathbf{A}_L^{-'} \end{bmatrix}$ et en intégrant sur

le support des inconnues Ω , pour la première équation et Ω' (support spatial des domaines dispersifs) pour les deux suivantes. Le résidu suivant est alors obtenu:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{DL}(\mathbf{F}, \mathbf{F}') = & \int_{\Omega} d\Omega \quad -\omega^2 \epsilon_\infty \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}'} + c^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}'} + \omega \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} [\mathbf{A}_L^+ + \mathbf{A}_L^-] \cdot \overline{\mathbf{E}'} \\ & + \int_{\Omega'} d\Omega' \quad -\omega \mathbf{A}_L^+ \cdot \overline{\mathbf{A}_L^{+'}} + \frac{\omega_p \omega_+}{\sqrt{2} \omega_r} \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{A}_L^{+'}} + \omega_+ \mathbf{A}_L^+ \cdot \overline{\mathbf{A}_L^{+'}} \\ & \quad -\omega \mathbf{A}_L^- \cdot \overline{\mathbf{A}_L^{-'}} - \frac{\omega_p \omega_-}{\sqrt{2} \omega_r} \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{A}_L^{-'}} + \omega_- \mathbf{A}_L^- \cdot \overline{\mathbf{A}_L^{-'}}, \end{aligned} \quad (3.1.32)$$

avec $\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{A}_L^+ \\ \mathbf{A}_L^- \end{bmatrix}$. En intégrant alors par partie et en utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky, l'équation 3.1.32 devient:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{DL}(\mathbf{F}, \mathbf{F}') = & \int_{\Omega} d\Omega \quad -\omega^2 \epsilon_{\infty} \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{E}'} + c^2 \nabla \times \mathbf{E} \cdot \nabla \times \overline{\mathbf{E}'} + \omega \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} [\mathbf{A}_L^+ + \mathbf{A}_L^-] \cdot \overline{\mathbf{E}'} \\ & + \int_{\Omega'} d\Omega' \quad -\omega \mathbf{A}_L^+ \cdot \overline{\mathbf{A}_L'^+} + \frac{\omega_p \omega_+}{\sqrt{2} \omega_r} \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{A}_L'^+} + \omega_+ \mathbf{A}_L^+ \cdot \overline{\mathbf{A}_L'^+} \\ & \quad -\omega \mathbf{A}_L^- \cdot \overline{\mathbf{A}_L'^-} - \frac{\omega_p \omega_-}{\sqrt{2} \omega_r} \mathbf{E} \cdot \overline{\mathbf{A}_L'^-} + \omega_- \mathbf{A}_L^- \cdot \overline{\mathbf{A}_L'^-} \\ & - \int_{\partial\Omega} dS \quad [(\nabla \times \mathbf{E}) \times \hat{\mathbf{n}}] \cdot \overline{\mathbf{E}'}, \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

où $\hat{\mathbf{n}}$ est la normale extérieure unitaire à $\partial\Omega$.

Le terme surfacique de l'équation 3.1.33 $\left(\int_{\partial\Omega} dS [(\nabla \times \mathbf{E}) \times \hat{\mathbf{n}}] \cdot \overline{\mathbf{E}'} \right)$, est ensuite classiquement utilisé afin d'imposer les conditions aux limites du problème (*Dirichlet, Neumann homogène, Bloch* [73]) afin d'annuler le terme de bord. Ces conditions aux limites définissent ainsi le sous-espace de fonctions $H_0^1(\Omega, \nabla \times)$ de $H_0(\Omega, \nabla \times)$ (espace de fonction d'énergie finie dans Ω et de rotationnel d'énergie fini dans Ω), dans lequel sont choisis les composantes du champ vectoriel de poids \mathbf{F}' ainsi que les composantes de la solution au problème considéré \mathbf{F} . Sur les frontières des éléments dispersifs Ω' , aucune condition particulière n'est imposée pour les champ auxiliaires. La solution \mathbf{F} de la formulation faible associée au résidu 3.1.33 du problème modal 3.1.31 est alors l'unique élément de $[H_0^1(\Omega, \nabla \times)]^3$ vérifiant:

$$\forall \mathbf{F}' \in [H_0^1(\Omega, \nabla \times)]^3, \quad \mathcal{R}_{DL}(\mathbf{F}, \mathbf{F}') = 0. \quad (3.1.34)$$

Comme mentionné précédemment, deux cas de polarisation (*s* et *p*) sont considérés. Pour la polarisation *s*, le champ électrique et les champs auxiliaires possèdent une composante unique suivant l'axe O_z . Le problème est donc scalaire et des éléments nodaux du premier ordre sont utilisés comme fonctions de base 1.2.1.6. Pour la polarisation *p*, les champs (électriques et auxiliaires) possèdent deux composantes possiblement discontinues dans le plan d'invariance de la structure O_{xy} . L'utilisation d'éléments d'arêtes (ou formes de Whitney) est donc nécessaire. En ce qui concerne l'implémentation pratique de la FEM, les logiciels précédemment cités au chapitre 1 en sous-section 1.2.1.6 ont été utilisés :

- Gmsh [75] comme générateur de maillage et outils de visualisation,
- GetDP [76] comme moteur éléments finis et la bibliothèque SLEPc [134] (basée sur la bibliothèque PETSc [133]) comme solveurs aux valeurs propres pour matrices creuses.

3.2 Validation numérique de la méthode

Afin de s'assurer de la validité de la méthode numérique aux éléments finis développée, celle-ci a été testée sur une configuration électromagnétique simple. La configuration de test est une cavité bidimensionnelle fermée constituée de deux sous-domaines carrés Ω_1 et Ω_2 . La longueur des cotés des carrés vaut a . Les matériaux constituant ces deux sous-domaines sont non-magnétiques, homogènes, linéaires et isotropes et leurs permittivités relatives sont notées $\epsilon_1(\omega)$ et $\epsilon_2(\omega)$ (c.f. figure 3.2.1). La cavité est fermée par une paroi parfaitement conductrice

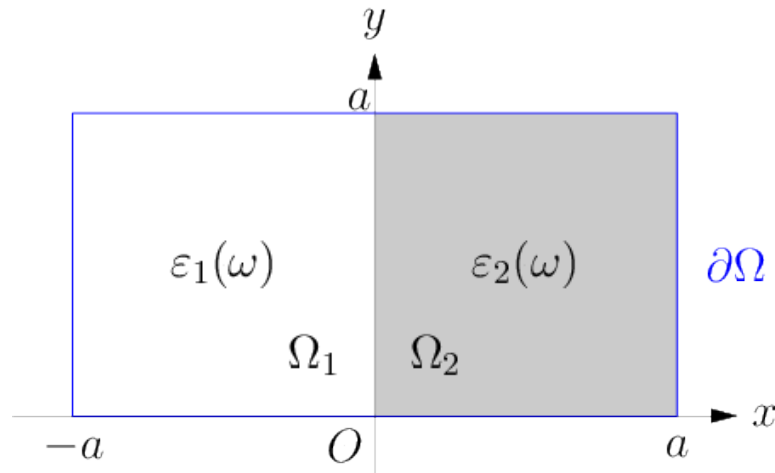


Fig. 3.2.1 – Schéma de la cavité fermée considérée.

insécable $\partial\Omega$. Ainsi, il conviendra d'appliquer les conditions aux limites adéquates sur sa frontière $\partial\Omega$, *i.e.* Neumann homogène ou Dirichlet selon le cas de polarisation considéré.

Dans un premier temps, les relations de dispersion de ce système vont être dérivées analytiquement pour les deux cas de polarisation précédemment définis. Les fréquences propres du système pourront alors être retrouvées par une résolution numérique de ces équations.

Dans un second temps, ces résultats seront comparés aux résultats obtenus à travers la formulation FEM dérivée dans la section précédente afin de valider celle-ci.

3.2.1 Relations de dispersion et fréquences propres du système considéré

3.2.1.1 Polarisation s

Dans ce cas de polarisation, le champ électrique E possède une seule composante $E(x, y, \omega)$ suivant l'axe O_z et des conditions aux limites de Dirichlet sont imposées sur la frontière du domaine $\partial\Omega$. Le problème aux valeurs propres (les équations de Maxwell sans sources) mis en jeu s'écrit:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \omega_n^2 \epsilon(x, \omega_n) \epsilon_0 \mu_0 \right] E_n(x, y) = 0. \quad (3.2.1)$$

En utilisant la méthode de séparation de variables, le vecteur propre scalaire E_n s'écrit comme le produit de :

$$E_n(x, y) = \phi_p(x)\psi_q(y). \quad (3.2.2)$$

La solution suivant l'axe l'axe O_y s'écrit:

$$\psi_q(y) = \sin[q\pi y/a], \quad q \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad (3.2.3)$$

et elle satisfait les conditions de Dirichlet imposées sur $\partial\Omega$.

En injectant cette solution dans l'équation 3.2.1, on obtient alors:

$$\frac{d^2\phi_p}{dx^2}(x) + [\omega_n^2\epsilon(x, \omega_n)\epsilon_0\mu_0 - q^2\pi^2/a^2] \phi_p(x) = 0. \quad (3.2.4)$$

Les constantes de propagations suivantes sont alors définies:

$$\beta_j(\omega_n) = \sqrt{\frac{\omega_n^2}{c^2}\epsilon_j(\omega_n) - \frac{q^2\pi^2}{a^2}}, \quad j = 1, 2, \quad (3.2.5)$$

et l'équation 3.2.4 devient:

$$\begin{cases} [d^2\phi_p/dx^2](x) + \beta_1^2(\omega_n)\phi_p(x) = 0 & \text{si } x < 0 \\ [d^2\phi_p/dx^2](x) + \beta_2^2(\omega_n)\phi_p(x) = 0 & \text{si } x > 0 \end{cases}. \quad (3.2.6)$$

Les solutions générales de ces équations s'écrivent:

$$\begin{cases} \phi_p(x) = A_1 \cos[\beta_1(\omega_n)x] + B_1 \sin[\beta_1(\omega_n)x] & \text{si } x < 0 \\ \phi_p(x) = A_2 \cos[\beta_2(\omega_n)x] + B_2 \sin[\beta_2(\omega_n)x] & \text{si } x > 0 \end{cases}. \quad (3.2.7)$$

Les quatre inconnues A_i et B_i sont alors déterminées en utilisant les quatre conditions aux limites suivantes: $\phi_p(-a) = 0$, $\phi_p(a) = 0$, $\phi_p(0^-) = \phi_p(0^+)$ et $[d\phi_p/dx](0^-) = [d\phi_p/dx](0^+)$. Le système d'équations suivant est alors obtenu:

$$\begin{cases} A_1 \cos[\beta_1(\omega_n)a] = B_1 \sin[\beta_1(\omega_n)a] \\ A_2 \cos[\beta_2(\omega_n)a] = -B_2 \sin[\beta_2(\omega_n)a] \\ A_1 = A_2 \\ B_1\beta_1(\omega_n) = B_2\beta_2(\omega_n) \end{cases}. \quad (3.2.8)$$

L'existence d'une solution non nulle à ce système d'équation permet d'obtenir la relation de dispersion pour la polarisation s :

$$\frac{\tan[\beta_1(\omega_n)a]}{\beta_1(\omega_n)} + \frac{\tan[\beta_2(\omega_n)a]}{\beta_2(\omega_n)} = 0. \quad (3.2.9)$$

3.2.1.2 Polarisation p

Dans ce cas de polarisation, l'inconnue considérée est cette fois le champ magnétique \mathbf{H} , qui ne possède qu'une seule composante $H(x, y, \omega)$ suivant l'axe O_z et une condition aux limites de Neumann homogène est imposée sur la frontière du domaine $\partial\Omega$.

Les étapes de résolution du problème aux valeurs propres sont les mêmes que celles de l'autre cas de polarisation présenté dans la sous-section précédente à ceci près que les conditions aux limites doivent être adaptées.

La première conséquence de cette différence de conditions aux limites intervient dans l'expression de la solution du vecteur propre H_n suivant l'axe O_y :

$$\psi_q(y) = \cos[q\pi y/a], \quad q \in \mathbb{N}. \quad (3.2.10)$$

Cette expression respecte ainsi les conditions aux limites de Neumann homogènes. La seconde conséquence intervient dans l'expression des quatre conditions aux limites qui sont utilisées pour résoudre le système d'équations 3.2.7 et qui deviennent: $[d\phi_p/dx](-a) = 0$, $[d\phi_p/dx](a) = 0$, $\phi_p(0^-) = \phi_p(0^+)$ et $\epsilon_2(\omega_n)[d\phi_p/dx](0^-) = \epsilon_1(\omega_n)[d\phi_p/dx](0^+)$. Le système d'équation obtenu devient alors:

$$\begin{cases} A_1 \sin[\beta_1(\omega_n)a] = -B_1 \cos[\beta_1(\omega_n)a] \\ A_2 \sin[\beta_2(\omega_n)a] = B_2 \cos[\beta_2(\omega_n)a] \\ A_1 = A_2 \\ B_1\beta_1(\omega_n)/\epsilon_1(\omega_n) = B_2\beta_2(\omega_n)/\epsilon_2(\omega_n) \end{cases} \quad (3.2.11)$$

L'existence d'une solution non nulle à ce système d'équation permet d'obtenir la relation de dispersion pour la polarisation p :

$$\frac{\beta_1(\omega_n)}{\epsilon_1(\omega_n)} \tan[\beta_1(\omega_n)a] + \frac{\beta_2(\omega_n)}{\epsilon_2(\omega_n)} \tan[\beta_2(\omega_n)a] = 0. \quad (3.2.12)$$

3.2.2 Confrontation des résultats analytiques aux résultats de la FEM

La cavité bidimensionnelle a été implémentée au travers de la formulation FEM développée en sous-section 3.1.3. Le sous-domaine Ω_1 est constitué d'un matériau non dispersif de permittivité relative $\epsilon_1 = 2.0$. Le sous-domaine Ω_2 est constitué d'un matériau dont la permittivité relative est modélisée par une résonance de Drude-Lorentz:

$$\epsilon_2(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_0^2}, \quad (3.2.13)$$

avec les valeurs numériques suivantes choisies pour les paramètres de la résonance:

$$\epsilon_{\infty} = 3.0, \quad \frac{\omega_p a}{2\pi c} = 1.2, \quad \frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.2, \quad \frac{\omega_0 a}{2\pi c} = 0.6. \quad (3.2.14)$$

Pour rappel, la formulation faible FEM développée en sous-section 3.1.3 est une formulation en champ électrique. Des conditions aux limites de Dirichlet sont donc imposées sur la frontière $\partial\Omega$ de la cavité.

Les fréquences propres de cette structure ont alors été déterminées de deux façons différentes pour les deux cas de polarisation:

- une résolution numérique des équations transcendantales de dispersion 3.2.9 et 3.2.12 par un algorithme de recherche de zéros dans le plan complexe du module des fonctions associées,
- la méthode éléments finis et la formulation faible présentée en sous-section 3.1.3.

La comparaison des résultats des deux méthodes de recherche de fréquence propre pour les deux cas de polarisation est présentée ci-dessous.

3.2.2.1 Polarisation s

La comparaison des résultats semi-analytiques et FEM pour la polarisation s est présentée par la figure 3.2.2. En polarisation s , l'accord entre les résultats semi-analytiques et FEM est excellent.

L'analyse du spectre est tout d'abord effectuée. Une première branche de modes convergeant vers la fréquence normalisée $(\omega_1 a)/(2\pi c) \simeq 0.59 - 0.1i$ est observée. Cette fréquence propre normalisée $(\omega_1 a)/(2\pi c)$ correspond au pôle de la résonance de Drude-Lorentz du modèle de permittivité relative de l'équation 3.2.13 ($|\epsilon_2(\omega)| \rightarrow \infty$ quand $\omega \rightarrow \omega_1$). Ainsi, un point d'accumulation de mode est présent autour de cette fréquence où une infinité de modes est présente. Pour $\text{Re}[(\omega_n a)/(2\pi c)] > \text{Re}[(\omega_1 a)/(2\pi c)]$, une seconde branche de mode est également observée sur cette figure. Cette branche converge vers l'axe réel pour les hautes fréquences. En effet, quand $|\omega| \rightarrow \infty$, la permittivité relative de la cavité dispersive $|\epsilon_2(\omega)| \rightarrow \epsilon_{\infty} = 3.0$ et le spectre d'un problème Hermitien avec des permittivités relatives purement réelles et positives est retrouvé.

En se focalisant à présent sur les cartes de champs, plusieurs constatations peuvent être faites. Tout d'abord, les conditions aux limites de Dirichlet sont bien respectées sur le bord de la cavité parfaitement conductrice $\partial\Omega$ (la couleur bleue correspond à une norme de champ électrique nulle). Comme attendu, le nombre q associé à un mode correspond à son ordre de multiplicité dans la direction de l'axe O_y (nombre de ventres du champ électrique propre associé à ce mode). Aussi, on peut constater que les modes dont le champ électrique propre associé est concentré dans la cavité Ω_2 dissipative possède une partie imaginaire de norme plus forte que ceux dont le champ électrique propre est concentré dans la cavité Ω_1 non-dispersive et non-dissipative.

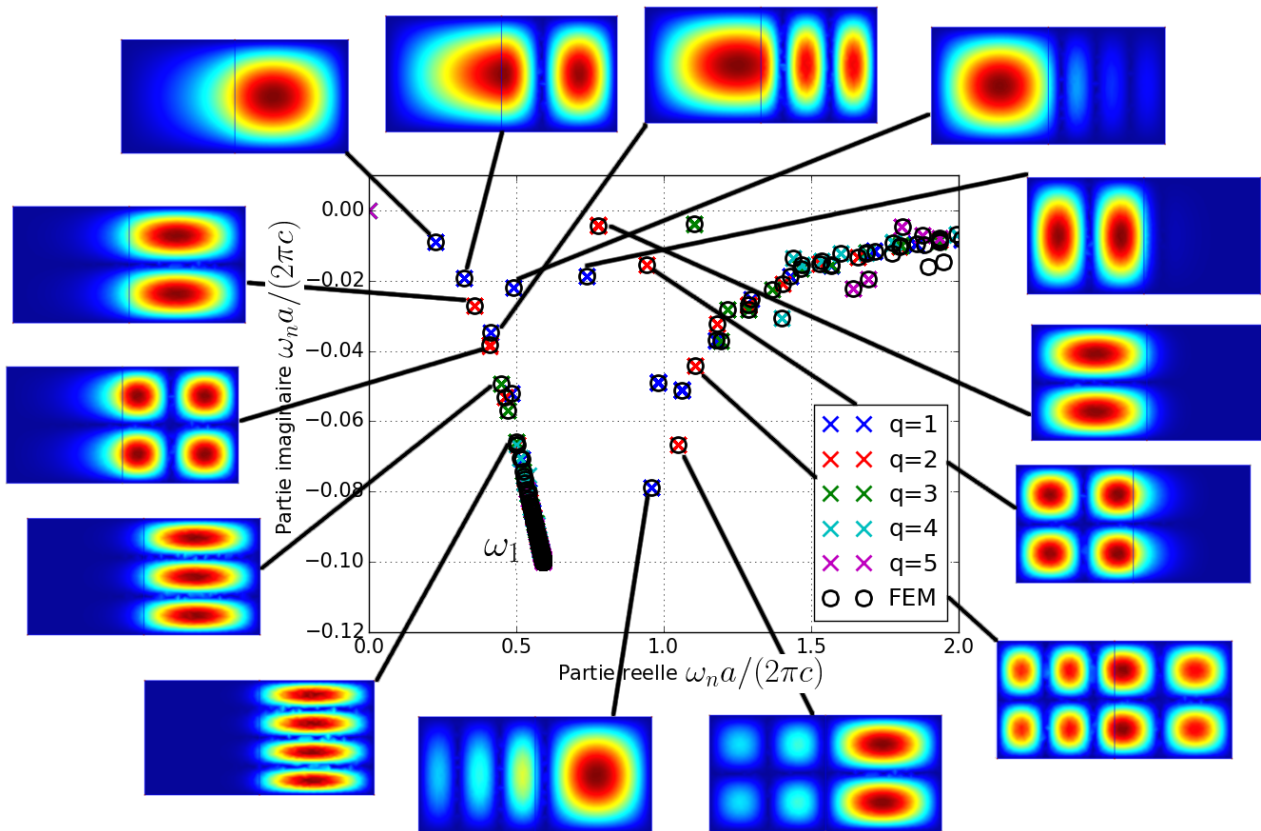


Fig. 3.2.2 – Comparaison entre les fréquences propres ω_n obtenues en utilisant la méthode FEM et la méthode de résolution semi-analytique de l'équation de dispersion pour la polarisation s . Les cartes de champ de la norme des vecteurs propres (électriques) correspondants sont également représentées.

La norme de la partie imaginaire d'un mode est donc bien associée aux pertes d'une structure. Plus cette norme est forte, plus les pertes associées à ce mode seront fortes également et plus de champ électrique propre sera concentré dans les domaines dissipatifs et donc dispersifs d'une structure donnée.

3.2.2.2 Polarisation p

La comparaison des résultats semi-analytiques et FEM pour la polarisation p est présentée par la figure 3.2.3. En polarisation p , la première branche de modes observée en polarisation p , convergeant vers la fréquence propre $(\omega_1 a)/(2\pi c) \simeq 0.59 - 0.1i$ est également présente. De plus, pour les mêmes raisons qu'en polarisation s , une seconde branche de modes converge vers l'axe réel pour les hautes fréquences.

Une branche de modes non présente en polarisation s et convergeant vers la fréquence normalisée $(\omega_2 a)/(2\pi c) \simeq 0.8 - 0.1i$ est de plus observée sur la figure 3.2.3. Cette branche correspond à une branche de modes de type plasmon de surface de l'interface entre les domaines Ω_1 et Ω_2 . On peut d'ailleurs vérifier que pour cette fréquence de convergence $\epsilon_2(\omega_2) = -\epsilon_1$. Un point d'accumulation de mode de type plasmon de surface est donc présent autour de la fréquence ω_2 . Le vecteur propre (norme et direction du champ électrique) pour la fréquence propre

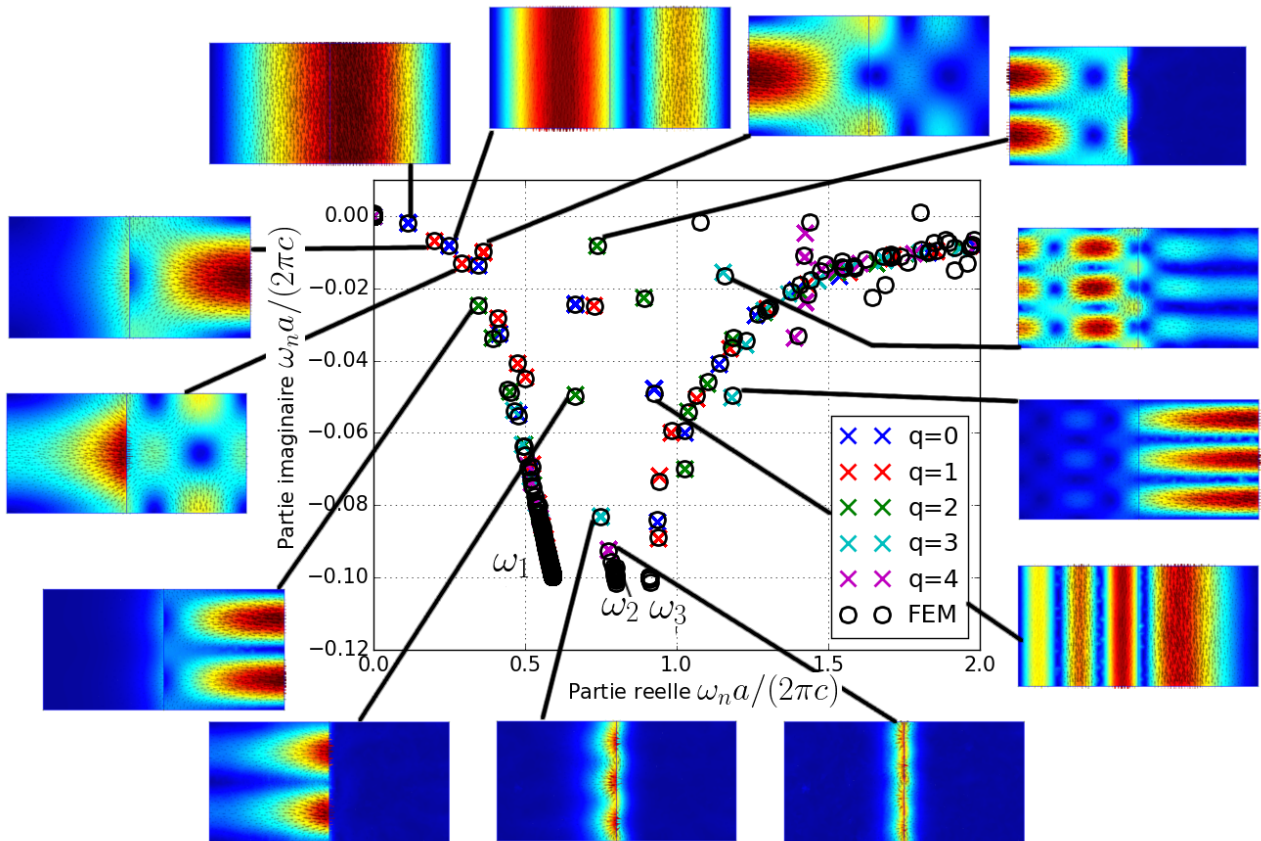


Fig. 3.2.3 – Comparaison entre les fréquences propres ω_n obtenues en utilisant la méthode FEM et la méthode de résolution semi-analytique de l'équation de dispersion pour la polarisation p . Les cartes de champ de la norme des vecteurs propres (électriques) correspondants sont également représentées.

$(\omega_4 a)/(2\pi c) \simeq 0.748 - 0.083i$ correspondant à un de ces modes plasmon de surface est présenté par la figure 3.2.4.

Sur la figure 3.2.3, on peut également constater la présence de modes "parasites" aux alentours de la fréquence normalisée $(\omega_3 a)/(2\pi c) \simeq 0.91 - 0.1i$ qui correspond à la fréquence pour laquelle $\epsilon_2(\omega_3) = 0$. Un zoom sur le spectre de la figure 3.2.3 aux alentours de cette fréquence est présenté par la figure 3.2.5. Leur présence peut être expliquée par le fait que quand $\epsilon_2(\omega) = 0$, la condition de divergence nulle du champ électrique $\nabla \cdot [\epsilon \mathbf{E}] = 0$ ne serait pas respectée. En effet, pour cette fréquence, comme $\epsilon_2(\omega_3) = 0$, le champ électrique propre \mathbf{E} peut prendre n'importe quelle valeur parasite dans le sous-domaine dispersif. Sur la figure 3.2.3, il est également constaté que la précision des résultats autour de la fréquence des modes parasites ω_3 est affectée par la présence de ceux-ci. Pour améliorer la précision des résultats, la condition de divergence nulle du champ électrique doit être imposée d'une autre manière, ce qui apparaît comme peu naturel, comme les éléments d'arêtes choisis comme fonction de base pour cette polarisation sont par construction à divergence nulle.

Ces modes parasites ne sont pas présents dans le cas des simulations FEM effectuées en polarisation s (c.f. figure 3.2.2). Ceci s'explique par le fait qu'en polarisation s , le champ électrique est orienté suivant l'axe O_z et ne dépend spatialement que des variables x et y . Ainsi, la condition

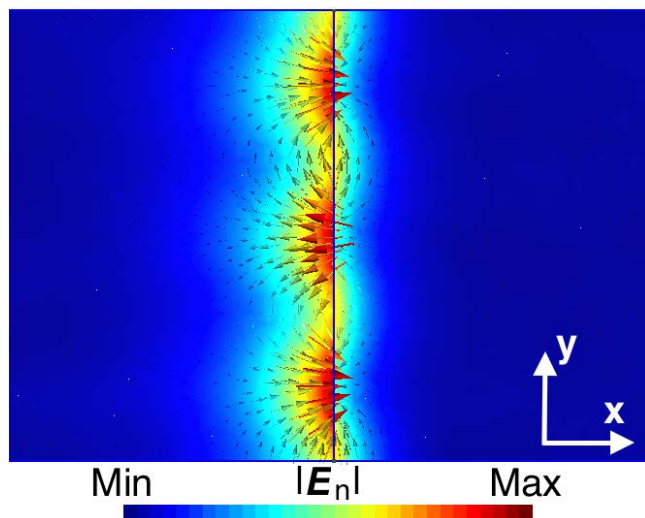


Fig. 3.2.4 – Norme (en couleur) et direction (flèches) du champ électrique propre pour le mode de la branche de modes plasmon de surface de fréquence propre normalisée $(\omega_4 a)/(2\pi c) \simeq 0.748 - 0.083i$.

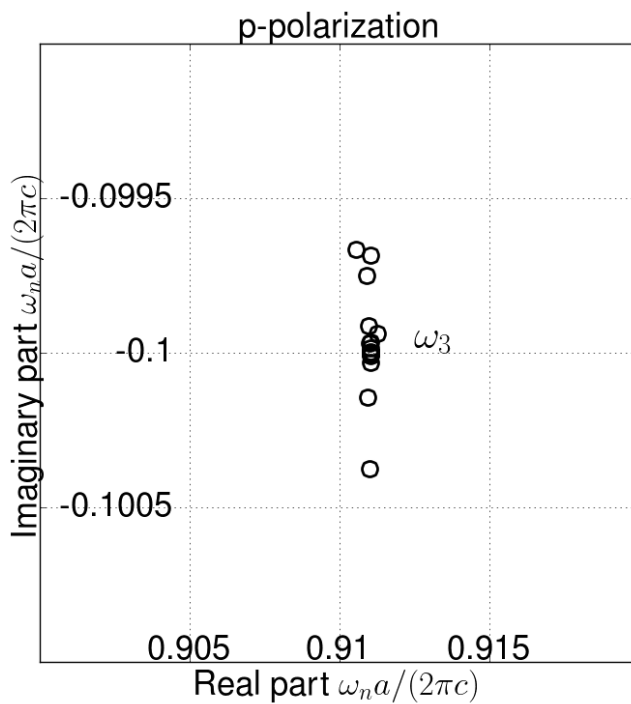


Fig. 3.2.5 – Zoom sur le spectre de la figure 3.2.3 aux alentours de la fréquence des modes parasites ω_3 .

de divergence nulle est ainsi implicitement contenue dans l'équation scalaire de Helmholtz pour le champ électrique. Une solution possible consisterait alors à développer une formulation faible en champ magnétique \mathbf{H} (celle que nous avons rejetée précédemment en sous-section 3.1.3 car apparaissant peu naturelle) pour ce cas de polarisation p qui serait alors associée à une inconnue scalaire H_z et dont la discrétisation spatiale serait alors également associée à des éléments nodaux. Néanmoins, rien ne garantit que cette nouvelle formulation réglerait le problème.

En observant à présent les cartes de norme et de direction de champ électrique propre, des constats similaires à ceux de la sous-section 3.2.2.1 pour la polarisation s peuvent être faits, à savoir que la condition aux limites de Neumann homogène est bien respectée sur la frontière $\partial\Omega$ de la structure, que q correspond une nouvelle fois à l'ordre de multiplicité d'un mode dans la direction y , et que plus la norme de la partie imaginaire d'un mode est forte, plus le champ électrique propre associé est concentré dans le domaine dissipatif et dispersif de la structure.

Malgré la présence des modes parasites et des imprécisions numériques associées, les résultats obtenus par l'implémentation de la formulation FEM d'analyse modale basée sur le formalisme de résonance sont néanmoins satisfaisants et fournissent un outil numérique puissant pour obtenir et analyser les spectres complexes des systèmes dispersifs et dissipatifs. Ainsi, après cette validation numérique dans le cas simple d'une cavité fermée, la méthode va être appliquée, dans la section 3.3, à l'obtention et l'analyse des spectres complexes de cristaux photoniques bidimensionnels métalliques de Drude.

3.3 Application aux cristaux photoniques bidimensionnels métalliques de Drude

Dans cette section, la formulation FEM développée est appliquée à l'étude des propriétés spectrales de cristaux photoniques bidimensionnels. Les propriétés spectrales des cristaux photoniques choisis ont déjà été étudiées dans la littérature permettant ainsi une comparaison avec les résultats obtenus par la FEM.

- Dans [123], la méthode modale exacte [103] est utilisée pour mener l'étude spectrale d'un cristal photonique bidimensionnel constitué de tiges métalliques de Drude à section carrée.
- Dans [104], c'est la méthode des harmoniques cylindriques combinée aux "lattice sums" qui est employée pour mener l'étude spectrale d'un cristal photonique bidimensionnel constitué de tiges métallique de Drude à section circulaire.
- Dans [105], la méthode numérique FDFD ("Finite-Difference Frequency Domain" [106–109]) combinée à un formalisme se rapprochant fortement du formalisme de résonance

présenté précédemment est appliquée à l'étude spectrale d'un cristal photonique bidimensionnel constitué de tiges métalliques de Drude à section carrée.

Ainsi, les cristaux photoniques considérés sont des réseaux carrés bi-périodiques, de période a identique suivant les deux axes O_x et O_y , de tiges faites de métal de Drude à section carrée ou circulaire placées dans l'air tels que représentés schématiquement par la figure 3.3.1. Les

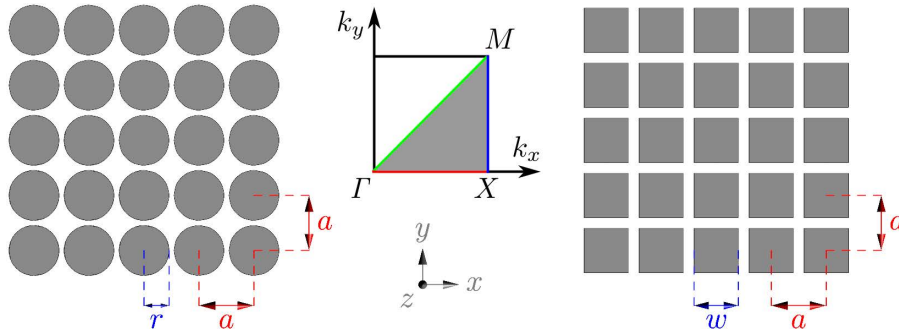


Fig. 3.3.1 – Schéma des cristaux photoniques bidimensionnels étudiés et première zone de Brillouin réduite correspondante (triangle ΓXM : bord ΓX en rouge, ΓM en vert et XM en bleu).

structures avec lesquelles nous travaillons étant bi-périodiques du plan O_{xy} , des conditions de Bloch (*i.e.* de quasi-périodicité [73]) sont imposées sur les frontières de la cellule unitaire de calcul carrée suivant x et y en utilisant le terme surfacique de l'équation 3.1.33. Ces conditions aux frontières quasi-périodiques sont paramétrées par le vecteur d'onde de Bloch $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}$ des modes électromagnétiques recherchés. Il est important de noter que les composantes (k_x, k_y) du vecteur d'onde sont choisies comme réelles tandis que les fréquences propres du système ω_n sont elles complexes. Ce choix est néanmoins sujet à débat dans la littérature [110, 111]. L'analyse modale de la cellule unitaire des différentes structures est alors effectuée au travers de la FEM pour un vecteur d'onde \mathbf{k} choisi comme paramètre fixe parcourant totalement la première zone de Brillouin réduite du cristal considéré et pour les deux cas de polarisation (s et p) précédemment décrits. La permittivité diélectrique relative des tiges métalliques est modélisée par une seule résonance de Drude et donnée par l'équation 3.3.1:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (3.3.1)$$

Les valeurs numériques des paramètres des différents cristaux (les largeurs w des tiges à section carrée, les rayons r des tiges à section circulaire, les paramètres du modèle de Drude ω_p, γ choisis pour le métal) seront rappelées pour chacun des cas étudiés.

Dans toutes les simulations effectuées, les fréquences propres complexes des structures sont retrouvées pour tous les vecteurs d'onde \mathbf{k} de la première zone de Brillouin réduite du cristal considéré (*c.f.* figure 3.3.1) soit $k_x \in [0, \pi/a]$ et $k_y \in [0, \pi/a]$ et ceci pour les cas de polarisation s et p .

3.3.1 Analyse et comparaison des résultats FEM avec ceux issus de [123] et [104]

Dans [123] (tiges métalliques à section carrée) et [104] (tiges métalliques à section circulaire), les paramètres numériques de la résonance de Drude sont les suivants:

$$\frac{\omega_p a}{2\pi c} = 1.1, \quad \frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.05. \quad (3.3.2)$$

Le taux de remplissage de la cellule unitaire carrée des cristaux est fixé à 0.65 dans le cas des tiges à section carrée comme dans le cas des tiges à section circulaire. Ainsi, les tiges à section carrée possèdent une largeur égale à $w = 0.806a$ et les tiges à section circulaire possèdent un rayon égal à $r = 0.455a$.

3.3.1.1 Polarisation s

Comme souligné dans [112], que ce soit pour un cristal photonique, en physique du solide ou quel que soit le domaine où une structure de réseau périodique apparaît, les calculs de structures de bandes sont généralement effectués pour un vecteur d'onde k parcourant les frontières (en couleurs sur la figure 3.3.1 et 3.3.2) de la première zone de Brouillon réduite [13, 14]. C'est donc cette première représentation qui a été adoptée en figure 3.3.2 pour présenter les structures de bandes du cristal à section carrée considéré. Dans [15], les calculs de structures de bandes sont également toujours effectués sur les frontières de la première zone de Brillouin réduite car ils apparaissent comme suffisants pour identifier l'étendue des différents gaps d'un cristal, étant communément admis que les minimas et maximas des bandes se situent toujours sur ces frontières. Ainsi, la figure 3.3.2 présente la représentation usuelle de la structure de bande du cristal photonique de tiges à section carrée pour la polarisation s . Les résonances correspondant aux vecteurs d'onde du contour de la première zone de Brillouin réduite (ΓXM) sont représentées par leur partie réelle (en haut) et leur partie imaginaire (en bas). Sur cette figure 3.3.2, en observant la partie réelle du spectre, deux gaps où aucun mode n'apparaît sont présents: un pour les faibles fréquences $\text{Re}[\omega_n a / (2\pi c)] < 0.79$ et l'autre pour les fréquences autour de $\text{Re}[\omega_n a / (2\pi c)] = 1.0$. Pour la partie imaginaire, un point d'accumulation de modes sur l'axe réel (partie imaginaire nulle) est observé. Ce point d'accumulation correspond aux résonances de hautes fréquences qui tendent vers l'axe réel comme $|\epsilon(\omega)| \rightarrow 1$ quand $|\omega| \rightarrow \infty$ dans le modèle de Drude considéré 3.3.1 pour les tiges du cristal. Sur la figure 3.3.2, il est également constaté qu'aucun mode ne possède de partie imaginaire de module supérieur à $0.02 < 0.025 = \frac{\gamma a}{2\pi c} / 2$. Cette borne est en accord avec celle dérivée analytiquement dans [102] et [126] et rappelée en sous-section 3.1.2.2. Toujours pour la partie imaginaire, la présence de décrochements (un exemple est entouré en gris) qui ne sont pas observés usuellement dans les structures de bandes est également constaté.

Dans [112], il est montré que certains modes de résonance peuvent être omis si ce calcul de

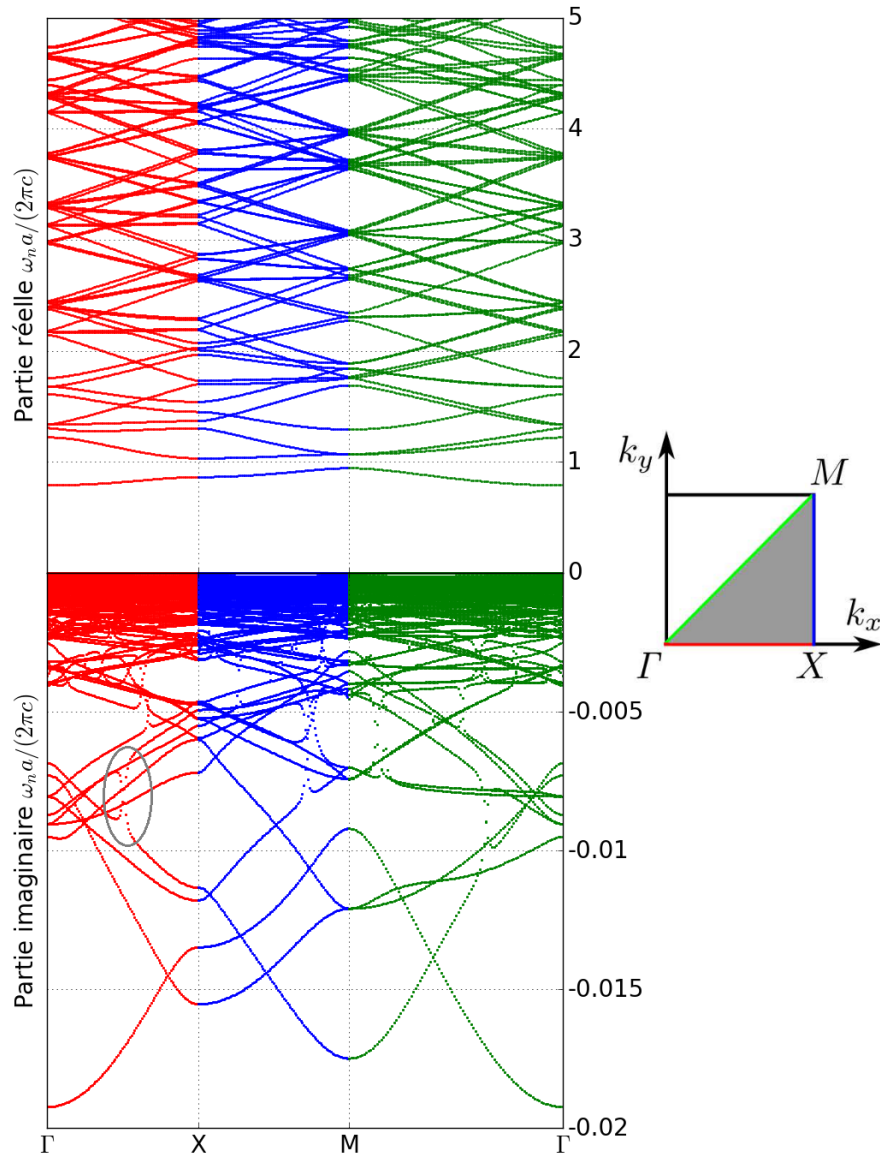


Fig. 3.3.2 – Structure de bande des résonances normalisées $\omega_n a / (2\pi c)$ pour le vecteur d'onde parcourant les frontières de la première zone de Brillouin réduite (ΓXM). Les parties réelles et imaginaires (respectivement en haut et en bas) des résonances correspondant aux trois frontières de la première zone de Brillouin réduite sont tracées en couleurs: ΓX en rouge, ΓM en vert et XM en bleu.

structures de bandes n'est effectué que sur les frontières de la première zone de Brillouin réduite. Pour un cristal photonique, l'hypothèse communément admise [104] est que "le spectre total des résonances complexes d'un cristal (pour k parcourant toute la première zone de Brillouin réduite, l'intérieur y compris) reste situé à l'intérieur du contour formé par les résonances complexes correspondant aux frontières de cette zone". Un contre-exemple de cette hypothèse a été obtenu dans [104] où l'on peut observer que certaines résonances complexes sont situées en dehors des triangles déformés formés par les résonances complexes des frontières de la première zone de Brillouin réduite.

Ainsi, afin de vérifier ce contre-exemple et de pouvoir comparer nos résultats à la littérature, nous allons donc supplanter la représentation classique des structures de bandes par une représentation directe des modes dans le plan complexe des résonances comme effectuée dans

[123] et [104].

Les spectres totaux des cristaux photoniques de tiges à section carrée (en haut) et à section circulaire (en bas) sont donc présentés par la figure 3.3.3 pour la polarisation s et pour tous les vecteurs d'onde de la première zone de Brillouin réduite (et pas seulement ses frontières) avec en abscisse la partie réelle des fréquences complexes de résonance et en ordonnée leur partie imaginaire. Ces résultats sont en accord avec les résultats obtenus dans [123] pour le cristal

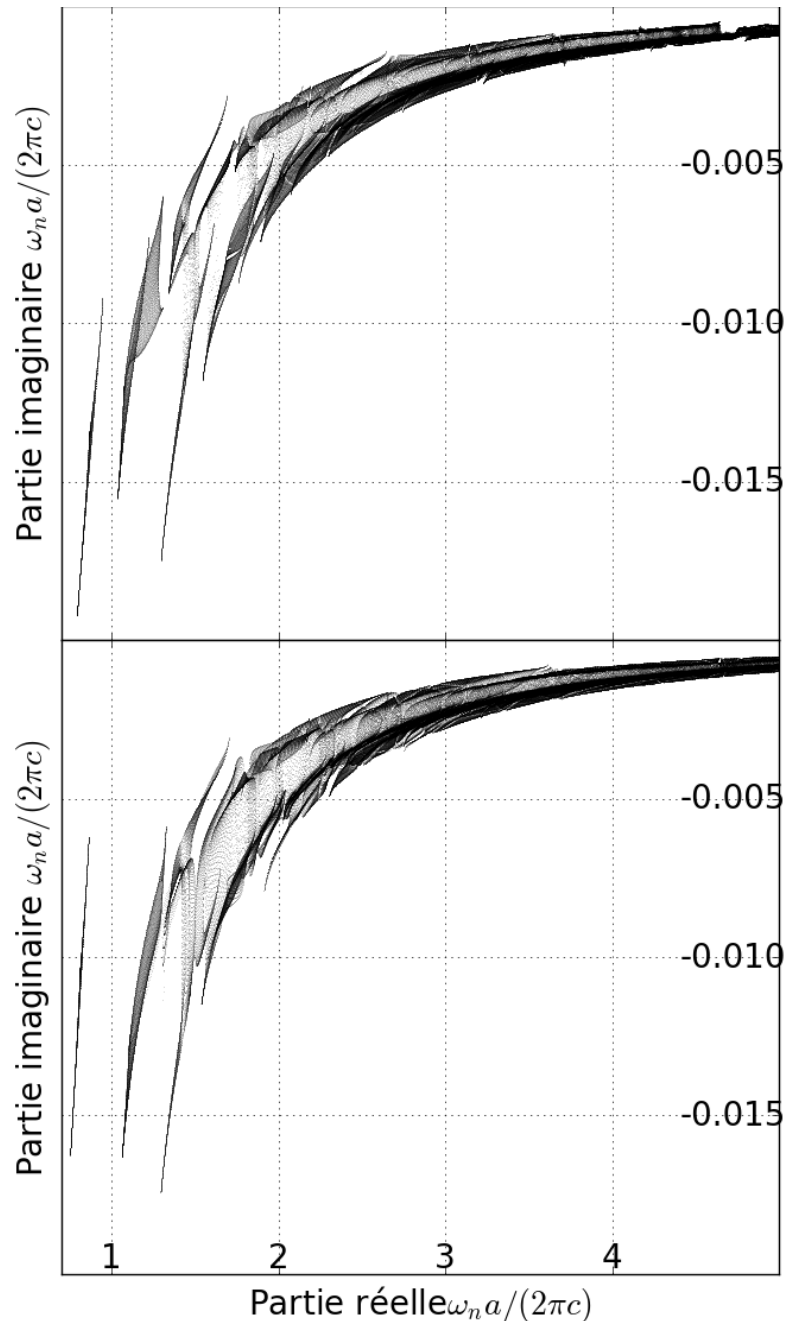


Fig. 3.3.3 – Spectres des fréquences propres complexes normalisées $\omega_n a / (2\pi c)$ des cristaux photoniques de tiges à section carrée (en haut) et à section circulaire (en bas) pour tous les vecteurs d'onde dans la première zone de Brillouin réduite.

photonique de tiges à section carrée et dans [104] pour le cristal photonique de tiges à section circulaire. Comme mentionné précédemment, les résultats de la littérature ont été obtenus avec

des méthodes de simulation complètement différentes (la méthode modale exacte pour [123] et la méthode des harmoniques cylindriques combinée aux « lattice sums » pour [104]). Ceci nous permet à la fois de conforter les résultats déjà existants de la littérature et de valider les résultats de simulation issus de la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance pour des cristaux photoniques bidimensionnels et pour la polarisation s . Contrairement aux deux méthodes numériques utilisées dans [123] et [104], l'implémentation de la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance peut être appliquée à des cristaux photoniques métalliques dont les tiges possèdent une section de géométrie arbitraire. Cette liberté concernant la géométrie revêt d'une importance particulière lorsque l'on souhaite étudier les propriétés de cristaux photoniques effectivement fabriqués comme dans [113].

Passons désormais à l'analyse de ces spectres, sur la figure 3.3.3, on peut remarquer que pour les hautes fréquences, les spectres des résonances pour les deux types de cristaux tendent vers le spectre presque continu et réel de l'espace libre. Ceci est en accord avec le fait que la permittivité relative des tiges du cristal tend vers la permittivité relative du vide pour les hautes fréquences ($|\epsilon(\omega)| \rightarrow 1$ quand $|\omega| \rightarrow \infty$). Cette limite pour les hautes fréquences correspond au point d'accumulation de modes sur l'axe réel constaté sur la représentation classique de la structure de bandes de la figure 3.3.2. De même, comme pour la figure 3.3.2, la borne concernant la norme de la partie imaginaire des modes ($|\text{Im} \left[\frac{\omega_n a}{2\pi c} \right]| < 0.025 = \frac{\gamma a}{2\pi c} / 2$) est également respectée lorsqu'on observe les deux spectres de la figure 3.3.3. On constate également que les spectres des cristaux de tiges à section carrée et circulaires sont relativement similaires. Ceci est confirmé par la figure 3.3.4 qui présente la première bande des résonances complexes pour les deux types de cristaux. Ainsi, nous focaliserons à présent notre attention

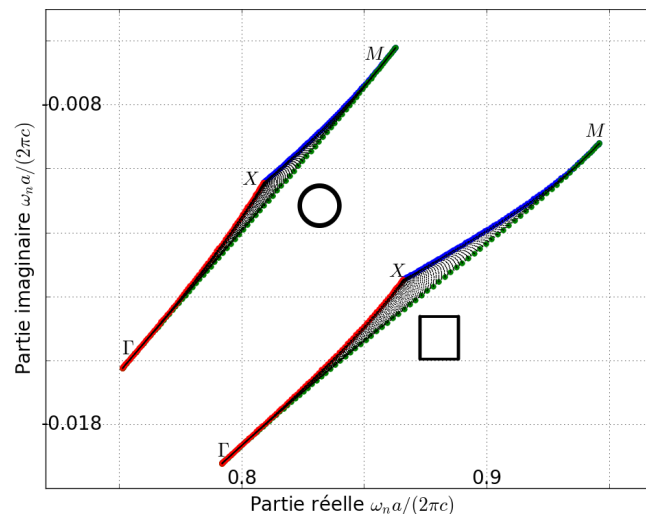


Fig. 3.3.4 – Premières bandes des spectres des fréquences complexes normalisées $\omega_n a / (2\pi c)$ pour les deux types de cristaux photoniques.

sur le cristal photonique de tiges à section carrée.

La figure 3.3.5 présente la deuxième et la troisième bande de ce cristal qui sont toujours en excellent accord avec les résultats présentés dans [123]. La figure 3.3.6 présente les quatrième et cinquième bandes (ainsi que d'autres d'ordres supérieurs) qui possèdent des structures très

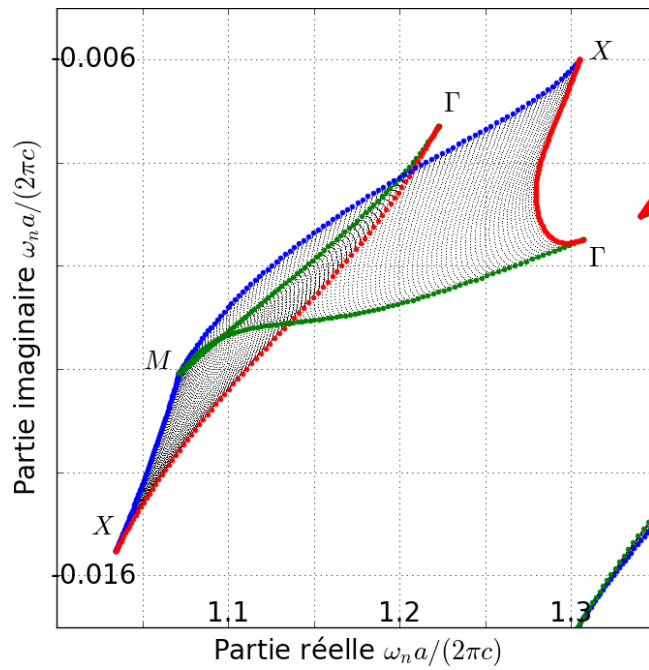


Fig. 3.3.5 – Deuxième et troisième bandes du spectre des fréquences complexes de résonance normalisées $\omega_n/(2\pi c)$. Les résonances correspondant aux trois frontières de la première zone de Brillouin réduite sont tracées en couleurs: ΓX en rouge, ΓM en vert et XM en bleu.

riches.

C'est sur cette figure 3.3.6 que le contre-exemple de [104] rappelé précédemment est observé

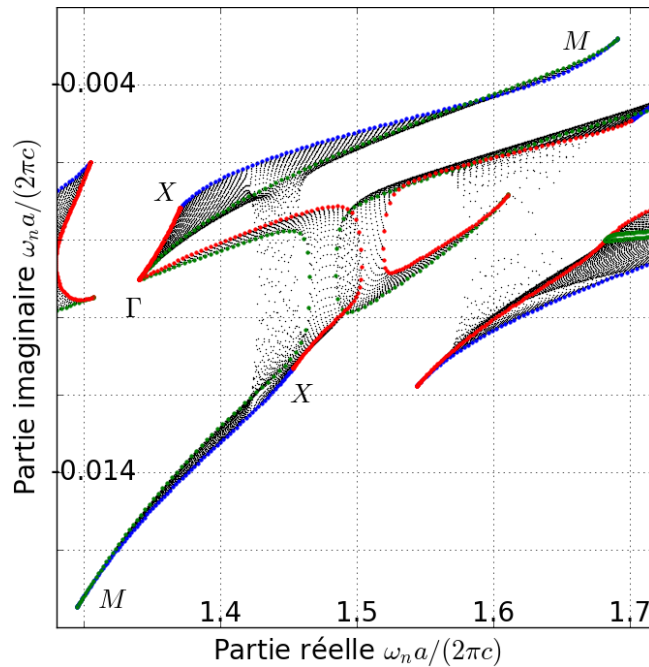


Fig. 3.3.6 – Quatrième et cinquième bandes du spectre des fréquences complexes de résonance normalisées $\omega_n/(2\pi c)$. Les résonances correspondant aux trois frontières de la première zone de Brillouin réduite sont tracées en couleurs: ΓX en rouge, ΓM en vert et XM en bleu.

(cette fois ci dans le cas du cristal de tiges à section carrée). En effet, certaines résonances sont situées en dehors des triangles déformés de couleurs formés par les résonances complexes des

frontières de la première zone de Brillouin réduite. En observant plus en détails la figure 3.3.6, il est constaté que les bandes 4 et 5 sont connectées par un ensemble de fréquences complexes propres. Des comportements similaires sont observés pour les bandes d'ordres supérieurs ainsi que pour le cristal de tiges à section circulaire dans la figure 3.3.3. Les connexions entre les différentes bandes observées sur la figure 3.3.3 se font toujours à travers un décrochement de la partie imaginaire comme étudié par la suite, mais qui ne correspond pas à un décrochement des résonances complexes des frontières comme ceux observés dans la figure 3.3.2. Ainsi, les connexions se font donc entre des bandes de forte et de faible absorption (la partie imaginaire d'un mode correspondant aux pertes associées à celui-ci). On peut d'ailleurs observer, toujours sur la figure 3.3.3, que la convergence vers la limite des hautes fréquences, qu'est le spectre pratiquement continu et réel, se fait de deux façons différentes, l'une pour les bandes de faible absorption, l'autre pour les bandes de forte absorption et que ces deux types de bandes sont toujours connectés par la partie imaginaire et se rejoignent aux très hautes fréquences.

Afin de mieux comprendre ces connexions entre deux bandes, les fréquences complexes des résonances ont été représentées pour un vecteur d'onde \mathbf{k} parcourant quatre lignes "iso- k_y " définies en fixant la composante k_y du vecteur d'onde \mathbf{k} aux quatre valeurs suivantes: $0.23\pi/a$, $0.24\pi/a$, $0.37\pi/a$ et $0.38\pi/a$ tandis que la composante k_x parcourt les segments $[k_y, \pi/a]$. Ces valeurs ont été choisies car les chemins caractéristiques des fréquences complexes de résonances pour ces différentes valeurs de k_y sont fondamentalement différentes. La partie gauche de la figure suivante 3.3.7 présente les résonances de ces quatre lignes iso- k_y et ceci pour un zoom sur les bandes 4 et 5 du spectre total. Pour $k_y = 0.23\pi/a$, les chemins suivis par les résonances (points rouges) démarrent depuis le côté des triangles déformés des bandes 4 et 5 correspondant à la frontière XM (diamants bleus) de la première zone de Brillouin réduite, puis sortent des triangles déformés pour finalement revenir de l'autre côté correspondant à la frontière ΓM (diamants verts) des mêmes triangles. Les parties du chemin qui sortent des deux triangles déformés des bandes 4 et 5 prennent alors la forme de deux pics qui semblent s'attirer l'un l'autre. Pour $k_y = 0.24\pi/a$, ces chemins (points verts) démarrent depuis le même côté des triangles déformés des bandes 4 et 5 correspondant à la frontière XM (diamants bleus), sortent des triangles déformés mais cette fois rejoignent le côté du triangle correspondant à la frontière ΓM (diamants verts) de l'autre bande. Ainsi pour $k_y = 0.24\pi/a$, les deux bandes sont connectées. Des constats identiques sont observés pour des valeurs de k_y fixées à $0.38\pi/a$ (les points violets de la figure 3.3.7 montrent les deux pics) et à $0.37\pi/a$ (les points bleus de la figure 3.3.7 montrent les connexions). Au vue de la forme des chemins caractéristiques, on peut supposer qu'il existe des valeurs pour k_y entre 0.23 et 0.24 et entre 0.37 et 0.38, pour lesquelles les deux pics précédemment observés se rejoignent. La partie à droite de la figure 3.3.7 présente les résonances pour la ligne iso- k_y entre 0.23 et 0.24 correspondant à ce mode de jonction qui est associé à un vecteur d'onde dont les composantes ont pu être estimées à $(k_x, k_y) \approx (0.789, 0.234)\pi/a$.

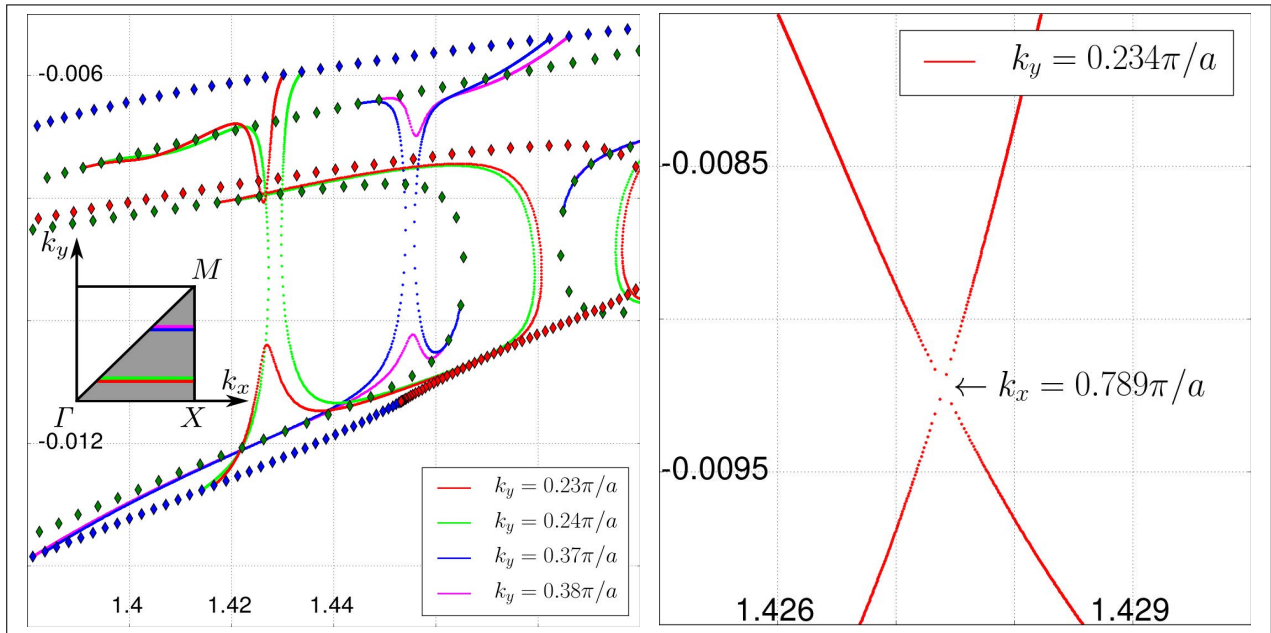


Fig. 3.3.7 – À gauche: Résonances dans le plan complexe dans bandes 4 et 5 du cristal photonique fait de tiges métalliques de Drude à section carrée pour les quatre lignes iso- k_y . À droite: zoom dans la structure de bandes dans la zone autour du point critique $(k_x, k_y) \approx (0.789, 0.234)\pi/a$.

Ces connexions et jonctions entre des bandes de forte et faible absorption peuvent être interprétées comme un phénomène de couplage de mode. Un tel couplage entre deux bandes vers un mode double (correspondant au mode de jonction) pourrait résulter d'une brisure de symétrie. Dans le cas du cristal considéré, aucune dissymétrie spatiale n'est présente. Néanmoins, dans le modèle de Drude pour la permittivité relative des tiges de l'équation 3.3.1, les résonances de la permittivité ne possèdent pas les mêmes parties imaginaires avec un premier pôle à $\omega = 0$ et un second à $\omega = -i\gamma$. Ainsi, une dissymétrie temporelle pourrait provenir de ce modèle. Cette hypothèse est en accord avec les connexions observées sur les figures 3.3.6 et 3.3.7 qui se font dans la direction verticale (imaginaire).

Afin de vérifier cette hypothèse numériquement, une simulation de même type sur les mêmes cristaux photoniques de tiges à section carrée mais cette fois avec un modèle de permittivité relative donnée par le modèle de Drude-Lorentz (*c.f.* équation 3.2.13) a été effectuée. En effet, dans le modèle de permittivité de Drude-Lorentz, les deux résonances $\pm\omega_0 - i\gamma$ possèdent la même partie imaginaire et donc une symétrie des pôles vis-à-vis de leur partie imaginaire qui n'est pas présente dans le modèle de Drude. Si l'hypothèse est juste, les connexions ne devraient pas être présentes dans les résultats de cette simulation. Les paramètres numériques suivants ont été choisis pour le modèle de Drude-Lorentz:

$$\epsilon_\infty = 1.0, \quad \frac{\omega_p a}{2\pi c} = 1.1, \quad \frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.05, \quad \frac{\omega_0 a}{2\pi c} = 1.1. \quad (3.3.3)$$

Le spectre de résonances correspondant à la simulation effectuée est présenté par la figure 3.3.8. On peut constater sur cette figure que les connexions sont toujours présentes et donc que l'origine de celles-ci ne se situe pas dans la dissymétrie temporelle du modèle de permittivité

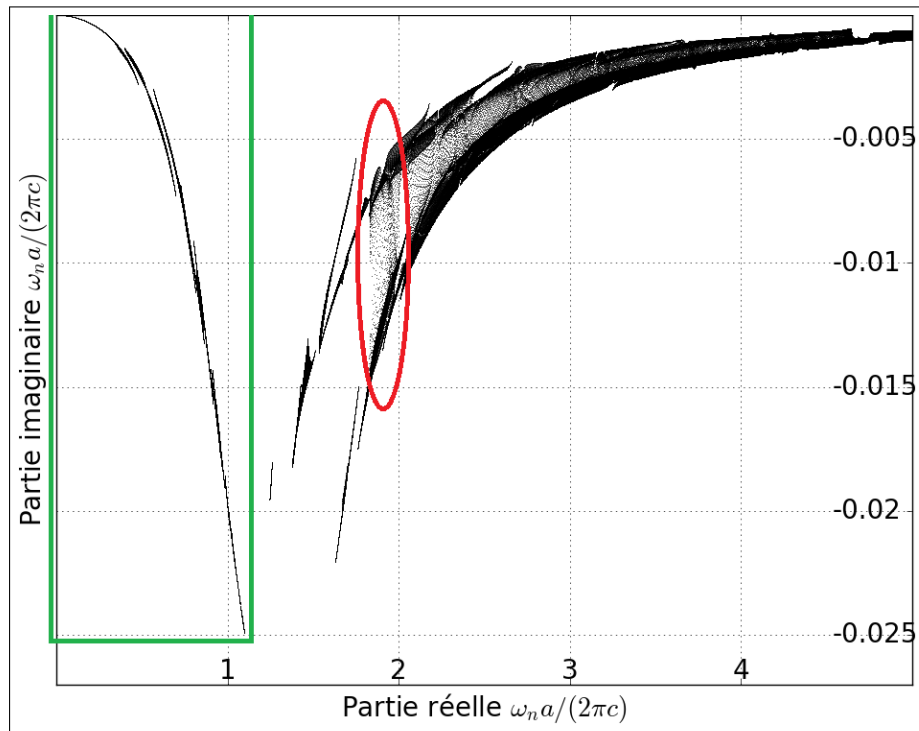


Fig. 3.3.8 – Résonances dans le plan complexe du cristal photonique de tiges métalliques de Drude-Lorentz à section carrée. La zone entourée en rouge montre les connexions toujours présentes. La zone entourée par un rectangle en vert montre la présence de nouvelles bandes.

relative choisi pour les cristaux. Des études complémentaires sont nécessaires pour comprendre l'origine du phénomène qui pourrait également être dû à une brisure de symétrie à la fois temporelle et spatiale entre la permittivité du vide présent autour des cristaux et les modèles de permittivité relative de ceux-ci donnés par les modèles de Drude 3.3.1 et Drude-Lorentz 3.2.13. En observant néanmoins plus en détails ce spectre, on peut noter que la borne inférieure pour la partie imaginaire des fréquences complexes de résonances est également respectée pour une permittivité relative de Drude-Lorentz (*c.f.* sous-section 3.1.2.1) et on peut également constater la présence de plusieurs nouvelles bandes aux faibles fréquences démarrant depuis l'origine du plan complexe et convergeant vers le pôle de partie réelle positive du modèle de permittivité relative choisie ($\omega_1 \simeq 1.099 - 0.025i$). Ces bandes ne sont pas présentes dans le cas du cristal de Drude.

Revenons à présent au cristal de Drude et intéressons nous aux bandes d'ordres supérieurs, la représentation en figure 3.3.9 des lignes iso- k_y , pour k_y fixé aux mêmes valeurs que précédemment ($0.23\pi/a$, $0.24\pi/a$, $0.37\pi/a$ et $0.38\pi/a$) révèle la présence de boucles (à gauche) et de points de rebroussement (à droite) quand k_x parcourt $[k_y, \pi/a]$. Ces boucles et points de rebroussement peuvent potentiellement avoir un effet important sur la vitesse de groupe complexe définie comme $\partial\omega/\partial k_x$ mais résultent une nouvelle fois de phénomènes physiques incompris. L'explication de ceux-ci nécessitent des analyses complémentaires poussées qui ne seront pas poursuivies dans le cadre de cette Thèse.

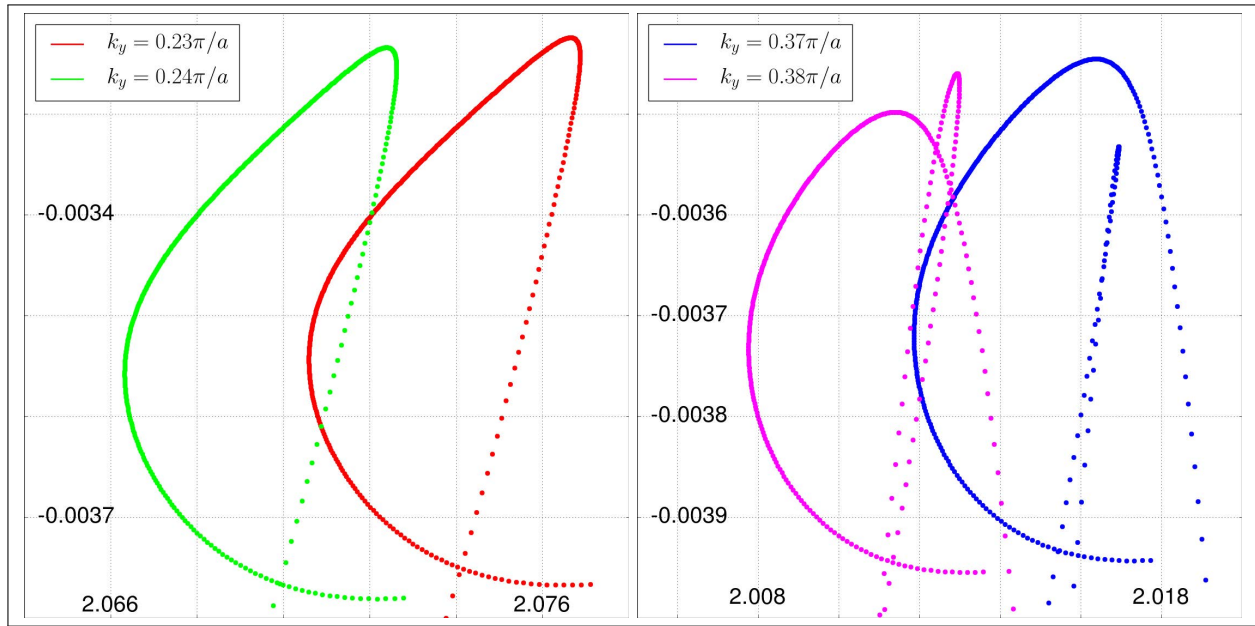


Fig. 3.3.9 – Résonances dans le plan complexe du cristal photonique de tiges métalliques de Drude à section carrée pour plusieurs lignes iso- k_y et pour des bandes d'ordres supérieurs. Le chemin des résonances présentent des boucles et des points de rebroussement.

3.3.1.2 Polarisation p

Les mêmes simulations numériques ont été effectuées pour l'autre cas de polarisation (polarisation p) avec une permittivité relative de Drude et avec les mêmes paramètres numériques pour la permittivité relative (*c.f.* équations 3.3.1 et 3.3.2). Néanmoins, dans ce cas, un cristal de tiges métalliques de Drude à section circulaire a été considéré dans le but de comparer les résultats pour cette polarisation p à ceux de [104] ([123] ne présentant que les résultats pour la polarisation s). La partie gauche de la figure 3.3.10 présente tout le spectre des résonances complexes obtenues pour cette simulation et sa partie droite un zoom sur le spectre identique à celui de la figure 2. de [104]. Les résultats sont globalement en accord avec [104]. Comme pour les résultats de cet article, on peut observer sur ces spectres la présence d'un point d'accumulation de branches de type plasmon de surface autour de la fréquence $(\omega_2 a)/(2\pi c) \simeq 0.777 - 0.025i$ pour laquelle $\epsilon(\omega_2) = -1$, ce qui est cohérent avec des simulations effectuées en polarisation p .

Bien que globalement corrects, ces spectres sont entachés par la présence de modes parasites. Comme précédemment observé pour la même polarisation p dans les cavités fermées de la sous-section 3.2.2.2, ces modes parasites affectent les résultats autour de la fréquence complexe $(\omega_3 a)/(2\pi c) \simeq 1.1 - 0.025i$ pour laquelle $\epsilon(\omega_3) = 0$. On peut remarquer que leurs fréquences propre sont essentiellement situées sur un axe vertical de même partie réelle que le mode parasite de fréquence ω_3 (ligne rouge verticale sur les figures 3.3.10). Une explication a déjà été proposée en ce qui concerne leur présence (*c.f.* 3.2.2.2).

On observe près du point d'accumulation ω_2 de modes de type plasmon de surface (comme par exemple les modes entourés en vert sur la figure 3.3.10) la présence de modes numériquement mal

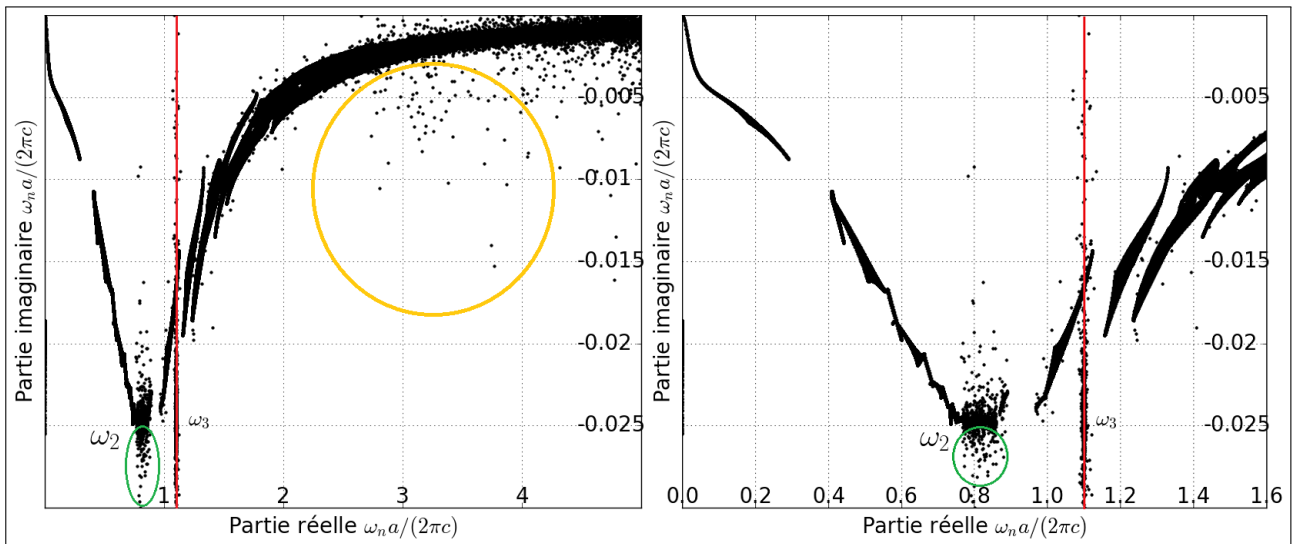


Fig. 3.3.10 – Spectre des résonances normalisées $\omega_n a / (2\pi c)$ pour le cristal photonique de tiges métalliques de Drude à section circulaire dans le cas de polarisation p . À gauche : spectre total, à droite: zoom identique à celui de [104]. Les modes parasites produits par $\epsilon(\omega_3) = 0$ sont repérés en rouge. Les modes parasites aux hautes fréquences dus à une trop faible discrétisation de l'espace sont repérés en orange. Les modes parasites proches des branches et points d'accumulation de type plasmon de surface sont repérés en vert.

déterminés. Certains de ces modes sont facilement reconnaissables car leur partie imaginaire dépasse la borne inférieure rappelée en sous-section 3.1.2.2. Près de ce point d'accumulation, la longueur d'onde des plasmons de surface des tiges devient extrêmement faible. Ainsi, un maillage extrêmement fin est nécessaire pour les décrire correctement. Ceci expliquerait cette imprécision numérique car le maillage utilisé pour les simulations est relativement lâche. Enfin, d'autres modes numériquement mal déterminés sont également observés aux hautes fréquences sur cette figure (entourés en orange). L'imprécision d'évaluation de ces modes est expliquée par la même raison que celle des modes situés à côté du point d'accumulation ω_2 de type plasmon (la longueur d'onde pour les modes correspondants devient trop faible devant la longueur caractéristique du maillage). De plus, en polarisation p , le maillage est associé à des éléments d'arêtes et la discrétisation de l'espace doit être encore plus fine qu'en polarisation s (où le maillage est associé à des éléments nodaux).

Ainsi en affinant le maillage, il est tout de même possible de réduire l'imprécision d'évaluation de ces deux derniers types de modes numériquement mal déterminés au détriment de la taille du problème, de l'espace de mémoire vive occupé et bien évidemment du temps de calcul nécessaire à la résolution du problème spectral.

Malgré ces imprécisions de calcul numérique, nous retiendrons tout de même que les résultats de l'implémentation de la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance pour ce cristal photonique de tiges métallique de Drude à section circulaire est globalement en accord avec les résultats de [104] pour le cas de polarisation p .

3.3.2 Analyse et comparaison des résultats FEM avec ceux issus de [105]

3.3.2.1 Présentation des résultats de [105]

Intéressons nous à présent aux résultats présentés dans [105]. Dans cet article, un formalisme sensiblement identique au formalisme de résonance pour le modèle de Drude-Lorentz (*c.f.* sous-section 3.1.2.1), est développé et implémenté numériquement via la méthode FDFD [106–109]. L'implémentation de la discrétisation spatiale à différence finie des champs électromagnétiques \mathbf{E} et \mathbf{H} est faite au travers de l'utilisation d'une grille de Yee [42]. L'utilisation de cette grille de Yee assure la condition de divergence nulle des champs électromagnétiques [2]. Cette implémentation numérique est alors appliquée à un cristal photonique bidimensionnel, de périodicité carrée a , de tiges métalliques de Drude à section carrée placées dans l'air. Les tiges à section carrée possède une largeur égale à $w = a/4$ avec $a = 137.6$ nm.

Dans un premier temps, le cristal est considéré sans pertes et les paramètres numériques de la résonance de Drude des tiges métalliques (donnée par l'équation 3.3.1) sont alors les suivants:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad \frac{\omega_p a}{2\pi c} = 1.0, \quad \frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.0. \quad (3.3.4)$$

Les structures de bandes de ce cas sans pertes sont alors calculées, pour le cas de polarisation p , par la résolution du problème spectral linéaire et Hermitien (car le problème est considéré sans pertes) défini à travers la méthode IRLM (pour Implicit Restarted Lanczos Method [16]). Ces calculs sont ensuite vérifiés en les comparant aux spectres obtenus à l'aide d'une simulation FDFD de la même structure [114]. Les structures de bandes sont seulement présentées, par la figure 1.(a) de [105], pour un vecteur d'onde \mathbf{k} parcourant la frontière ΓX de la première zone de Brillouin réduite (en rouge sur la figure 3.3.1). La présence de nombreuses bandes plates sur cette figure pour un domaine de fréquence particulier est soulignée. Ces bandes plates ont pour origine les résonances plasmon de surface des tiges métalliques isolées [104, 115, 116]. Leur présence est donc cohérente avec le cas de polarisation p considéré. Ces résonances se produisent à des fréquences discrètes et sont fortement localisées près de la surface des tiges métalliques [104, 115]. Comme les tiges métalliques sont organisées en réseau bidimensionnel, formant ainsi un cristal photonique, les résonances discrètes s'élargissent spectralement et prennent alors la forme de bandes étroites [104, 116]. Sur la figure 1.(c) de [105], la carte de la norme du champ électrique propre normalisé ainsi que celle du champ de polarisation normalisé associé (qui correspond au champ auxiliaire du formalisme de résonance dans notre cas) d'un de ces modes de type plasmon de surface est présenté. Il est également stipulé dans cet article qu'augmenter la résolution de la grille de Yee, augmente le nombre de bandes plates observées dans la structure de bandes (l'espace étant mieux discrétisé, les résonances plasmons de surface d'ordre supérieur sont alors retrouvées [117]).

Après obtention et analyses de ces résultats, des pertes sont ajoutées au système (cristal de même géométrie) en choisissant les valeurs numériques suivantes pour la résonance de Drude des tiges:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad \frac{\omega_p a}{2\pi c} = 1.0, \quad \frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.01. \quad (3.3.5)$$

Un premier calcul “rigoureux” des résonances dans ce cas à pertes est alors effectué à travers le formalisme étendu développé dans cet article. Il n’est toutefois pas précisé de quelle façon le formalisme étendu est implémenté (à travers la FDFD ou à travers une résolution directe du système comme dans le cas sans perte). Les résultats du calcul modal sont alors une nouvelle fois présentés pour un vecteur d’onde \mathbf{k} parcourant la frontière ΓX de la première zone de Brillouin réduite. Néanmoins, une nouvelle représentation directe dans le plan complexe est adoptée. Cette représentation est celle que nous avons précédemment utilisée dans la section 3.3.1 à ceci près que la norme de la partie imaginaire des fréquences complexes est choisie comme ordonnée. Ensuite, afin de démontrer la connexion entre les résultats avec et sans pertes, une théorie des perturbations du premier ordre est appliquée au champ de déplacement électrique D pour prendre en compte les pertes. Les résultats de calcul des résonances obtenues via cette méthode perturbative sont alors confrontés à ceux obtenus par le calcul “rigoureux”. Un excellent accord est obtenu pour les résultats de ces deux calculs qui sont présentés par la figure 2. de l’article.

Ainsi, afin de vérifier ces résultats et de poursuivre la validation de l’implémentation numérique de la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance, celle-ci a été appliquée au même cristal de tiges métalliques de Drude dans le cas sans pertes puis dans le cas à pertes.

3.3.2.2 Comparaison avec les résultats de la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance

Cas sans pertes Pour rappel, le cristal photonique est bidimensionnel, de périodicité carrée a , constitué de tiges métalliques de Drude à section carrée placées dans l’air. Les tiges à section carrée possède une largeur égale à $w = a/4$ avec $a = 137.6$ nm et les paramètres numériques de la résonance de Drude des tiges métalliques sont les suivants:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad \frac{\omega_p a}{2\pi c} = 1.0, \quad \frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.0. \quad (3.3.6)$$

Le calcul est effectué pour le cas de polarisation p . La figure suivante présente la structure de bandes obtenue à travers la formulation FEM basée sur le formalisme de résonance pour un vecteur d’onde \mathbf{k} parcourant seulement la frontière ΓX afin que le lecteur puisse comparer facilement ces résultats avec ceux présentés par la figure 1.(a). de l’article [105]. En effectuant cette comparaison, un accord des résultats est constaté pour les fréquences inférieures à 0.4

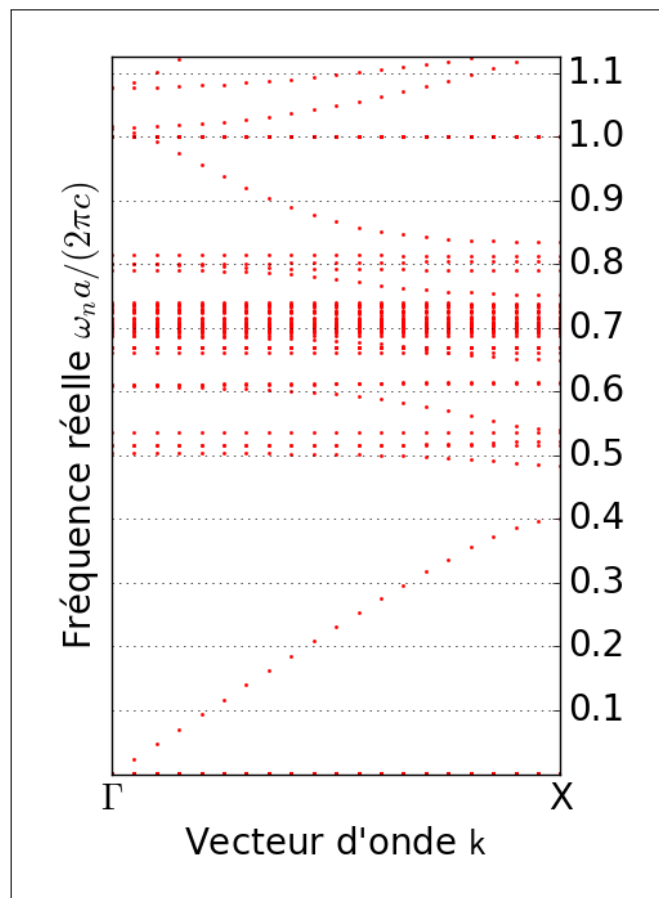


Fig. 3.3.11 – Structure de bandes du cristal photonique bidimensionnel sans perte de [105] pour un vecteur d'onde k parcourant la frontière ΓX de la première zone de Brillouin réduite.

et supérieures 1.0. Néanmoins plusieurs différences flagrantes apparaissent entre les deux structures de bandes entre ces deux fréquences:

- tout d'abord la présence d'un gap de modes pour les fréquences réelles situées entre 0.4 et 0.48 est constatée sur la figure 3.3.11. Ce gap n'est pas présent sur la figure 1.(a) de [105],
- on observe également une accumulation de bandes plates observées sur la figure 3.3.11 autour de la fréquence réelle $\omega_2 \simeq 0.707$ qui n'est pas présente sur la figure 1.(a) de [105]. Comme mentionné précédemment, ces bandes plates présentes en polarisation p ont pour origine les résonances plasmon de surface des tiges du cristal et interviennent donc autour de la fréquence ω_2 pour laquelle $\epsilon(\omega_2) = -1$. La présence de ces bandes est également soulignée dans [105]. Néanmoins, celles-ci ne se positionnent pas autour de ω_2 , ce qui est source à remise en question des résultats présentés. On peut par exemple observer sur la figure 1.(a). de [105], la présence de bandes plates autour de la fréquence 0.9 qui sont totalement absentes de nos résultats,
- globalement, la structure de bandes pour les fréquences dans l'intervalle $]0.4, 1.0]$ n'est pas la même.

Des différences majeures sont donc observées entre les résultats obtenus par les deux méthodes. Afin de savoir si ces différences persistent dans le cas avec pertes, nous avons alors poursuivi l'analyse pour le cristal à pertes de [105].

Cas avec pertes Nous allons donc maintenant présenter les résultats des calculs modaux effectués par la FEM pour le cristal à pertes. Pour rappel, seul le paramètre d'absorption γ du modèle de Drude pour la permittivité relative des tiges change et vaut maintenant $\frac{\gamma a}{2\pi c} = 0.01$. Bien que les calculs aient été effectués pour un vecteur d'onde k parcourant toute la première zone de Brillouin réduite du cristal, la figure suivante 3.3.12 présente les fréquences de résonance obtenues pour un vecteur d'onde k parcourant seulement la frontière ΓX . La représentation adoptée par cette figure est la même que celle de la figure 2. de l'article [105] afin de faciliter la comparaison avec celle-ci (représentation directe dans le plan complexe avec le module de la partie imaginaire des fréquences complexes des modes en ordonnée). Sur cette figure, on constate tout d'abord que les modes parasites calculés par la FEM en polarisation p situés sur une droite verticale de même partie réelle que la fréquence complexe $\omega_1 a / (2\pi c) \simeq 1 - 0.005i$ (tel que $\epsilon(\omega_1 a / [2\pi c]) = 0$) sont toujours présents. On constate également que la limite supérieure de la norme des parties imaginaires des fréquences propres complexes valant $\gamma a / (2\pi c) / 2 = 0.005$ est respectée.

En effectuant la comparaison avec la figure 2. de [105], bien que les résultats soient globalement en accord pour les fréquences complexes de parties réelles strictement inférieures à 0.4 et supérieures à 0.9, des différentes frappantes apparaissent dans l'intervalle $\omega_n a / (2\pi c) \in]0.4, 0.9]$:

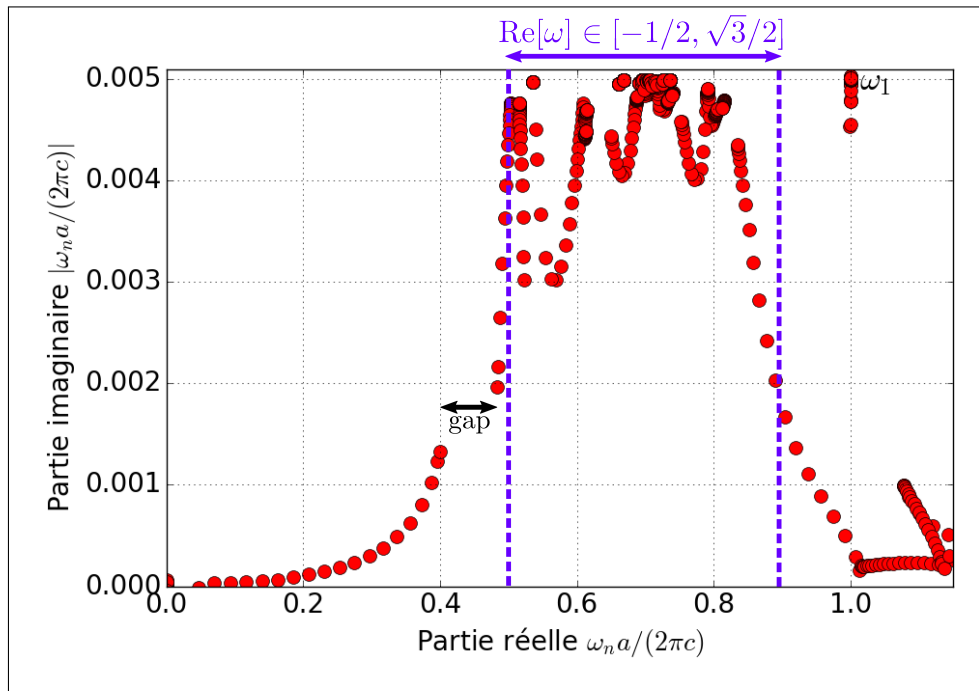


Fig. 3.3.12 – Fréquences de résonances complexes du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d'onde k parcourant la frontière ΓX de la première zone de Brillouin réduite.

- sur la figure 2. de [105], une asymptote verticale est présente pour les fréquences propres complexes de résonances de parties réelles inférieures à 0.4. Celle-ci n'est pas présente sur la figure 3.3.12,
- tout comme dans le cas sans perte, la présence d'un gap de modes pour les fréquences complexes de parties réelles situées entre 0.4 et 0.48 est constatée sur la figure 3.3.12. Ce gap n'est pas présent sur la figure 2. de [105],
- enfin les fréquences propres complexes de parties réelles situées dans l'intervalle $]0.4, 0.9]$ ne sont pas les mêmes. On peut noter que cette intervalle de fréquences réelles correspond approximativement à l'intervalle de fréquence pour lequel un phénomène hypersingulier lié au changement de signe de la partie réelle de la permittivité relative du métal de Drude intervient aux coins des tiges du cristal [128, 124, 118]. En effet, dans notre cas, les tiges du cristal étant de section carrée ($\alpha = \pi/2$, α étant l'angle aux coins des tiges du cristal), alors la présence de "modes de coins" liés à ce phénomène est attendu lorsque la partie réelle de la permittivité relative du métal de Drude prend des valeurs comprises dans l'intervalle κ_σ tel que $\text{Re}[\epsilon(\omega)] \in \kappa_\sigma = [-3, -1/3]$, ce qui correspond à un intervalle de fréquences de partie réelle $\text{Re}[\omega] \in [1/2, \sqrt{3}/2]$ (en considérant que $\gamma \simeq 0$). On peut notamment constater sur la figure 3.3.12 que pour cet intervalle de fréquence (délimité par les barres en pointillés violets sur la figure), un accroissement important de la partie imaginaire des fréquences propres des modes est observé, ce qui est cohérent de la présence de ces "modes de coins". Pour confirmer leur présence, la norme du champ électrique propre d'un de ces "modes de coins" de cet intervalle de fréquence est présentée

par la figure suivante 3.3.13. De plus amples investigations doivent être effectuées concernant ces modes et notamment une étude portant sur la stabilité numérique des résultats obtenus vis à vis du maillage éléments finis au voisinage des coins des tiges.

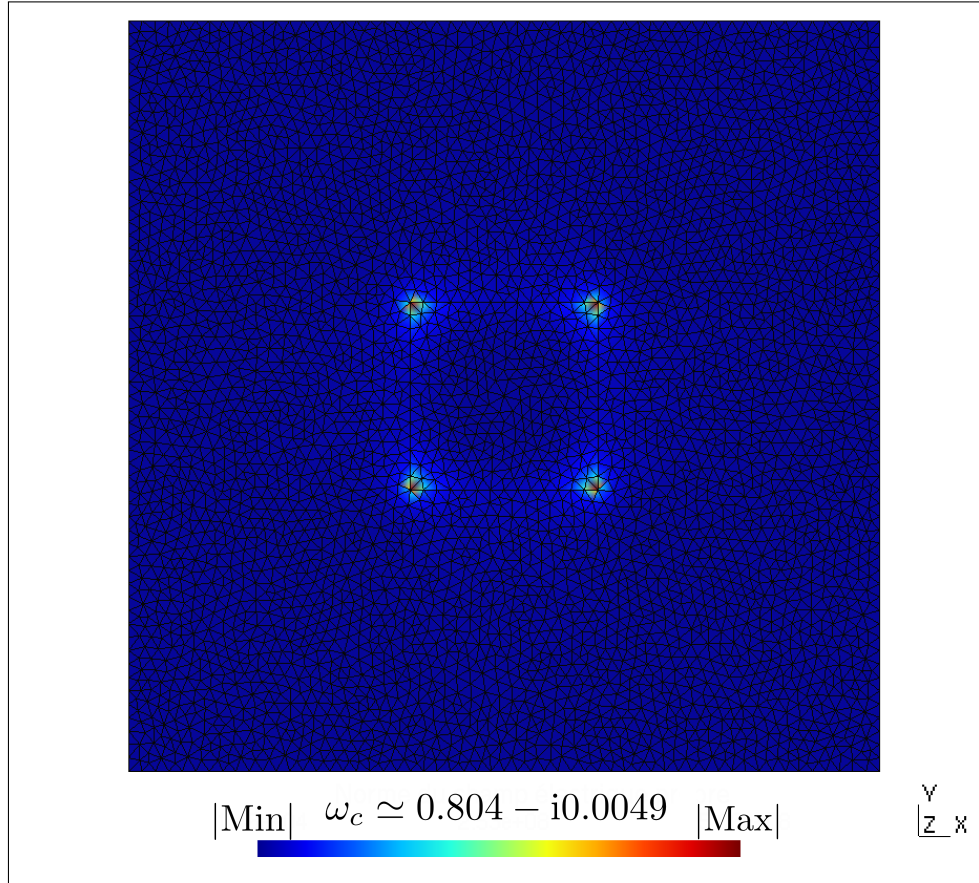


Fig. 3.3.13 – Champ électrique propre d'un "mode de coins" de fréquence propre $\omega_c \simeq 0.804 - i0.0049$ du cristal photonique considéré.

Les résultats des deux méthodes de résolution du problème modal considéré étant différents, les résultats de l'implémentation de la FEM basée sur le formalisme de résonance pour ce cristal ont alors été comparés aux résultats de l'implémentation d'une formulation faible FEM pour les structures électromagnétiques dispersives, développée parallèlement à l'Institut Fresnel, basée sur la résolution d'un problème aux valeurs propres polynomial. Le principe de cette formulation est très succinctement exposé ci-dessous.

Les matériaux considérés étant linéaires, homogènes, isotropes et non-magnétiques, le problème spectral à résoudre s'écrit:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E} \quad (3.3.7)$$

En considérant une dépendance fréquentielle de type Drude pour la permittivité relative des différents matériaux composant la structure, on peut réécrire ce problème spectral de la façon

suivante:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_j \mathbf{l}_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \left[1 - \frac{\omega_{p,j}^2}{\omega(\omega + i\gamma_j)} \right] \mathbf{l}_d \mathbf{E}. \quad (3.3.8)$$

Nous n'entrerons pas dans le détail de la formulation faible et de la résolution par éléments finis de ce type de problèmes aux valeurs propres dits polynomiaux. On peut voir simplement que l'expression ci-dessus 3.3.8 peut se mettre sous la forme d'une équation aux valeurs propres polynomiale du troisième ordre en ω :

$$\begin{aligned} \omega^3 [\mathbf{l}_d \mathbf{E}] + i\omega^2 \sum_j \mathbf{l}_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \gamma_j [\mathbf{l}_d \mathbf{E}] - \omega \left(\sum_j \mathbf{l}_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \omega_{p,j}^2 [\mathbf{l}_d \mathbf{E}] + c^2 [\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}] \right) \\ - i c^2 \sum_j \mathbf{l}_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \gamma_j [\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}] = 0. \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

On notera tout de même que la prise en compte d'une somme de résonances pour la modélisation de la permittivité relative des matériaux de la structure conduirait nécessairement à une augmentation de l'ordre de ce problème aux valeurs propres polynomial.

La figure suivante présente alors les fréquences de résonances complexes obtenues, pour le cristal photonique à pertes de [105], pour un vecteur d'onde \mathbf{k} parcourant la frontière ΓX et pour les deux formulations développées à l'Institut Fresnel. Il est à noter que pour toutes les simulations effectuées entre les résultats de ces deux types de simulation, la discrétisation des valeurs prises par les composantes (k_x, k_y) du vecteur d'onde \mathbf{k} le long des frontières de la première zone de Brillouin réduite a été la même. Sur cette figure, un excellent accord entre les

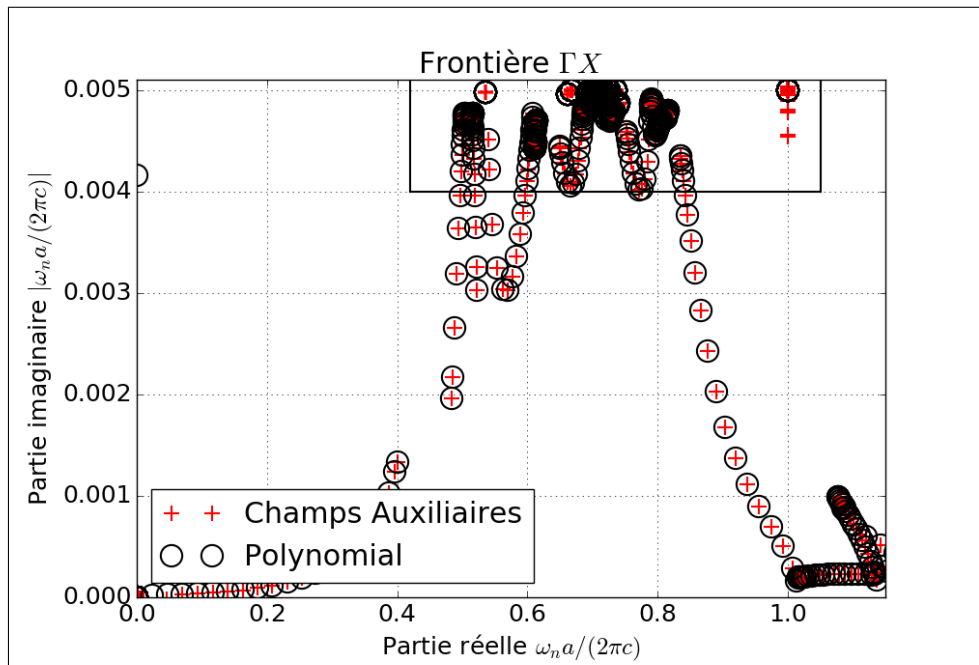


Fig. 3.3.14 – Fréquences de résonances complexes du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d'onde \mathbf{k} parcourant la frontière ΓX de la première zone de Brillouin réduite obtenue à travers l'implémentation des deux formulations FEM différentes (polynomiale et champs auxiliaires).

résultats des deux types de simulation est constaté excepté autour de la fréquence complexe ω_1

où les modes parasites de la formulation basée sur le formalisme de résonance sont présents. En effectuant un zoom sur la partie du spectre encadré en noir sur la figure 3.3.14, on peut vérifier sur la figure 3.3.15 que cet accord est préservé dans la bande de fréquences “critiques” (partie réelle des fréquences complexes entre 0.4 et 0.9) pour laquelle les résultats sont en désaccord avec ceux de [105]. La concordance des résultats est également observée pour les

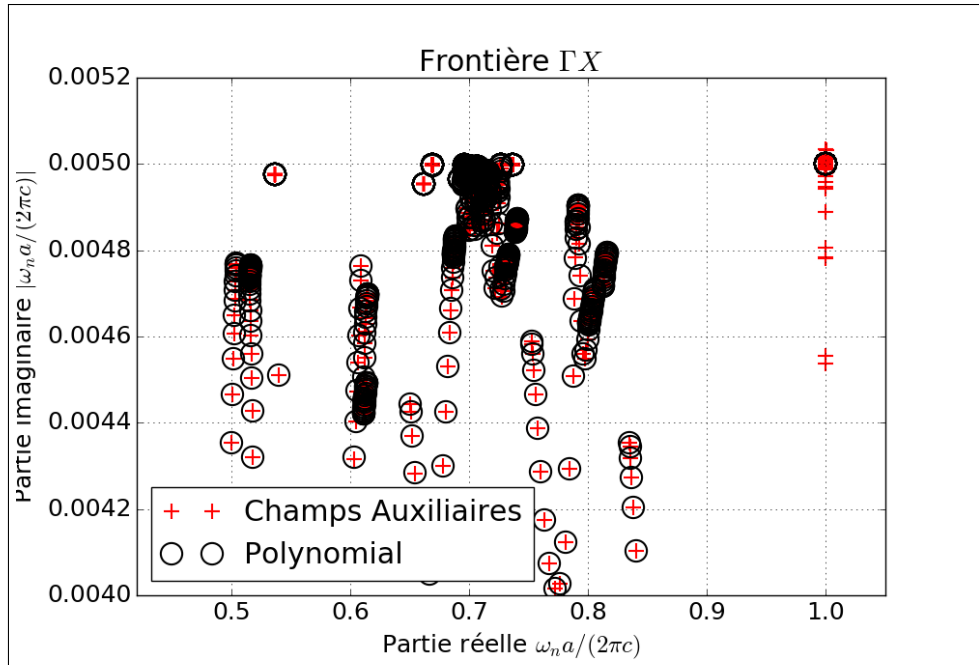


Fig. 3.3.15 – Zoom sur le spectre dans la bande de fréquences de résonances complexes “critiques” du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d’onde k parcourant la frontière ΓX de la première zone de Brillouin réduite obtenue à travers l’implémentation des deux formulations FEM différentes (polynomiale et champs auxiliaires).

deux formulations FEM pour un vecteur d’onde parcourant les frontières XM (c.f. figure 3.3.16) et $M\Gamma$ (c.f. figure 3.3.17) de la première zone de Brillouin réduite. Enfin, la figure suivante

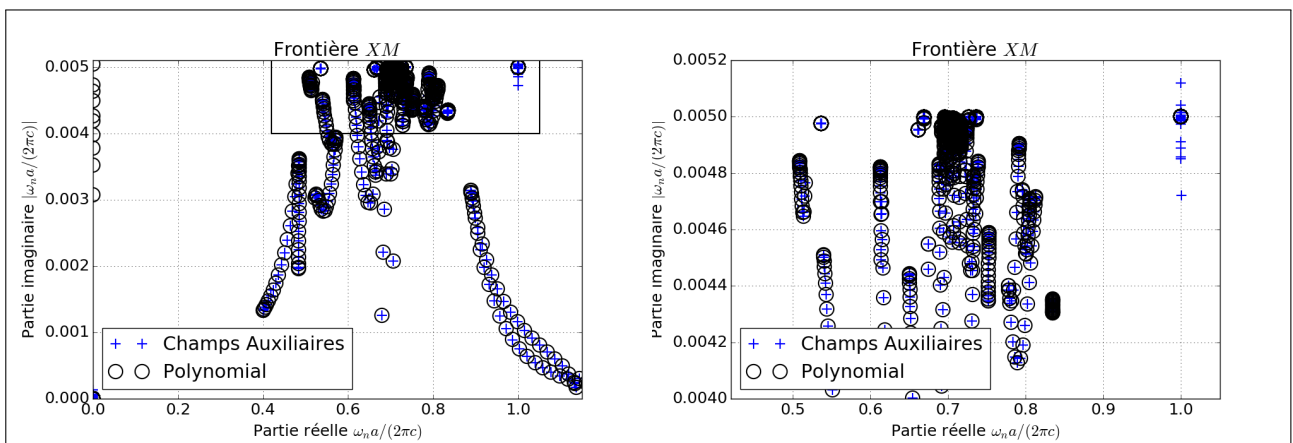


Fig. 3.3.16 – Fréquences de résonances complexes du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d’onde k parcourant la frontière XM de la première zone de Brillouin réduite obtenue à travers l’implémentation des deux formulations FEM différentes (polynomiale et champs auxiliaires) avec un zoom sur la bande de fréquences “critiques” (à droite).

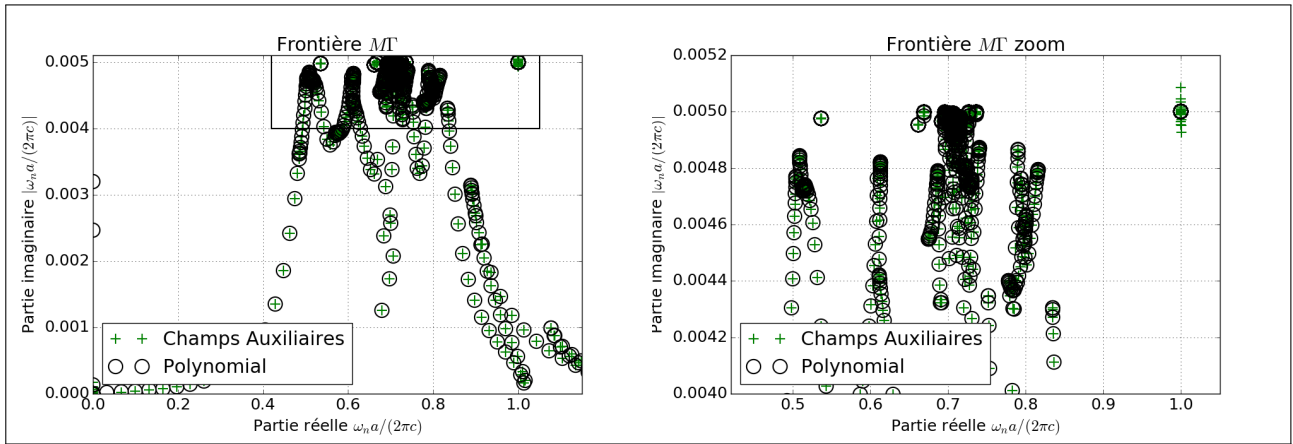


Fig. 3.3.17 – Fréquences de résonances complexes du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d’onde k parcourant la frontière $M\Gamma$ de la première zone de Brillouin réduite obtenue à travers l’implémentation des deux formulations FEM différentes (polynomiale et champs auxiliaires) avec un zoom sur la bande de fréquences “critiques” (à droite).

3.3.18 présente les résultats de simulation FEM basée sur le formalisme de résonance pour k parcourant la totalité de la première zone de Brillouin réduite. Sur cette figure, on peut ainsi

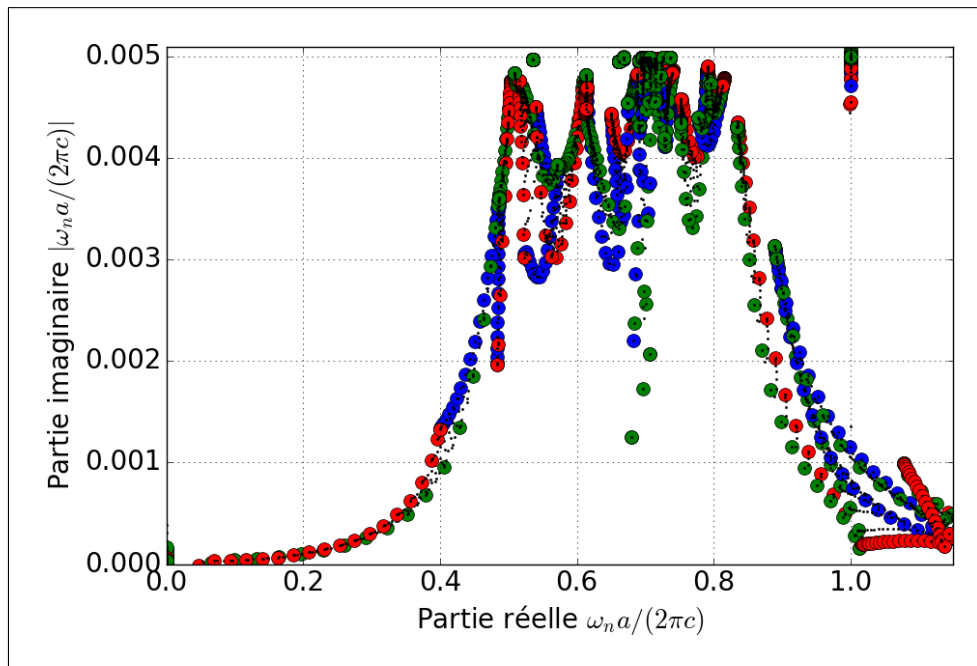


Fig. 3.3.18 – Fréquences de résonances complexes du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d’onde k parcourant la totalité de la première zone de Brillouin réduite obtenue à travers l’implémentation de type champs auxiliaires de la FEM. Les résonances correspondant aux frontières sont représentées en couleurs, les autres par des points noirs.

observer la continuité des différents chemins caractéristiques formés par les fréquences propres lorsque le vecteur d’onde k parcourt les frontières de la première zone de Brillouin réduite qui, dans le plan complexe, forment différents triangles déformés.

Dans tous les spectres précédemment présentés (voir figures 3.3.12,3.3.15,3.3.16,3.3.17 et 3.3.18), on peut constater la présence d’un point d’accumulation de branches et de modes autour de la fréquence $\omega'_2 a / (2\pi c) \simeq 0.707 - 0005i$ pour laquelle $\epsilon(\omega'_2) = -1$. Ce phénomène déjà

observé sur la figure 3.3.10 correspond à l'accumulation de modes de type plasmon de surface autour de cette fréquence propre complexe ω'_2 pour le cas de polarisation p . Cette accumulation correspond également à l'accumulation de bandes plates observées sur la figure 3.3.11 autour de la fréquence réelle $\omega_2 \simeq 0.707$ dans le cas du cristal sans pertes. En effectuant différents zooms sur le spectre du cristal avec pertes autour de cette fréquence d'accumulation ω'_2 , présentés par la figure 3.3.19, on peut mieux se rendre compte de l'accumulation des différentes branches et modes autour de celle-ci et de l'impossibilité de décrire correctement l'infinité de modes présents en utilisant un maillage discret de l'espace. En observant à présent la figure 2. de

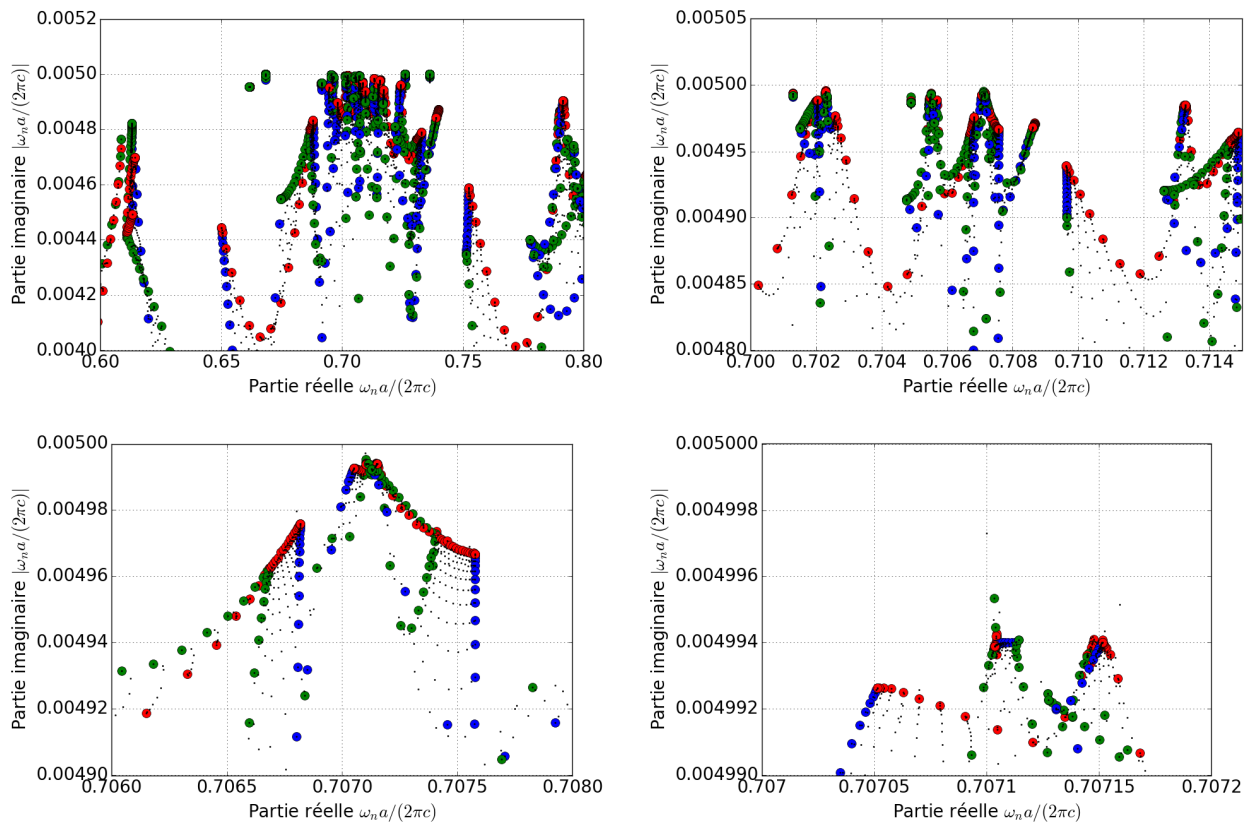


Fig. 3.3.19 – Zooms sur le spectre total obtenu autour de la fréquence complexe ω_2 d'accumulation de modes de type plasmon de surface du cristal photonique bidimensionnel avec pertes de [105] pour un vecteur d'onde \mathbf{k} parcourant la totalité de la première zone de Brillouin réduite (de plus en plus proche de ω_2 de haut en bas et de gauche à droite).

[105], l'absence de ce point d'accumulation autour de ω'_2 est frappante et laisse à supposer que les résultats présentés par [105] ne sont pas corrects. Comme mentionné précédemment, cette absence de point d'accumulation autour de la fréquence ω_2 avait déjà été constatée dans le cas sans pertes, on peut donc supposer que les résultats présentés dans [105] pour ce cas étaient déjà erronés et qu'alors, l'accord entre les résultats du calcul "rigoureux" des modes du cas avec pertes et du calcul par la méthode perturbative provient de ces erreurs de calculs. Une potentielle source d'erreur identifiée concerne les différentes limites choisies pour $\omega_0 \rightarrow \infty$ et $\omega_p \rightarrow 0$ afin de modéliser les régions de l'espace contenant de l'air. En procédant ainsi, les opérateurs A et B définis par les équations (10) et (11) de l'article contiennent en effet des

termes mal définis ($\omega_0^2/\omega_p^2\epsilon_\infty$, $1/\omega_p^2\epsilon_\infty$ pour \mathbf{A} et $i\frac{\omega_0^2}{\omega_p^2\epsilon_\infty}$ pour \mathbf{B}).

Quoi qu'il en soit, de plus amples investigations sont nécessaires pour comprendre les désaccords obtenus qui pourraient également provenir d'erreurs concernant les données numériques des différents paramètres choisis pour le cristal.

3.3.3 Conclusions intermédiaires

Dans cette section, la formulation FEM d'analyse modale basée sur le formalisme de résonance a été appliquée à l'étude des propriétés spectrales de cristaux photoniques bidimensionnels métalliques de Drude.

En premier lieu, le cristal de tiges métalliques de Drude à pertes et à section carrée considéré dans [123] a été étudié. Le spectre de ce cristal obtenu par la FEM, pour le cas de polarisation s , a été comparé à celui obtenu par la méthode modale exacte dans [123]. L'accord des résultats s'est avéré excellent. L'obtention de ce spectre a pu confirmer un contre-exemple de l'hypothèse communément admise stipulant que "le spectre total des résonances complexes d'un cristal (pour k parcourant toute la première zone de Brillouin réduite, l'intérieur y compris) reste situé à l'intérieur du contour formé par les résonances complexes correspondant aux frontières de cette zone". Ainsi, le calcul classique des structures de bandes d'un cristal photonique qui s'effectue sur les seules frontières de la première zone de Brillouin réduite, n'est pas forcément suffisant pour fournir toutes les informations nécessaires à la description des propriétés d'un cristal photonique. Concernant l'origine de ces résonances, l'hypothèse d'un phénomène de couplage entre des bandes de faibles et de fortes absorptions est émise. L'analyse de ce spectre a également mis en exergue des phénomènes physiques inexplicables pouvant impacter fortement la vitesse de groupe complexe.

Dans un second temps, le cristal de tiges métalliques de Drude à pertes et à section circulaire considéré dans [104] a été étudié. Le spectre de ce cristal obtenu par la FEM, pour le cas de polarisation p , a été comparé à celui obtenu par la méthode des harmoniques cylindriques combinée aux « lattice sums » dans [104]. L'accord entre ces deux spectres est satisfaisant. La présence d'un point d'accumulation de branches de modes de type plasmon de surface autour de la fréquence complexe ω_2 telle que $\epsilon(\omega_2) = -1$ a, comme attendu, été observée. La présence de modes parasites affectent néanmoins les résultats de la méthode. Leurs fréquences propres sont situées principalement à proximité d'une droite verticale du plan complexe possédant la même partie réelle que la fréquence complexe ω_3 telle que $\epsilon(\omega_3) = 0$. Des modes numériquement mal déterminés sont également observés. Ils possèdent soit des fréquences de résonance complexes situées autour de la fréquence ω_2 soit des fréquences de résonance de fortes parties réelles. L'imprécision d'évaluation de ces modes est due à une trop faible discrétisation de l'espace vis à vis de la longueur d'onde des modes à évaluer numériquement. Un maillage plus fin de l'espace permettrait d'améliorer la situation.

Enfin, les cristaux de tiges métalliques de Drude avec et sans pertes et à section carrée con-

sidérés dans [105] ont été étudiés. Les spectres de ces cristaux obtenus pour le cas de polarisation p ont été comparés à ceux obtenus dans [105] par différentes méthodes de résolution dont l'une est basée sur l'implémentation FDFD d'un formalisme très similaire au formalisme de résonance implémenté dans le cadre de cette Thèse. Des désaccords profonds entre les différents résultats ont été constatés. Afin de vérifier les résultats obtenus par l'implémentation FEM du formalisme de résonance, ceux-ci ont alors été comparés à ceux obtenus par l'implémentation FEM d'une autre méthode d'analyse modale développée parallèlement à l'Institut Fresnel et basée sur la formation d'un problème aux valeurs propres polynomial. L'accord entre les résultats de ces deux formulations FEM appliqué au cristal avec perte a alors été constaté, conduisant ainsi à la remise en cause des résultats présentés par [105]. L'étude de ces types de cristaux a également permis de constater la présence de "mode de coins" au sein de ceux-ci. Les résultats numériques des fréquences propres de ces modes de coins sont situées dans un intervalle de fréquences attendu par les résultats de la littérature [128, 124, 118]. La stabilité de ces résultats numériques vis-à-vis du maillage utilisé pour les simulations pourrait être étudiée afin de garantir la validité de ceux-ci.

Ainsi, l'applicabilité de la formulation FEM d'analyse modale, basée sur le formalisme de résonance, aux cristaux photoniques métalliques de Drude a été montrée. L'implémentation d'une formulation faible étendue en champ magnétique H permettrait d'améliorer la précision des résultats obtenus pour le cas de polarisation p bien que ceux-ci aient déjà été globalement validés. Il ne fait aucun doute que la méthode est applicable à des cristaux photoniques bidimensionnels de tiges métalliques dont la permittivité relative est modélisée par une somme de résonance de type Drude/Drude-Lorentz telle que présentée par l'expression 3.1.3 et potentiellement de section géométrique quelconque.

Toutes les structures électromagnétiques bipériodiques qui ont été considérées dans cette section possèdent une extension infinie dans l'espace et la méthode ainsi implémentée ne peut pas être appliquée aux systèmes ouverts. C'est donc dans le but d'effectuer l'analyse modale numérique par la FEM de structures électromagnétiques bidimensionnelles ouvertes contenant des matériaux dispersifs et dissipatifs que nous allons effectuer dans la section suivante une étude concernant l'impact des PMLs sur les spectres obtenus par la FEM d'une structure électromagnétique relativement simple.

3.4 Étude spectrale des structures ouvertes: introduction de PMLs dispersives

Afin d'étendre la méthode d'analyse modale numérique aux éléments finis développée précédemment aux systèmes électromagnétiques ouverts et ainsi de pouvoir retrouver les quasi-modes associés à ces systèmes, l'introduction de PMLs est nécessaire afin de simuler la présence de l'espace libre. L'impact des PMLs sur l'analyse spectrale de ces systèmes n'a pas été étudié

en profondeur dans la littérature. Ainsi, dans cette section, une étude simple est menée sur une configuration électromagnétique bidimensionnelle de test contenant des PMLs afin de d'étudier l'impact de celles-ci sur l'étude numérique spectrale aux éléments finis de l'opérateur de Maxwell. Nous ne considérerons pas de matériaux dispersifs (excepté pour les PMLs) afin de ne pas complexifier l'étude. Cette nouvelle étude numérique sera menée seulement pour le cas de polarisation s associée à une formulation FEM en champ électrique associée à une base de discrétisation nodale.

Dans un premier temps, nous allons retrouver la relation de dispersion analytique du système considéré pour ce cas de polarisation s . De cette relation de dispersion analytique, nous déduirons les expressions analytiques des fréquences propres des différents types de modes de la structure (modes à fuites et modes de PMLs). Les fréquences propres du système issues de ces expressions analytiques seront alors vérifiées par comparaison avec celles issues d'une résolution numérique semi-analytique de la relation de dispersion du système dans le plan complexe telle que précédemment effectuée en section 3.2 de ce chapitre pour les cavités bidimensionnelles dispersives. Les spectres analytiques ainsi vérifiés seront comparés à des spectres issus de différentes simulations numériques aux éléments finis pour des structures contenant des PMLs classiques puis des PMLs dispersives en $1/\omega$ afin d'étudier l'impact de l'implémentation de cette dispersion sur les résultats de calcul modal aux éléments finis. Les PMLs dispersives en $1/\omega$ sont celles utilisées en FDTD, qui présente une similitude avec notre cas d'analyse spectrale, car pour ce type de simulations effectuées en domaine temporel, les PMLs sont confrontées à une étendue spectrale large et elles doivent donc absorber à plusieurs fréquences [119]. Nous déduirons de cette implémentation aux éléments finis les différents avantages de l'utilisation de PMLs dispersives pour le calcul modal numérique associé aux structures électromagnétiques ouvertes.

3.4.1 Description de la structure et du problème spectral considérés

La structure étudiée est constituée de 5 cavités linéaires et homogènes, Ω_j , infinies suivant l'axe O_z , de permittivités relatives ϵ_j et de perméabilités relatives μ_j avec $j \in J = \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$. Chaque cavité possède une largeur a_j et une hauteur d .

Les domaines Ω_1 et Ω_5 sont deux PMLs absorbantes suivant la direction x de coefficients d'absorption complexes potentiellement dispersifs. Ainsi les tenseurs de permittivité et perméabilité relatives anisotropes de ces domaines sont donnés par l'expression suivante:

$$\epsilon_1 = \mu_1 = \begin{bmatrix} 1/\eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{bmatrix}, \epsilon_5 = \mu_5 = \begin{bmatrix} 1/\eta_5 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_5 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_5 \end{bmatrix}, \quad (3.4.1)$$

où η_1 est le coefficient d'absorption de la PML, complexe fixé dans le cas non dispersif ($\eta_1 = \alpha_1 + i\beta_1$ avec $\{\alpha, \beta\} \in \mathbb{R}^2$ fixés) ou fonction de la fréquence complexe dans le cas dispersif ($\eta_1 = \frac{\eta'_1}{\omega_n} = (\alpha'_1 + i\beta'_1)/\omega$ toujours avec $\{\alpha', \beta'\} \in \mathbb{R}^2$ fixés). Il en est de même pour $\eta_5 = \alpha_5 + i\beta_5$.

Les domaines Ω_2 et Ω_4 sont constitués de vide et ainsi $\epsilon_2 = \epsilon_4 = \mu_2 = \mu_4 = I_d$. Enfin, le domaine central Ω_3 est constitué d'un matériau homogène non magnétique de permittivité relative $\epsilon_3 = \epsilon_3 I_d$. En utilisant les mêmes notations que définit en section 3.1.1 pour les fonctions caractéristiques spatiales l_{Ω_j} , on définit donc la permittivité relative totale de la structure comme:

$$\epsilon = \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \epsilon_j = \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} \epsilon_{x,j} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{y,j} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{z,j} \end{bmatrix} \quad (3.4.2)$$

où $\epsilon_{x,j}$, $\epsilon_{y,j}$ et $\epsilon_{z,j}$ sont les composantes de chacun des tenseurs ϵ_j , ainsi que la perméabilité relative totale de la structure:

$$\mu = \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \mu_j = \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} \mu_{x,j} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{y,j} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{z,j} \end{bmatrix} \quad (3.4.3)$$

où $\mu_{x,j}$, $\mu_{y,j}$ et $\mu_{z,j}$ sont les composantes de chacun des tenseurs ϵ_j .

Les deux frontières parallèles à l'axe O_y de chacun des domaines Ω_j sont notées $\partial\Omega_{x,(j-1)}$ et $\partial\Omega_{x,j}$ et les deux frontières parallèles à l'axe O_x sont notées $\partial\Omega_{y,0,j}$ et $\partial\Omega_{y,d,j}$. Nous noterons également $\partial\Omega_y = \bigcup_i [\Omega_{y,0,i} \cup \Omega_{y,d,i}]$ et $\partial\Omega_x = \partial\Omega_{x,0} \cup \partial\Omega_{x,5}$. Enfin nous noterons $b_1 = a_1$, $b_2 = a_1 + a_2$, $b_3 = a_1 + a_2 + a_3$ et $b_4 = a_1 + a_2 + a_3 + a_4$, les coordonnées suivant x des interfaces parallèles à l'axe O_y entre chacun des domaines, et $b_0 = 0$, $b_5 = a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5$ les coordonnées suivant y des frontières extérieure des PMLs.

La structure est représentée schématiquement par la figure suivante 3.4.1.

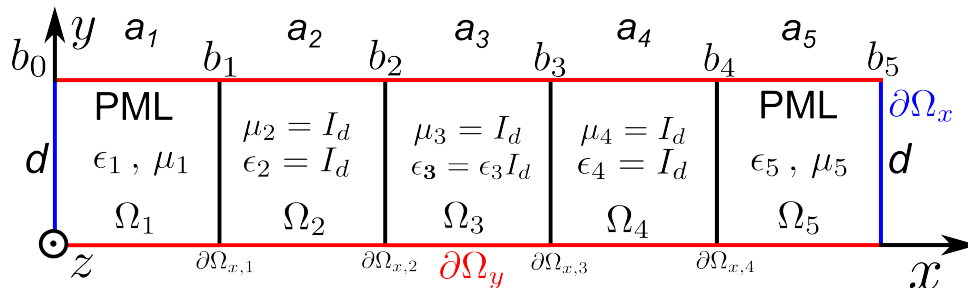


Fig. 3.4.1 – Schéma de la structure considérée pour l'étude spectrale des structures ouvertes.

Comme mentionné en introduction de cette section, nous travaillons en polarisation s avec le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(x, y, z, \omega) = \mathbf{E}(x, y, \omega) = E_z(x, y, \omega) \hat{\mathbf{z}}$ et ceci bien évidemment

toujours en régime fréquentiel. Pour le champ électrique, une condition de Dirichlet est imposée sur les frontières extérieures des PMLs $\partial\Omega_x$ et une condition de Neumann homogène est imposée sur les frontières $\partial\Omega_y$.

Le problème spectral à résoudre s'écrit alors:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{1}{\mu_{y,j}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{\mu_{x,j}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\omega_n^2}{c^2} \epsilon_{z,j} \right] E_z(x, y, \omega_n) = 0 \text{ dans } \Omega_j \text{ avec } j \in J, \\ E_z(0, y, \omega_n) = E_z(b_5, y, \omega_n) = 0 \text{ (Dirichlet sur } \partial\Omega_x), \\ \frac{\partial E_z(x, 0, \omega_n)}{\partial \hat{y}} = \frac{\partial E_z(x, d, \omega_n)}{\partial \hat{y}} = 0 \text{ (Neumann homogène sur } \partial\Omega_y), \\ E_z(b_j^-, y, \omega_n) = E_z(b_j^+, y, \omega_n) \text{ avec } j \in \{1, 2, 3, 4\}, \\ \frac{1}{\mu_{y,j}} \frac{\partial E_z}{\partial x}(b_j^-, y, \omega_n) = \frac{1}{\mu_{y,(j+1)}} \frac{\partial E_z}{\partial x}(b_j^+, y, \omega_n) \text{ avec } j \in \{1, 2, 3, 4\}. \end{array} \right. \quad (3.4.4)$$

3.4.2 Relation de dispersion en polarisation s

Nous recherchons à présent la relation de dispersion de la structure en polarisation s .

Tout comme pour l'étude spectrale analytique de la cavité menée en section 3.2, la méthode de séparation de variables est employée.

$$E_z(x, y, \omega) = \phi_p(x, \omega) \psi_q(y, \omega), \quad (3.4.5)$$

et en injectant 3.4.5 dans 3.4.4, on obtient l'équation différentielle séparable suivante:

$$\frac{\mu_{x,j}}{\mu_{y,j}} \frac{\phi_{p,j}''(x, \omega)}{\phi_{p,j}(x, \omega)} + (\omega_n/c)^2 \epsilon_{z,j} \mu_{x,j} = - \frac{\psi_q''(y, \omega)}{\psi_q(y, \omega)} \text{ avec } j \in J. \quad (3.4.6)$$

Suivant y , la solution s'écrit:

$$\psi_q(y, \omega) = \cos\left(\frac{q\pi}{d}y\right) \text{ avec } q \in \mathbb{N}, \quad (3.4.7)$$

satisfaisant les conditions de Neumann homogène sur $\partial\Omega_y$.

En injectant l'expression 3.4.7 dans 3.4.4, l'équation différentielle à résoudre pour ϕ_p devient :

$$\phi_{p,j}''(x, \omega_n) + \left[\frac{\omega_n^2}{c^2} \epsilon_{z,j} \mu_{y,j} - \frac{q^2 \pi^2}{d^2} \frac{\mu_{y,j}}{\mu_{x,j}} \right] \phi_{p,j}(x, \omega_n) = 0 \text{ avec } j \in J. \quad (3.4.8)$$

On définit alors $\beta_1(\omega_n) = \eta_1 \sqrt{\frac{\omega_n^2}{c^2} - \frac{q^2 \pi^2}{d^2}}$, $\beta_2(\omega_n) = \beta_4(\omega_n) = \beta_0(\omega_n) = \sqrt{\frac{\omega_n^2}{c^2} - \frac{q^2 \pi^2}{d^2}}$,

$\beta_3(\omega_n) = \sqrt{\frac{\omega_n^2}{c^2} \epsilon_3 - \frac{q^2 \pi^2}{d^2}}$ et $\beta_5(\omega_n) = \eta_5 \sqrt{\frac{\omega_n^2}{c^2} - \frac{q^2 \pi^2}{d^2}}$.

L'équation 3.4.8 s'écrit alors:

$$\phi_{p,j}''(x, \omega_n) + \beta_j^2(\omega_n)\phi_{p,j}(x, \omega_n) = 0 \text{ pour } b_{j-1} < x < b_j, j \in J. \quad (3.4.9)$$

En résolvant ces équations différentielles, on peut alors écrire les solutions $\phi_{p,j}$ sous les formes suivantes:

$$\phi_{p,j}(x, \omega_n) = A_{j-1} \cos[\beta_1(\omega_n)x] + B_{j-1} \frac{\mu_{y,j}}{\beta_j(\omega_n)} \sin[\beta_j(\omega_n)x] \text{ pour } b_{j-1} < x < b_j, \text{ avec } j \in J, \quad (3.4.10)$$

où (A_{j-1}, B_{j-1}) sont les valeurs de $(\phi_{p,j}, \phi_{p,j}')$ aux interfaces de coordonnées b_{j-1} selon x .

Les matrices de transfert T_j qui relie $\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}$ à $\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}$ s'écrivent:

$$T_j = \begin{bmatrix} \cos[\beta_j(\omega_n)a_j] & \frac{\mu_{y,j}}{\beta_j(\omega_n)} \sin[\beta_j(\omega_n)a_j] \\ -\frac{\beta_j(\omega_n)}{\mu_{y,j}} \sin[\beta_j(\omega_n)a_j] & \cos[\beta_j(\omega_n)a_j] \end{bmatrix}. \quad (3.4.11)$$

Ainsi, on peut remarquer que la matrice de transfert $T_{\eta_1} = T_2 \cdot T_1$ à travers la première PML du domaine Ω_1 et la couche d'air du domaine Ω_2 s'écrit :

$$T_{\eta_1} = \begin{bmatrix} \cos[\beta_0(\omega_n)(a_1\eta_1 + a_2)] & \frac{\sin[\beta_0(\omega_n)(a_1\eta_1 + a_2)]}{\beta_0(\omega_n)} \\ -\beta_0(\omega_n) \sin[\beta_0(\omega_n)(a_1\eta_1 + a_2)] & \cos[\beta_0(\omega_n)(a_1\eta_1 + a_2)] \end{bmatrix}. \quad (3.4.12)$$

De même pour la matrice de transfert $T_{\eta_5} = T_5 \cdot T_4$ à travers la seconde couche d'air Ω_4 et la dernière PML Ω_5 :

$$T_{\eta_5} = \begin{bmatrix} \cos[\beta_0(\omega_n)(a_5\eta_5 + a_4)] & \frac{\sin[\beta_0(\omega_n)(a_5\eta_5 + a_4)]}{\beta_0(\omega_n)} \\ -\beta_0(\omega_n) \sin[\beta_0(\omega_n)(a_5\eta_5 + a_4)] & \cos[\beta_0(\omega_n)(a_5\eta_5 + a_4)] \end{bmatrix}. \quad (3.4.13)$$

La matrice de transfert totale du système, $T = T_5 \cdot T_4 \cdot T_3 \cdot T_2 \cdot T_1 = T_{\eta_5} \cdot T_3 \cdot T_{\eta_1}$, caractérise le transfert depuis la frontière extérieure de la PML du domaine Ω_1 en $x = b_0 = 0$ vers celle de la frontière extérieure de la PML du domaine Ω_5 en $x = b_5$ et relie donc $\begin{pmatrix} \phi_p(b_0, \omega_n) \\ \phi_p'(b_0, \omega_n) \end{pmatrix}$ à

$\begin{pmatrix} \phi_p(b_5, \omega_n) \\ \phi_p'(b_5, \omega_n) \end{pmatrix}$. Aussi, les conditions de Dirichlet en $x = 0$ et $x = b_5$ imposent $\phi_p(b_0, \omega_n) = \phi_p(b_5, \omega_n) = 0$. On peut donc écrire:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \phi_p'(b_5, \omega_n) \end{pmatrix} = T \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_p'(0, \omega_n) \end{pmatrix}. \quad (3.4.14)$$

La relation de dispersion du système est alors donnée par la condition suivante : $T_{[01]} = 0$ qui garantit l'existence d'une solution pour ϕ_p .

En exprimant explicitement alors cette relation de dispersion $T_{[01]} = 0$:

$$\begin{aligned}
 T_{[01]} &= T_{\eta_5[01]} (T_{\eta_1[00]} T_{3[00]} + T_{\eta_1[01]} T_{3[10]}) + T_{\eta_5[11]} (T_{\eta_1[00]} T_{3[01]} + T_{\eta_1[01]} T_{3[11]}) \\
 &= \frac{1}{\beta_0(\omega_n)} \cos[\beta_3(\omega_n) a_3] (\cos[\beta_0(\omega_n)(a_1 \eta_1 + a_2)] \sin[\beta_0(\omega_n)(a_5 \eta_5 + a_4)] \\
 &\quad + \sin[\beta_0(\omega_n)(a_1 \eta_1 + a_2)] \cos[\beta_0(\omega_n)(a_5 \eta_5 + a_4)]) \\
 &\quad + \frac{1}{\beta_0(\omega_n)} \sin[\beta_3(\omega_n) a_3] \left(\frac{\beta_0(\omega_n)}{\beta_3(\omega_n)} \cos[\beta_0(\omega_n)(a_1 \eta_1 + a_2)] \cos[\beta_0(\omega_n)(a_5 \eta_5 + a_4)] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\beta_3(\omega_n)}{\beta_0(\omega_n)} \sin[\beta_0(\omega_n)(a_1 \eta_1 + a_2)] \sin[\beta_0(\omega_n)(a_5 \eta_5 + a_4)] \right)
 \end{aligned} \tag{3.4.15}$$

nous sommes en mesure de caractériser les fréquences propres de la structure étudiée pour le cas de polarisation s .

3.4.3 Calcul analytique des fréquences propres de la structure

Afin de simplifier le calcul analytique des fréquences propres des modes de la structure, nous nous plaçons dans le cas où $q = 0$ et nous ferons également l'hypothèse que $c = 1$. Ces hypothèses seront toujours vraies jusqu'à la fin de cette étude. Ainsi $\beta_0(\omega_n) = \omega_n$ et $\beta_3(\omega_n) = \sqrt{\epsilon_3} \omega_n$. En définissant $x_1 = \omega_n(a_1 \eta_1 + a_2)$, $x_5 = \omega_n(a_5 \eta_5 + a_4)$ et $x_3 = \sqrt{\epsilon_3} \omega_n a_3$, on peut réécrire la relation de dispersion de l'équation 3.4.15:

$$\begin{aligned}
 \frac{\cos[x_3]}{\omega_n} (\cos[x_1] \sin[x_5] + \sin[x_1] \cos[x_5]) \\
 + \frac{\sin[x_3]}{\omega_n} \left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}} \cos[x_1] \cos[x_5] - \sqrt{\epsilon_3} \sin[x_1] \sin[x_5] \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{3.4.16}$$

3.4.3.1 Fréquences propres des modes à fuite du domaine Ω_3

Afin de caractériser les fréquences propres des quasi-modes du domaine central Ω_3 , nous effectuons une étude asymptotique. Nous choisissons comme coefficients d'absorptions des PMLs $\eta_1 = \eta_5 = 1$ et nous faisons tendre leurs longueurs a_1 et a_5 vers l'infini afin de retrouver une configuration d'espace libre.

En exprimant alors les parties réelles et imaginaires de $\omega_n = \omega'_n + i\omega''_n$ avec $\omega''_n < 0$, on peut s'apercevoir que x_1 et x_5 possèdent des parties imaginaires négatives et donc que quand a_1 et a_5 tendent vers l'infini, les expressions $\cos[x_1]$, $\sin[x_1]$ et $\cos[x_5]$, $\sin[x_5]$ se réduisent aux simples

exponentielles $\exp[ix_1]$ et $\exp[ix_5]$. L'équation 3.4.16 se réécrit alors :

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{\omega_n} \cos[x_3] \left(\frac{\exp[ix_1] \exp[ix_5]}{2} \frac{\exp[ix_5]}{2i} + \frac{\exp[ix_1] \exp[ix_5]}{2i} \frac{\exp[ix_5]}{2} \right) \\
&+ \frac{1}{\omega_n} \sin[x_3] \left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}} \frac{\exp[ix_1] \exp[ix_5]}{2} \frac{\exp[ix_5]}{2} - \sqrt{\epsilon_3} \frac{\exp[ix_1] \exp[ix_5]}{2i} \frac{\exp[ix_5]}{2i} \right) \\
&= \frac{\cos[x_3]}{\omega_n} \left(\frac{\exp[i(x_1 + x_5)]}{2i} \right) + \frac{\sin[x_3]}{\omega_n} \left(\frac{\exp[i(x_1 + x_5)]}{4} [1/\sqrt{\epsilon_3} + \sqrt{\epsilon_3}] \right), \\
0 &= \frac{\exp[i(x_1 + x_5)]}{2\omega_n} \left(-i \cos[x_3] + \frac{\sin[x_3]}{2} [1/\sqrt{\epsilon_3} + \sqrt{\epsilon_3}] \right)
\end{aligned} \tag{3.4.17}$$

et ainsi la relation de dispersion $T_{[01]} = 0$ s'exprime alors sous la forme:

$$\tan[x_3] = \frac{2i}{1/\sqrt{\epsilon_3} + \sqrt{\epsilon_3}} = \frac{2i\sqrt{\epsilon_3}}{1 + \epsilon_3} \tag{3.4.18}$$

soit

$$x_3 = \sqrt{\epsilon_3} \omega_n a_3 = \arctan \left[\frac{2i\sqrt{\epsilon_3}}{1 + \epsilon_3} \right] + k\pi \tag{3.4.19}$$

avec $k \in \mathbb{N}$ et finalement:

$$\begin{aligned}
\omega_n &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_3} a_3} \frac{1}{2i} \ln \left[\frac{1 + i \frac{2i\sqrt{\epsilon_3}}{1 + \epsilon_3}}{1 - i \frac{2i\sqrt{\epsilon_3}}{1 + \epsilon_3}} \right] + \frac{k\pi}{\sqrt{\epsilon_3} a_3} \\
&= \frac{-i}{\sqrt{\epsilon_3} a_3} \ln \left[\left| \frac{1 - \sqrt{\epsilon_3}}{1 + \sqrt{\epsilon_3}} \right| \right] + \frac{k\pi}{\sqrt{\epsilon_3} a_3}, \\
\omega_n &= \frac{-i}{\sqrt{\epsilon_3} a_3} \ln [|r|] + \frac{k\pi}{\sqrt{\epsilon_3} a_3}
\end{aligned} \tag{3.4.20}$$

où $r = \frac{1 - \sqrt{\epsilon_3}}{1 + \sqrt{\epsilon_3}}$ est le coefficient de réflexion à l'interface air/ Ω_3 . Ces fréquences propres des modes à fuites correspondent aux pôles de la matrice de diffusion d'une monocouche constituée d'un matériau non-magnétique, de permittivité relative ϵ_3 et d'épaisseur a_3 . Il existe donc une infinité de modes à fuites. Leurs fréquences propres possèdent la même partie imaginaire qui est proportionnelle au logarithme népérien du module du coefficient de réflexion r . Dans le plan complexe, les fréquences propres des modes à fuites sont toutes alignées sur une droite horizontale de partie imaginaire négative $\frac{-i}{\sqrt{\epsilon_3} a_3}$ et sont régulièrement espacées, séparées par une distance $\frac{\pi}{\sqrt{\epsilon_3} a_3}$.

3.4.3.2 Fréquences propres des modes de PMLs des domaines Ω_1 et Ω_5 .

Nous allons à présent nous intéresser aux modes de PMLs du domaine Ω_1 . Pour ce faire, nous allons utiliser une nouvelle approximation asymptotique. Tout d'abord, nous allons faire tendre la longueur a_3 du domaine Ω_3 vers l'infini. En procédant ainsi, aucun mode à fuite ne sera

présent au sein de la structure. On peut d'ailleurs constater que dans l'expression 3.4.20 des fréquences propres des modes à fuites du domaine Ω_3 , lorsque a_3 tend vers l'infini, celle-ci se réduit à la seule fréquence nulle.

En conduisant le même raisonnement que précédemment les expressions $\cos[x_3]$, $\sin[x_3]$ se réduisent aux simples exponentielles $\exp[ix_3]$ (car la partie imaginaire de x_3 est négative) et la relation de dispersion 3.4.16 se réécrit alors :

$$0 = \frac{\exp[ix_3]}{2\omega_n} (\cos[x_1] \sin[x_5] + \sin[x_1] \cos[x_5]) + \frac{\exp[ix_3]}{2i\omega_n} \left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}} \cos[x_1] \cos[x_5] - \sqrt{\epsilon_3} \sin[x_1] \sin[x_5] \right), \quad (3.4.21)$$

qui peut s'exprimer sous la forme suivante:

$$\cos[x_1] \sin[x_5] + \sin[x_1] \cos[x_5] = i \left(\frac{\cos[x_1] \cos[x_5]}{\sqrt{\epsilon_3}} - \sqrt{\epsilon_3} \sin[x_1] \sin[x_5] \right). \quad (3.4.22)$$

Comme nous nous intéressons aux modes de PML du domaine Ω_1 , nous faisons maintenant tendre la longueur a_5 de la PML du domaine Ω_5 vers l'infini et fixons η_5 à 1, afin de s'assurer de l'absence de mode de PML pour ce domaine qui est maintenant équivalent à l'espace libre. Le même raisonnement que précédemment appliqué aux expressions de $\cos[x_5]$ et $\sin[x_5]$, lorsque $\eta_5 = 1$ et a_5 tend vers l'infini, conduit à la simplification suivante de l'équation 3.4.22:

$$\cos[x_1] \frac{\exp[ix_5]}{2i} + \sin[x_1] \frac{\exp[ix_5]}{2} = i \left(\frac{\cos[x_1] \exp[ix_5]/2}{\sqrt{\epsilon_3}} - \sqrt{\epsilon_3} \sin[x_1] \frac{\exp[ix_5]}{2i} \right), \quad (3.4.23)$$

qui devient en simplifiant par $\exp[ix_5]/2$:

$$\sin[x_1] - i \cos[x_1] = \frac{i \cos[x_1]}{\sqrt{\epsilon_3}} - \sqrt{\epsilon_3} \sin[x_1], \quad (3.4.24)$$

soit

$$\tan[x_1] = \frac{i}{\sqrt{\epsilon_3}}. \quad (3.4.25)$$

On obtient alors l'expression des fréquences propres des modes associés à la PML du domaine Ω_1 :

$$x_1 = \omega_n(a_1\eta_1 + a_2) = \arctan \left[\frac{i}{\sqrt{\epsilon_3}} \right] + k\pi \quad (3.4.26)$$

avec $k \in \mathbb{N}$. À partir de ce point, il convient alors de distinguer les deux types de PMLs étudiées (dispersives ou non).

PML non-dispersive: Dans ce cas, $\eta_1 = \alpha_1 + i\beta_1$ avec $\{\alpha, \beta\} \in \mathbb{R}^2$ fixés et l'expression 3.4.26 devient:

$$\begin{aligned}\omega_n &= \frac{-i \ln[|r|]}{2[a_1(\alpha_1 + i\beta_1) + a_2]} + \frac{k\pi}{a_1(\alpha_1 + i\beta_1) + a_2} \\ \omega_n &= \left[\frac{-i \ln[|r|]}{2} + k\pi \right] \left[\frac{a_1\alpha_1 + a_2 - ia_1\beta_1}{(a_1\alpha_1 + a_2)^2 + a_1^2\beta_1^2} \right], k \in \mathbb{N}.s\end{aligned}\quad (3.4.27)$$

De l'expression 3.4.27, nous déduisons qu'il existe une infinité de modes de PML pour le domaine Ω_1 . Leurs fréquences propres sont régulièrement espacées sur une droite du plan complexe, de coefficient directeur $\frac{-a_1\beta_1}{a_1\alpha_1 + a_2}$. On peut notamment constater que si $a_2 \ll a_1$, ce coefficient directeur devient $-\beta_1/\alpha_1$ et ainsi l'angle entre l'axe réel et la droite formée par les fréquences propres de la PML n'est autre que l'opposé de l'argument du coefficient de PML. Si on choisit ce coefficient de telle façon que cet argument soit positif, la pente de la droite de modes de PML est négative et ainsi plus la partie réelle (positive) de la fréquence propre du mode de PML est grande, plus sa partie imaginaire (négative) est faible et plus le mode est absorbé rapidement. Ainsi ce type de PMLs est très efficace à haute fréquence car elles sont fortement absorbantes tandis que leur efficacité est limitée à basse fréquence. Cet alignement de toutes les fréquences propres d'une PML classique sur une droite du plan complexe a déjà été observé dans [62]. On peut d'ailleurs remarquer dans cet article que cette droite forme un angle avec l'axe réel du plan complexe environ égal à l'opposé de l'argument du coefficient d'absorption de la PML choisie. Cet alignement de modes discrets le long d'une droite correspond à l'effet d'une PML en tant que transformation complexe de l'espace libre. Le spectre continu de l'espace libre correspond en effet à l'axe réel. En introduisant une transformation complexe de cet espace, ce spectre subit une rotation autour de l'origine dans le plan complexe. Le spectre est alors continu et correspond à une droite dans le plan complexe. Puis en tronquant la PML, ce spectre continu est discrétisé et son spectre correspond alors à l'alignement de modes discrets dont les fréquences sont données par l'expression 3.4.27.

PML dispersive: Dans ce cas, $\eta_1 = \frac{\eta'_1}{\omega_n} = \frac{\alpha'_1 + i\beta'_1}{\omega_n}$ avec $\{\alpha', \beta'\} \in \mathbb{R}^2$ fixés et l'expression 3.4.26 devient alors:

$$\omega_n = -\frac{i}{2a_2} \ln[|r|] + \frac{k\pi}{a_2} - \frac{a_1(\alpha'_1 + i\beta'_1)}{a_2}, k \in \mathbb{N}. \quad (3.4.28)$$

Cette nouvelle expression des fréquences propres des modes de PML dispersive du domaine Ω_1 nous montre qu'il existe toujours une infinité de modes de PML mais cette fois-ci leurs fréquences propres sont régulièrement espacées sur une droite horizontale du plan complexe de partie imaginaire $-\frac{\ln[|r|]/2 + a_1\beta'_1}{a_2}$. Ainsi, contrairement au cas des PMLs non-dispersives, l'absorption est la même quelle que soit la partie réelle de la fréquence propre du mode de PML considéré. Ce type de PML absorbe donc de la même façon l'énergie rayonnée dans leur direction à toutes les fréquences. Cet alignement de modes discret le long d'une droite horizontale, correspond à une autre transformation complexe du spectre de l'espace libre qui n'est plus

associé à une rotation mais une à translation dans le plan complexe.

Enfin, les développements effectués pour le calcul des fréquences propres des modes de PML (dispersives ou non) du domaine Ω_1 sont valables pour le calcul de celles du domaine Ω_5 . Il suffit de remplacer les indices 1 par 5 et 2 par 4 dans les expressions 3.4.27 et 3.4.28.

3.4.3.3 Illustration numérique: confirmation des expressions analytiques des modes de la structure étudiée

Dans cette section, les fréquences propres de la structure sont déterminées de deux façons différentes pour le cas de polarisation s considéré et pour $q = 0$:

- une résolution numérique de l'équation transcendante de dispersion 3.4.16 par un algorithme de recherche de zéros dans le plan complexe du module de la fonction associée,
- les expressions analytiques des modes à fuites et des modes de PMLs dispersives ou non données par les expressions 3.4.20, 3.4.27 et 3.4.28.

PMLs non-dispersives: La figure 3.4.2 présente le résultat de cette comparaison pour des PMLs non dispersives pour $\text{Re}[\omega]$ variant entre 0 et 5 et $\text{Im}[\omega]$ entre -3 et 0 avec les valeurs numériques suivantes pour les valeurs de coefficient d'absorption des PMLs et de longueurs de cavités (d n'est pas fixé car nous nous plaçons dans le cas $q = 0$): $a_1 = 15$, $a_2 = 3$, $a_3 = 5$, $a_4 = 6$, $a_5 = 12$, $\eta_1 = \exp[i\pi/6]$, $\eta_5 = \exp[i\pi/8]$ et $\epsilon_3 = 2$.

Les fréquences propres des modes obtenues semi-analytiquement par résolution numérique de l'équation 3.4.16 sont représentées par des croix noires.

Les fréquences propres des modes à fuites du domaine Ω_3 données par l'expression analytique 3.4.20 sont représentées par des cercles bleus.

Les fréquences propres des modes de PML du domaine Ω_1 données par l'expression analytique 3.4.27 sont représentées par des cercles verts.

Les fréquences propres des modes de PML du domaine Ω_5 données par l'expression analytique 3.4.27 (aux indices près) sont représentées par des cercles rouges.

On constate ainsi sur cette figure la validité des expressions analytiques dérivées pour les fréquences propres des différents types de modes de la structure considérée avec des PMLs non dispersives. On constate également que pour révéler tous les modes à fuites, le spectre de chaque PML doit provoquer une rotation du spectre continu suffisamment importante tel que souligné dans [62]. Sur la figure 3.4.2, on peut par exemple observer que les premiers modes à fuites à basse fréquence de la structure n'ont pas été révélés par les PMLs.

PMLs dispersives: La figure 3.4.3 présente maintenant le résultat de cette comparaison pour des PMLs dispersives toujours pour $\text{Re}[\omega]$ variant entre 0 et 5 et $\text{Im}[\omega]$ entre -3 et 0,

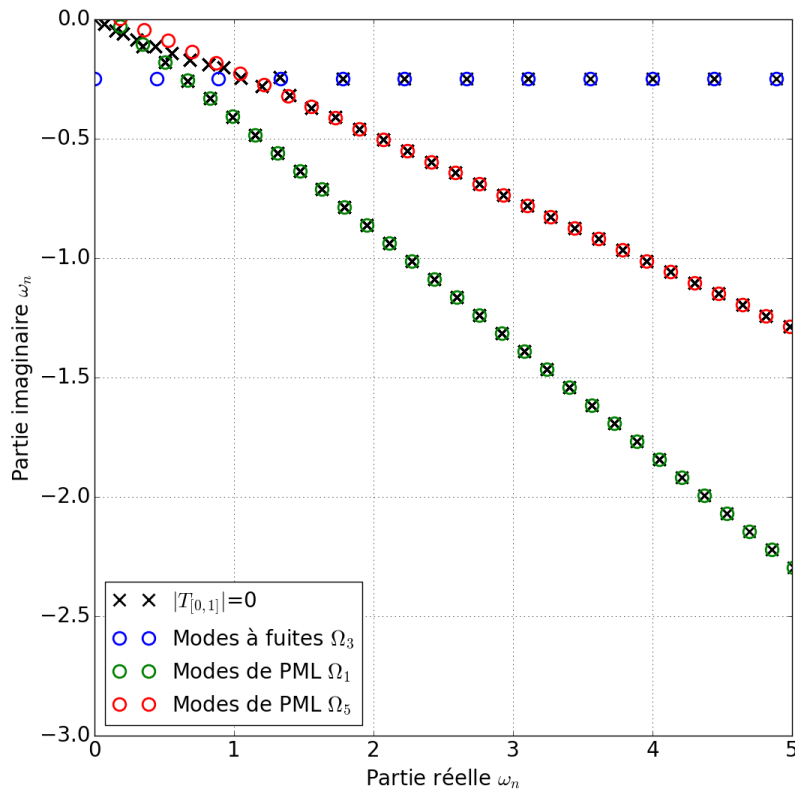


Fig. 3.4.2 – Comparaison des fréquences propres des modes par résolution semi-analytique de l'équation 3.4.16 (croix noires) aux expressions analytiques des modes de la structure considérée données par les expressions des modes à fuites 3.4.20 (cercles bleus) et des modes de PMLs non dispersives 3.4.27 (cercles verts et rouges).

avec les valeurs numériques suivantes pour les valeurs de coefficient d'absorption des PMLs et de longueurs de cavités (d n'est toujours pas fixé car nous nous plaçons dans le cas $q = 0$): $a_1 = 15$, $a_2 = 3$, $a_3 = 5$, $a_4 = 6$, $a_5 = 12$, $\eta'_1 = \exp[i\pi/6]$, $\eta'_5 = \exp[i\pi/8]$ et $\epsilon_3 = 2$. Ainsi, les longueurs de cavités et les coefficients d'absorption fixés des PMLs η'_1 et η'_5 ne changent pas par rapport au cas non dispersif (η_1 et η_5) étudié au paragraphe précédent.

Les fréquences propres des modes obtenues semi-analytiquement par résolution numérique de l'équation 3.4.16 sont représentées par des croix noires.

Les fréquences propres des modes à fuites du domaine Ω_3 données par l'expression analytique 3.4.20 sont représentées par des cercles bleus.

Les fréquences propres des modes de PML du domaine Ω_1 données par l'expression analytique 3.4.28 sont représentées par des cercles verts.

Les fréquences propres des modes de PML du domaine Ω_5 données par l'expression analytique 3.4.28 (aux indices près) sont représentées par des cercles rouges.

On peut constater que tous les modes à fuites de la structure sont révélés par ce type de PMLs, y compris à basse fréquence. Ceci est dû au fait que leurs fréquences propres possèdent une partie imaginaire plus forte que celle des fréquences propres des modes à fuites. On constate également la validité des expressions analytiques dérivées pour les fréquences propres des

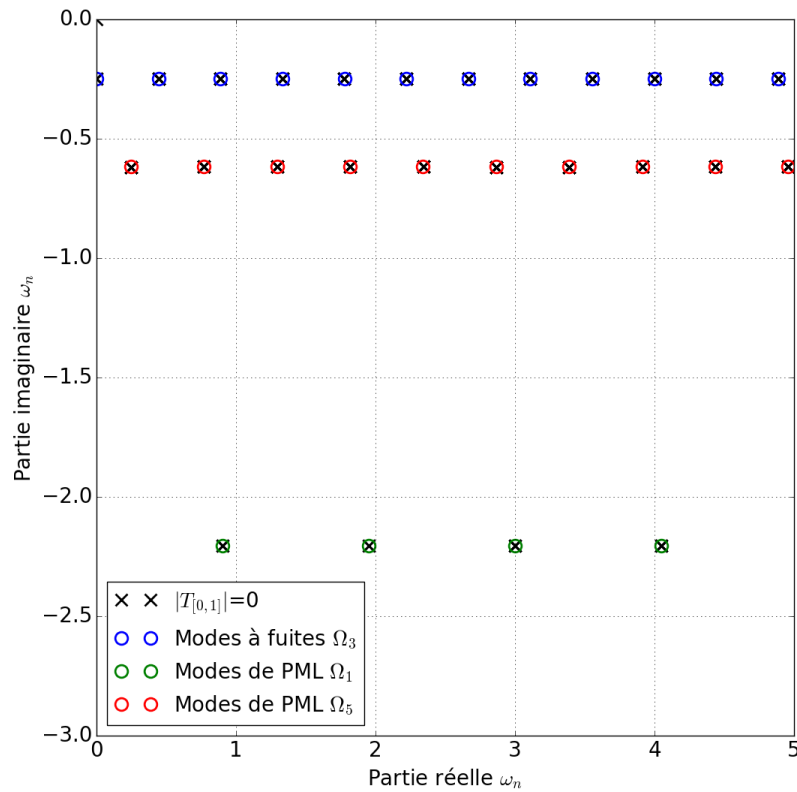


Fig. 3.4.3 – Comparaison des fréquences propres des modes par résolution semi-analytique de l'équation 3.4.16 (croix noires) aux expressions analytiques des modes de la structure considérée données par les expressions des modes à fuites 3.4.20 (cercles bleus) et des modes de PMLs dispersives 3.4.28 (cercles verts et rouges).

différents types de modes de la structure considérée avec PMLs non dispersives.

3.4.4 Implémentation FEM de la structure et études modales numériques des PMLs

La structure a ensuite été modélisée à l'aide de la FEM. Afin de retrouver seulement les modes pour $q = 0$, la modélisation a été effectuée en une dimension suivant l'axe O_x ($d = 0$).

3.4.4.1 Cas de PMLs non dispersives

Dans le cas non dispersif, en prenant comme base de discrétisation des éléments nodaux, les modes de la structure pour la polarisation s ont été retrouvés à l'aide de la formulation faible simplifiée donnée par l'équation 3.1.33 sans champs auxiliaires (aucun élément dispersif étant présent au sein de la structure). Nous avons également choisi de prendre deux PMLs identiques à gauche et à droite afin de simplifier les résultats de l'étude. Les valeurs numériques suivantes ont été choisies pour les paramètres de la structure: $a_1 = a_5 = 8$, $a_2 = a_4 = 1$, $a_3 = 2$, $\eta_1 = \eta_5 = \exp[i\pi/8]$ et $\epsilon_3 = 2$. La figure 3.4.4 présente la comparaison du spectre issu des résultats

FEM avec celui issu des expressions analytiques dérivées précédemment (c.f. 3.4.20 et 3.4.27). Sur cette figure, un accord global est observé à basse fréquence entre les fréquences propres

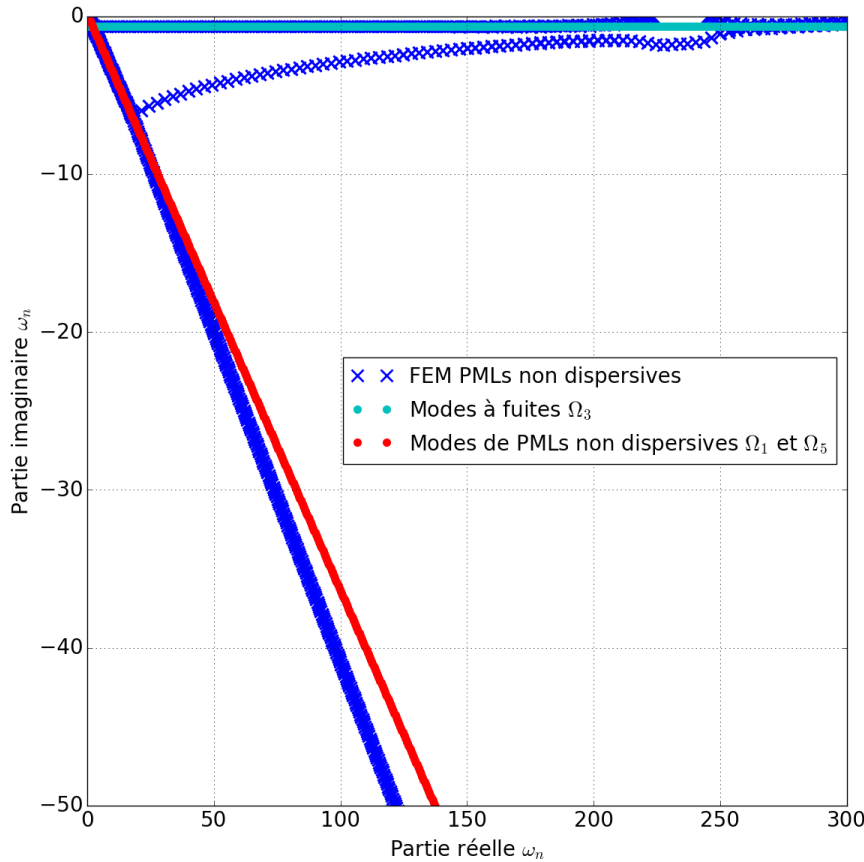


Fig. 3.4.4 – Superposition des fréquences propres obtenues par la FEM (croix) et par les expressions analytiques 3.4.20 et 3.4.27 (points).

issues des résultats FEM et leurs expressions analytiques. Une divergence, entre la branche des fréquences propres des modes de PMLs calculés analytiquement et celle des modes obtenus par la FEM, est observée pour les fréquences de partie réelle supérieure à $\simeq 17$. Pour les résultats numériques issus de la FEM, la branche de modes de PML se scinde en deux parties, une branche dont les fréquences propres des modes sont toujours alignés sur une droite qui diverge de la droite de fréquences propres calculées analytiquement et une qui rejoint l'axe réel. En observant alors les différents zooms sur le spectre présenté par la figure suivante 3.4.4, on peut constater que, pour les fréquences possédant une partie réelle inférieure à la partie réelle de ce point de divergence, la précision obtenue sur les fréquences propres des modes à fuites est meilleure que celle des fréquences propres possédants une partie réelle supérieure. La précision d'évaluation des modes à fuites se dégrade alors progressivement en montant en fréquence. En accord avec la résolution semi-analytique de l'équation de dispersion 3.4.16, pour les PMLs non dispersives, effectuée en section 3.4.3.3, on peut également observer sur la figure 3.4.5 que tous les modes à fuites de la cavité centrale ne sont pas révélés numériquement par la FEM avec les PMLs choisies (Ce sont les modes situés à gauche de la branche de modes de PML). Il conviendrait de choisir des PMLs d'argument plus fort afin de pouvoir les observer [62].

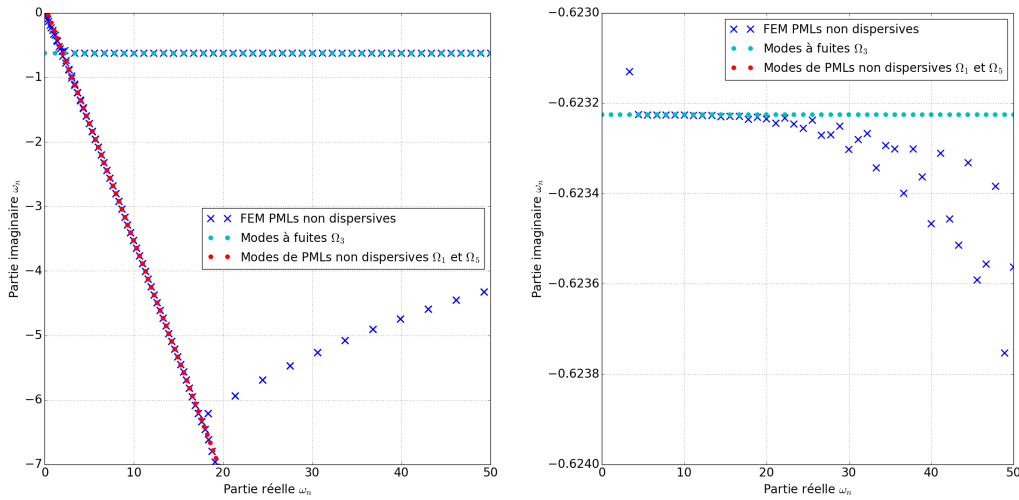


Fig. 3.4.5 – Superposition des fréquences propres obtenues par la FEM (croix) et par les expressions analytiques 3.4.20 et 3.4.27 (points).

Dès lors, nous avons étudié l'impact du maillage de la cellule de calcul et affiner celui-ci, passant d'une moyenne de cent nœuds par unité de longueur à cent-cinquante. Le problème étant quadratique et la longueur totale du domaine étant de vingt unités de longueurs, la taille du système total à résoudre est donc passée de 3999 degrés de libertés à 5999. Nous avons alors pu remarquer que la partie réelle de la fréquence de ce point de divergence de modes était plus haute. Les résultats de ces simulations sont présentés par la figure suivante 3.4.6. Ainsi, l'apparition de cette branche de modes parasites est liée à la discrétisation du problème considéré. En observant la précision des fréquences propres des modes à fuites calculés numériquement par comparaison avec les résultats des expressions analytiques, on peut observer que celle-ci est globalement meilleure sur tout le spectre en raffinant le maillage (*c.f.* 3.4.6, en bas à gauche), mais qu'elle peut être localement dégradée (par exemple pour des fréquences réelles supérieures à 25 sur la figure 3.4.6, en bas à droite). Ces difficultés numériques sont probablement liées au concept de pseudo-spectre [17] associé aux problèmes aux valeurs propres numériques considérés. Nous n'entrerons néanmoins pas dans le détail de ces considérations ici.

Intéressons nous à présent aux vecteurs propres associés aux différents modes obtenus par la FEM. La figure suivante 3.4.7 présente le champ électrique propre des 100 premiers modes de la structure (quels qu'ils soient) calculés par la FEM. Sur cette figure, on peut observer que les différents champs propres se comportent différemment dans les PMLs. Chacun possède en effet une constante de décroissance et une périodicité spatiale qui lui est propre. On peut d'ailleurs remarquer que plus cette périodicité spatiale est faible, bien évidemment associée à une fréquence temporelle plus forte, plus la décroissance de champ dans la PML est rapide spatialement (et donc temporellement). Ceci est en accord avec le constat émis précédemment 3.4.3.2 en observant l'expression analytique des fréquences propres des PMLs non dispersives, à savoir que ce type de PML est plus efficace (absorbante) à haute fréquence (plus la partie

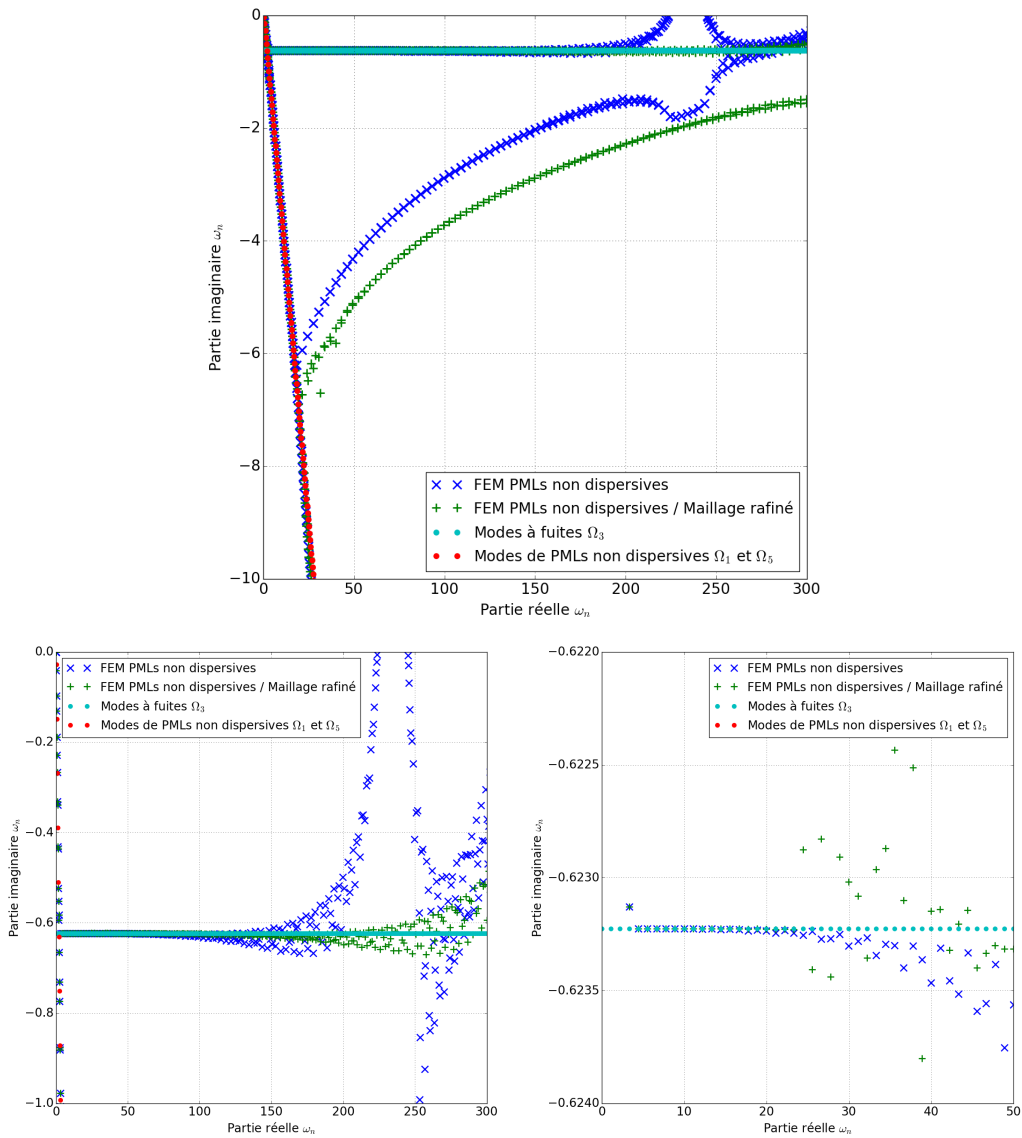


Fig. 3.4.6 – Superposition des fréquences propres obtenues par la FEM pour deux maillages différents (croix et plus) et par les expressions analytiques 3.4.20 et 3.4.27 (points). Spectre total en haut, deux zooms autour des fréquences propres des modes à fuites en bas.

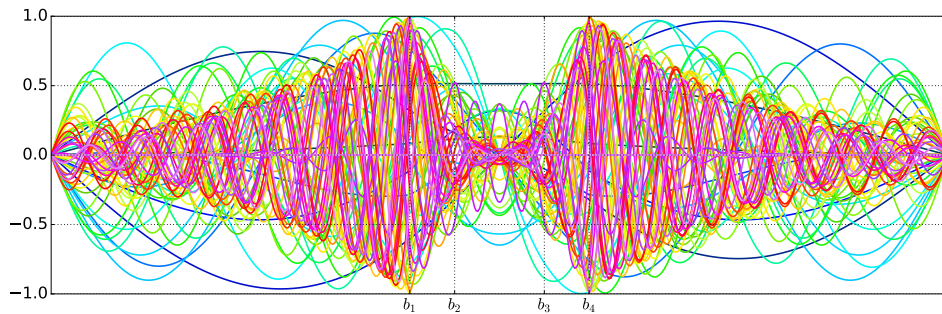


Fig. 3.4.7 – Superposition des champs électriques propres associés aux cent premiers modes propres calculés par la FEM dans le cas de la structure considérée sans PMLs dispersives. La valeur du champ électrique propre E_z est représentée en ordonnée et la coordonnée spatiale x en abscisse.

réelle du mode de PML est forte plus le module de sa partie imaginaire est fort).

3.4.4.2 Cas de PMLs dispersives

Afin de prendre en compte la dispersion en $1/\omega_n$ présente au sein des PMLs, il est nécessaire de dériver une formulation faible adaptée au modèle de dispersion choisi pour celles-ci. Pour rappel, le problème spectral à résoudre s'écrit:

$$\nabla \times \boldsymbol{\mu}^{-1} \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \boldsymbol{\epsilon} \mathbf{E}. \quad (3.4.29)$$

En polarisation s , $\mathbf{E}(x, y, \omega) = E_z(x, y, \omega) \hat{\mathbf{z}}$, et le problème spectral se réécrit de la façon suivante:

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) 1/\mu_{y,j} \frac{\partial E_z}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) 1/\mu_{x,j} \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \epsilon_{z,j} E_z \\ \Leftrightarrow & -\frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) 1/\mu_{y,j} \frac{\partial E_z}{\partial x} \right] - \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) 1/\mu_{x,j} \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_j l_{\Omega_j}(\mathbf{r}) \epsilon_{z,j} E_z \\ \Leftrightarrow & -\frac{\partial}{\partial x} \left(\left[l_{\Omega_{1,5}} \left(\frac{\omega}{\alpha' + i\beta'} \right) + l_{\Omega_{2,3,4}} \right] \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) - \left(l_{\Omega_{1,5}} \frac{\alpha' + i\beta'}{\omega} + l_{\Omega_{2,3,4}} \right) \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} \\ & = \frac{\omega^2}{c^2} \left(l_{\Omega_{1,5}} \frac{\alpha' + i\beta'}{\omega} + l_{\Omega_{2,4}} + l_{\Omega_3} \epsilon_3 \right) E_z \end{aligned} \quad (3.4.30)$$

En notant que $\frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} = -\frac{q^2 \pi^2}{d^2} E_z$, et en se plaçant dans le cas où $q = 0$, l'équation 3.4.30 peut être réécrite:

$$\frac{\omega^2}{c^2} \left(l_{\Omega_{1,5}} \frac{\alpha' + i\beta'}{\omega} + l_{\Omega_{2,4}} + l_{\Omega_3} \epsilon_3 \right) E_z + \frac{\partial}{\partial x} \left(\left[l_{\Omega_{1,5}} \left(\frac{\omega}{\alpha' + i\beta'} \right) + l_{\Omega_{2,3,4}} \right] \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) = 0. \quad (3.4.31)$$

Le résidu suivant est obtenu en multipliant scalairement l'équation 3.4.31 par le complexe conjugué de la fonction poids E'_z et en intégrant l'expression obtenue sur le domaine total Ω :

$$\begin{aligned} R = \int_{\Omega} d\Omega \quad & \omega^2 \left[\frac{l_{\Omega_{2,4}} + l_{\Omega_3} \epsilon_3}{c^2} \right] E_z \cdot \overline{E'_z} \\ & + \omega \left[\frac{(\alpha' + i\beta') l_{\Omega_{1,5}}}{c^2} \right] E_z \cdot \overline{E'_z} \\ & + \omega \left[\frac{1}{\alpha' + i\beta'} \frac{\partial}{\partial x} \left(l_{\Omega_{1,5}} \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \right] \cdot \overline{E'_z} \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(l_{\Omega_{2,3,4}} \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \cdot \overline{E'_z}. \end{aligned} \quad (3.4.32)$$

Puis, en intégrant par partie l'expression obtenue 3.4.32 et en utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky, ce résidu devient:

$$\begin{aligned}
R = \int_{\Omega} d\Omega \quad & \omega^2 \left[\frac{l_{\Omega_{2,4}} + l_3 \epsilon_3}{c^2} \right] E_z \cdot \overline{E'_z} \\
& + \omega \left[\frac{(\alpha' + i\beta') l_{\Omega_{1,5}}}{c^2} \right] E_z \cdot \overline{E'_z} \\
& - \omega \frac{l_{\Omega_{1,5}}}{\alpha' + i\beta'} \frac{\partial E_z}{\partial x} \cdot \frac{\partial \overline{E'_z}}{\partial x} \\
& - l_{\Omega_{2,3,4}} \frac{\partial E_z}{\partial x} \cdot \frac{\partial \overline{E'_z}}{\partial x} \\
+ \int_{\partial\Omega} dS \quad & \omega \frac{l_{\Omega_{1,5}}}{\alpha' + i\beta'} \frac{\partial E_z}{\partial x} \cdot \overline{E'_z} \\
& + l_{\Omega_{2,3,4}} \frac{\partial E_z}{\partial x} \cdot \overline{E'_z},
\end{aligned} \tag{3.4.33}$$

et la formulation faible associée au problème est alors donnée par l'équation $R = 0$ une fois que les conditions de bord de type Dirichlet ont été imposées. Les éléments de base choisis pour la discrétisation sont toujours des éléments nodaux et la structure est alors modélisée en une dimension afin de ne retrouver les modes que pour $q = 0$. Les mêmes valeurs numériques que dans le cas sans dispersion pour les longueurs de cavités ont alors été choisies afin de pouvoir effectuer une comparaison des résultats obtenus par la FEM pour les deux types de PMLs. Pour rappel, $a_1 = a_5 = 8$, $a_2 = a_4 = 1$, $a_3 = 2$ et $\epsilon_3 = 2$. Les coefficients d'absorption des PMLs ont quant à eux été fixés à $\eta'_1 = \eta'_5 = \exp[i\pi/8]$.

La figure 3.4.8 présente la comparaison du spectre issu des résultats FEM avec celui issu des expressions analytiques dérivées précédemment (*c.f.* 3.4.20 et 3.4.28) pour cette structure à PMLs dispersives. Sur cette figure 3.4.8, tout comme dans le cas de la structure à PMLs non dispersives, un accord global est observé à basse fréquence entre les deux résultats. Néanmoins, malgré le maillage employé qui est le même que celui de la simulation qui a conduit aux spectres présentés par les figures 3.4.4 et 3.4.5, la précision d'évaluation des fréquences propres des modes de cavités et de PML semble s'être nettement dégradée par rapport au cas non dispersif. De plus, sur la figure 3.4.8, des divergences surviennent toujours entre les branches des fréquences propres des modes obtenues par la FEM et celles obtenues analytiquement.

Afin de savoir si le maillage impacte les résultats FEM, une nouvelle simulation a alors été effectuée pour la même structure avec un maillage raffiné. Les résultats de cette simulation comparés aux résultats de la simulation précédente sont présentés par la figure suivante 3.4.9. En observant cette figure, on constate que le résultat est globalement meilleur pour les hautes fréquences. Néanmoins, en observant le zoom sur les fréquences propres des modes à fuites, on constate que la précision d'évaluation de ces modes n'est pas améliorée pour les basses fréquences.

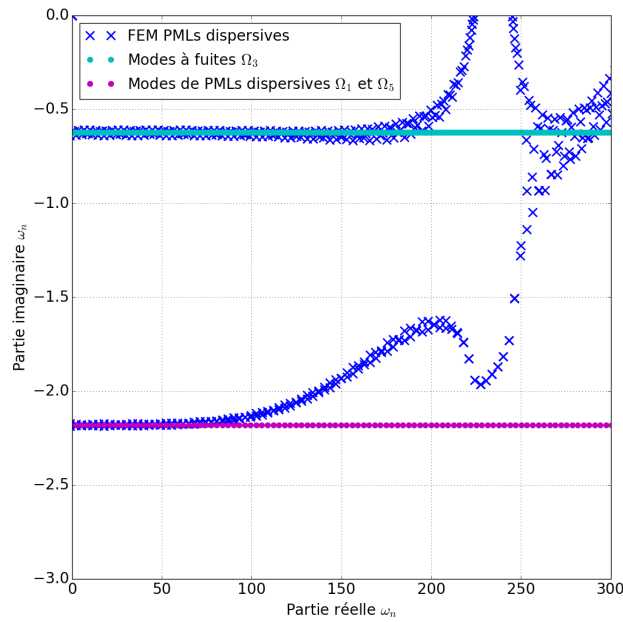


Fig. 3.4.8 – Superposition des fréquences propres obtenues par la FEM (croix) et par les expressions analytiques 3.4.20 et 3.4.28 (points).

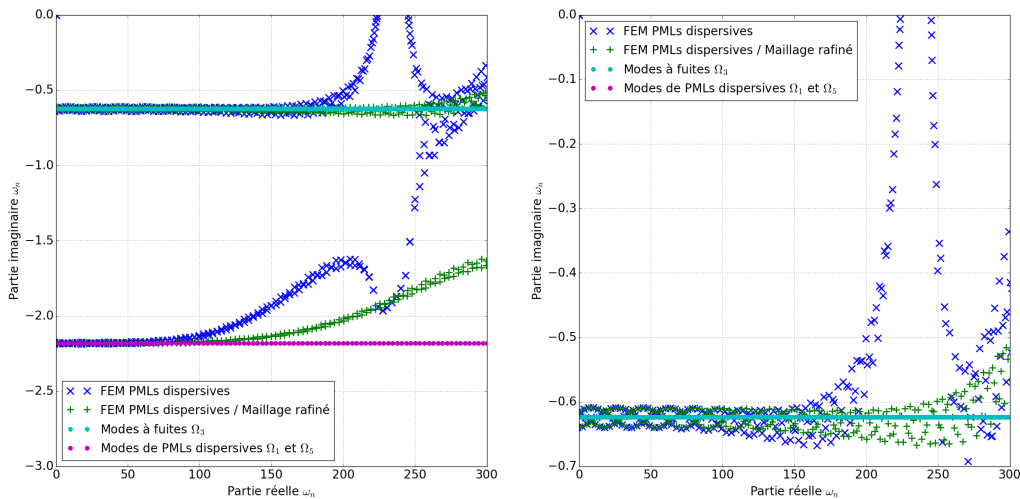


Fig. 3.4.9 – Superposition des fréquences propres obtenues par la FEM (croix et plus) et par les expressions analytiques 3.4.20 et 3.4.28 (points). Spectre total à gauche et zoom sur les fréquences propres des modes à fuites à droite.

Se pose alors la question de l'effet du coefficient d'absorption $\eta' = \alpha' + i\beta'$ choisi pour les PMLs dispersives. Nous avons alors effectué deux autres simulations pour la même structure, avec le même maillage raffiné que précédemment, mais avec des coefficients d'absorption égaux à $\eta'_1 = \eta'_5 = 2 \exp[i\pi/8]$ puis $\eta'_1 = \eta'_5 = 5 \exp[i\pi/8]$. Les spectres obtenus ont alors été comparés à ceux de la simulation précédente où $\eta'_1 = \eta'_5 = \exp[i\pi/8]$ et également aux résultats de la simulation effectuée dans le cas de PMLs non dispersives de la sous-section 3.4.4.1 avec le même maillage raffiné. Pour rappel, dans ce cas avec PMLs non dispersives, les mêmes dimensions de structure et un coefficient d'absorption dans les PMLs égal à $\eta_1 = \eta_5 = \exp[i\pi/8]$ avaient été choisis. La comparaison de tous ces spectres ainsi que les spectres issus des expressions

analytiques 3.4.20,3.4.27 et 3.4.28 est présentée par la figure suivante 3.4.10. Cette figure, bien

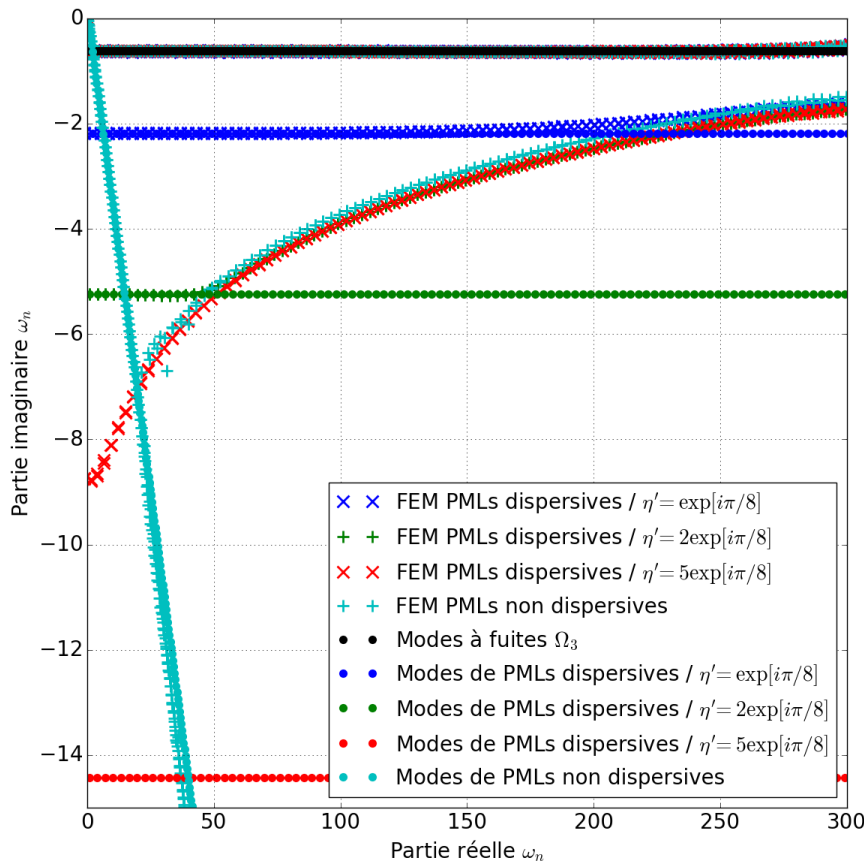


Fig. 3.4.10 – Superposition des fréquences propres obtenues par la FEM pour les PMLs non dispersives, pour les PMLs dispersives avec trois coefficients d'absorption différents et par les expressions analytiques 3.4.20,3.4.27 et 3.4.28 (points).

que difficile à lire, est riche en informations. Tout d'abord, en observant les fréquences propres des modes de PMLs dispersives calculées analytiquement, repérées par des points magenta, verts et rouges, on observe que plus le module de η'_1 et η'_5 est grand, plus la partie imaginaire de la droite formée par les fréquences propres des modes de PMLs dispersives possède un module fort et donc que les PMLs sont plus absorbantes. On observe que les fréquences propres des modes associées à ces PMLs dispersives, calculées par la FEM (croix magenta et rouges et plus verts), ne sont néanmoins pas toujours alignées sur ces droites horizontales. Dans le cas où $\eta'_1 = \eta'_5 = \exp[i\pi/8]$, les fréquences propres des modes de PMLs dispersives calculées par la FEM (croix magenta) s'alignent sur cette droite (points magenta) jusqu'à une fréquence réelle relativement haute, puis dévient de celle-ci pour rejoindre le spectre réel et ceci de la même façon que la branche de fréquences propres des modes "parasites" de PMLs non dispersives calculées par la FEM (plus cyan) dans la section précédente 3.4.4.1. Pour $\eta'_1 = \eta'_5 = 2\exp[i\pi/8]$, ce constat est toujours valide, mais les fréquences propres des modes calculées par la FEM (plus verts) dévient plus tôt de la droite de fréquences propres issue du calcul analytique (points verts) et rejoint alors l'axe réel toujours en suivant la branche de modes parasites du cas des PMLs non dispersives (croix cyan). Enfin, pour $\eta'_1 = \eta'_5 = 5\exp[i\pi/8]$, les fréquences propres des

modes de PMLs dispersives calculées par la FEM (croix rouges) ne s'alignent plus du tout sur la droite de fréquences propres analytiques (points rouges) et rejoignent directement l'axe réel en suivant la branche de fréquences propres de modes parasites du cas des PMLs non dispersives. Ainsi, ces branches de modes parasites présentes dans toutes les simulations FEM effectuées constituent une limite numérique liée au maillage. En effet, nous travaillons avec le même maillage dans tous les cas et nous avons vu dans la section précédente que la position dans le plan complexe de cette branche parasite dépendait de celui-ci. Ainsi, pour un maillage donné, les modes de fréquences complexes situées dans le demi-plan complexe inférieur à cette branche sont mal évalués ou ne sont calculés par la FEM.

Évaluons à présent la précision des différentes fréquences propres des modes à fuites de la cavité centrale Ω_3 calculées par la FEM pour les trois coefficients d'absorption de PMLs dispersives choisis, en comparaison avec le cas des PMLs non dispersives. La figure 3.4.11 présente deux zooms sur les fréquences propres de ces modes à fuites évaluées par la FEM et comparées à leurs expressions analytiques 3.4.20. On constate sur cette figure que la précision des fréquences

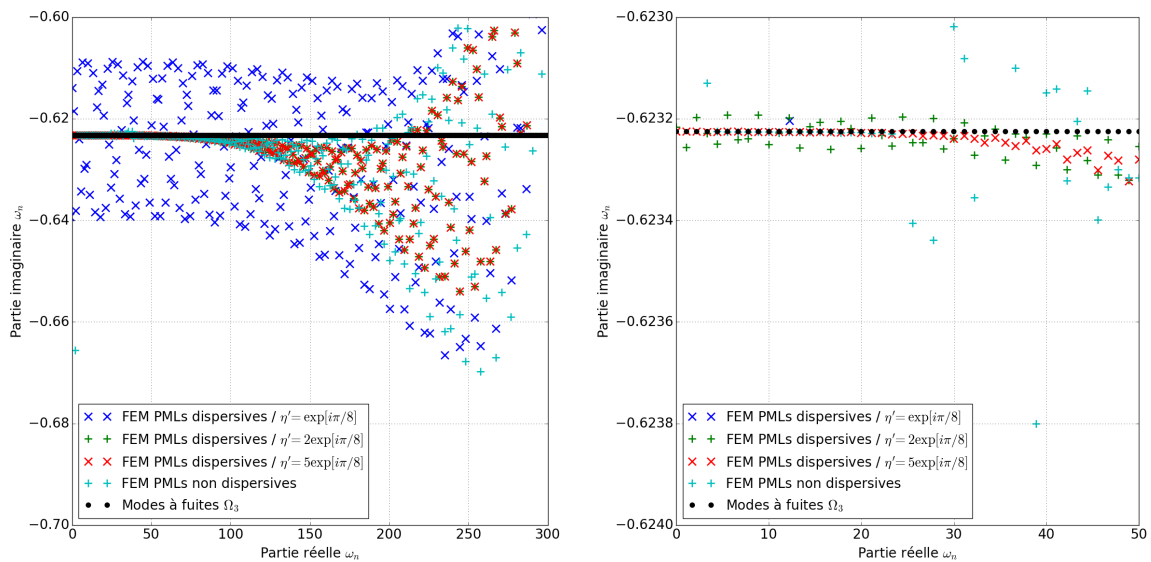


Fig. 3.4.11 – Zoom sur les spectres des fréquences propres obtenues par la FEM (croix et plus) et par les expressions analytiques 3.4.20 (points).

propres des modes à fuites évaluées par la FEM pour le cas de PMLs dispersives est nettement meilleure quand leurs coefficients d'absorption possèdent un module fort. Cette précision devient d'ailleurs comparable, voire même meilleure pour le cas où $\eta'_1 = \eta'_5 = 5 \exp[i\pi/8]$ (croix rouges), à celle des fréquences propres évaluées par la FEM dans le cas de PMLs non dispersives (plus cyan). Ainsi, bien que les fréquences propres des modes de PMLs dispersives ne soient pas évaluées correctement par la FEM quand le module du coefficient d'absorption de celles-ci est trop fort, les modes à fuites de la structure, qui sont les modes d'intérêt, sont obtenus par la FEM avec une précision satisfaisante et comparable à la précision obtenue dans le cas de PMLs classiques.

Pour terminer cette étude, nous allons maintenant observer le comportement de différents vecteurs propres à l'intérieur des PMLs dispersives de cette structure et ceci pour les trois coefficients d'absorption choisis précédemment. La figure suivante 3.4.12 présente le champ électrique propre des 100 premiers modes de la structure (quels qu'ils soient) calculés par la FEM pour ces trois coefficients d'absorption. En observant cette figure, un premier constat est

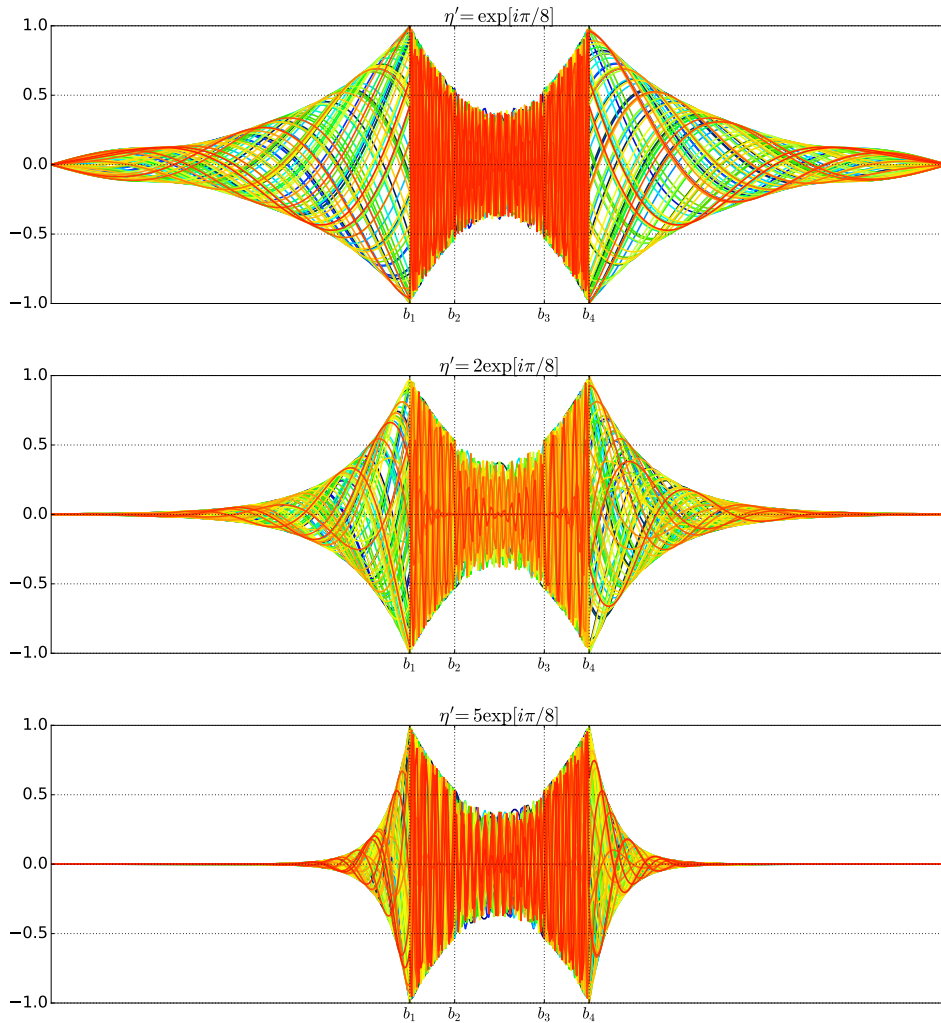


Fig. 3.4.12 – Superposition des champs électriques propres associés aux cent premiers modes propres calculés par la FEM dans le cas de la structure considérée avec PMLs dispersives. La valeur du champ électrique propre E_z est représentée en ordonnée et la coordonnée spatiale x en abscisse. En haut $\eta' = \exp[i\pi/8]$, au milieu $\eta' = 2 \exp[i\pi/8]$ et en bas $\eta' = 5 \exp[i\pi/8]$.

frappant. Le comportement des différents champs électriques propres dans les PMLs dispersives est homogène en termes de périodicité et de décroissance spatiale, quel que soit le mode propre considéré. Il se différencie donc nettement de celui observé en figure 3.4.7 pour les PMLs classiques où cette homogénéité n'était pas présente. Ces observations sont en accord avec les expressions analytiques des différentes fréquences propres des modes de PMLs dispersives qui, pour un coefficient d'absorption η' fixé, possèdent tous la même partie imaginaire. On peut d'ailleurs constater, en observant les spectres de ces différentes PMLs dispersives 3.4.10, que

plus la partie imaginaire des fréquences propres calculées analytiquement (points colorés sur la figure), de modes de PMLs dispersives, possède un module fort, plus la PMLs est absorbante et la décroissance spatiale au sein de celle-ci est rapide (*c.f.* figure 3.4.12). On peut également associer la précision de calcul des fréquences propres des modes à fuites par la FEM à cette décroissance. En effet, dans le cas où $\eta' = \exp[i\pi/8]$, la décroissance spatiale n'étant pas suffisamment rapide dans les PMLs, le champ n'a pas assez décré avant d'arriver au fond des PMLs. Ainsi, la précision de calcul des fréquences propres des modes à fuites associées à ces PML n'est pas satisfaisante contrairement au cas où $\eta' = 5 \exp[i\pi/8]$, où la décroissance spatiale est nettement plus rapide et où le champ propre des différents modes décroît suffisamment avant d'arriver au fond de la PML et n'affecte ainsi pas cette précision d'évaluation.

Afin d'évaluer la longueur d'onde ainsi que la constante de décroissance d'une onde électromagnétique se propageant dans les PMLs dispersives, revenons à l'équation d'onde que satisfait le champ électrique 3.4.31 pour ce cas 1D. Dans les PMLs dispersives, associées aux fonctions caractéristiques $l_{\Omega_{1,5}}$, une onde monochromatique de pulsation ω se propageant suivant l'axe O_x possède un vecteur d'onde $\mathbf{k} = \eta k_0 \hat{\mathbf{x}} = \frac{\eta' \omega}{\omega c} \hat{\mathbf{x}} = \frac{\alpha' + i\beta'}{c} \hat{\mathbf{x}}$. En rappelant que nous avons fait l'hypothèse que c était fixé à 1, le vecteur d'onde n'est autre que $\mathbf{k} = (\alpha' + i\beta') \hat{\mathbf{x}}$. Ainsi, la longueur d'onde dans une PML dispersive de coefficient d'absorption $\eta' = \alpha' + i\beta'$ vaut $\lambda = \frac{2\pi}{\alpha'}$ et sa décroissance spatiale est régit par β' . Pour illustrer ce propos, nous allons présenter, en figure 3.4.13, le champ électrique propre de trois modes propres choisis au hasard pour la même structure que précédemment (pour rappel, $a_1 = a_5 = 8$, $a_2 = a_4 = 1$, $a_3 = 2$) mais cette fois-ci avec les coefficients d'absorptions suivants pour les PMLs: $\eta'_1 = \eta'_5 = 2\pi + i \ln[2]/2$. Ainsi, si les développements précédents sont corrects, les longueurs d'onde dans les PMLs vaudront 1 et pour un déplacement de 2 suivant la direction x , le champ aura décré de 50% de sa valeur initiale. Sur la figure 3.4.13, le comportement des différents champs électriques propres est

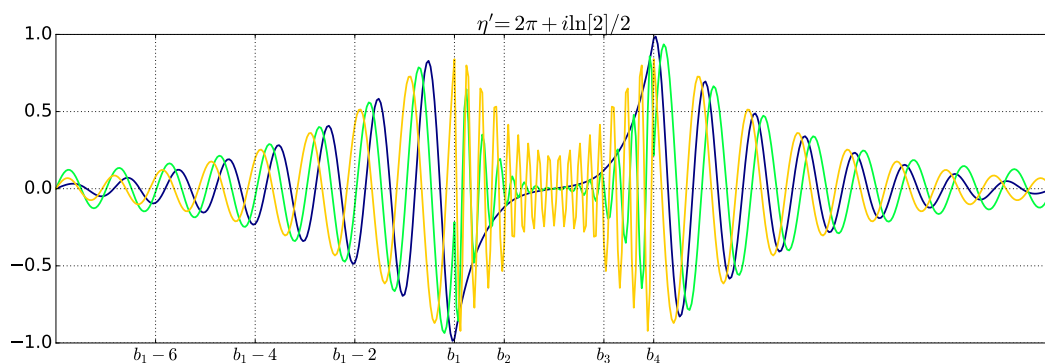


Fig. 3.4.13 – Champs électriques propres associés à trois modes propres choisis au hasard calculés par la FEM dans le cas de la structure considérée avec PMLs dispersives. La valeur du champ électrique propre E_z est représentée en ordonnée et la coordonnée spatial x en abscisse.

bien celui qui est attendu dans les PMLs dispersives.

Nous avons donc montré ici, qu'avec des PMLs dispersives en $1/\omega$, il est possible, tout en imposant un critère de décroissance du champ en bout de PML, de maîtriser leur longueur au

travers la partie imaginaire de leur coefficient d'absorption, mais aussi d'imposer la longueur d'onde du champ dans la PML et donc de maîtriser le maillage associé à la FEM au sein de celle-ci et ceci à toutes les fréquences. Ceci est d'un intérêt primordial pour évaluer avec précision les modes à fuites d'une structure électromagnétique ouverte tout en maîtrisant le maillage et la taille des PMLs et donc la taille du système à résoudre numériquement.

3.4.5 Conclusions intermédiaires

Dans cette section, une étude a été menée sur une structure électromagnétique simple afin d'évaluer l'impact de l'introduction de PMLs dispersives sur le calcul modal par la FEM appliqué aux structures électromagnétiques ouvertes. Les spectres de cette structure simple ont, tout d'abord, été retrouvés analytiquement pour le cas de polarisation s , et pour des PMLs dispersives ou non, afin de constituer une référence de comparaison pour les spectres issus des modélisations éléments finis. Ces spectres analytiques ont été vérifiés par comparaison avec les résultats d'une résolution semi-analytique de la relation de dispersion du système. De ces expressions analytiques, nous avons pu prévoir le comportement des PMLs classiques et dispersives:

- les fréquences propres des modes de PMLs non dispersives se situant sur une droite de pente négative du plan complexe inférieur, ces PMLs sont très efficaces à haute fréquence car fortement absorbantes, alors que leur efficacité est limitée à basse fréquence. De plus, les PMLs non dispersive ne permettent pas forcément de révéler tous les modes à fuites d'une structure donnée et notamment ceux dont les fréquences sont situées à gauche des droites constituées par les fréquences propres des modes de PMLs dans le plan complexe. En termes de transformation complexe du spectre de l'espace libre (axe réel), une PML non dispersive est associée à une rotation puis à une discrétisation du spectre continu,
- pour les PMLs dispersives, les fréquences propres des modes de PMLs se situent sur une droite horizontale du plan complexe inférieur, et ce type de PMLs est alors également efficace en terme d'absorption pour toutes les fréquences. Nous supposons que ce type de PML permet de révéler tous les modes à fuites d'une structure possédant une partie imaginaire plus faible en module que celle des PMLs. En termes de transformation complexe du spectre de l'espace libre, une PML dispersive en $1/\omega$ est associée à une translation puis à une discrétisation du spectre continu.

Dans un second temps, une étude numérique modale aux éléments finis de cette structure contenant des PMLs dispersives ou non a été menée. De cette étude, plusieurs conclusions ont pu être tirées. Tous les spectres issus des simulations numériques FEM sont entachés d'une branche de modes parasites de PML, dont la position dans le plan complexe dépend du maillage du système, et qui constitue une limite pour laquelle tous les modes situés en dessous de cette branche, dans le plan complexe, ne peuvent pas être correctement évalués

numériquement. Cette limitation purement numérique nécessite d'être étudiée plus en profondeur afin de comprendre son origine. En ce qui concerne l'intérêt de l'implémentation de PMLs dispersives, contrairement aux PMLs non dispersives et comme prévu par l'analyse des expressions analytiques de leurs fréquences propres, leurs réponses numériques aux éléments finis sont homogènes en fréquence. Ces réponses homogènes en fréquence apparaissent plus saines que celles des PMLs classiques dans le but d'effectuer le calcul numérique des modes à fuites d'une structure qui peuvent posséder une fréquence quelconque. Nous avons également pu montrer que la partie réelle α' du coefficient d'absorption de la PML dispersive η' était reliée à la longueur d'onde dans la PML et que sa partie imaginaire β' gouvernait la décroissance spatiale du champ au sein de celle-ci et ceci quelle que soit la fréquence propre du mode considéré. Ainsi, en imposant cette longueur d'onde et la décroissance du champ dans la PML via ce coefficient d'absorption, il est possible de maîtriser la longueur et le maillage éléments finis de la PML, et donc la taille du système numérique à résoudre, tout en imposant un critère de décroissance de champ en bout de PML nécessaire à l'évaluation précise des modes d'une structure électromagnétique ouverte quelle que soit la fréquence du mode à fuite considéré. Enfin, nous avons d'ailleurs pu constater que la précision numérique d'évaluation des fréquences propres des modes à fuites, de la structure considérée, calculées par la FEM pour les PMLs dispersives est comparable voire même meilleure que celle pour des PMLs non dispersives et ceci pour un maillage identique. Ceci est, bien entendu, valable du moment où la partie imaginaire du coefficient d'absorption et la longueur de la PML dispersive permettent une décroissance suffisante du champ au sein de celle-ci.

CONCLUSIONS DU CHAPITRE III

Dans ce chapitre, nous avons développé une extension de la FEM pour le calcul modal appliqué aux structures électromagnétiques bidimensionnelles dispersives et dissipatives tels que les nanostructures métalliques. Cette extension est basée sur le formalisme des “champs auxiliaires” combiné à une modélisation de la permittivité relative des matériaux dispersifs et dissipatifs par une somme de résonances de type Drude et Drude-Lorentz. La formulation faible associée à cette extension a été implémentée numériquement pour les deux cas de polarisation de la lumière puis appliquée et validée semi-analytiquement par l’obtention des spectres du cas simple d’une cavité bidimensionnelle fermée. L’obtention de ces spectres a mis notamment en lumière la présence de modes parasites autour de la fréquence pour laquelle la permittivité de l’élément dispersif est nulle et ceci pour le cas de polarisation p associé à une formulation en champ électrique. Leurs présences s’expliquent par le fait qu’à cette fréquence, la condition de divergence nulle du champ électrique $\nabla \cdot [\epsilon \mathbf{E}] = 0$ n’est pas respectée aux zéros de ϵ . Une condition de divergence doit donc être ajoutée explicitement pour ce cas de polarisation.

L’implémentation FEM a ensuite été appliquée à différents cristaux photoniques bidimensionnels de tiges métalliques de Drude et permis d’obtenir leurs spectres pour les deux cas de polarisation. Une nouvelle fois les modes parasites présents dans le cas de la cavité fermée ont été observés. Les résultats obtenus ont été validés par comparaison avec différents résultats de la littérature. Néanmoins, les résultats d’une publication existante de la littérature, obtenus à l’aide d’une technique similaire à celle développée dans ce chapitre, n’ont pas pu être reproduit à l’aide de cette implémentation. Plusieurs hypothèses ont été émis concernant les différences constatées sur les spectres obtenus. L’obtention des différents spectres de cristaux photoniques a également permis de contredire une conjecture communément acceptée par la communauté scientifique, à savoir que “le spectre total des résonances complexes d’un cristal photonique reste situé à l’intérieur du contour formé par les résonances complexes correspondant aux frontières de la première zone de Brillouin réduite de ce cristal”. Des phénomènes de couplage entre bandes et d’autres pouvant impacter fortement la vitesse de groupe dans ces cristaux photonique ont aussi été mis en évidence. Ces résultats ont fait l’objet d’une publication [120]. Enfin, dans le but d’une future extension de la méthode développée aux structures ouvertes, une étude spectrale numérique au travers de la FEM a été menée sur une structure électromagnétique relativement simple contenant des couches parfaitement adaptées (PML) dispersives

ou non. L'obtention de résultats analytiques et numériques sur cette structure avec des PMLs classiques et dispersives a pu montrer l'intérêt de l'implémentation de PMLs dispersives en $1/\omega$, notamment en ce qui concerne leur réponse qui est identique pour toutes les fréquences propres de la structure. Cette homogénéité de réponse en fréquence a été montrée en observant différents champs propres calculés par la FEM dans ce type de PMLs. Aussi, nous avons pu montrer que le coefficient d'absorption η' d'une PML dispersive était directement relié au comportement du champ au sein de celle-ci et ceci à toutes les fréquences, sa partie réelle α' étant liée à la longueur d'onde, et sa partie imaginaire β' gouvernant la décroissance spatiale du champ. Nous en avons déduit qu'il était donc possible de maîtriser la longueur et le maillage des PMLs, tout en imposant un critère de décroissance de champ au sein de celle-ci, et en conservant donc l'avantage d'une évaluation numérique précise des modes à fuite d'une structure électromagnétique ouverte, à toutes les fréquences, sans augmentation de la taille du système numérique à résoudre. De plus amples développements sont néanmoins nécessaires pour associer ce type de PMLs à la formulation en champs auxiliaires développée, afin de pouvoir conduire le calcul modal aux éléments finis, de structures électromagnétiques, bidimensionnelles, ouvertes, dispersives et dissipatives.

De nombreux développements complémentaires des méthodes développées sont également possibles. Nous citerons, entre autres, la transposition de la méthode aux matériaux magnétiquement dispersifs et dissipatifs ainsi qu'aux matériaux anisotropes et l'implémentation de la formulation FEM étendue pour des structures électromagnétiques tridimensionnelles. Ces développements potentiels de la FEM conduiraient à la réalisation d'un outil numérique puissant dédié au calcul modal des structures électromagnétiques ouvertes ou non, périodiques ou non, à géométrie quelconque, contenant des matériaux linéaires, anisotropes, électriquement et magnétiquement dispersifs. Il permettrait notamment d'effectuer l'optimisation conduite au chapitre précédent 2, concernant la conception de composant de filtrage optique de façon spectrale potentiellement plus rapide qu'avec la méthode directe utilisée.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Le travail effectué au cours de cette Thèse de Doctorat se situe à la confluence de la modélisation numérique des phénomènes électromagnétiques et de leurs applications à la conception de composants optiques de filtrage novateurs planaires, notamment pour la réalité augmentée des Visuels Tête Haute.

Dans un premier temps, nous avons rappelé et appliqué une formulation existante de la méthode numérique aux éléments finis pour la modélisation des réseaux de diffraction à deux types de configurations électromagnétiques extrêmement résonantes, l'une métallique et l'autre diélectrique. Par comparaison des résultats de la méthode à des résultats issus d'autres méthodes numériques, nous avons validé théoriquement ceux-ci pour la configuration métallique et compris les facteurs limitant la convergence de la méthode éléments finis pour la configuration diélectrique.

Ayant validé théoriquement les résultats de la méthode pour une nanostructure métallique en configuration de résonance extrême, nous avons alors pu l'utiliser afin de mener une étude paramétrique sur des réseaux monodimensionnels de rubans métalliques et bidimensionnels de nanocylindres à section elliptique dans le but de concevoir des composants optimisés de filtrage optique pour l'application VTH. La fabrication de certains de ces réseaux et les mesures effectuées sur ceux-ci à l'Institut d'Électronique Fondamentale nous ont également permis de valider expérimentalement les résultats de la méthode. L'étude paramétrique ayant permis de dégager des règles de conception simples pour adapter les propriétés de réflexion et de transmission des réseaux étudiés, selon les différents matériaux incorporés dans les structures, les dimensions et géométries des nanoparticules ainsi que les conditions d'éclairement, nous avons alors été en mesure d'optimiser le design:

- de quatre réseaux monodimensionnels de rubans d'argent permettant de réfléchir une partie du spectre lumineux pour une composante de polarisation de la lumière incidente autour d'une longueur d'onde de centrage différente pour chacun de ces filtres tout en conservant également des propriétés de transparence globale sur le spectre visible pour l'autre composante de polarisation de la lumière,
- et de celui de deux réseaux bidimensionnels de nanocylindres à section elliptique per-

mettant chacun de réfléchir deux parties distinctes du spectre lumineux autour de deux longueurs d'onde de centrage différentes fonction de la polarisation de la lumière incidente et ceci toujours en gardant une forte transparence globale.

Suite à ces propositions de designs, la réalisation de réseaux de nanoparticules métalliques optimisés a pu confirmer qualitativement les tendances tirées des études numériques paramétriques conduites et également démontrer la possibilité de réalisation de composants de filtrage optique semi-réfléchissants et globalement transparents par l'utilisation de nanostructures de particules métalliques.

Dans ce chapitre, un agencement ingénieux du filtre précédemment optimisé avec deux lentilles classiques, qui permettrait de réaliser une fonction de focalisation optique pour l'application VTH, a également été proposé. Un démonstrateur de principe de cet agencement, qui permettrait donc d'associer les fonctions de filtrage et de focalisation requises pour une application VTH, utilisant un composant de filtrage optique de type "couches minces" réalisé par l'équipe RCMO de l'Institut Fresnel et deux lentilles optiques classiques, est en cours de réalisation.

Dans un dernier temps, nous avons développé une extension de la FEM pour le calcul modal appliqué aux structures électromagnétiques dispersives et dissipatives tels que les nanostructures métalliques. L'implémentation de cette formulation FEM, basée sur le formalisme des "champs auxiliaires" combiné à une modélisation de la permittivité relative des matériaux dispersifs et dissipatifs par une somme de résonances de type Drude et Drude-Lorentz, a pu être validée semi-analytiquement par l'obtention des spectres du cas simple d'une cavité bidimensionnelle fermée contenant un matériau dispersif. Elle a ensuite été appliquée à différents cristaux photoniques bidimensionnels de tiges métalliques de Drude et a permis d'obtenir leurs spectres pour différents cas de polarisation. Ces résultats ont été validés par comparaison avec différents résultats de la littérature. Ainsi, la validité de ces spectres en a permis l'étude et une conjecture communément acceptée par la communauté scientifique stipulant que "le spectre total des résonances complexes d'un cristal photonique reste situé à l'intérieur du contour formé par les résonances complexes correspondant aux frontières de la première zone de Brillouin réduite de ce cristal" a pu être mise en défaut. Des phénomènes de couplage entre bandes et d'autres pouvant impacter fortement la vitesse de groupe dans ces cristaux photoniques ont été mis en évidence. Enfin, dans le but d'étendre la méthode développée aux structures ouvertes, une étude spectrale analytique et numérique aux éléments finis a été menée sur une structure électromagnétique relativement simple contenant des couches parfaitement adaptées (PML) dispersives. Cette étude a notamment montré l'intérêt de leur utilisation qui permet de contrôler la taille du système numérique à résoudre, en maîtrisant leur longueur et leur maillage éléments finis, tout en gardant une précision numérique satisfaisante pour l'évaluation des fréquences et vecteurs propres des différents modes à fuir d'une structure ouverte quelles que soient ces fréquences propres.

En perspectives de ce travail de Thèse de Doctorat, nous pouvons distinguer deux axes de travaux à poursuivre, l'un concernant la réalisation de la fonction optique du projet PLANISSIMO et notamment le design de composants de filtrage et de focalisation pour l'application VTH, l'autre concernant la poursuite du développement de la méthode numérique de calcul modal pour les structures électromagnétiques dispersives et dissipatives.

En ce qui concerne la fonction optique à réaliser pour l'application de type VTH et notamment le composant de filtrage, la réalisation de simulations FEM en champ diffracté avec une modélisation rigoureuse des réseaux effectivement réalisés est souhaitable et facilement réalisable à travers une modélisation exacte de la géométrie des nanoparticules obtenue par imagerie au MEB et l'emploi des valeurs d'indices optiques mesurés à l'IEF par ellipsométrie. Ceci permettrait d'affiner les résultats de simulation et le design des filtres. Comme il a été constaté que les résonances des nanoparticules métalliques employés se décalaient fortement dans la partie rouge du spectre visible lors de l'encapsulation de ceux-ci dans la silice, l'étude de l'emploi d'une couche diélectrique d'encapsulation bas indice qui limiterait cet effet est en cours chez Groupe PSA. Il serait également possible de mener des études sur réseaux plus complexes de nanostructures métalliques tels que des réseaux de nanoparticules métalliques couplés avec une couche guidante diélectrique à haut indice en-dessous de ceux-ci qui permettrait d'obtenir un mode guidé à l'intérieur de celle-ci et ainsi d'affiner la largeur spectrale au travers l'obtention d'un meilleur facteur de qualité des résonances en réflexion et également d'obtenir une meilleure transparence globale. L'étude de réseaux de structures MIM (Metal-Insulator-Metal [31]) permettrait également d'obtenir d'autres types de résonances dans les structures et potentiellement de conduire à l'augmentation recherchée du facteur de qualité de la résonance en réflexion. Toujours dans l'optique d'obtenir un meilleur facteur de qualité possible, l'optimisation numérique du design de réseaux résonants diélectrique [84–86], qui permet l'obtention d'une excellente transparence globale tout en obtenant une largeur de bande en réflexion nettement plus fine que celle des nanostructures métalliques, associée à l'étude des possibilités de réalisation de ces structures par des technologies dites "grandes surfaces" (nanoimprint [121]), qui font l'objet d'autres composantes du projet PLANISSIMO, doivent être poursuivies. Enfin, la réalisation d'un algorithme de simulation colorimétrique prenant comme entrées les différents spectres mesurés des filtres réalisés et permettant de rendre compte des couleurs perçues par le conducteur pourrait également être envisagée. Pour le composant de focalisation, les développements scientifiques et technologiques des métasurfaces plasmoniques et diélectriques devront être suivis de près, celles-ci pouvant potentiellement permettre la réalisation de composants optiques de focalisation planaires extrêmement fins et d'atteindre des résolutions d'image sub-longueurs d'onde. Ces développements concernent notamment la réduction des pertes présentes au sein des métaux des métasurfaces plasmoniques par l'optimisation de leurs designs et potentiellement par l'emploi de matériaux actifs pour compenser ces pertes. Pour les métasurfaces diélectriques, la possibilité de réaliser des lentilles à focales requises pour l'application VTH ainsi que les possibilités de fabrication sur des grandes surfaces devront

être étudiées.

Concernant le développement de la méthode numérique modale aux éléments finis, la transposition de la méthode aux matériaux magnétiquement dispersifs et dissipatifs ainsi qu'aux matériaux anisotropes est facilement implémentable. Pour les structures bidimensionnelles, l'implémentation d'une formulation FEM étendue avec une formulation en champ magnétique permettrait possiblement de s'affranchir de la présence de modes parasites présents dans le cas de polarisation p autour de la fréquence ω pour laquelle la permittivité relative du matériau dispersif considérée est nulle $\epsilon(\omega) = 0$. L'adaptation de PMLs dispersives associées à la formulation faible étendue développée pour la FEM permettrait d'envisager l'extension de la méthode numérique développée aux structures électromagnétiques dispersives et dissipatives ouvertes. Enfin l'implémentation de la formulation FEM étendue pour des structures électromagnétiques tridimensionnelles est également envisagée. Une fois tous ces développements numériques potentiels effectivement implémentés, l'optimisation numérique du design des nanostructures métalliques ouvertes pour les composants de filtrage optique de l'application VTH pourrait alors être effectuée par une étude numérique modale potentiellement plus rapide que les études directes conduites. De plus, ces développements conduiraient à une méthode générale pour l'étude numérique modale de structures électromagnétiques, ouvertes ou non, périodiques ou non, à géométrie quelconque, contenant des matériaux linéaires, anisotropes, électriquement et magnétiquement dispersifs. Cet outil numérique constituerait ainsi un moyen d'analyse électromagnétique puissant des différents phénomènes présents au sein de la plupart des structures technologiquement réalisables.

Annexes

ANNEXE A

SPECTRES DE RÉSEAUX DE NANOPARTICULES MÉTALLIQUES EN OR.

A.1 Spectres de réseaux mono-dimensionnels de rubans d'or

Dans cette annexe, les spectres de réseaux mono-dimensionnels de rubans d'or sont présentés pour les conditions d'éclairage suivantes : onde plane de longueur d'onde $\lambda \in [380, 780]$ nm, d'angle d'incidence $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s et p . La périodicité du réseau est toujours fixée à $d = 250$ nm et les rubans sont directement déposés sur le substrat en silice sans couche de conduction ni couche de couverture. La largeur des rubans des réseaux varie dans $w \in [50, 140]$ nm. La hauteur des rubans des réseaux varie dans $h \in [10, 50]$ nm.

Les spectres sont présentés de deux façons différentes :

- soit la hauteur de rubans est fixée et la largeur varie,
- soit la largeur de rubans est fixée et la hauteur varie.

Seuls les ordres spéculaires (R_0 et T_0) sont considérés.

A.1.1 Hauteur de rubans fixée

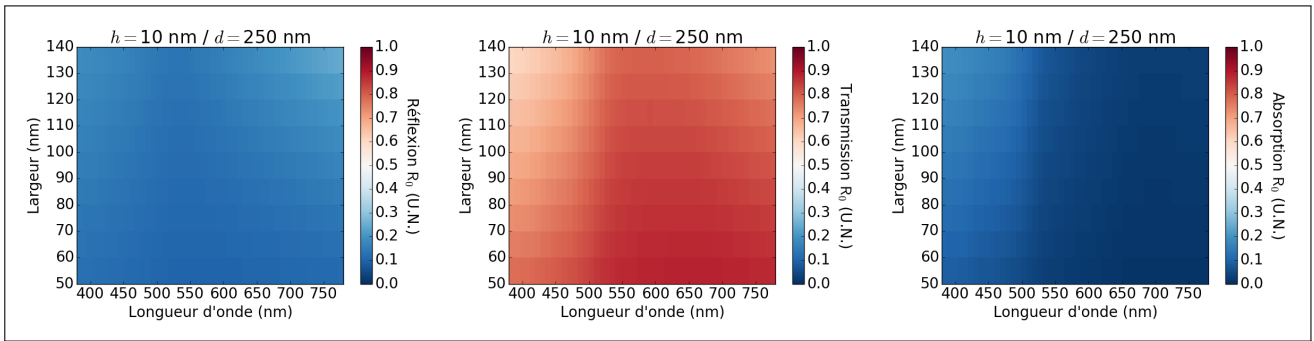


Fig. A.1 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 10 \text{ nm}$, $d = 250 \text{ nm}$ et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

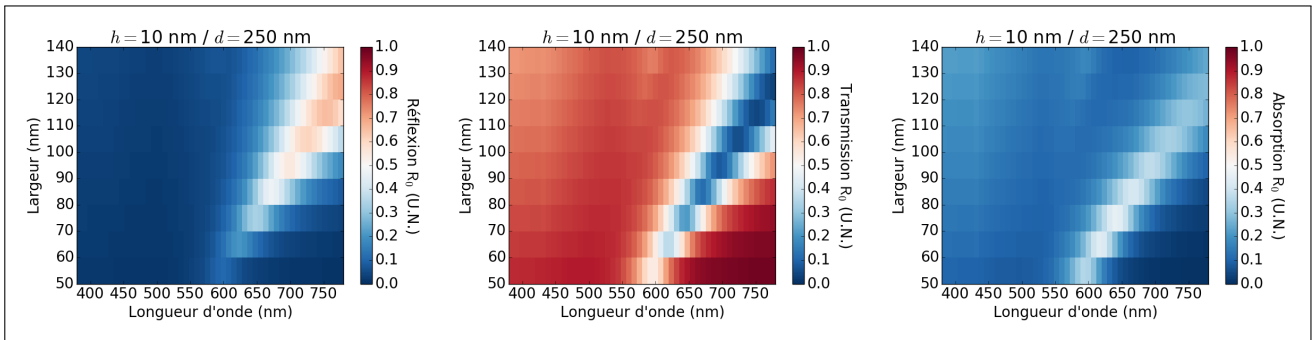


Fig. A.2 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 10 \text{ nm}$, $d = 250 \text{ nm}$ et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

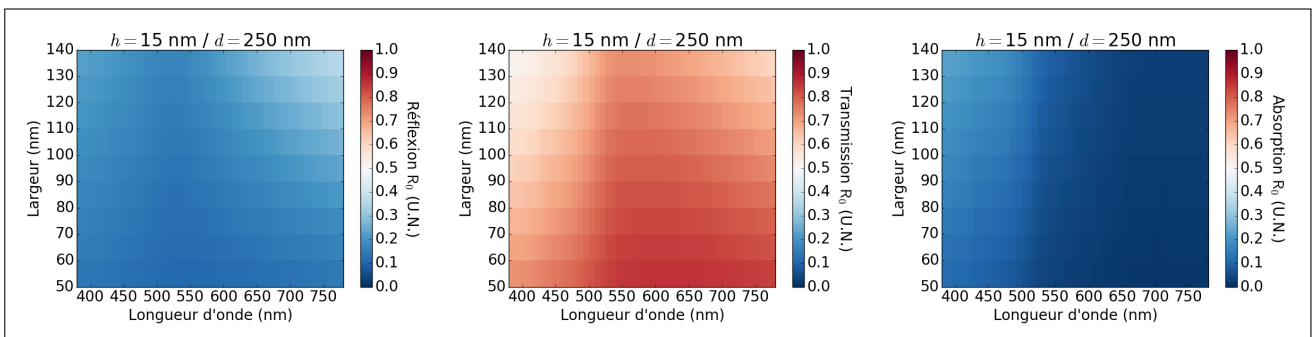


Fig. A.3 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 15 \text{ nm}$, $d = 250 \text{ nm}$ et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

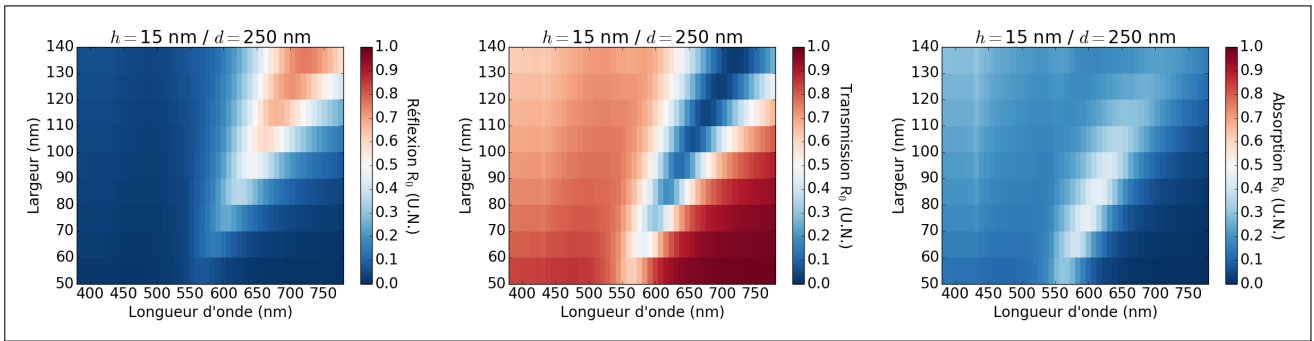


Fig. A.4 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 15$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

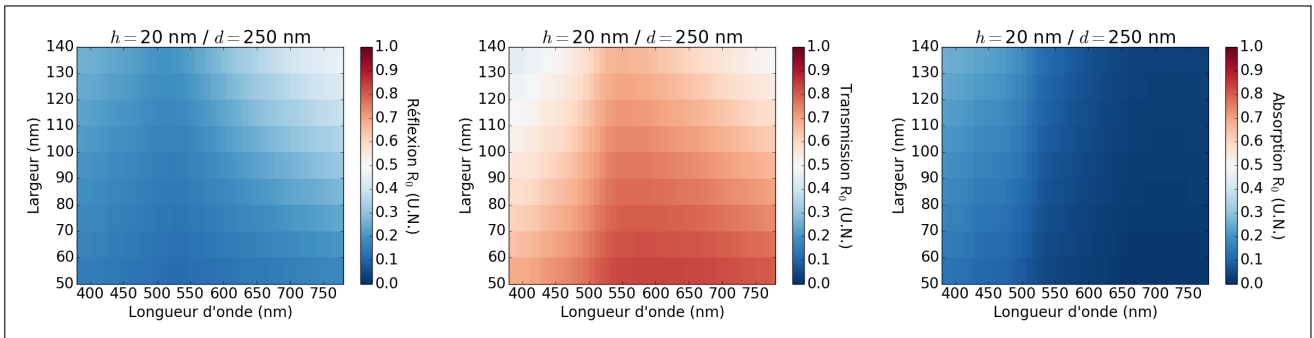


Fig. A.5 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 20$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

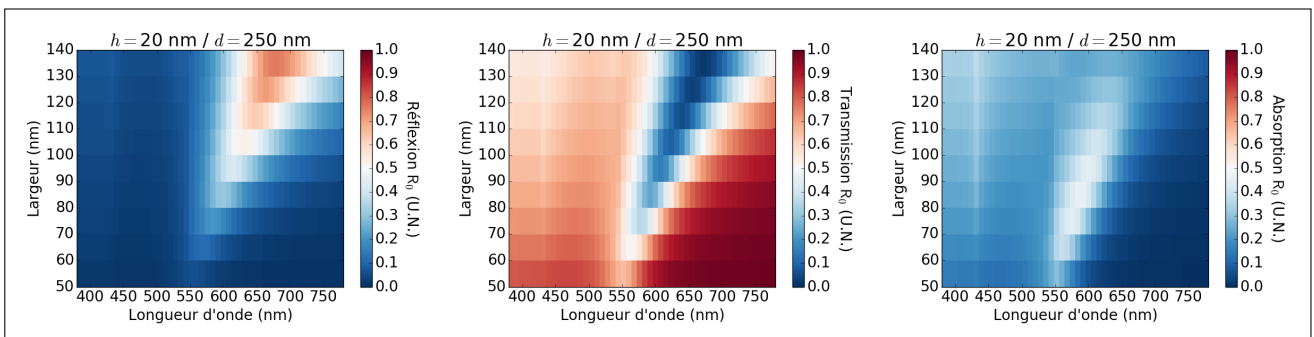


Fig. A.6 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 20$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

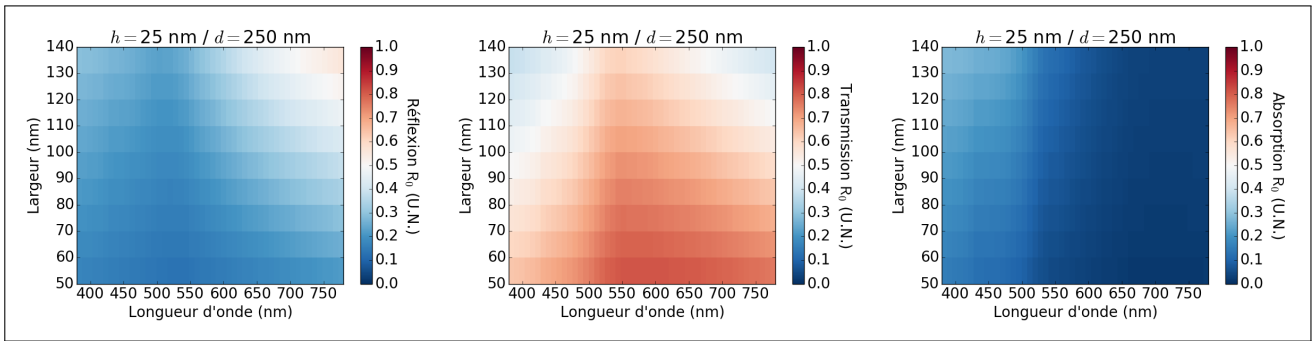


Fig. A.7 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 25$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

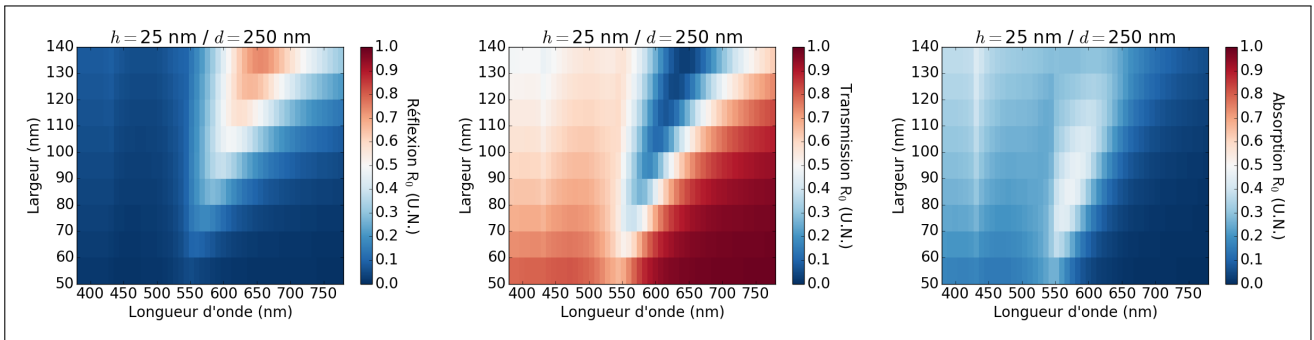


Fig. A.8 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 25$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

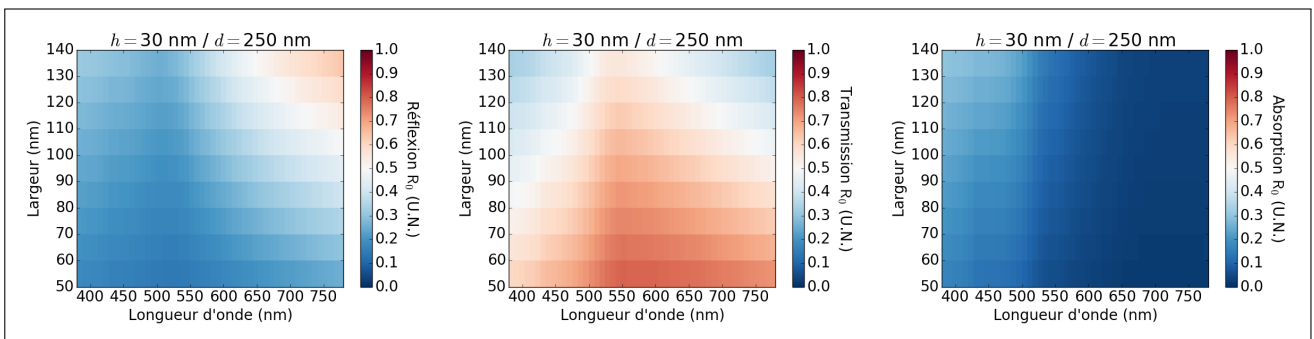


Fig. A.9 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 30$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

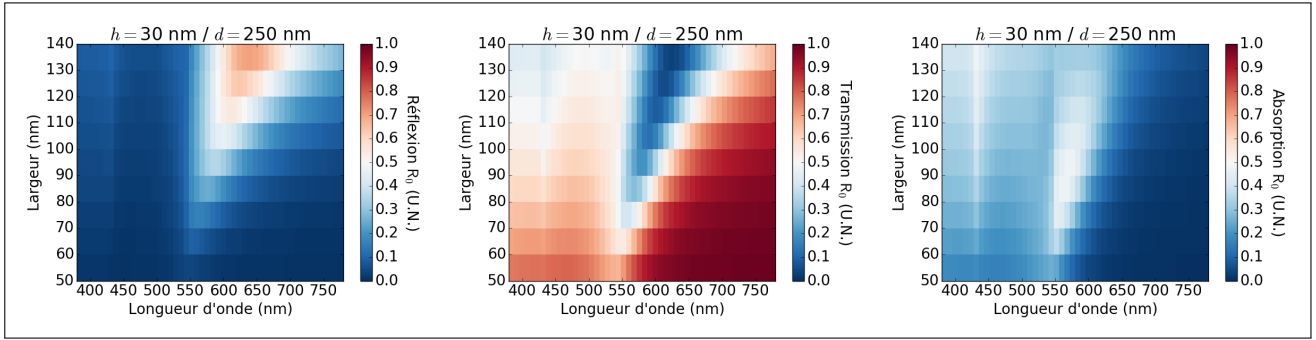


Fig. A.10 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 30$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

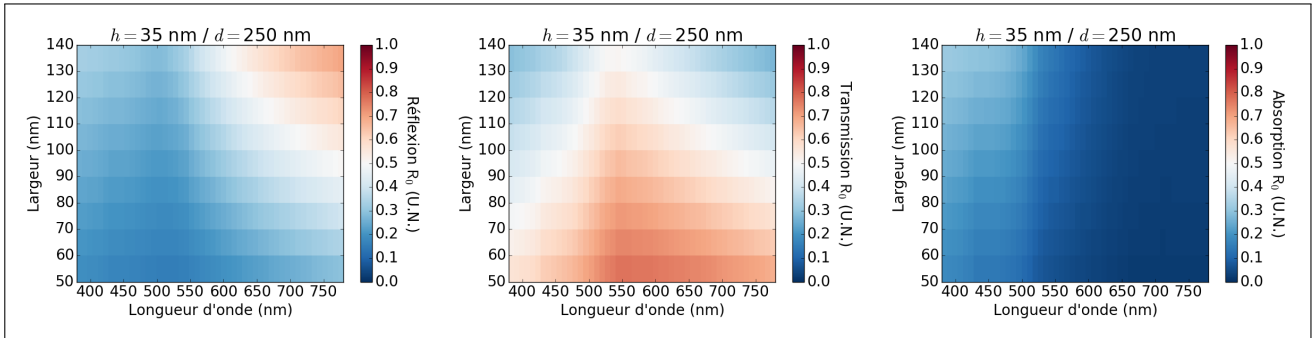


Fig. A.11 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 35$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

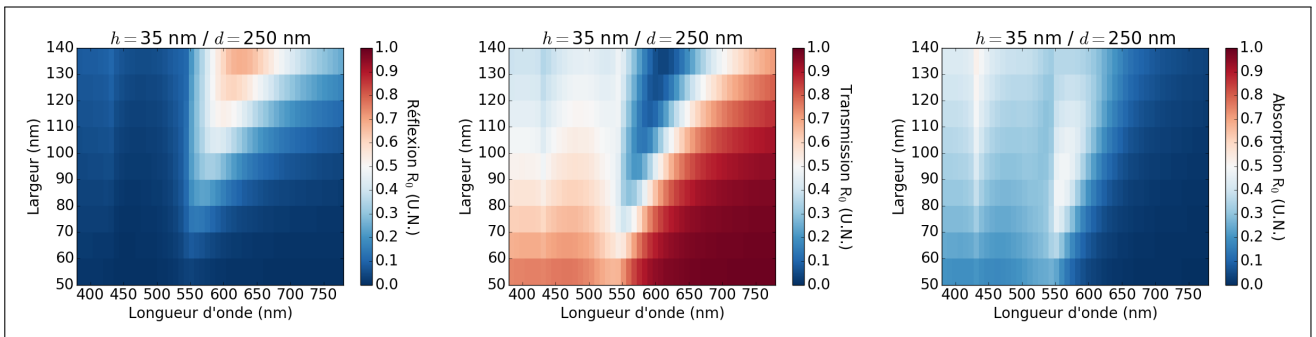


Fig. A.12 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 35$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

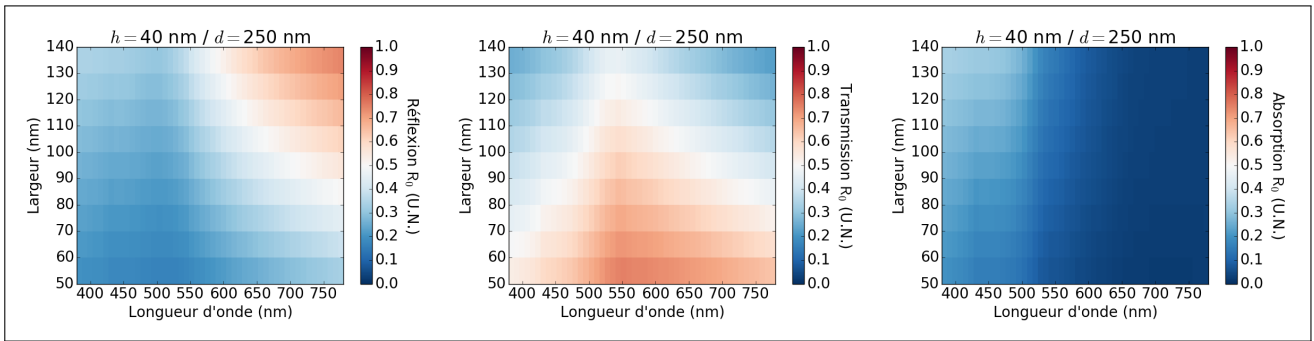


Fig. A.13 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 40$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

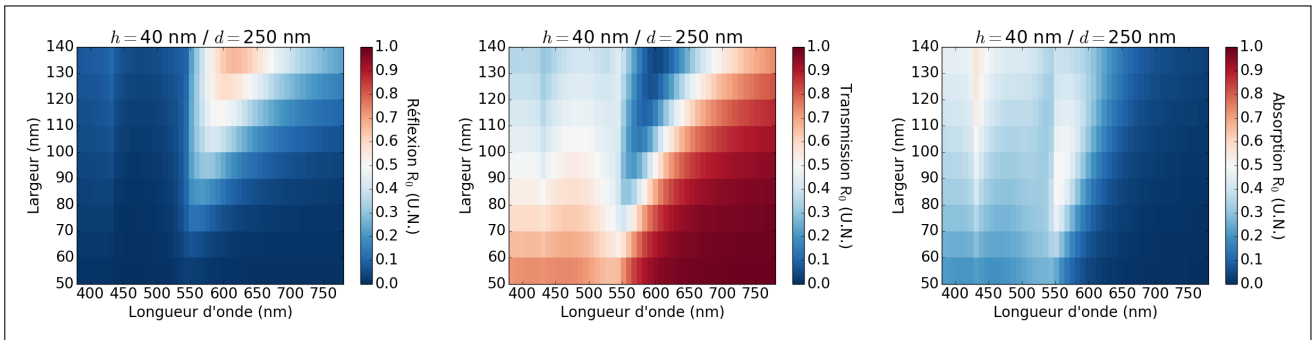


Fig. A.14 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 40$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

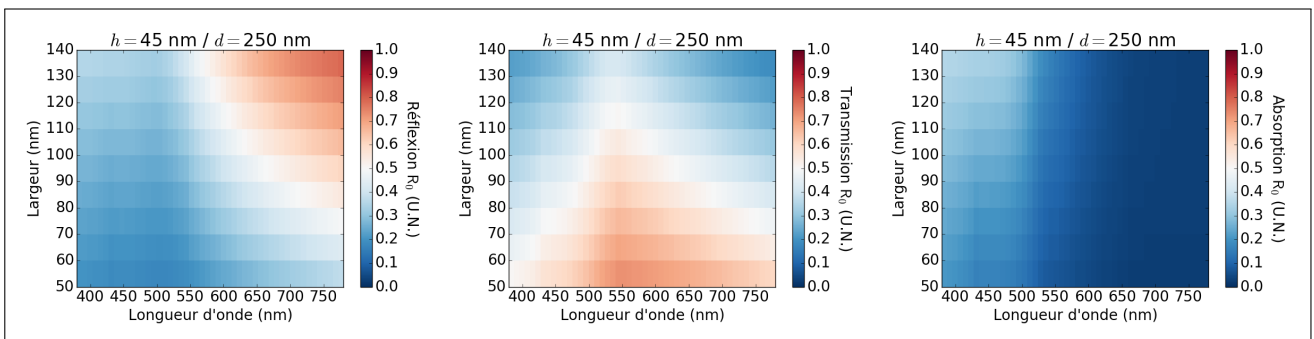


Fig. A.15 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 45$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

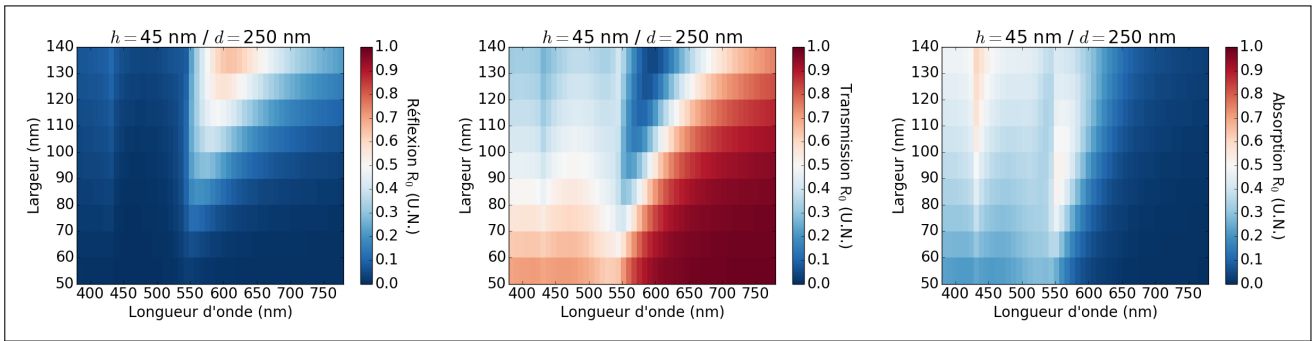


Fig. A.16 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 45$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

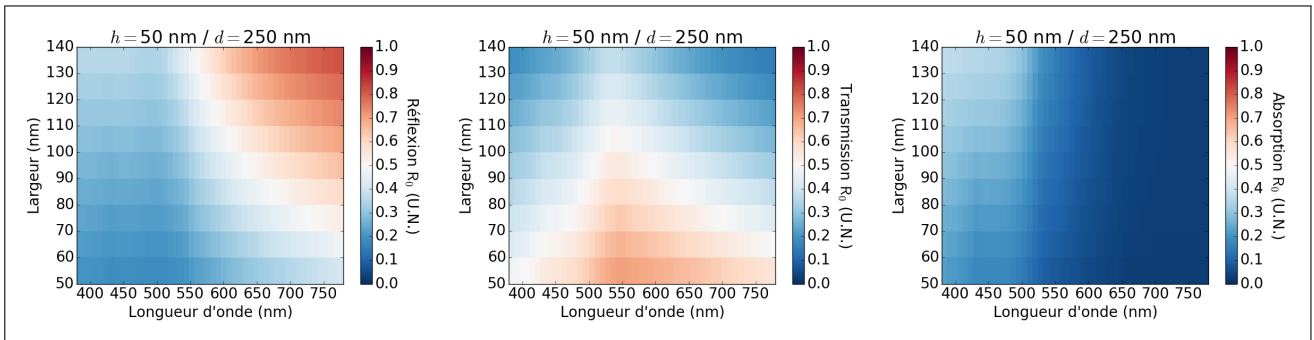


Fig. A.17 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 50$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

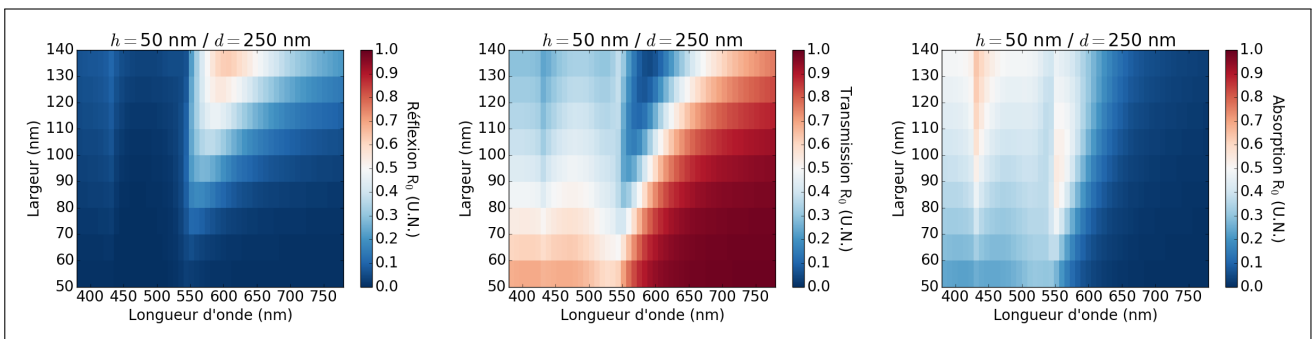


Fig. A.18 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $h = 50$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

A.1.2 Largeur de rubans fixée

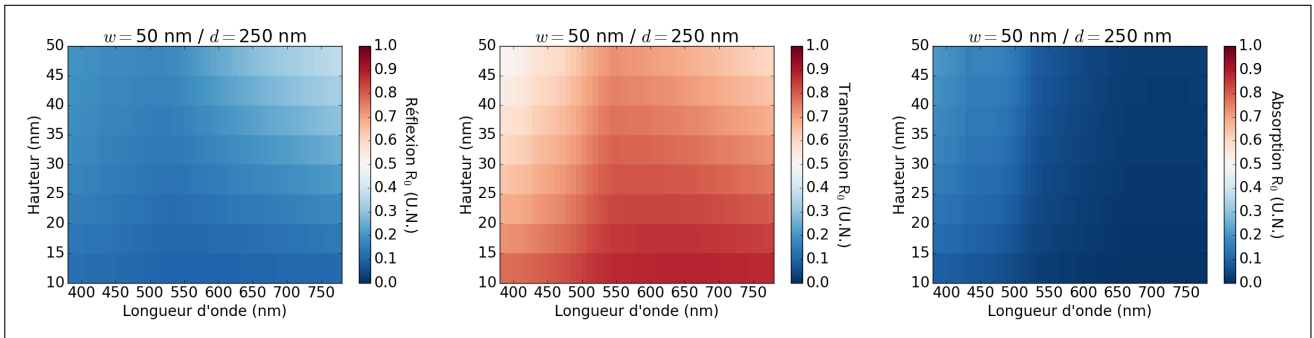


Fig. A.19 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 50$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

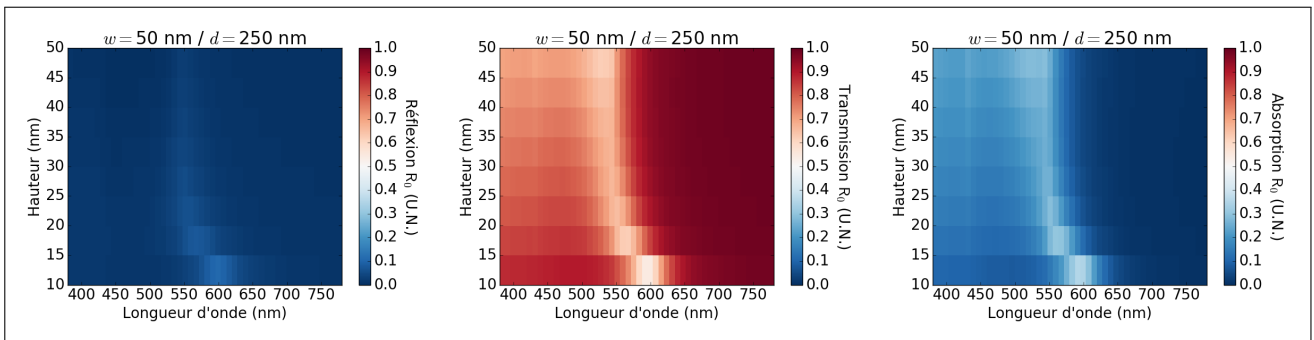


Fig. A.20 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 50$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

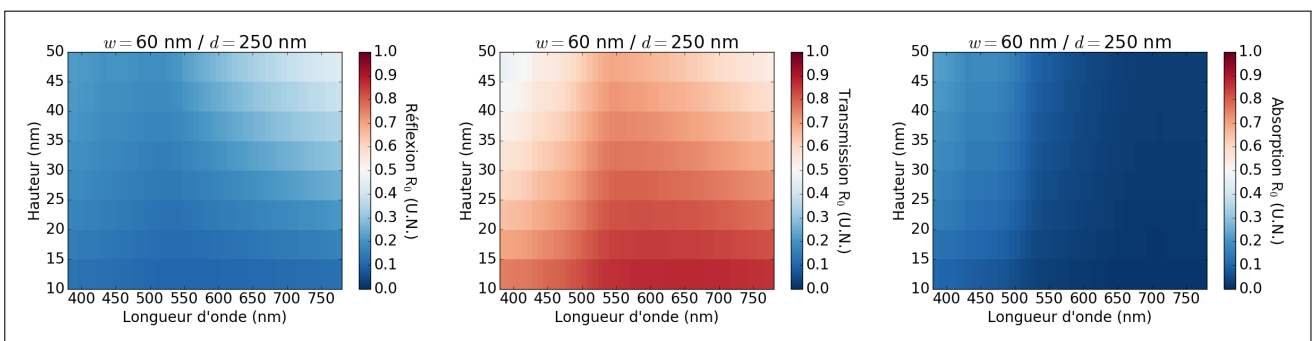


Fig. A.21 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 60$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

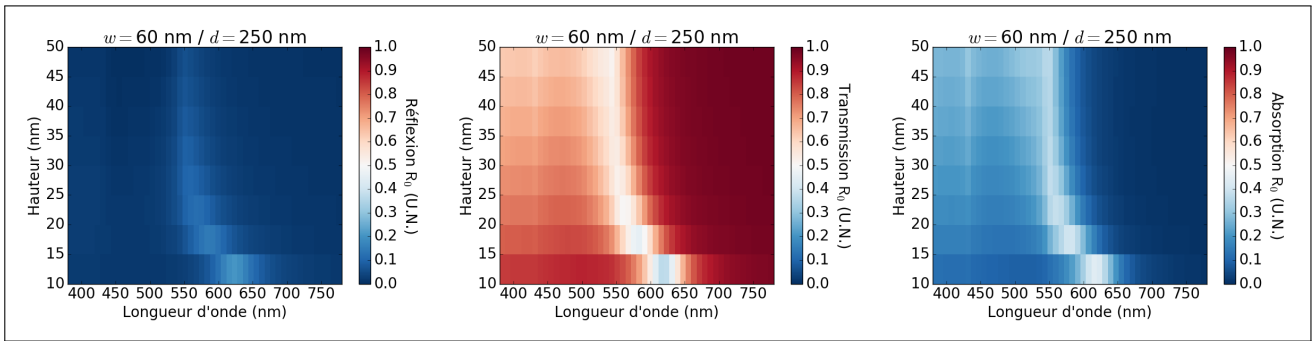


Fig. A.22 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 60$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

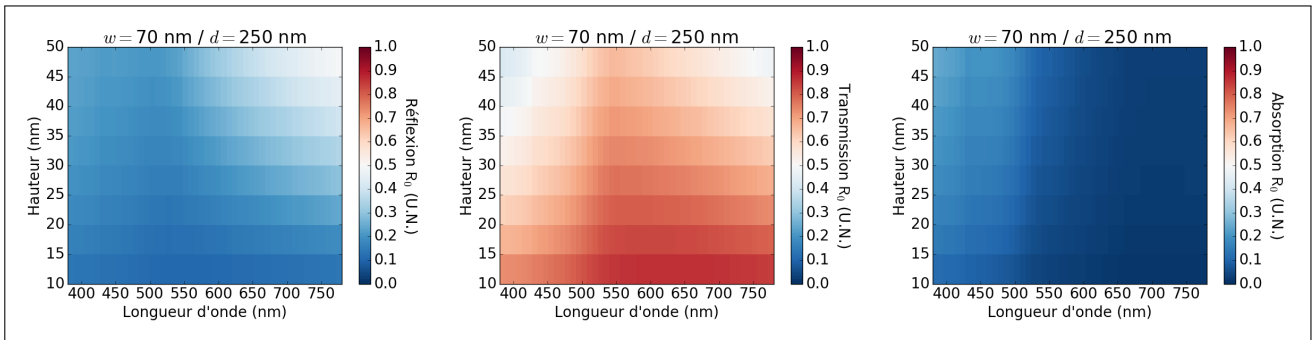


Fig. A.23 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 70$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

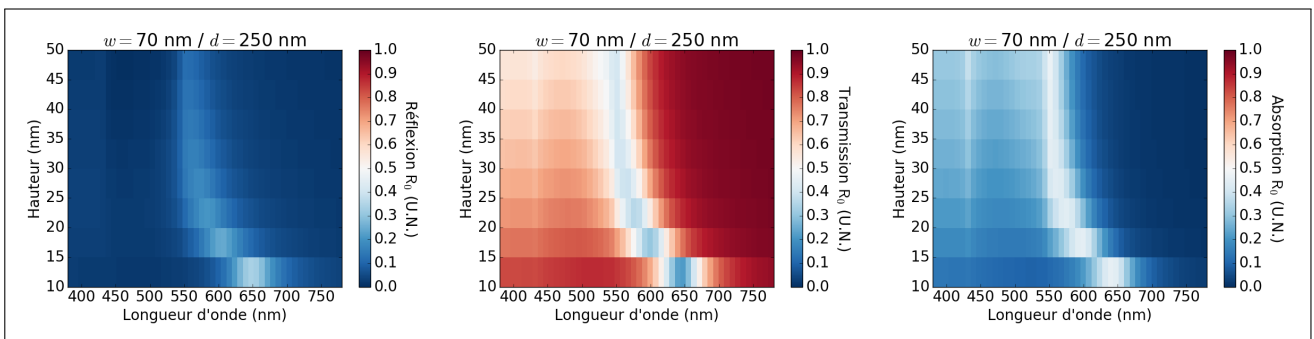


Fig. A.24 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 70$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

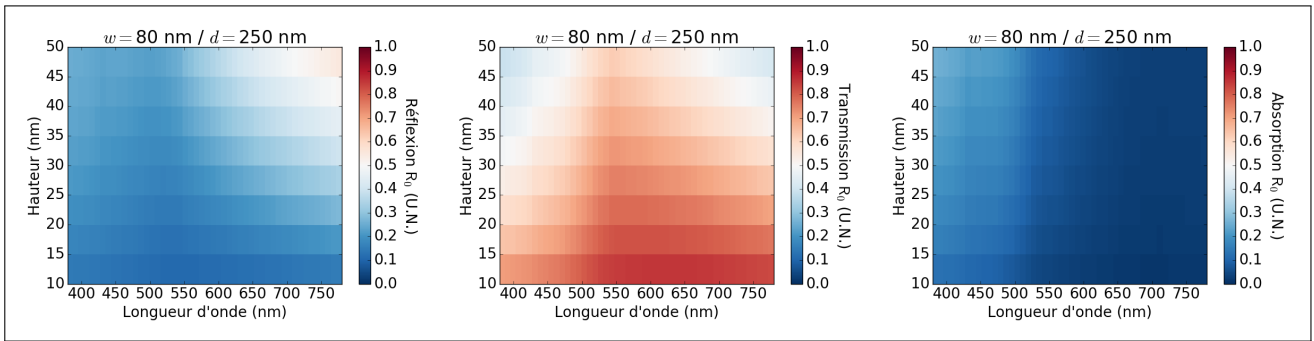


Fig. A.25 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 80$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

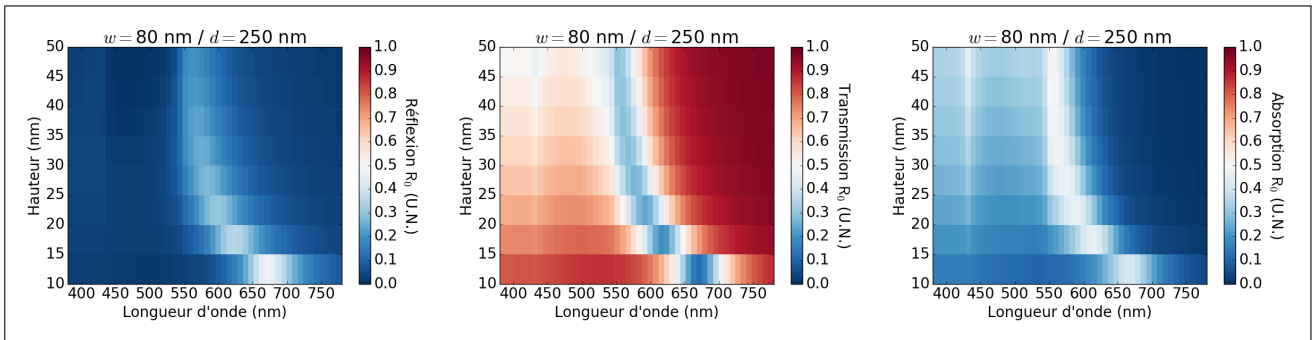


Fig. A.26 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 80$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

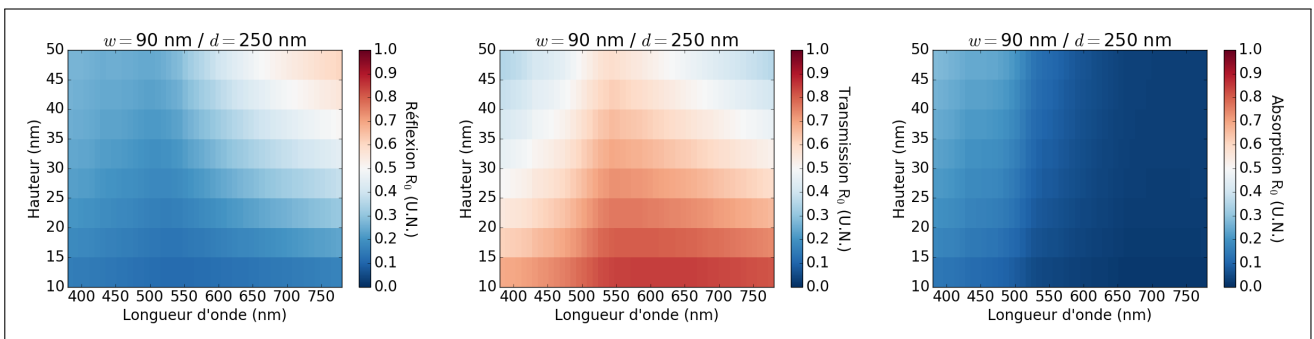


Fig. A.27 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 90$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

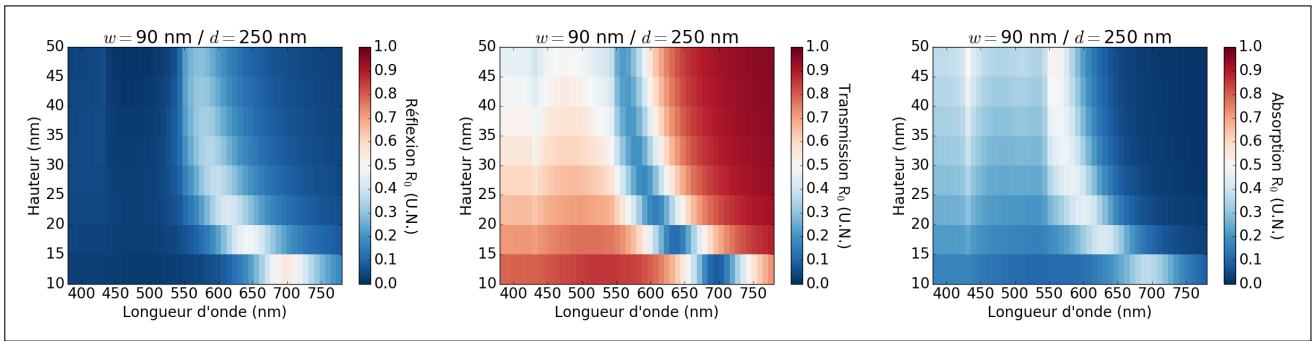


Fig. A.28 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 90$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

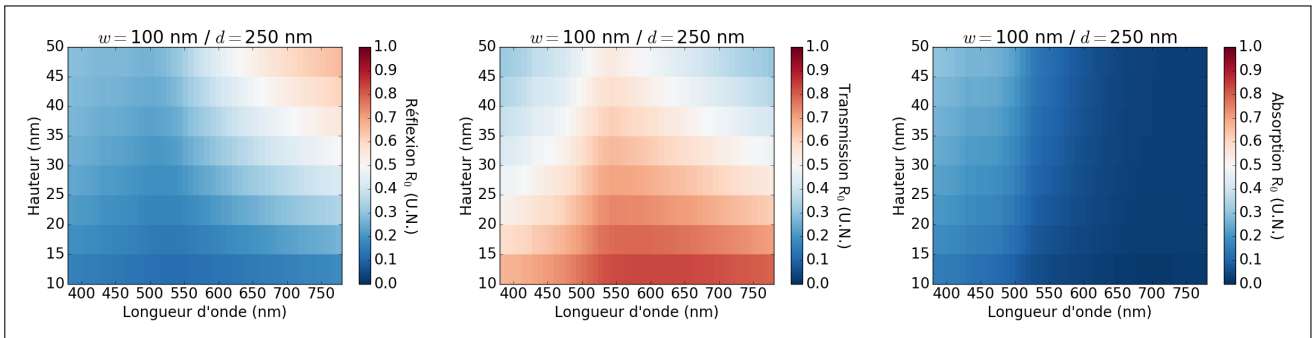


Fig. A.29 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 100$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

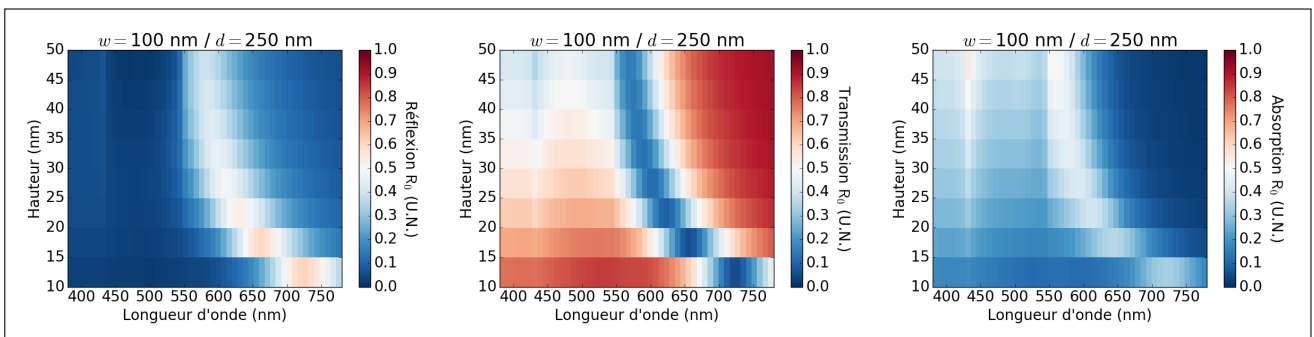


Fig. A.30 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 100$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

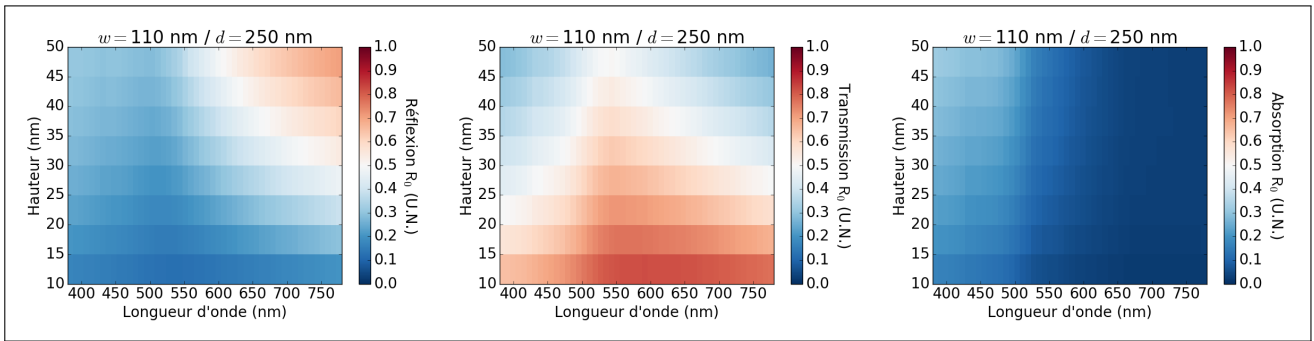


Fig. A.31 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 110$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

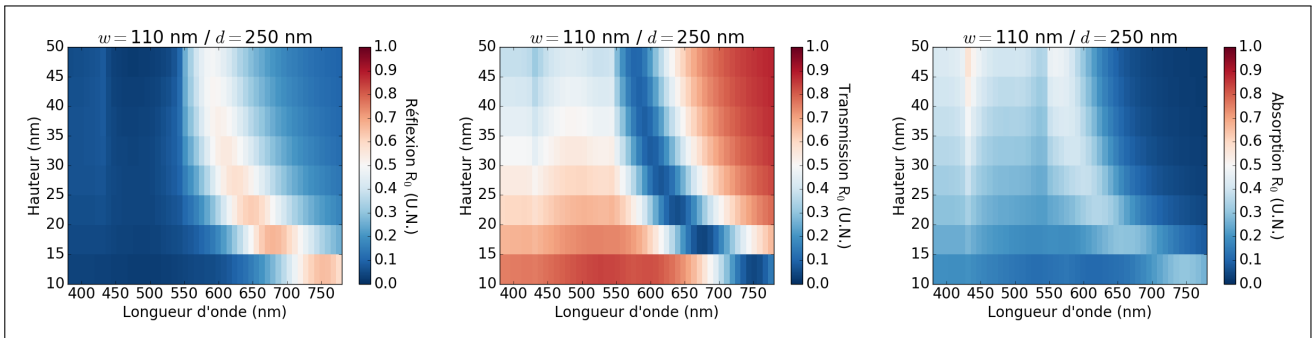


Fig. A.32 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 110$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

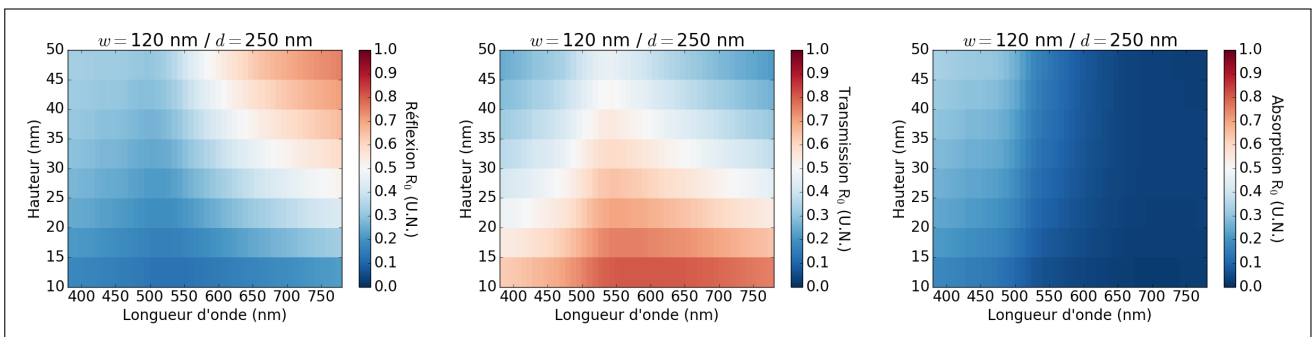


Fig. A.33 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 120$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

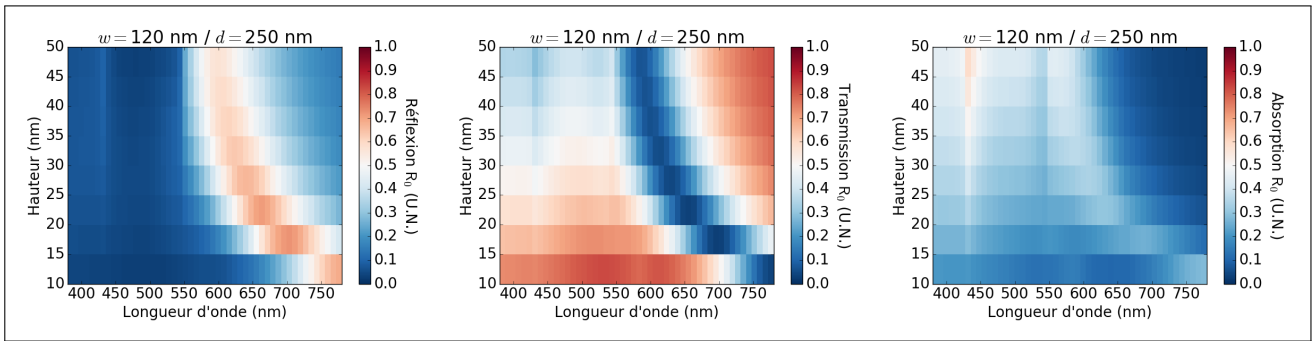


Fig. A.34 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 120$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

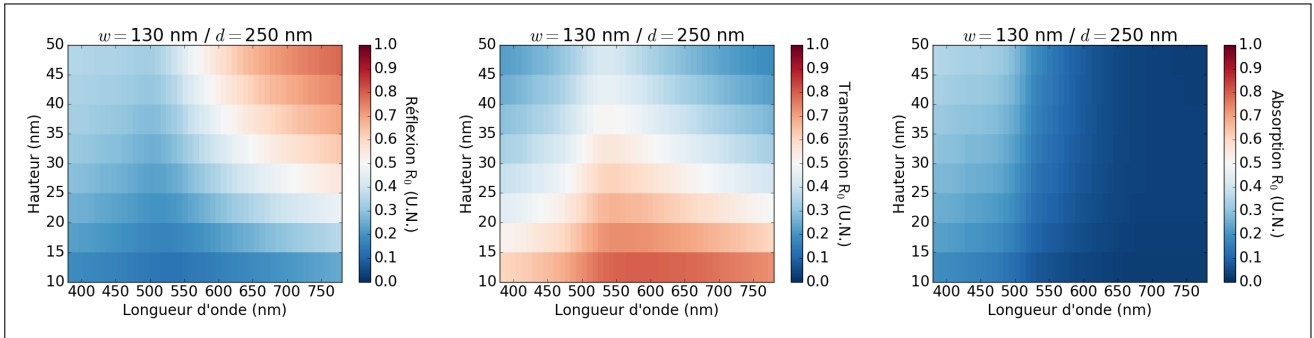


Fig. A.35 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 130$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

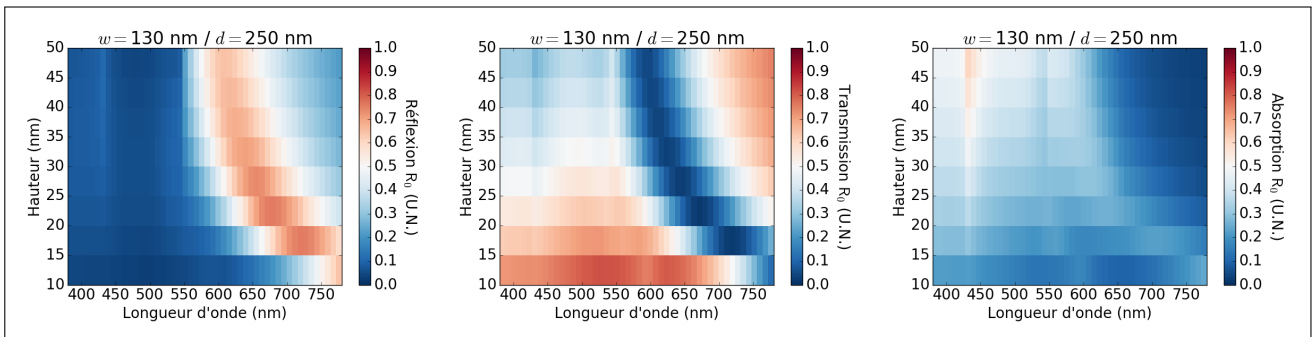


Fig. A.36 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 130$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

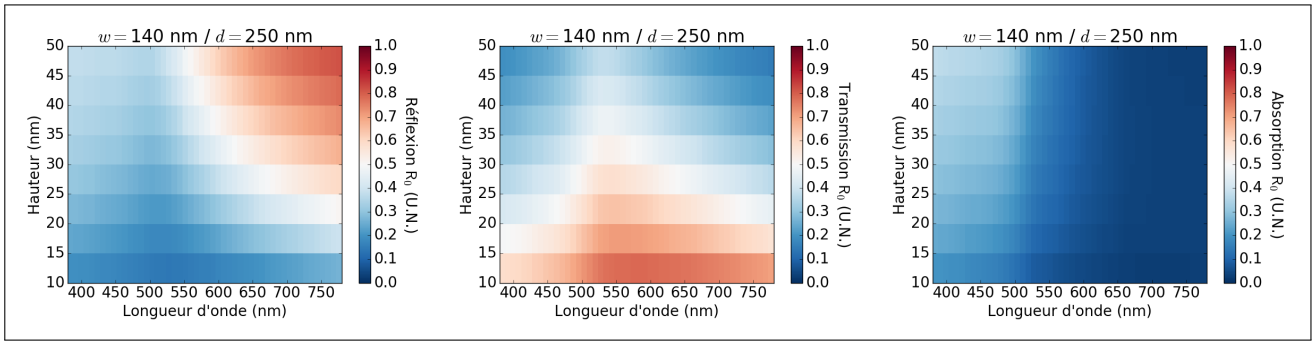


Fig. A.37 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 140$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation s .

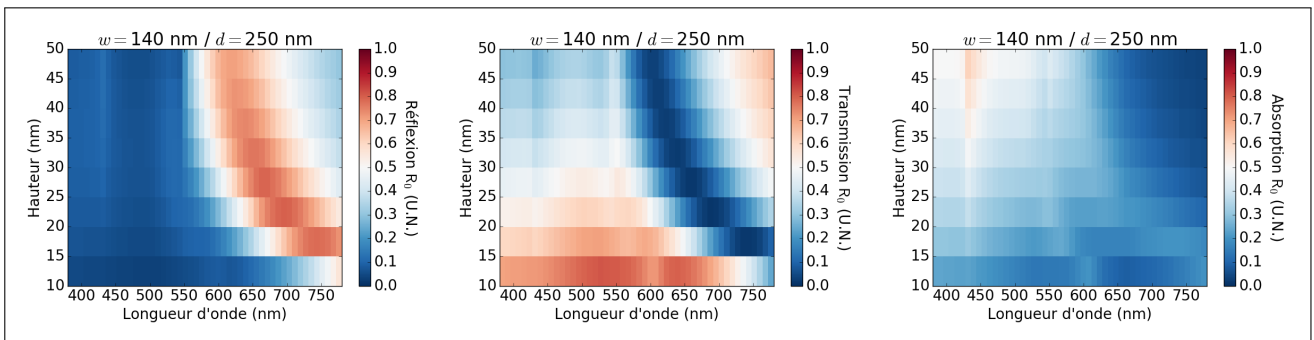


Fig. A.38 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures considéré avec $w = 140$ nm, $d = 250$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, en polarisation p .

A.2 Spectres de réseaux bi-dimensionnels de nanocylindres d'or à section circulaire

Dans cette annexe, les spectres de réseaux bi-dimensionnels de périodicité carrée de nanocylindres d'or à section circulaire sont présentés. La périodicité carrée du réseau est fixée à $a = 250$ nm et les nanocylindres sont directement déposés sur le substrat en silice sans accroche, ni couche de conduction, ni couche de couverture. La hauteur des nanocylindres d'or varie de 15 à 65 nm et le diamètre des nanocylindres varie de 30 à 200 nm (groupe de structure S5 *c.f.* figure 2.1.34 à gauche). L'onde plane incidente illuminant la structure possède un vecteur d'onde contenu dans le plan O_{xz} ($k_y = 0$) avec un angle d'incidence polaire fixé à $\theta_0 = 45^\circ$ et est polarisé en s . Elle possède une longueur d'onde qui varie dans $\lambda \in [380, 780]$ nm. Les spectres sont présentés de deux façons différentes :

- soit la hauteur des nanocylindres est fixée et leur diamètre varie,
- soit la largeur de nanocylindres est fixée et leur hauteur varie.

Il est à noter que seuls les ordres spéculaires ($R_{0,0}$ et $T_{0,0}$) sont considérés car les autres ordres sont négligeables en termes d'efficacité sur tout le spectre visible.

A.2.1 Hauteur de nanocylindres fixée

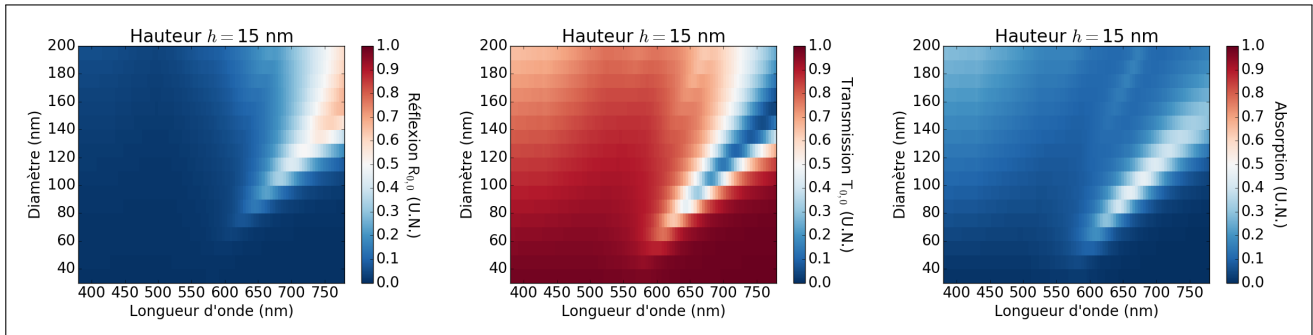


Fig. A.1 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 15$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s .

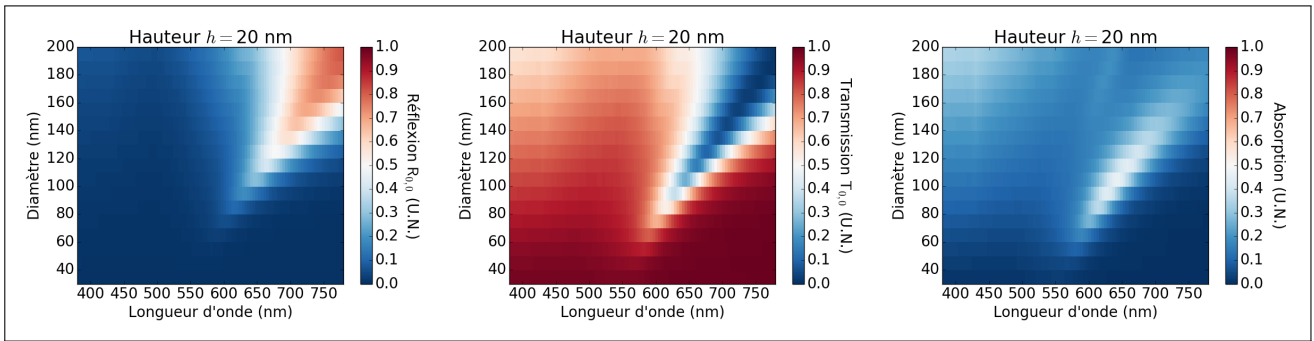


Fig. A.2 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 20$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

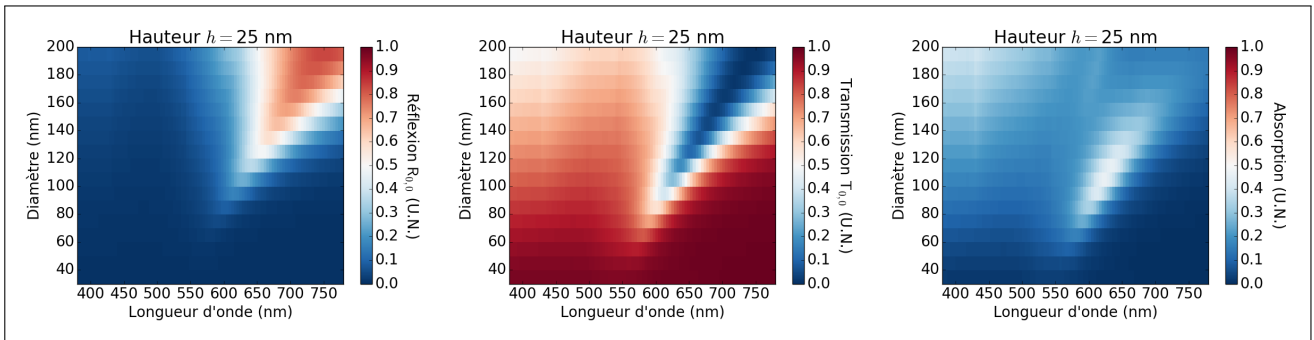


Fig. A.3 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 25$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

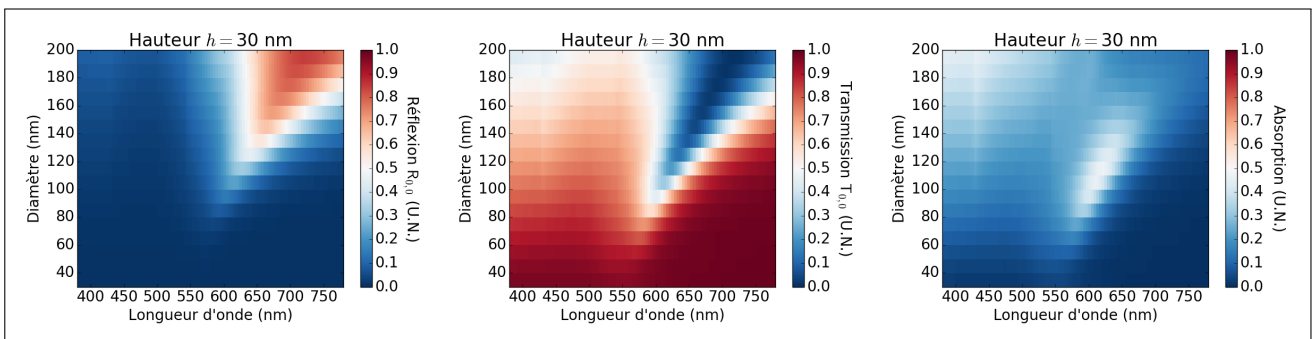


Fig. A.4 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 30$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

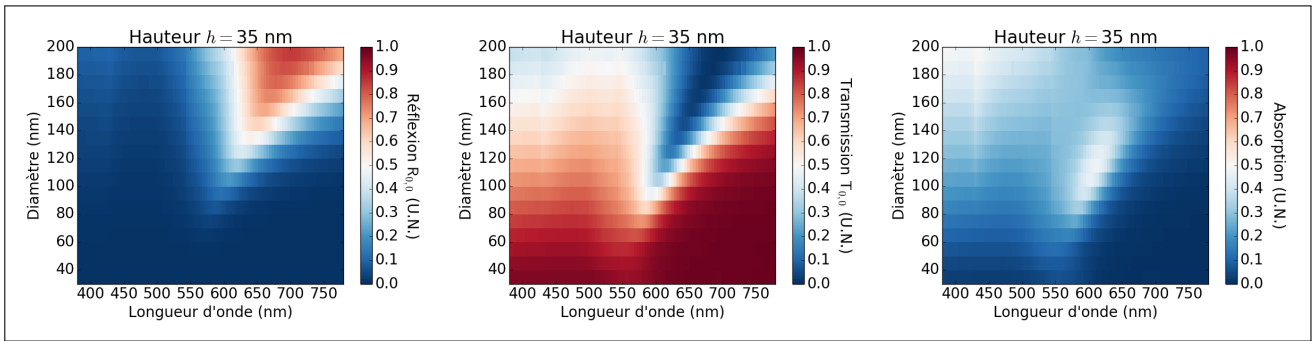


Fig. A.5 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 35$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

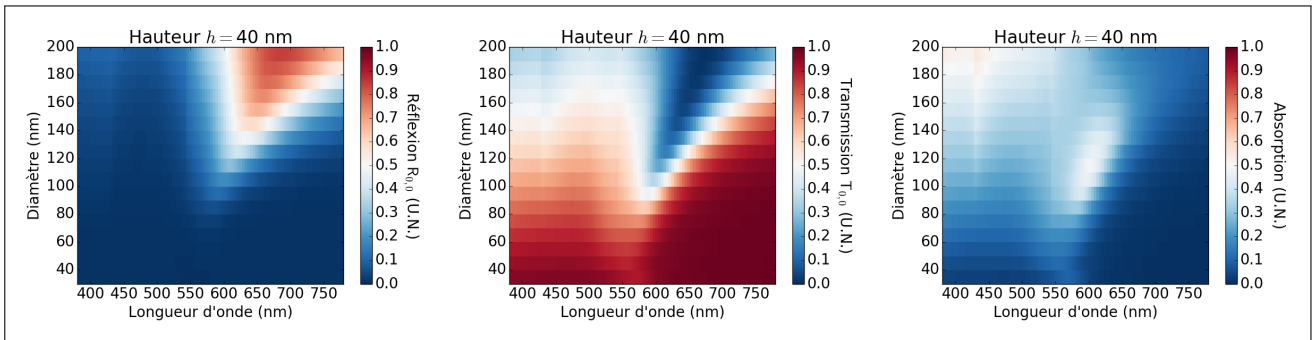


Fig. A.6 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 40$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

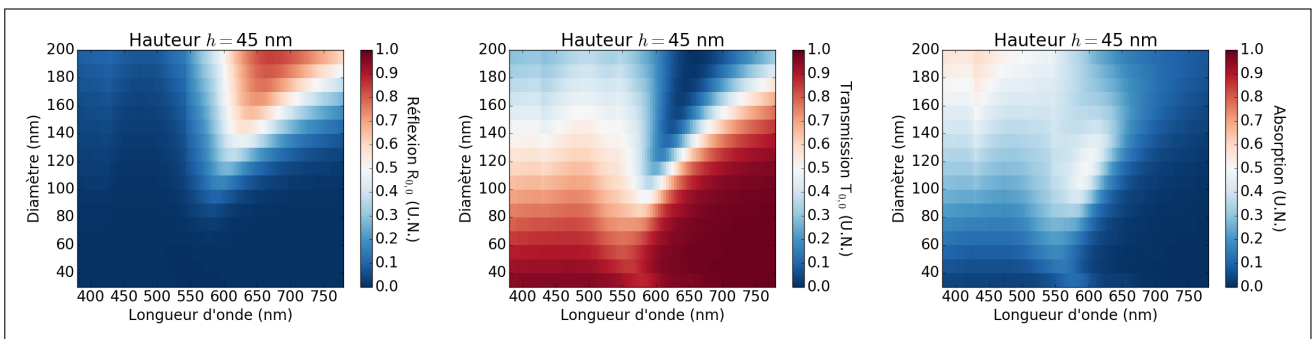


Fig. A.7 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 45$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

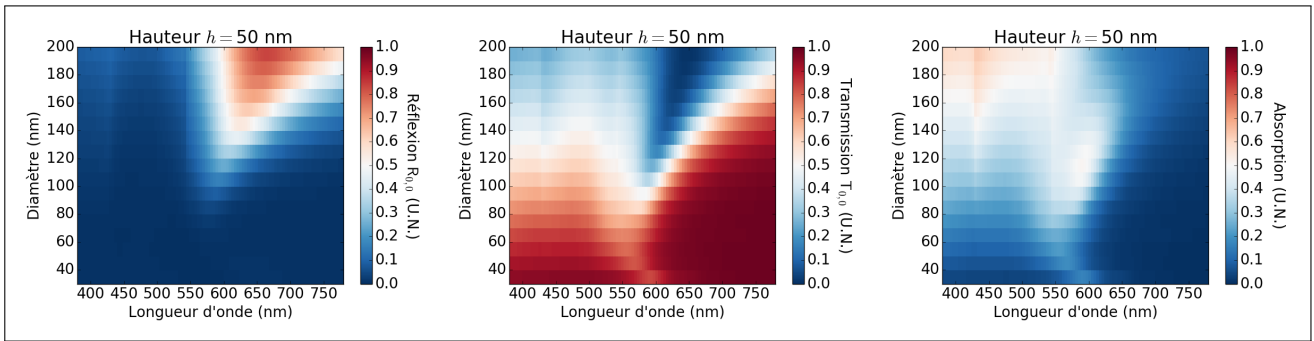


Fig. A.8 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 50$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

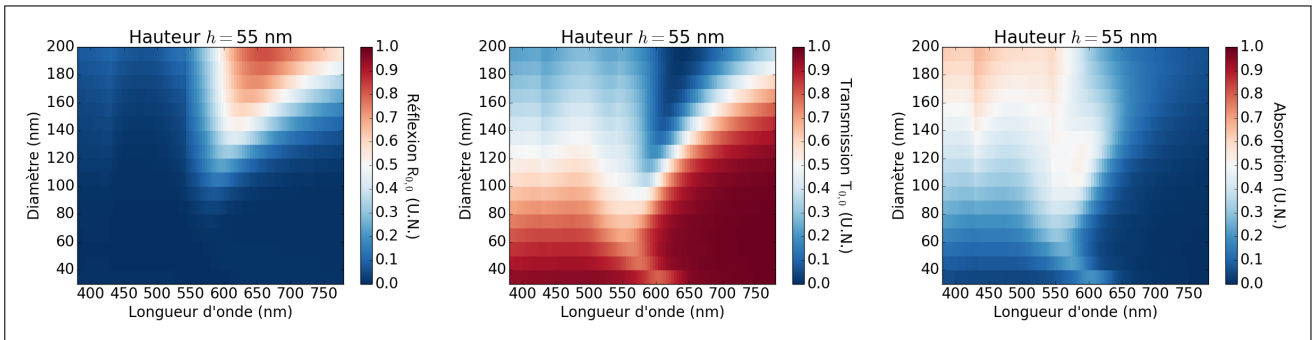


Fig. A.9 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 55$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

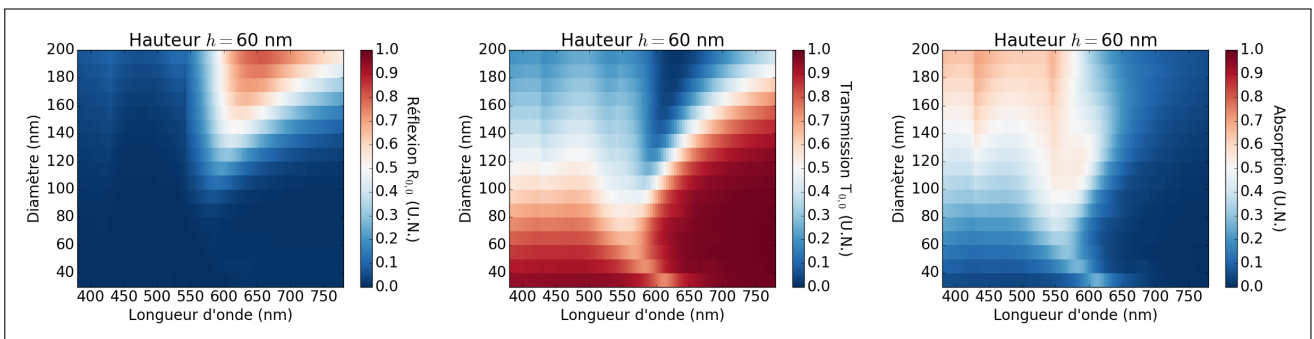


Fig. A.10 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 60$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

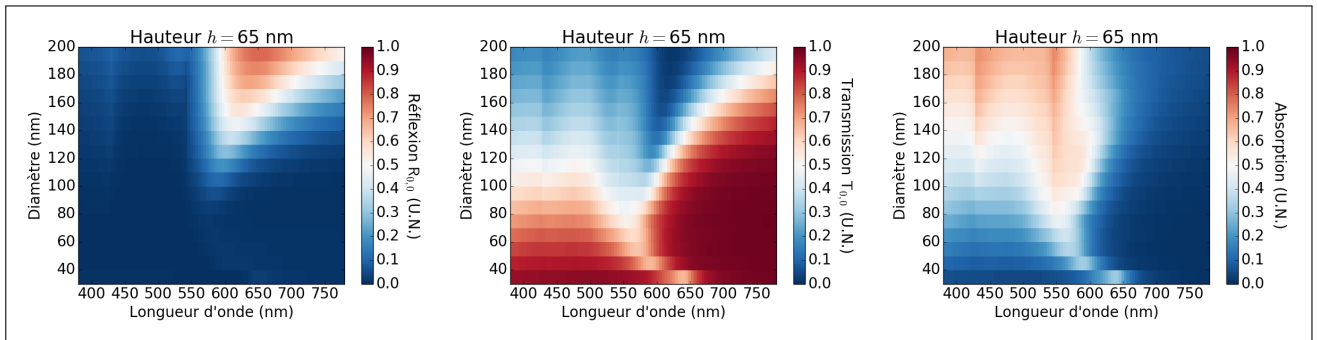


Fig. A.11 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structure S5 avec $h = 65$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

A.2.1.1 Diamètre de nanocylindres fixée

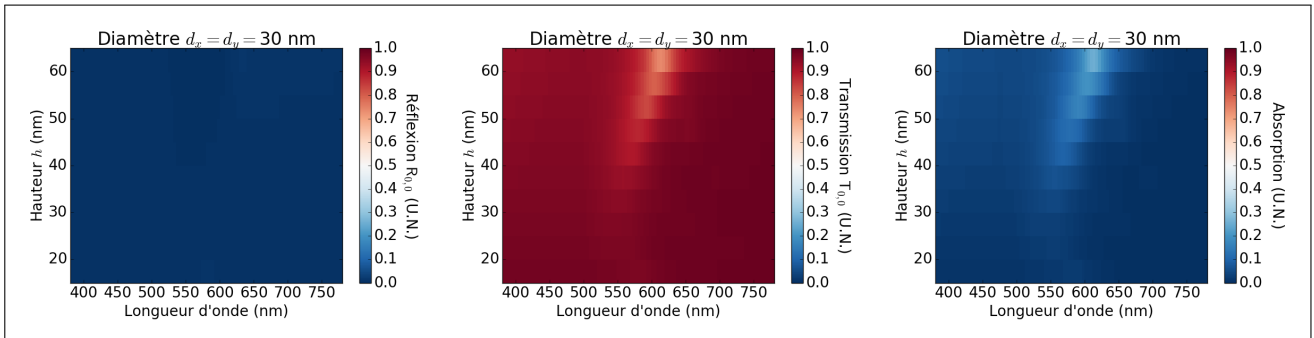


Fig. A.12 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 30$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

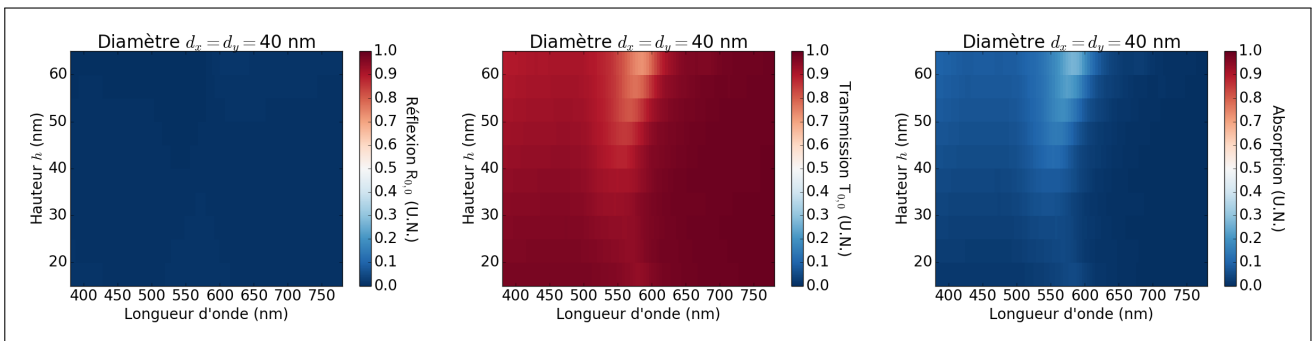


Fig. A.13 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 40$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

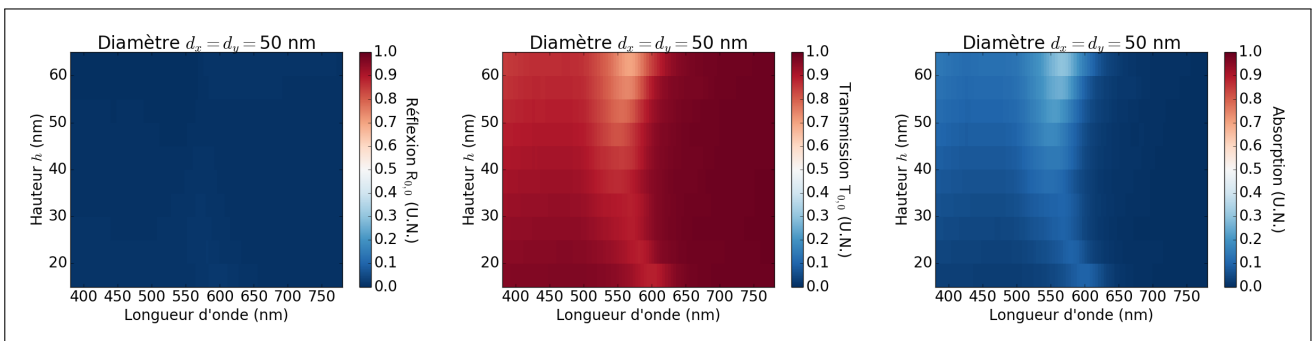


Fig. A.14 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 50$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

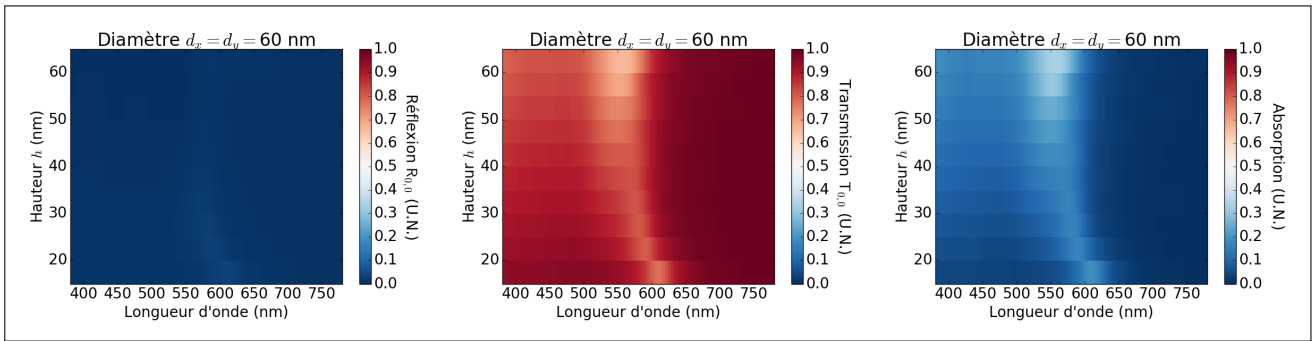


Fig. A.15 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 60$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

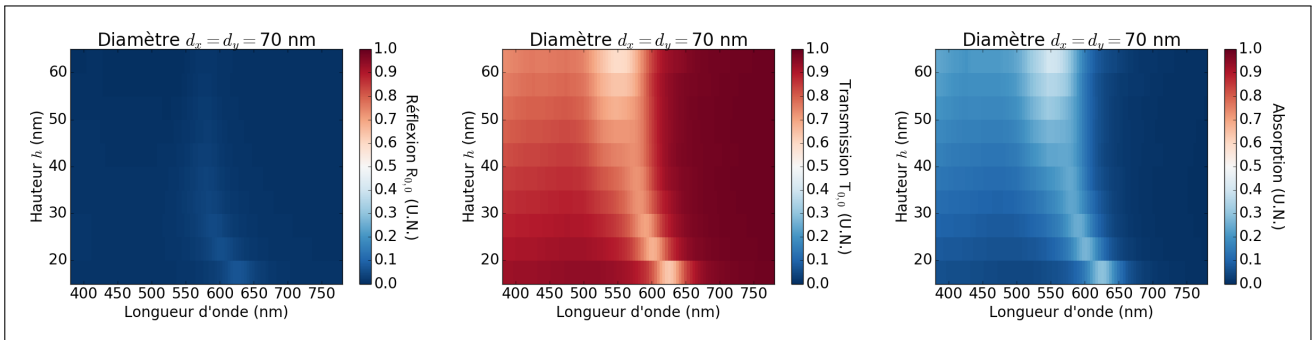


Fig. A.16 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 70$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

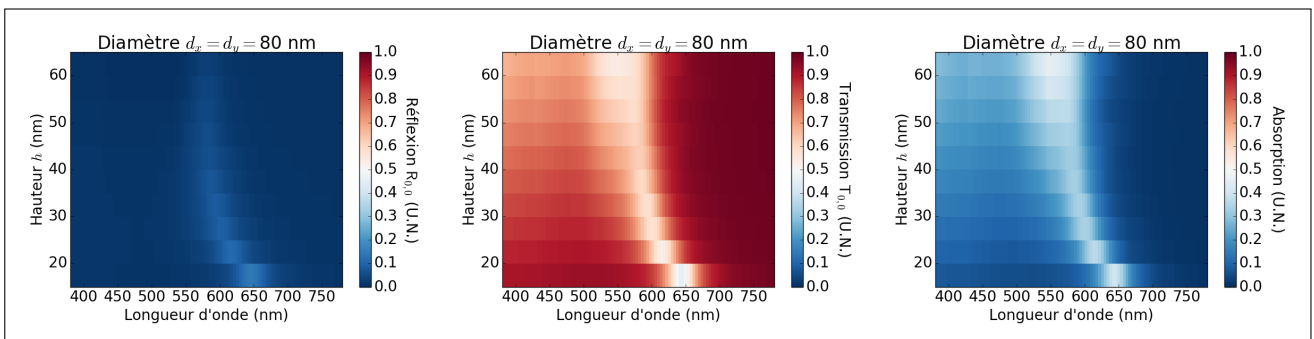


Fig. A.17 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 80$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

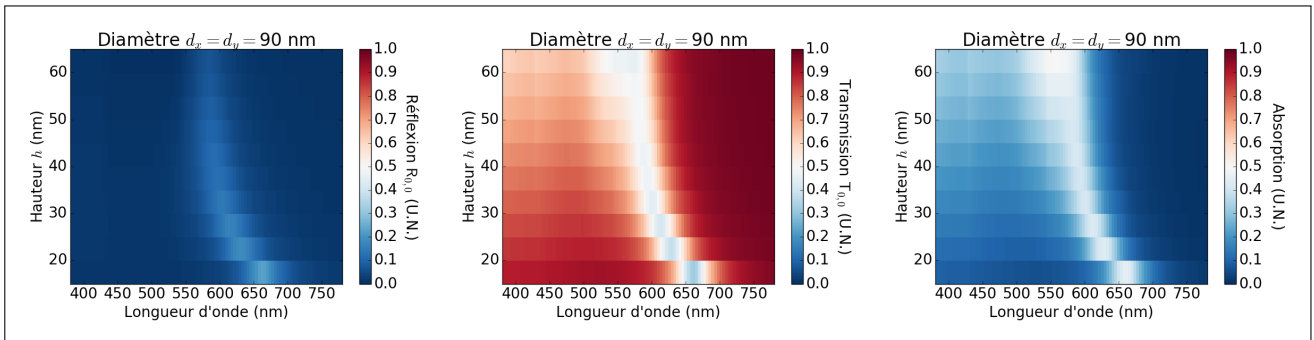


Fig. A.18 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 90$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

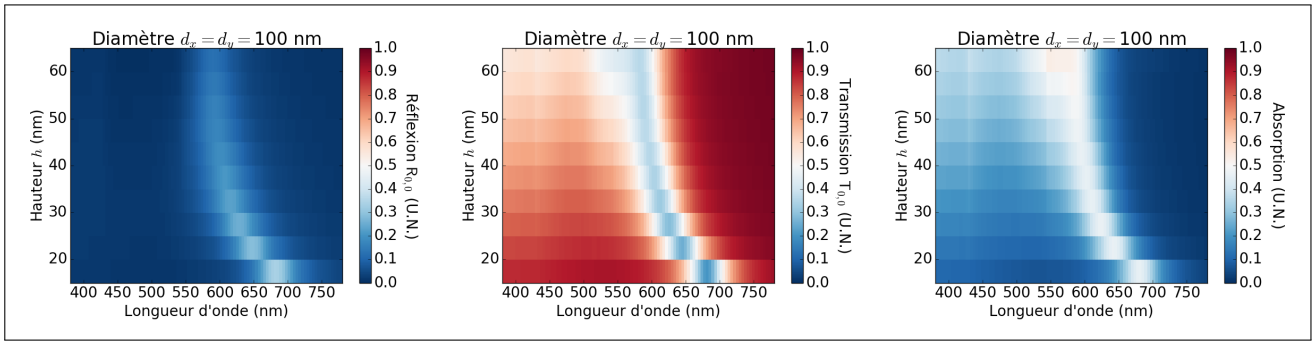


Fig. A.19 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 100$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

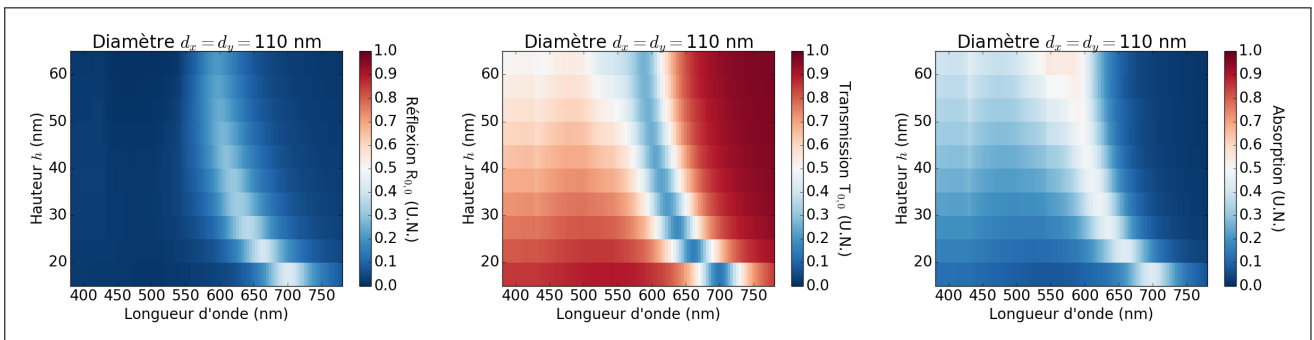


Fig. A.20 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 110$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

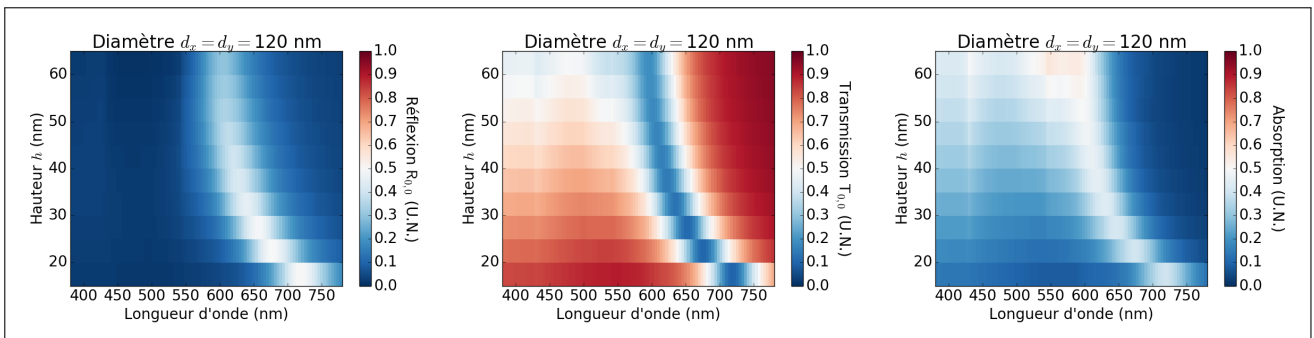


Fig. A.21 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 120$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

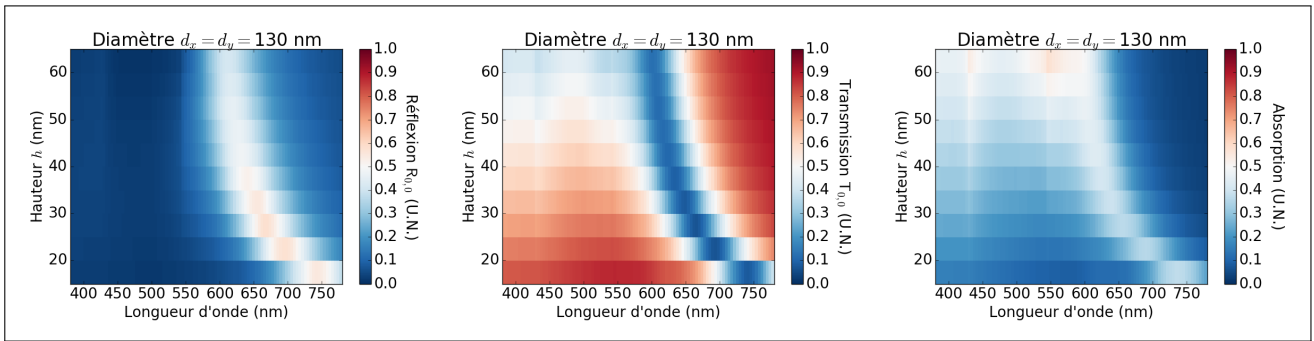


Fig. A.22 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 130$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

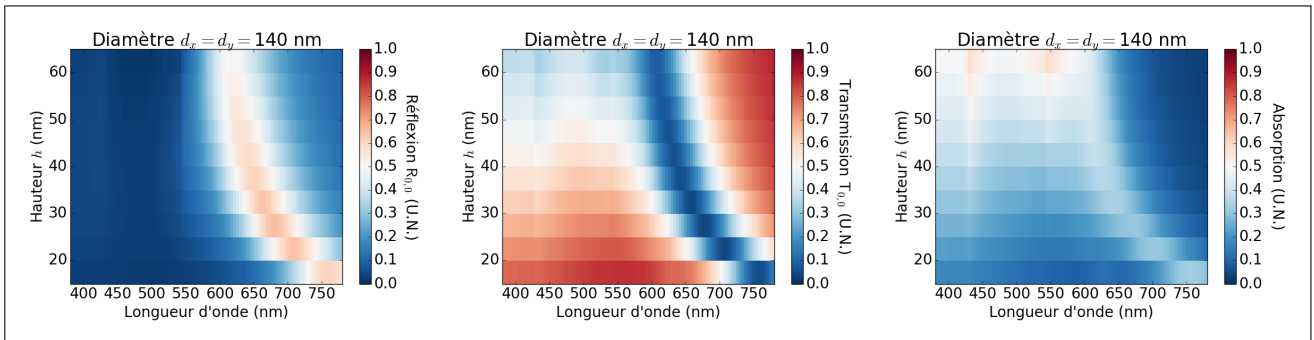


Fig. A.23 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 140$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

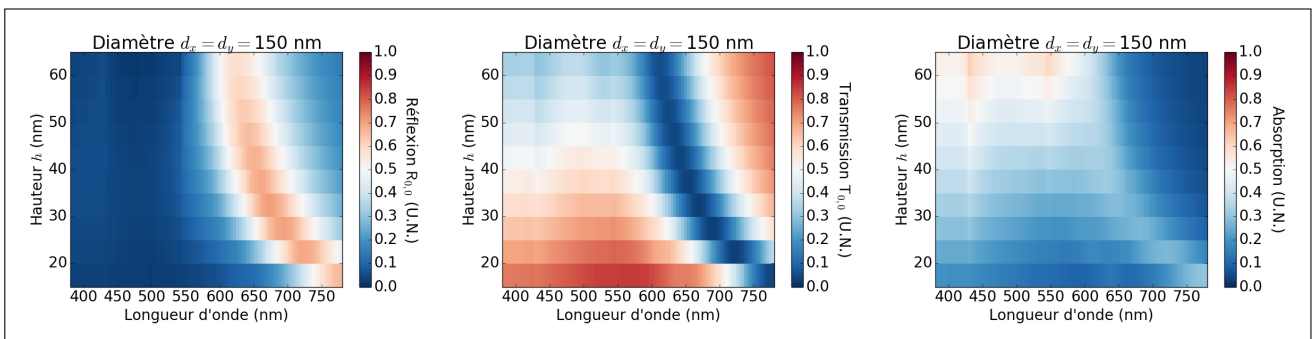


Fig. A.24 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 150$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

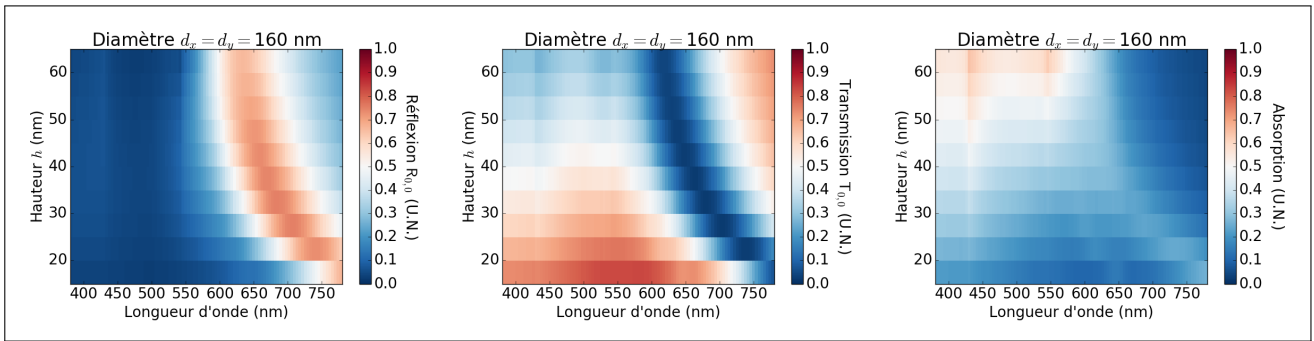


Fig. A.25 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 160$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

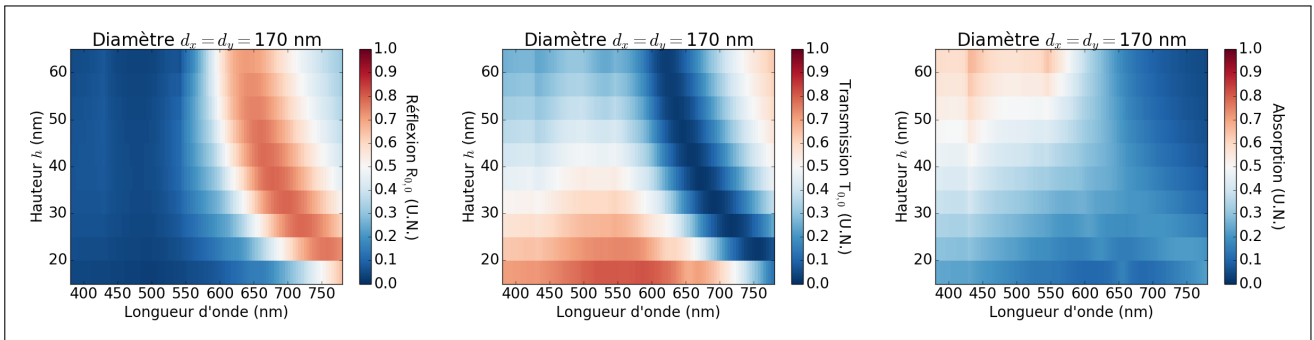


Fig. A.26 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 170$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

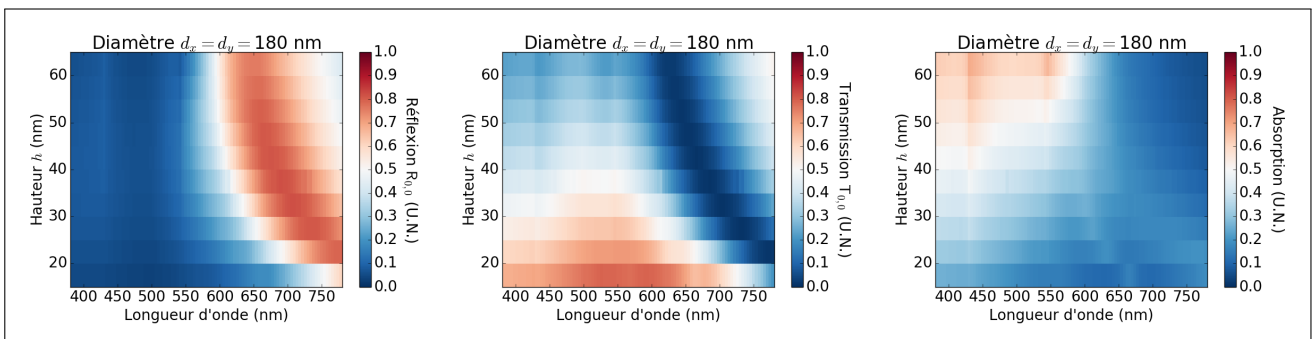


Fig. A.27 – Spectres d’efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d’absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 180$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

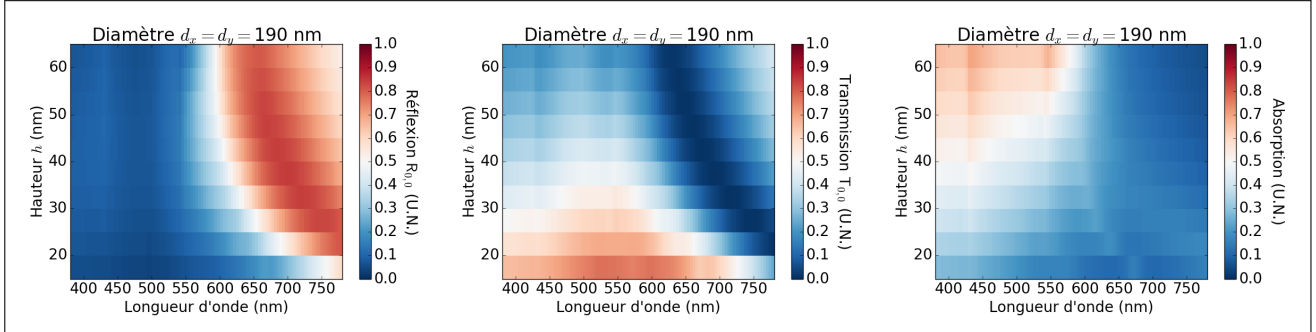


Fig. A.28 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 190$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

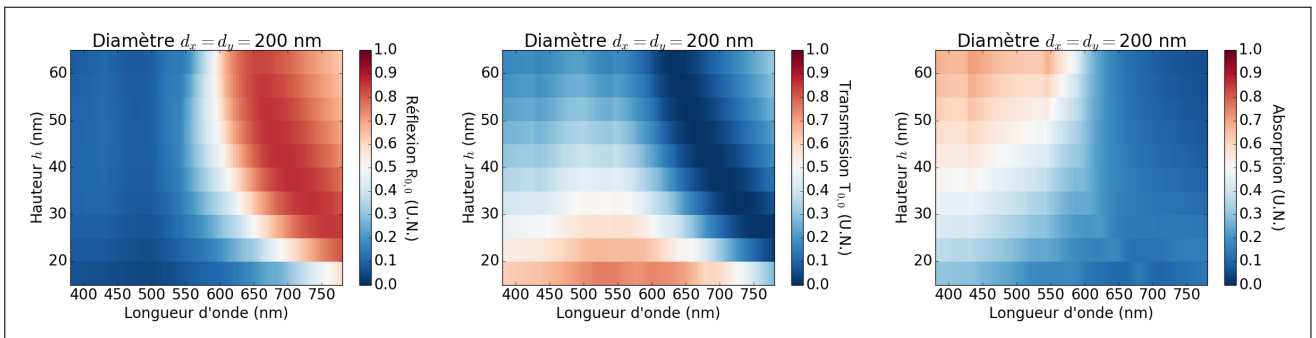


Fig. A.29 – Spectres d'efficacité de diffraction des ordres spéculaires en réflexion (à gauche), en transmission (au milieu) et d'absorption (à droite) pour le groupe de structures S5 avec $d_x = d_y = 200$ nm et $\theta_0 = 45^\circ$, $k_y = 0$ en polarisation s.

ANNEXE B

CALCUL DE DYADES DE DÉPOLARISATION STATIQUE

B.1 Introduction

Dans cette annexe, le calcul de dyade de dépolariation statique est effectué pour les structures suivantes:

- un cylindre à section circulaire placé dans le vide,
- un cylindre à section elliptique placé dans le vide,
- un cylindre à section elliptique posé sur un substrat,

Pour rappel, la dyade de dépolariation statique au centre du cylindre (à l'origine) est donnée par [82, 10]:

$$L_C = \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \Phi(\mathbf{r}), \quad (\text{B.1})$$

où $\Phi(\mathbf{r})$ est la fonction de Green statique du vide ou du dioptre plan (suivant le cas considéré) à l'origine et V est le volume du cylindre.

Dans un premier temps, le calcul de la fonction de Green statique du dioptre plan à l'origine est rappelé. Ensuite le calcul de la dyade de dépolariation sera effectué pour les trois configurations précédemment énoncées.

B.2 Fonction de Green statique du dioptre plan.

Soit \mathbf{r} le vecteur de coordonnées spatiales (x, y, z) . Nous considérons un substrat de permittivité relative ε^- situé dans le demi-espace tel que $z < -h$. L'autre demi-espace, $z > -h$, est rempli d'un superstrat de permittivité relative ε^+ . Soit $\epsilon(\mathbf{r})$ la permittivité relative totale de l'espace *i.e.* : $\epsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon^-$ si $z < -h$ et $\epsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon^+$ si $z > -h$. Nous considérons un point source situé

à l'origine $\mathbf{r} = 0$. Le potentiel électrostatique $\Phi(\mathbf{r})$ créé par ce point source est solution de l'équation:

$$\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r}) \nabla \Phi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}). \quad (\text{B.1})$$

Nous introduisons la transformée de Fourier spatiale bidimensionnelle de ce potentiel:

$$\tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = \int_{\mathbb{R}^2} dx dy \Phi(x, y, z) \exp[-i(k_x x + k_y y)], \quad (\text{B.2})$$

avec k_x et k_y les projections du vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ sur les axes x et y respectivement.

Pour $z > -h$: l'équation B.1 devient:

$$\epsilon^+ \nabla \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}) = \epsilon^+ \Delta \Phi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}). \quad (\text{B.3})$$

En appliquant la transformée de Fourier précédemment définie à cette équation, celle-ci devient l'équation différentielle ordinaire suivante:

$$\epsilon^+ \left(-k_x^2 - k_y^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = \delta(z). \quad (\text{B.4})$$

En définissant $k_{xy} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, les solutions de cette équation peuvent être écrites:

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = A \exp[-k_{xy}z] & \text{pour } z > 0 \text{ et} \\ \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = B \exp[-k_{xy}z] + C \exp[k_{xy}z] & \text{pour } -h < z < 0, \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

car pour $z > 0$, le potentiel doit tendre vers 0 quand $z \rightarrow \infty$.

Les conditions aux limites suivantes doivent également être respectées:

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}(k_x, k_y, 0^+) = A = B + C = \tilde{\Phi}(k_x, k_y, 0^-) \\ \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial z}(k_x, k_y, 0^+) - \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial z}(k_x, k_y, 0^-) = 1/\epsilon^+, \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

ce qui conduit à l'expression suivante pour $\tilde{\Phi}$ comme fonction de B :

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = \left(B - \frac{1}{2\epsilon^+ k_{xy}} \right) \exp[-k_{xy}z] & \text{pour } z > 0 \text{ et} \\ \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = B \exp[-k_{xy}z] - \frac{1}{2\epsilon^+ k_{xy}} \exp[k_{xy}z] & \text{pour } -h < z < 0. \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

Pour $z < -h$: l'équation B.1 devient:

$$\epsilon^- \nabla \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}) = \epsilon^- \Delta \Phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{B.8})$$

La solution de cette équation s'écrit:

$$\tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) = D \exp[k_{xy}z], \quad (\text{B.9})$$

car pour $z < 0$, le potentiel doit tendre vers 0 quand $z \rightarrow -\infty$.

Les conditions aux limites suivantes doivent également être respectées:

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}(k_x, k_y, -h^+) & = \tilde{\Phi}(k_x, k_y, -h^-) \\ \varepsilon^+ \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial z}(k_x, k_y, -h^+) & = \varepsilon^- \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial z}(k_x, k_y, -h^-), \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

ce qui conduit aux expressions suivantes de B et D :

$$\begin{cases} B & = -\frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \exp[-2k_{xy}h] \\ D & = -\frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \frac{2\varepsilon^+}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-}. \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

Ainsi l'expression du potentiel $\tilde{\Phi}$ peut être réécrite:

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) & = -\frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \exp[-k_{xy}(z + 2h)] - \frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \exp[-k_{xy}z] \quad \text{pour } z > 0, \\ \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) & = -\frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \exp[-k_{xy}(z + 2h)] - \frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \exp[k_{xy}z] \quad \text{pour } -h < z < 0, \\ \tilde{\Phi}(k_x, k_y, z) & = -\frac{1}{2k_{xy}\varepsilon^+} \frac{2\varepsilon^+}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \exp[k_{xy}z] \quad \text{pour } z < -h. \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

Il convient à présent d'appliquer la transformée de Fourier inverse aux différentes expressions du potentiel dans l'équation B.12. En notant $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, à travers l'utilisation de coordonnées cylindriques, la transformée de Fourier inverse du potentiel pour $z < 0$ est calculée:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} dk_x dk_y \frac{\exp[k_{xy}z]}{2k_{xy}} \exp[i(k_x x + k_y y)] \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty dk_{xy} \int_0^{2\pi} d\phi \exp[k_{xy}z] \exp[ik_{xy}\rho \cos(\phi)] \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dk_{xy} \exp[k_{xy}(z + i\rho \cos[\phi])] \\ &= -\frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{z + i\rho \cos[\phi]} \\ I &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{2z + i\rho(\exp[i\phi] + \exp[-i\phi])}. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Par substitution, en posant $u = \exp[i\phi]$ avec $du = iud\phi$, l'équation B.13 peut être réécrite:

$$\begin{aligned}
I &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_{\gamma} \frac{du}{iu} \frac{1}{2z + i\rho(u + 1/u)} \\
&= -\frac{1}{4\pi^2} \int_{\gamma} du \frac{1}{2izu - \rho u^2 - \rho} \\
&= \frac{1}{4\pi^2 \rho} \int_{\gamma} du \frac{1}{u^2 - 2iz/\rho u + 1} \\
I &= \frac{1}{4\pi^2 \rho} \int_{\gamma} du \frac{1}{(u - u_+)(u - u_-)},
\end{aligned} \tag{B.14}$$

avec $u_{\pm} = i[z/\rho \pm \sqrt{z^2/\rho^2 + 1}]$ et γ le cercle unitaire du plan complexe dont le centre est à l'origine.

Appliquons le théorème des résidus de Cauchy au calcul de l'intégrale de l'équation B.14. En remarquant que le produit des deux pôles (u_p, u_m) est égal à 1, si un des deux pôles est à l'intérieur du cercle γ , l'autre est à l'extérieur. On a alors:

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{4\pi^2 \rho} 2i\pi \frac{1}{u_+ - u_-} = \frac{1}{2\pi \rho} \frac{1}{2\sqrt{z^2/\rho^2 + 1}} \\
&= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\
I &= \frac{1}{4\pi |\mathbf{r}|}.
\end{aligned} \tag{B.15}$$

En raisonnant de la même façon que précédemment pour les autres domaines de l'espace ($z > 0$ et $-h < z < 0$), l'expression du potentiel dans l'espace direct est retrouvée:

$$\begin{cases} \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon^+} \left[\left(\frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \right) \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|} + \frac{1}{4\pi |\mathbf{r}|} \right] & \text{pour } z > -h, \\ \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon^+} \left(\frac{2\varepsilon^+}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \right) \frac{1}{4\pi |\mathbf{r}|} & \text{pour } z < -h, \end{cases} \tag{B.16}$$

où \mathbf{r}_0 est le vecteur de coordonnées spatiales $(0, 0, -2h)$.

Dans cette expression, on retrouve la présence des coefficients de réflexion $r = \frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-}$ et de

transmission $t = \frac{2\varepsilon^+}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-}$ du dioptré plan.

La fonction de Green statique du vide est également contenue dans cette expression en prenant $\varepsilon^+ = \varepsilon^- = 1$ et est rappelé par l'équation suivante:

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi |\mathbf{r}|}. \tag{B.17}$$

B.3 Calcul de la dyade de dépolarisation statique pour un cylindre droit à section circulaire dans le vide.

Nous considérons un cylindre droit à section circulaire placé dans le vide de hauteur $2h$ et de rayon R orienté suivant l'axe O_z dont le centre est situé à l'origine. Son volume est noté V et sa surface S . Le potentiel électrostatique $\Phi(\mathbf{r})$ créé par un point source situé à l'origine (au centre du cylindre) s'écrit:

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|}. \quad (\text{B.1})$$

La dyade de dépolarisation statique au centre du cylindre (à l'origine du système de coordonnées) est donné par:

$$L_0 = \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \Phi(\mathbf{r}) = - \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|}. \quad (\text{B.2})$$

Une singularité est présente à l'origine dans l'intégrale de l'équation B.2. Ainsi, celle-ci est divisée en deux:

- la première sur le volume B_0 d'une sphère infinitésimale située à l'origine (sa surface est noté S_0),
- la seconde sur le reste du volume $V \setminus B_0$.

Ainsi l'équation B.2 devient:

$$L_0 = - \int_{B_0} d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} - \int_{V \setminus B_0} d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|}. \quad (\text{B.3})$$

Pour intégrer sur B_0 : le théorème de Green-Ostrogradski est utilisé et l'intégrale sur B_0 devient:

$$- \int_{B_0} d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} = - \int_{S_0} dS_0 \hat{\mathbf{n}}_0 \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} = \int_{S_0} dS_0 \hat{\mathbf{n}}_0 \frac{\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3}, \quad (\text{B.4})$$

où dS_0 est l'élément de surface infinitésimal de la sphère et $\hat{\mathbf{n}}_0$ la normale extérieure unitaire à sa surface. Ainsi, en utilisant le système de coordonnées sphériques, $dS = |\mathbf{r}|^2 \sin \varphi d\varphi d\theta$ et $\hat{\mathbf{n}}_0 = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$, l'équation B.4 devient:

$$- \int_{B_0} d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \sin \varphi \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^2} = 1/3 \mathbf{U}, \quad (\text{B.5})$$

en utilisant les propriétés de symétrie de la sphère (\mathbf{U} étant la dyade diagonale unitaire).

Pour l'intégration sur $V \setminus B_0$: le théorème de Green-Ostrogradski est appliqué une nouvelle fois

et l'intégrale sur $V \setminus B_0$ devient:

$$\begin{aligned} - \int_{V \setminus B_0} d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} &= - \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} + \int_{S_0} dS_0 \hat{\mathbf{n}} \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} \\ &= \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \frac{\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} - 1/3 \mathbf{U}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

où dS est l'élément de surface infinitésimal du cylindre et $\hat{\mathbf{n}}$ la normale unitaire extérieure à sa surface.

L'équation B.2 devient alors:

$$L_0 = \int_S dS \frac{\hat{\mathbf{n}} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3}. \quad (\text{B.7})$$

La surface S est alors décomposée en trois surfaces : S_{z+} , S_{z-} et S_{Lat} respectivement la surface haute, basse et latérale du cylindre. Ainsi l'équation B.7 devient:

$$\begin{aligned} L_0 &= \int_{S_{z+}} dS_{z+} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} + \int_{S_{z-}} dS_{z-} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z-} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} + \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \\ &= 2 \int_{S_{z+}} dS_{z+} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} + \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \\ L_0 &= 2L_{0z} + L_{0Lat} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

en utilisant la symétrie de S_{z-} et S_{z+} par rapport à l'origine, avec:

$$\hat{\mathbf{n}}_{z+} = -\hat{\mathbf{n}}_{z-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{n}}_{Lat} = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad dS_{z+} = dS_{z-} = \rho d\rho d\phi \quad \text{et} \quad dS_{Lat} = R d\phi dz. \quad (\text{B.9})$$

Pour $S_{z\pm}$ et L_{0z} : $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \rho \cos \phi \\ \rho \sin \phi \\ h \end{pmatrix}$ et $\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \rho \cos \phi & \rho \sin \phi & h \end{pmatrix}$ et comme:

$$\begin{aligned} L_{0z} &= \int_{S_{z+}} dS_{z+} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \\ L_{0z} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^R d\rho \rho \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

La seule composante non nulle de L_{0z} est la composante suivant zz .

L'expression de $L_{0z} = L_{0zz}$ est obtenue par substitution en posant $u = \rho^2 + h^2$ et $du = 2\rho d\rho$:

$$\begin{aligned}
L_{0z} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^R d\rho \rho \frac{h}{4\pi(\rho^2 + h^2)^{3/2}} \\
&= \frac{h}{2} \int_0^R d\rho \frac{\rho}{(\rho^2 + h^2)^{3/2}} \\
&= \frac{h}{4} \int_{h^2}^{R^2+h^2} \frac{du}{u^{3/2}} \\
L_{0z} &= -\frac{h}{2} \left[\frac{1}{u^{1/2}} \right]_{h^2}^{R^2+h^2} \\
2L_{0z} &= 1 - \frac{h}{\sqrt{R^2 + h^2}}.
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Pour S_{Lat} et L_{0Lat} : $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} R \cos \phi \\ R \sin \phi \\ z \end{pmatrix}$ et $\hat{\mathbf{n}}_{Lat} \mathbf{r} = \begin{pmatrix} R \cos^2 \phi & R \cos \phi \sin \phi & z \cos \phi \\ R \cos \phi \sin \phi & R \sin^2 \phi & z \sin \phi \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$,

et comme:

$$\begin{aligned}
L_{0Lat} &= \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat} \mathbf{r}}{4\pi |\mathbf{r}|^3} \\
L_{0Lat} &= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi R \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat} \mathbf{r}}{4\pi |\mathbf{r}|^3}.
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Par symétrie, les seules composantes non-nulles de L_{0Lat} sont les composantes suivants xx et yy . L'expression de $L_{0Lat} = L_{0xx} + L_{0yy}$ est alors obtenue en effectuant deux intégrations (une pour L_{0xx} et une pour L_{0yy}).

- Pour L_{0xx} :

$$\begin{aligned}
L_{0xx} &= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi R^2 \frac{\cos^2[\phi]}{4\pi |\mathbf{r}|^3} \\
&= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi R^2 \frac{\cos^2[\phi]}{4\pi (z^2 + R^2)^{3/2}} \\
L_{0xx} &= \frac{R^2}{2\pi} \int_0^h \frac{dz}{(z^2 + R^2)^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2[\phi].
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Comme

$$\int_0^{2\pi} d\phi \cos^2[\phi] = 1/2 \int_0^{2\pi} d\phi (1 + \cos[2\phi]) = 1/2 [x + 1/2 \sin[2x]]_0^{2\pi} = \pi, \tag{B.14}$$

par substitution, en posant $z = R \tan[u]$, $dz = \frac{R du}{\cos^2[u]}$ et $(R^2 + z^2)^{3/2} = R^3(1 + \tan^2[u])^{3/2} = R^3 / \cos^3[u]$, on a :

$$\begin{aligned}
\int_0^h \frac{dz}{(R^2 + z^2)^{3/2}} &= R \int_0^{\arctan[h/R]} du \cos[u] / R^3 \\
&= \frac{1}{R^2} [\sin[u]]_0^{\arctan[h/R]} \\
&= \frac{1}{R^2} \sin[\arctan[h/R]] \\
&= \frac{1}{R^2} \frac{h/R}{\sqrt{1 + (h/R)^2}} \\
\int_0^h \frac{dz}{(z^2 + h^2)^{3/2}} &= \frac{h}{R^2 \sqrt{h^2 + R^2}},
\end{aligned} \tag{B.15}$$

et finalement :

$$\begin{aligned}
L_{0xx} &= \frac{R^2}{2\pi} \int_0^h \frac{dz}{(z^2 + R^2)^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2[\phi] \\
&= \frac{R^2}{2\pi} \frac{h}{R^2 \sqrt{h^2 + R^2}} \\
L_{0xx} &= \frac{1}{2} \frac{h}{\sqrt{h^2 + R^2}}.
\end{aligned} \tag{B.16}$$

- Pour L_{1yy} : la seule intégrale qui diffère du calcul précédent est la suivante :

$$\int_0^{2\pi} d\phi \sin^2[\phi] = 1/2 \int_0^{2\pi} d\phi (1 - \cos[2\phi]) = 1/2 [x - 1/2 \sin[2x]]_0^{2\pi} = \pi. \tag{B.17}$$

Le résultat pour L_{0yy} est donc le même que pour L_{0xx} :

$$L_{0yy} = \frac{1}{2} \frac{h}{\sqrt{h^2 + R^2}}. \tag{B.18}$$

Finalement, en notant que $\cos \theta = \frac{h}{\sqrt{h^2 + R^2}}$ où θ est l'angle défini entre le centre du cylindre et un point du cercle délimitant frontière du disque supérieur du cylindre, la dyade de dépolarisation statique du cylindre placé dans le vide L_0 de l'équation B.2 est obtenue :

$$L_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}. \tag{B.19}$$

B.4 Calcul de la dyade de dépolarisation statique pour un cylindre droit à section elliptique dans le vide.

Le cylindre considéré est à présent elliptique de rayons R_x et R_y suivant les axes O_x et O_y respectivement et de hauteur $2h$. Son volume est noté V et sa surface S . Le cylindre est toujours placé dans le vide.

La dyade de dépolarisation statique au centre du cylindre (à l'origine du système de coordonnées) est donné par:

$$L_{0EC} = \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \Phi(\mathbf{r}) = - \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|}. \quad (\text{B.1})$$

Le problème de la singularité à l'origine est traité de la même façon que précédemment:

$$L_{0EC} = \int_S dS \frac{\hat{\mathbf{n}}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3}, \quad (\text{B.2})$$

où dS est l'élément de surface infinitésimal du cylindre et $\hat{\mathbf{n}}$ est la normale unitaire extérieure à sa surface. La même décomposition de la surface du cylindre S est effectuée (S_+ , S_- and S_{Lat}). L'équation B.2 devient alors (grâce à l'utilisation de la symétrie des surfaces S_- et S_+ par rapport à l'origine):

$$L_{0EC} = 2 \int_{S_+} dS_+ \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} + \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \quad (\text{B.3})$$

$$L_{0EC} = L_{0ECz} + L_{0ECLat},$$

avec

$$\hat{\mathbf{n}}_{z+} = -\hat{\mathbf{n}}_{z-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.4})$$

pour les surfaces haute et basse du cylindre.

Pour $S_{z\pm}$ et L_{0ECz} :

La surface $S_{z\pm}$ est définie comme $\{S_{z\pm} = (x, y, z) \mid x^2/R_x^2 + y^2/R_y^2 \leq 1 \text{ et } z = \pm h\}$.

L'élément de surface infinitésimal de $S_{z\pm}$ est $dS_{z\pm} = \rho d\rho d\phi$ avec $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Cette surface peut également être exprimée en fonction de ρ et ϕ :

$\{S_{z\pm} = (\rho, \phi, z) \mid \rho \leq R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi} \text{ et } \phi \in [0, 2\pi] \text{ et } z = \pm h\}$.

Alors, pour \mathbf{r} décrivant $S_{z\pm}$, $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x = \rho \cos \phi \\ y = \rho \sin \phi \\ \pm h \end{pmatrix}$ et $\hat{\mathbf{n}}_{z\pm} \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \rho \cos \phi & \rho \sin \phi & h \end{pmatrix}$, et :

$$\begin{aligned} L_{0ECz} &= 2 \int_{S_{z+}} dS_{z+} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r}}{4\pi |\mathbf{r}|^3} \\ L_{0ECz} &= 2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} d\rho \rho \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+} \mathbf{r}}{4\pi |\mathbf{r}|^3}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Grâce aux propriétés de symétrie du cylindre par rapport aux plans O_{xz} and O_{yz} , la seule composante non nulle de la dyade L_{0ECz} est la composante suivant zz et:

$$\begin{aligned} L_{0ECz} &= 2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} d\rho \rho \frac{h}{4\pi (\rho^2 + h^2)^{3/2}} \\ &= \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} d\rho \frac{\rho}{(\rho^2 + h^2)^{3/2}} \\ &= \frac{h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h^2}^{h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \frac{du}{u^{3/2}} \\ &= \frac{-h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{1}{u^{1/2}} \right]_{h^2}^{h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \\ &= \frac{-h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{1}{u^{1/2}} \right]_{h^2}^{h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \\ L_{0ECz} &= 1 - \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Pour S_{Lat} et L_{0ECLat} :

Le vecteur \mathbf{r} décrivant la surface latérale du cylindre S_{Lat} est:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} R_x \cos \phi \\ R_y \sin \phi \\ z \end{pmatrix} \implies \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = \begin{pmatrix} -R_x \sin \phi \\ R_y \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

et la normale unitaire extérieure à S_{Lat} est donnée par le produit vectoriel suivant:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{n}}_{Lat} &= |\partial\mathbf{r}/\partial\phi|^{-1} \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial\phi} \times \hat{\mathbf{n}}_{z+} \\
&= \frac{1}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \begin{pmatrix} -R_x \sin \phi \\ R_y \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\hat{\mathbf{n}}_{Lat} &= \frac{1}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \begin{pmatrix} R_y \cos \phi \\ R_x \sin \phi \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{B.8}$$

L'élément de surface infinitésimal de S_{Lat} est $dS_{Lat} = dzd\phi|\partial\mathbf{r}/\partial\phi|$.

$$\text{Alors, } \hat{\mathbf{n}}_{Lat}\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \begin{pmatrix} R_x R_y \cos^2 \phi & R_y^2 \cos \phi \sin \phi & z R_y \cos \phi \\ R_x^2 \cos \phi \sin \phi & R_x R_y \sin^2 \phi & z R_x \sin \phi \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et :}$$

$$\begin{aligned}
L_{0ECLat} &= \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \\
&= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi |\partial\mathbf{r}/\partial\phi| \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \\
L_{0ECLat} &= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}\mathbf{r}}{4\pi|\mathbf{r}|^3}.
\end{aligned} \tag{B.9}$$

En considérant les propriétés de symétrie du cylindre par rapport aux plans O_{xz} et O_{yz} , les seules composantes non nulles de la dyade L_{0ECLat} sont les composantes suivant xx et yy et donc $L_{0ECLat} = L_{0ECxx} + L_{0ECyy}$ avec:

$$\begin{aligned}
L_{0ECxx} &= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \frac{R_x R_y \cos^2 \phi}{4\pi(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + z^2)^{3/2}} \\
L_{0ECxx} &= \frac{R_x R_y}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \phi \int_0^h \frac{dz}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + z^2)^{3/2}}.
\end{aligned} \tag{B.10}$$

En notant $R_m = \sqrt{R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi}$, l'intégrale $\int_0^h \frac{dz}{(R_m^2 + z^2)^{3/2}}$ est similaire à celle effectuée dans l'équation B.15 et:

$$\begin{aligned}
\int_0^h \frac{dz}{(R_m^2 + z^2)^{3/2}} &= \frac{h}{R_m^2 \sqrt{h^2 + R_m^2}} \\
&= \frac{h}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}}.
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Finalement, l'expression de L_{0ECxx} est obtenue:

$$L_{0ECxx} = \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R_x R_y \cos^2 \phi}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}}. \quad (\text{B.12})$$

Cette intégrale est alors calculée numériquement.

De façon similaire, l'expression de L_{0ECyy} est donnée par l'équation suivant:

$$L_{0ECyy} = \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R_x R_y \sin^2 \phi}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}}. \quad (\text{B.13})$$

Ainsi, la dyade de dépolarisation statique du cylindre à section elliptique placé dans le vide L_{0ECV} de l'équation B.1 s'écrit:

$$L_{0EC} = \begin{pmatrix} L_{0ECxx} & 0 & 0 \\ 0 & L_{0ECyy} & 0 \\ 0 & 0 & L_{0ECz} \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

avec:

$$\begin{aligned} L_{0ECxx} &= \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R_x R_y \cos^2 \phi}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}} \\ L_{0ECyy} &= \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R_x R_y \sin^2 \phi}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}} \\ L_{0ECz} &= 1 - \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

En prenant $R_x = R_y$, le calcul de la dyade de dépolarisation statique de la section B.3 est retrouvé.

B.5 Calcul de la dyade de dépolarisation d'un cylindre droit à section elliptique posé sur un dioptré plan.

Le cylindre considéré est toujours elliptique de rayons R_x et R_y suivant les axes O_x et O_y respectivement et de hauteur $2h$. Son volume est noté V et sa surface S . Le cylindre est posé sur un dioptré plan de permittivité relative ε^- situé dans le demi-espace $z < -h$. L'environnement autour du cylindre $z > -h$ est rempli d'un superstrat de permittivité relative ε^+ et ainsi $\epsilon(\mathbf{r})$, la permittivité relative totale de l'espace s'écrit $\epsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon^-$ si $z < -h$ et $\epsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon^+$ si $z > -h$. La

dyade de dépolarisation statique au centre du cylindre (l'origine du système de coordonnées) est donnée par l'expression suivante:

$$L_{EC} = \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon^+} \left[\left(\frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \right) \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|} + \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} \right] \quad (\text{B.1})$$

$$L_{EC} = \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon^+} \left[\left(\frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{\varepsilon^+ + \varepsilon^-} \right) L_{1EC} + L_{0EC} \right]$$

Dans l'équation précédente B.1, on peut remarquer que L_{0EC} est la dyade de dépolarisation du cylindre placé dans le vide qui a été calculé dans la section précédente (B.4). Il reste donc à calculer la dyade L_{1EC} .

Calcul de L_{1EC} :

$$L_{1EC} = - \int_V d\mathbf{r} \nabla \nabla \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|}. \quad (\text{B.2})$$

où \mathbf{r}_0 est le vecteur de coordonnées $(0, 0, -2h)$.

La singularité à l'origine n'étant plus présente (décalage de \mathbf{r}_0 au dénominateur), le théorème de Green Green-Ostrogradski est appliqué directement à l'équation B.2, ce qui conduit à:

$$L_{1EC} = \int_S dS \frac{\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3}, \quad (\text{B.3})$$

où dS est toujours l'élément de surface infinitésimal du cylindre et $\hat{\mathbf{n}}$ la normale unitaire extérieure à sa surface. La surface S est une fois de plus décomposée en trois surfaces: S_{z+} , S_{z-} et S_{Lat} . Cependant, la symétrie par rapport à l'origine présente dans le calcul de L_{0EC} (voir équation B.3), n'est plus valide. L'équation B.3 devient alors:

$$L_{1EC} = \int_{S_{z+}} dS_{z+} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z+}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3} + \int_{S_{z-}} dS_{z-} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{z-}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3} + \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3} \quad (\text{B.4})$$

$$L_{1EC} = L_{1EC+} + L_{1EC-} + L_{1ECLat}.$$

Pour S_{z+} et L_{1EC+} :

L'élément de surface infinitésimal de S_{z+} est $dS_{z+} = \rho d\rho d\phi$ avec $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$.

La surface S_{z+} est définie comme $\{S_{z+} = (x, y, z) \mid x^2/R_x^2 + y^2/R_y^2 \leq 1 \text{ et } z = h\}$.

Cette surface peut également être exprimée en fonction de ρ et ϕ :

$\{S_{z+} = (\rho, \phi, z) \mid \rho \leq R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi} \text{ et } \phi \in [0, 2\pi] \text{ et } z = h\}$.

Sa normale unitaire extérieure est $\hat{\mathbf{n}}_{z+} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ et le vecteur $\mathbf{r} + \mathbf{r}_0$, quand \mathbf{r} la décrit est:

$$\mathbf{r} + \mathbf{r}_0 = \begin{pmatrix} \rho \cos \phi \\ \rho \sin \phi \\ -h \end{pmatrix}. \text{ Ainsi, } \hat{\mathbf{n}}_{z+}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \rho \cos \phi & \rho \sin \phi & -h \end{pmatrix}.$$

Grâce aux propriétés de symétrie du cylindre par rapport aux plans O_{xz} et O_{yz} (qui contiennent

le point de coordonnées $(0, 0, -2h)$, la seule composante non nulle de L_{1EC+} est une fois de plus la composante suivant zz et l'expression de $L_{1EC+} = L_{1EC+zz}$ est obtenue par substitution en posant $u = \rho^2 + h^2$ et $du = 2\rho d\rho$:

$$\begin{aligned}
L_{1EC+} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} d\rho \rho \frac{-h}{4\pi[\rho^2 + (-h)^2]^{3/2}} \\
&= \frac{-h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} \frac{d\rho \rho}{(\rho^2 + h^2)^{3/2}} \\
&= \frac{-h}{8\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h^2}^{h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \frac{du}{u^{3/2}} \\
&= \frac{h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{1}{u^{1/2}} \right]_{h^2}^{h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \\
L_{1EC+} &= -1/2 + \frac{h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}}.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Pour S_{z-} et L_{1EC-} :

L'élément de surface infinitésimal de S_{z-} est $dS_{z-} = \rho d\rho d\phi$ avec $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$.

La surface S_{z-} est définie comme $\{S_{z-} = (x, y, z) \mid x^2/R_x^2 + y^2/R_y^2 \leq 1 \text{ et } z = -h\}$.

Cette surface peut également être exprimée en fonction de ρ et ϕ :

$\{S_{z-} = (\rho, \phi, z) \mid \rho \leq R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi} \text{ et } \phi \in [0, 2\pi] \text{ et } z = -h\}$.

Sa normale unitaire extérieure est $\hat{n}_{z-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ et le vecteur $\mathbf{r} + \mathbf{r}_0$, quand \mathbf{r} la décrit est:

$$\mathbf{r} + \mathbf{r}_0 = \begin{pmatrix} \rho \cos \phi \\ \rho \sin \phi \\ -3h \end{pmatrix}. \text{ Ainsi, } \hat{n}_{z-}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \rho \cos \phi & \rho \sin \phi & 3h \end{pmatrix}.$$

Grâce aux propriétés de symétrie du cylindre par rapport aux plans O_{xz} et O_{yz} (qui contiennent le point de coordonnées $(0, 0, -2h)$), la seule composante non nulle de L_{1EC-} est de nouveau la composante suivant zz et l'expression de $L_{1EC-} = L_{1EC-zz}$ est obtenue par substitution en

posant $u = \rho^2 + 9h^2$ et $du = 2\rho d\rho$:

$$\begin{aligned}
L_{1EC-} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} d\rho \rho \frac{3h}{4\pi(\rho^2 + (-3h)^2)^{3/2}} \\
&= \frac{3h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_x R_y / \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}} \frac{d\rho \rho}{(\rho^2 + 9h^2)^{3/2}} \\
&= \frac{3h}{8\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{9h^2}^{9h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \frac{du}{u^{3/2}} \\
&= -\frac{3h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{1}{u^{1/2}} \right]_{9h^2}^{9h^2 + R_x^2 R_y^2 / (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)} \\
L_{1EC-} &= 1/2 - \frac{3h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + 9h^2(R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}}.
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Pour S_{Lat} et L_{1ECLat} :

Le vecteur \mathbf{r} la décrivant est:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} R_x \cos \phi \\ R_y \sin \phi \\ z \end{pmatrix} \implies \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = \begin{pmatrix} -R_x \sin \phi \\ R_y \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{B.7}$$

et la normale unitaire extérieure à S_{Lat} est:

$$\hat{\mathbf{n}}_{Lat} = \frac{1}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \begin{pmatrix} R_y \cos \phi \\ R_x \sin \phi \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{B.8}$$

L'élément de surface infinitésimal de S_{Lat} est $dS_{Lat} = dz d\phi |\partial \mathbf{r} / \partial \phi|$.

$$\text{Alors, } \hat{\mathbf{n}}_{Lat}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0) = \frac{1}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \begin{pmatrix} R_x R_y \cos^2 \phi & R_y^2 \cos \phi \sin \phi & (z - 2h) R_y \cos \phi \\ R_x^2 \cos \phi \sin \phi & R_x R_y \sin^2 \phi & (z - 2h) R_x \sin \phi \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et:

$$\begin{aligned}
L_{1ECLat} &= \int_{S_{Lat}} dS_{Lat} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi |\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3} \\
&= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi |\partial \mathbf{r} / \partial \phi| \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi |\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3} \\
L_{1ECLat} &= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi} \frac{\hat{\mathbf{n}}_{Lat}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{4\pi |\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|^3}.
\end{aligned} \tag{B.9}$$

Grâce aux propriétés de symétrie du cylindre par rapport aux plans O_{xz} et O_{yz} (qui contiennent le point de coordonnées $(0, 0, -2h)$), les seules composantes non nulles de la dyade L_{1ECLat} sont

les composantes suivants xx et yy et $L_{1ECLat} = L_{1ECxx} + L_{1ECyy}$, où:

$$\begin{aligned} L_{1ECxx} &= \int_{-h}^h dz \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 \sin^2 \phi + R_y^2 \cos^2 \phi}} \frac{R_x R_y \cos^2 \phi}{4\pi (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2)^{3/2}} \\ L_{1ECxx} &= \frac{R_x R_y}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \phi \int_{-h}^h \frac{dz}{[R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2]^{3/2}}, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

et:

$$L_{1ECyy} = \frac{R_x R_y}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \sin^2 \phi \int_{-h}^h \frac{dz}{[R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2]^{3/2}}. \quad (\text{B.11})$$

Ainsi la dyade de dépolarisation $L_{1EC} = L_{1EC+} + L_{1EC-} + L_{1ECLat}$ de l'équation B.2, qui correspond à la dyade de dépolarisation du cylindre considéré placé dans le vide au point de coordonnées $(0, 0, -2h)$ est obtenue:

$$L_{1EC} = \begin{pmatrix} L_{1ECxx} & 0 & 0 \\ 0 & L_{1ECyy} & 0 \\ 0 & 0 & L_{1ECz} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

avec:

$$\begin{aligned} L_{1ECxx} &= \frac{R_x R_y}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \phi \int_{-h}^h \frac{dz}{[R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2]^{3/2}} \\ L_{1ECyy} &= \frac{R_x R_y}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \sin^2 \phi \int_{-h}^h \frac{dz}{[R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2]^{3/2}} \\ L_{1ECz} &= \frac{h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}} \\ &\quad - \frac{3h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + 9h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}}. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Finalement, la dyade de dépolarisation statique, à l'origine, d'un cylindre droit à section elliptique de rayons R_x, R_y et de hauteur $2h$, entouré par un milieu de permittivité relative ϵ_+ , posé sur un substrat de permittivité relative ϵ_- , donné par l'équation B.1 peut être exprimée en fonction de $\epsilon_-, \epsilon_+, R_x, R_y$ et h :

$$L_{EC} = \frac{1}{\epsilon_+} \left[L_{0EC} + \left(\frac{\epsilon^+ - \epsilon^-}{\epsilon^+ + \epsilon^-} \right) L_{1EC} \right], \quad (\text{B.14})$$

avec

$$L_{0EC} = \begin{pmatrix} L_{0ECxx} & 0 & 0 \\ 0 & L_{0ECyy} & 0 \\ 0 & 0 & L_{0ECz} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned}
L_{0ECxx} &= \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R_x R_y \cos^2 \phi}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}} \\
L_{0ECyy} &= \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{R_x R_y \sin^2 \phi}{(R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi) \sqrt{h^2 + (R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi)}} , \\
L_{0ECz} &= 1 - \frac{h}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}}
\end{aligned} \tag{B.16}$$

et

$$L_{1EC} = \begin{pmatrix} L_{1ECxx} & 0 & 0 \\ 0 & L_{1ECyy} & 0 \\ 0 & 0 & L_{1ECz} \end{pmatrix} \tag{B.17}$$

$$\begin{aligned}
L_{1ECxx} &= \frac{R_x R_y}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \phi \int_{-h}^h \frac{dz}{[R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2]^{3/2}} \\
L_{1ECyy} &= \frac{R_x R_y}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \sin^2 \phi \int_{-h}^h \frac{dz}{[R_x^2 \cos^2 \phi + R_y^2 \sin^2 \phi + (z - 2h)^2]^{3/2}} \\
L_{1ECz} &= \frac{h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}} \\
&\quad - \frac{3h}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sqrt{R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{R_x^2 R_y^2 + 9h^2 (R_y^2 \cos^2 \phi + R_x^2 \sin^2 \phi)}}
\end{aligned} \tag{B.18}$$

BIBLIOGRAPHIE

Livres

- [1] Evgeny Popov, *GratinGs: theory and numeric applications* (Popov, Institut Fresnel, 2012) (cit. on p. 2).
- [2] Allen Taflove, Johnson and Susan C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, 3rd ed. (Artech House Publishers, 2005) (cit. on pp. 2, 134).
- [3] H Angus Macleod, *Thin-film optical filters* (CRC press, 2001) (cit. on p. 17).
- [4] Roger Petit, *Ondes électromagnétiques en radioélectricité et en optique* (Masson, 1989) (cit. on p. 18).
- [5] Frédéric Zolla, Gilles Renversez, André Nicolet, Boris Kuhlmeiy, Sébastien Guenneau, Didier Felbacq, Alexander Argyros and Sergio Leon-Saval, *Foundations of photonic crystal fibres* (World Scientific, 2005) (cit. on pp. 19, 24).
- [6] D. Gray, *American Institute of Physics Handbook, 2nd Edition* (Mc Graw-Hill, 1963) (cit. on p. 35).
- [7] Edward D Palik, *Handbook of optical constants of solids*, Vol. 3 (Academic press, 1998) (cit. on pp. 51, 64, 69).
- [8] Marvin J Weber, *Handbook of optical materials*, Vol. 19 (CRC press, 2002) (cit. on p. 69).
- [9] Tuck C Choy, *Effective medium theory: principles and applications*, Vol. 165 (Oxford University Press, 2015) (cit. on p. 81).
- [10] Jean G Van Bladel, *Electromagnetic fields* (John Wiley & Sons, 2007) (cit. on pp. 81, 203).
- [11] Hendrik Anthony Kramers, *La diffusion de la lumière par les atomes* (1927) (cit. on p. 102).
- [12] John David Jackson, *Classical electrodynamics*, 3rd ed. (Wiley, New York, NY, 1999) (cit. on p. 105).
- [13] Leon Brillouin, *Wave propagation in periodic structures: electric filters and crystal lattices* (Courier Corporation, 2003) (cit. on p. 124).

- [14] Charles Kittel, *Introduction to solid state* (John Wiley & Sons, 1966) (cit. on p. 124).
- [15] John D Joannopoulos, Steven G Johnson, Joshua N Winn and Robert D Meade, *Photonic crystals: molding the flow of light* (Princeton university press, 2011) (cit. on p. 124).
- [16] Richard B Lehoucq, Danny C Sorensen and Chao Yang, *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods*, Vol. 6 (Siam, 1998) (cit. on p. 134).
- [17] Lloyd Nicholas Trefethen and Mark Embree, *Spectra and pseudospectra: the behavior of nonnormal matrices and operators* (Princeton University Press, 2005) (cit. on p. 158).

Articles

- [18] William L Barnes, Alain Dereux and Thomas W Ebbesen, 'Surface plasmon subwavelength optics', *Nature* **424**, 824–830 (2003) (cit. on p. 1).
- [19] D. A. Weitz, T. J. Gramila, A. Z. Genack and J. I. Gersten, 'Anomalous Low-Frequency Raman Scattering from Rough Metal Surfaces and the Origin of Surface-Enhanced Raman Scattering', *Phys. Rev. Lett.* **45**, 355–358 (1980) (cit. on p. 1).
- [20] A Wirgin and T Lopez-Rios, 'Can surface-enhanced Raman scattering be caused by waveguide resonances?', *Optics communications* **48**, 416–420 (1984) (cit. on p. 1).
- [21] Nicolas M. B. Perney, Jeremy J. Baumberg, Majd E. Zoorob, Martin D. B. Charlton, Sven Mahnkopf and Caterina M. Netti, 'Tuning localized plasmons in nanostructured substrates for surface-enhanced Raman scattering', *Opt. Express* **14**, 847–857 (2006) (cit. on p. 1).
- [22] R. Reinisch and M. Nevière, 'Electromagnetic theory of diffraction in nonlinear optics and surface-enhanced nonlinear optical effects', *Phys. Rev. B* **28**, 1870–1885 (1983) (cit. on p. 1).
- [23] R. Reinisch, E. Popov and M. Nevière, 'Second-harmonic-generation-induced optical bistability in prism or grating couplers', *Opt. Lett.* **20**, 854–856 (1995) (cit. on p. 1).
- [24] Harry A Atwater and Albert Polman, 'Plasmonics for improved photovoltaic devices', *Nature materials* **9**, 205–213 (2010) (cit. on p. 1).
- [25] S. Pillai, K. R. Catchpole, T. Trupke and M. A. Green, 'Surface plasmon enhanced silicon solar cells', *Journal of Applied Physics* **101**, 093105 (2007) <http://dx.doi.org/10.1063/1.2734885> (cit. on p. 1).
- [26] Mickaël Février, Philippe Gogol, Grégory Barbillon, Abdelhanin Aassime, Robert Mégy, Bernard Bartenlian, Jean-Michel Lourtioz and Béatrice Dagens, 'Integration of short gold nanoparticles chain on SOI waveguide toward compact integrated bio-sensors', *Opt. Express* **20**, 17402–17409 (2012) (cit. on p. 1).

- [27] Y. Brûlé, G. Demésy, A.-L. Fehrembach, B. Gralak, E. Popov, G. Tayeb, M. Grangier, D. Barat, H. Bertin, P. Gogol and B. Dagens, ‘Design of metallic nanoparticle gratings for filtering properties in the visible spectrum’, *Appl. Opt.* **54**, 10359–10368 (2015) (cit. on pp. 1, 87).
- [28] Karthik Kumar, Huigao Duan, Ravi S Hegde, Samuel CW Koh, Jennifer N Wei and Joel KW Yang, ‘Printing colour at the optical diffraction limit’, *Nature Nanotechnology* **7**, 557–561 (2012) (cit. on pp. 1, 47).
- [29] Guangyuan Si, Yanhui Zhao, Jiangtao Lv, Mengqian Lu, Fengwen Wang, Hailong Liu, Ning Xiang, Tony Jun Huang, Aaron J. Danner, Jinghua Teng and Yan Jun Liu, ‘Reflective plasmonic color filters based on lithographically patterned silver nanorod arrays’, *Nanoscale* **5**, 6243–6248 (2013) (cit. on pp. 1, 47).
- [30] Chia Wei Hsu, Bo Zhen, Wenjun Qiu, Ofer Shapira, Brendan G DeLacy, John D Joannopoulos and Marin Soljačić, ‘Transparent displays enabled by resonant nanoparticle scattering’, *Nature communications* **5** (2014) (cit. on pp. 1, 47).
- [31] Ting Xu, Yi-Kuei Wu, Xiangang Luo and L Jay Guo, ‘Plasmonic nanoresonators for high-resolution colour filtering and spectral imaging’, *Nature communications* **1**, 59 (2010) (cit. on pp. 1, 47, 173).
- [32] Beibei Zeng, Yongkang Gao and Filbert J. Bartoli, ‘Ultrathin nanostructured metals for highly transmissive plasmonic subtractive color filters’, *Sci. Rep.* **3**, 2840 (2013) (cit. on pp. 1, 47).
- [33] Koichiro Saito and Tetsu Tatsuma, ‘A transparent projection screen based on plasmonic Ag nanocubes’, *Nanoscale* **7**, 20365–20368 (2015) (cit. on pp. 1, 47).
- [34] J. Chandezon, M. T. Dupuis, G. Cornet and D. Maystre, ‘Multicoated gratings: a differential formalism applicable in the entire optical region’, *J. Opt. Soc. Am.* **72**, 839–846 (1982) (cit. on pp. 2, 8, 33, 35).
- [35] Lifeng Li and Jean Chandezon, ‘Improvement of the coordinate transformation method for surface-relief gratings with sharp edges’, *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 2247–2255 (1996) (cit. on pp. 2, 8, 33, 35).
- [36] Lifeng Li, ‘New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings’, *J. Opt. Soc. Am. A* **14**, 2758–2767 (1997) (cit. on pp. 2, 8, 33).
- [37] M. G. Moharam and T. K. Gaylord, ‘Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction’, *J. Opt. Soc. Am.* **71**, 811–818 (1981) (cit. on pp. 2, 8, 33).
- [38] Philippe Lalanne and G. Michael Morris, ‘Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization’, *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 779–784 (1996) (cit. on pp. 2, 8, 33).

- [39] I.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran, J.L. Adams and J.R. Andrewartha, 'The Dielectric Lamellar Diffraction Grating', *Optica Acta: International Journal of Optics* **28**, 413–428 (1981) (cit. on p. 2).
- [40] L.C. Botten, M.S. Craig, R.C. McPhedran, J.L. Adams and J.R. Andrewartha, 'The Finitely Conducting Lamellar Diffraction Grating', *Optica Acta: International Journal of Optics* **28**, 1087–1102 (1981) (cit. on p. 2).
- [41] L.C. Botten, M.S. Craig and R.C. McPhedran, 'Highly Conducting Lamellar Diffraction Gratings', *Optica Acta: International Journal of Optics* **28**, 1103–1106 (1981) (cit. on p. 2).
- [42] Kane Yee, 'Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media', *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **14**, 302–307 (1966) (cit. on pp. 2, 112, 134).
- [43] S. Enoch, R. C. McPhedran, N. A. Nicorovici, L. C. Botten and J. N. Nixon, 'Sums of spherical waves for lattices, layers, and lines', *Journal of Mathematical Physics* **42**, 5859–5870 (2001) (cit. on p. 2).
- [44] Koki Watanabe, 'Numerical integration schemes used on the differential theory for anisotropic gratings', *J. Opt. Soc. Am. A* **19**, 2245–2252 (2002) (cit. on pp. 2, 8).
- [45] D. Maystre, 'A new general integral theory for dielectric coated gratings', *J. Opt. Soc. Am.* **68**, 490–495 (1978) (cit. on p. 2).
- [46] F. Zolla and R. Petit, 'Method of fictitious sources as applied to the electromagnetic diffraction of a plane wave by a grating in conical diffraction mounts', *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 796–802 (1996) (cit. on p. 2).
- [47] T. Delort and D. Maystre, 'Finite-element method for gratings', *J. Opt. Soc. Am. A* **10**, 2592–2601 (1993) (cit. on p. 2).
- [48] Yuichi Ohkawa, Yasuhide Tsuji and Masanori Koshihara, 'Analysis of anisotropic dielectric grating diffraction using the finite-element method', *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 1006–1012 (1996) (cit. on p. 2).
- [49] Gang Bao, Zhiming Chen and Haijun Wu, 'Adaptive finite-element method for diffraction gratings', *J. Opt. Soc. Am. A* **22**, 1106–1114 (2005) (cit. on p. 2).
- [50] J. B. Pendry, D. Schurig and D. R. Smith, 'Controlling Electromagnetic Fields', *Science* **312**, 1780–1782 (2006) (cit. on p. 3).
- [51] Viktor G Veselago, 'THE ELECTRODYNAMICS OF SUBSTANCES WITH SIMULTANEOUSLY NEGATIVE VALUES OF ϵ AND μ ', *Soviet Physics Uspekhi* **10**, 509 (1968) (cit. on p. 3).

- [52] D. Schurig, J. J. Mock, B. J. Justice, S. A. Cummer, J. B. Pendry, A. F. Starr and D. R. Smith, 'Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies', *Science* **314**, 977–980 (2006) (cit. on p. 3).
- [53] Tolga Ergin, Nicolas Stenger, Patrice Brenner, John B. Pendry and Martin Wegener, 'Three-Dimensional Invisibility Cloak at Optical Wavelengths', *Science* **328**, 337–339 (2010) (cit. on p. 3).
- [54] J. B. Pendry, 'Negative Refraction Makes a Perfect Lens', *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3966–3969 (2000) (cit. on p. 3).
- [55] Nanfang Yu, Patrice Genevet, Mikhail A. Kats, Francesco Aieta, Jean-Philippe Tetienne, Federico Capasso and Zeno Gaburro, 'Light Propagation with Phase Discontinuities: Generalized Laws of Reflection and Refraction', *Science* **334**, 333–337 (2011) (cit. on p. 3).
- [56] Francesco Aieta, Patrice Genevet, Mikhail A. Kats, Nanfang Yu, Romain Blanchard, Zeno Gaburro and Federico Capasso, 'Aberration-Free Ultrathin Flat Lenses and Axicons at Telecom Wavelengths Based on Plasmonic Metasurfaces', *Nano Letters* **12**, PMID: 22894542, 4932–4936 (2012) (cit. on pp. 3, 92).
- [57] Paul R. West, James L. Stewart, Alexander V. Kildishev, Vladimir M. Shalaev, Vladimir V. Shkunov, Friedrich Strohkendl, Yuri A. Zakharenkov, Robert K. Dodds and Robert Byren, 'All-dielectric subwavelength metasurface focusing lens', *Opt. Express* **22**, 26212–26221 (2014) (cit. on pp. 3, 92).
- [58] Dianmin Lin, Pengyu Fan, Erez Hasman and Mark L. Brongersma, 'Dielectric gradient metasurface optical elements', *Science* **345**, 298–302 (2014) (cit. on pp. 3, 92).
- [59] Alexander V. Kildishev, Alexandra Boltasseva and Vladimir M. Shalaev, 'Planar Photonics with Metasurfaces', *Science* **339** (2013) 10.1126/science.1232009 (cit. on pp. 3, 92).
- [60] Xianzhong Chen, Lingling Huang, Holger Mühlenbernd, Guixin Li, Benfeng Bai, Qiaofeng Tan, Guofan Jin, Cheng-Wei Qiu, Shuang Zhang and Thomas Zentgraf, 'Dual-polarity plasmonic metalens for visible light', *Nature communications* **3**, 1198 (2012) (cit. on pp. 3, 92).
- [61] Mohammadreza Khorasaninejad, Wei Ting Chen, Robert C. Devlin, Jaewon Oh, Alexander Y. Zhu and Federico Capasso, 'Metalenses at visible wavelengths: Diffraction-limited focusing and subwavelength resolution imaging', *Science* **352**, 1190–1194 (2016) (cit. on pp. 3, 92).
- [62] Benjamin Vial, Frédéric Zolla, André Nicolet and Mireille Commandré, 'Quasimodal expansion of electromagnetic fields in open two-dimensional structures', *Phys. Rev. A* **89**, 023829 (2014) (cit. on pp. 4, 56, 96, 101, 153, 154, 157).

- [63] A. Tip, ‘Canonical formalism and quantization for a class of classical fields with application to radiative atomic decay in dielectrics’, *Phys. Rev. A* **56**, 5022–5041 (1997) (cit. on pp. 4, 107, 110).
- [64] A. Tip, ‘Linear absorptive dielectrics’, *Phys. Rev. A* **57**, 4818–4841 (1998) (cit. on pp. 4, 107, 110).
- [65] Yoann Brûlé, Guillaume Demésy, Boris Gralak and Evgeny Popov, ‘Surface plasmon hurdles leading to a strongly localized giant field enhancement on two-dimensional (2D) metallic diffraction gratings’, *Opt. Express* **23**, 9167–9182 (2015) (cit. on pp. 9, 33, 36).
- [66] Evgeny Popov, Anne-Laure Fehrembach, Yoann Brûlé, Guillaume Demésy and Philippe Boyer, ‘Two-dimensional grating for narrow-band filtering with large angular tolerances’, *Opt. Express* **24**, 14974–14985 (2016) (cit. on pp. 9, 33, 38, 40).
- [67] Guillaume Demésy, Frédéric Zolla, André Nicolet, Mireille Commandré and Caroline Fossati, ‘The finite element method as applied to the diffraction by an anisotropic grating’, *Opt. Express* **15**, 18089–18102 (2007) (cit. on p. 13).
- [68] Guillaume Demésy, Frédéric Zolla, André Nicolet and Mireille Commandré, ‘Versatile full-vectorial finite element model for crossed gratings’, *Opt. Lett.* **34**, 2216–2218 (2009) (cit. on p. 13).
- [69] Guillaume Demésy, Frédéric Zolla, André Nicolet and Mireille Commandré, ‘All-purpose finite element formulation for arbitrarily shaped crossed-gratings embedded in a multilayered stack’, *J. Opt. Soc. Am. A* **27**, 878–889 (2010) (cit. on p. 13).
- [70] Jean-Pierre Berenger, ‘A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves’, *Journal of Computational Physics* **114**, 185–200 (1994) (cit. on p. 19).
- [71] A. Nicolet, F. Zolla, Y. O. Agha and S. Guenneau, ‘Leaky modes in twisted microstructured optical fibers’, *Waves in Random and Complex Media* **17**, 559–570 (2007) (cit. on p. 19).
- [72] Y Ould Agha, F Zolla, A Nicollet and S Guenneau, ‘On the use of PML for the computation of leaky modes’, *COMPEL - The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering* **27**, 95–109 (2008) (cit. on p. 20).
- [73] André Nicolet, Sébastien Guenneau, Christophe Geuzaine and Frédéric Zolla, ‘Modelling of electromagnetic waves in periodic media with finite elements’, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **168**, Selected Papers from the Second International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering (ACOMEN 2002), 321–329 (2004) (cit. on pp. 23, 114, 123).
- [74] S. Guenneau, A. Nicolet, F. Zolla, C. Geuzaine and B. Meys, ‘A finite element formulation for spectral problems in optical fibers’, *COMPEL - The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering* **20**, 120–132 (2001) (cit. on pp. 23, 30).

- [75] Christophe Geuzaine and Jean-François Remacle, 'Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities', *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **79**, 1309 (2009) (cit. on pp. 24, 114).
- [76] Patrick Dular et al., 'A general environment for the treatment of discrete problems and its application to the finite element method', *IEEE Trans. Magn.* **34**, 3395 (1998) (cit. on pp. 24, 114).
- [77] Patrick R. Amestoy, Abdou Guermouche, Jean-Yves L'Excellent and Stéphane Pralet, 'Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems', *Parallel Computing* **32**, *Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA'04)*, 136–156 (2006) (cit. on p. 24).
- [78] A. Bossavit and I. Mayergoyz, 'Edge-elements for scattering problems', *IEEE Transactions on Magnetics* **25**, 2816–2821 (1989) (cit. on p. 31).
- [79] P. B. Johnson and R. W. Christy, 'Optical Constants of the Noble Metals', *Phys. Rev. B* **6**, 4370–4379 (1972) (cit. on pp. 51, 69, 71, 72, 106).
- [80] Aleksandar D. Rakić, Aleksandra B. Djurišić, Jovan M. Elazar and Marian L. Majewski, 'Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices', *Appl. Opt.* **37**, 5271–5283 (1998) (cit. on p. 69).
- [81] N. A. Nicorovici and R. C. McPhedran, 'Transport properties of arrays of elliptical cylinders', *Phys. Rev. E* **54**, 1945–1957 (1996) (cit. on p. 81).
- [82] Arthur D Yaghjian, 'Electric dyadic Green's functions in the source region', *Proceedings of the IEEE* **68**, 248–263 (1980) (cit. on pp. 81, 203).
- [83] G. J. Lee, Y. Lee, B. Y. Jung, S. G. Jung, C. K. Hwangbo, J. H. Kim and C. S. Yoon, 'Microstructural and Nonlinear Optical Properties of Thin Silver Films Near the Optical Percolation Threshold', *Journal of Korean Physical Society* **51**, 1555 (2007) (cit. on p. 88).
- [84] Y. Ding and R. Magnusson, 'Resonant leaky-mode spectral-band engineering and device applications', *Opt. Express* **12**, 5661–5674 (2004) (cit. on pp. 91, 173).
- [85] Anne-Laure Fehrembach, Anne Talneau, Olga Boyko, Fabien Lemarchand and Anne Sentenac, 'Experimental demonstration of a narrowband, angular tolerant, polarization independent, doubly periodic resonant grating filter', *Opt. Lett.* **32**, 2269–2271 (2007) (cit. on pp. 91, 173).
- [86] X. Buet, E. Daran, D. Belharet, F. Lozes-Dupuy, A. Monmayrant and O. Gauthier-Lafaye, 'High angular tolerance and reflectivity with narrow bandwidth cavity-resonator-integrated guided-mode resonance filter', *Opt. Express* **20**, 9322–9327 (2012) (cit. on pp. 91, 173).
- [87] Amir Arbabi, Yu Horie, Mahmood Bagheri and Andrei Faraon, 'Dielectric metasurfaces for complete control of phase and polarization with subwavelength spatial resolution and high transmission', *Nature nanotechnology* (2015) (cit. on p. 92).

- [88] Rowland Sammut and Allan W. Snyder, ‘Leaky modes on a dielectric waveguide: orthogonality and excitation’, *Appl. Opt.* **15**, 1040–1044 (1976) (cit. on p. 101).
- [89] Willis E. Lamb, ‘Theory of an Optical Maser’, *Phys. Rev.* **134**, A1429–A1450 (1964) (cit. on p. 101).
- [90] A. Settimi, S. Severini and B. J. Hoenders, ‘Quasi-normal-modes description of transmission properties for photonic bandgap structures’, *J. Opt. Soc. Am. B* **26**, 876–891 (2009) (cit. on p. 101).
- [91] A. Settimi, S. Severini, N. Mattiucci, C. Sibilia, M. Centini, G. D’Aguanno, M. Bertolotti, M. Scalora, M. Bloemer and C. M. Bowden, ‘Quasinormal-mode description of waves in one-dimensional photonic crystals’, *Phys. Rev. E* **68**, 026614 (2003) (cit. on p. 101).
- [92] A. G. Fox and T. Li, ‘Resonant modes in a maser interferometer’, *The Bell System Technical Journal* **40**, 453–488 (1961) (cit. on p. 101).
- [93] Barry Simon, ‘Resonances and complex scaling: A rigorous overview’, *International Journal of Quantum Chemistry* **14**, 529–542 (1978) (cit. on p. 101).
- [94] E. A. Muljarov, W. Langbein and R. Zimmermann, ‘Brillouin-Wigner perturbation theory in open electromagnetic systems’, *EPL (Europhysics Letters)* **92**, 50010 (2010) (cit. on p. 101).
- [95] M. B. Doost, W. Langbein and E. A. Muljarov, ‘Resonant-state expansion applied to planar open optical systems’, *Phys. Rev. A* **85**, 023835 (2012) (cit. on p. 101).
- [96] M. B. Doost, W. Langbein and E. A. Muljarov, ‘Resonant state expansion applied to two-dimensional open optical systems’, *Phys. Rev. A* **87**, 043827 (2013) (cit. on p. 101).
- [97] John S. Toll, ‘Causality and the Dispersion Relation: Logical Foundations’, *Phys. Rev.* **104**, 1760–1770 (1956) (cit. on p. 102).
- [98] R. de L. Kronig, ‘On the Theory of Dispersion of X-Rays’, *J. Opt. Soc. Am.* **12**, 547–557 (1926) (cit. on p. 102).
- [99] Dominique Barchiesi and Thomas Grosjes, ‘Errata: Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium and aluminum in the visible bandwidth’, *Journal of Nanophotonics* **8**, 089996 (2015) (cit. on p. 106).
- [100] Alexander Figotin and Jeffrey H. Schenker, ‘Hamiltonian Structure for Dispersive and Dissipative Dynamical Systems’, *Journal of Statistical Physics* **128**, 969–1056 (2007) (cit. on p. 107).
- [101] B. Gralak and A. Tip, ‘Macroscopic Maxwell’s equations and negative index materials’, *Journal of Mathematical Physics* **51**, 052902 (2010) <http://dx.doi.org/10.1063/1.3374670> (cit. on p. 107).

- [102] Aaswath Raman, Wonseok Shin and Shanhui Fan, 'Upper Bound on the Modal Material Loss Rate in Plasmonic and Metamaterial Systems', *Phys. Rev. Lett.* **110**, 183901 (2013) (cit. on pp. 110, 111, 124).
- [103] Boris Gralak, Michiel de Dood, Gérard Tayeb, Stefan Enoch and Daniel Maystre, 'Theoretical study of photonic band gaps in woodpile crystals', *Phys. Rev. E* **67**, 066601 (2003) (cit. on p. 122).
- [104] Han van der Lem, Adriaan Tip and Alexander Moroz, 'Band structure of absorptive two-dimensional photonic crystals', *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 1334–1341 (2003) (cit. on pp. 122, 124–128, 132–134, 144).
- [105] Aaswath Raman and Shanhui Fan, 'Photonic Band Structure of Dispersive Metamaterials Formulated as a Hermitian Eigenvalue Problem', *Phys. Rev. Lett.* **104**, 087401 (2010) (cit. on pp. 122, 134–138, 140–143, 145).
- [106] Shun-Der Wu and Elias N. Glytsis, 'Finite-number-of-periods holographic gratings with finite-width incident beams: analysis using the finite-difference frequency-domain method', *J. Opt. Soc. Am. A* **19**, 2018–2029 (2002) (cit. on pp. 122, 134).
- [107] Georgios Veronis, Robert W. Dutton and Shanhui Fan, 'Method for sensitivity analysis of photonic crystal devices', *Opt. Lett.* **29**, 2288–2290 (2004) (cit. on pp. 122, 134).
- [108] Chin ping Yu and Hung chun Chang, 'Compact finite-difference frequency-domain method for the analysis of two-dimensional photonic crystals', *Opt. Express* **12**, 1397–1408 (2004) (cit. on pp. 122, 134).
- [109] Shangping Guo, Feng Wu, Sacharia Albin and Robert S. Rogowski, 'Photonic band gap analysis using finite-difference frequency-domain method', *Opt. Express* **12**, 1741–1746 (2004) (cit. on pp. 122, 134).
- [110] A. Archambault, T. V. Teperik, F. Marquier and J. J. Greffet, 'Surface plasmon Fourier optics', *Phys. Rev. B* **79**, 195414 (2009) (cit. on p. 123).
- [111] P. A. Sturrock, 'Kinematics of Growing Waves', *Phys. Rev.* **112**, 1488–1503 (1958) (cit. on p. 123).
- [112] R. V. Craster, T. Antonakakis, M. Makwana and S. Guenneau, 'Dangers of using the edges of the Brillouin zone', *Phys. Rev. B* **86**, 115130 (2012) (cit. on p. 124).
- [113] Kahyun Hur, Yan Francescato, Vincenzo Giannini, Stefan A. Maier, Richard G. Hennig and Ulrich Wiesner, 'Three-Dimensionally Isotropic Negative Refractive Index Materials from Block Copolymer Self-Assembled Chiral Gyroid Networks', *Angewandte Chemie International Edition* **50**, 11985–11989 (2011) (cit. on p. 127).
- [114] Georgios Veronis, Robert W. Dutton and Shanhui Fan, 'Metallic photonic crystals with strong broadband absorption at optical frequencies over wide angular range', *Journal of Applied Physics* **97**, 093104 (2005) <http://dx.doi.org/10.1063/1.1889248> (cit. on p. 134).

- [115] Esteban Moreno, Daniel Erni and Christian Hafner, ‘Band structure computations of metallic photonic crystals with the multiple multipole method’, *Phys. Rev. B* **65**, 155120 (2002) (cit. on p. 134).
- [116] V. Kuzmiak, A. A. Maradudin and F. Pincemin, ‘Photonic band structures of two-dimensional systems containing metallic components’, *Phys. Rev. B* **50**, 16835–16844 (1994) (cit. on p. 134).
- [117] Takunori Ito and Kazuaki Sakoda, ‘Photonic bands of metallic systems. II. Features of surface plasmon polaritons’, *Phys. Rev. B* **64**, 045117 (2001) (cit. on p. 134).
- [118] A.-S. Bonnet-Ben Dhia, C. Carvalho, L. Chesnel and P. Ciarlet Jr., ‘On the use of Perfectly Matched Layers at corners for scattering problems with sign-changing coefficients’, *Journal of Computational Physics* **322**, 224–247 (2016) (cit. on pp. 138, 145).
- [119] Ardavan Oskooi and Steven G. Johnson, ‘Distinguishing correct from incorrect {PML} proposals and a corrected unsplit {PML} for anisotropic, dispersive media’, *Journal of Computational Physics* **230**, 2369–2377 (2011) (cit. on p. 146).
- [120] Yoann Brûlé, Boris Gralak and Guillaume Demésy, ‘Calculation and analysis of the complex band structure of dispersive and dissipative two-dimensional photonic crystals’, *J. Opt. Soc. Am. B* **33**, 691–702 (2016) (cit. on p. 169).
- [121] Stephen Y. Chou, Peter R. Krauss and Preston J. Renstrom, ‘Nanoimprint lithography’, *Journal of Vacuum Science & Technology B* **14**, 4129–4133 (1996) (cit. on p. 173).

Contributions à des Conférences

- [122] Vladimir Mityushev, Conductivity of a two-dimensional composite containing elliptical inclusions, in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (The Royal Society, 2009), rspa20090219 (cit. on p. 81).
- [123] Jean-Michel Combes, Boris Gralak and Adriaan Tip, Spectral properties of absorptive photonic crystals, in, edited by P. Kuchment (2002), p. 1 (cit. on pp. 122, 124, 126, 127, 132, 144).

Articles non publiés

- [124] Anne-Sophie Bonnet-Ben Dhia, Camille Carvalho and Patrick Ciarlet, ‘Mesh requirements for the finite element approximation of problems with sign-changing coefficients’, working paper or preprint, June 2016 (cit. on pp. 138, 145).

Thèses et HDR

- [125] Guillaume Demésy, Modélisation électromagnétique tri-dimensionnelle de réseaux complexes. Application au filtrage spectral dans les imageurs CMOS. PhD thesis (Université Paul Cézanne-Aix-Marseille III, 2009) (cit. on pp. 3, 13, 27, 29).
- [126] Boris Gralak, Habilitation à diriger des recherches (Université Paul Cézanne-Aix-Marseille III, 2010) (cit. on pp. 4, 107, 110, 111, 124).
- [127] Benjamin Vial, Étude de résonateurs électromagnétiques ouverts par approche modale. Application au filtrage multispectral dans l'infrarouge. PhD thesis (Ecole Centrale Marseille, 2013) (cit. on pp. 56, 101).
- [128] Camille Carvalho, Étude mathématique et numérique de structures plasmoniques avec coins, PhD thesis (ENSTA ParisTech, 2015) (cit. on pp. 138, 145).

Documents en Ligne

- [129] Eliane Bécache, *Schémas numériques pour la résolution de l'équation des ondes*, Cours de Master, (Jan. 2009) <http://perso.ensta-paristech.fr/~becache/COURS-ONDES/Poly-num-0209.pdf> (cit. on p. 39).
- [130] *SOPRA N&K Database*, <http://refractiveindex.info> (cit. on p. 51).

Brevets

- [131] A.-L. Fehrembach, B. Gralak, B. Dagens, B. Barat, E. Popov, G. Demésy, G. Tayeb, P. Gogol, S. Féron, V. Yam and Y. Brûlé, 'DISPOSITIF D’AFFICHAGE À COMPOSANT OPTIQUE À RÉFLEXION SÉLECTIVE ET ÉLÉMENTS OPTIQUES DE DÉFLEXION ET DE FOCALISATION, POUR UN VÉHICULE', Patent (FR) () (cit. on pp. 92, 97).
- [132] A.-L. Fehrembach, B. Gralak, B. Dagens, B. Barat, E. Popov, G. Demésy, G. Tayeb, P. Gogol, B. Bavoux, Q. Li, R. Megy, M. Grangier, V. Yam and Y. Brûlé, 'DISPOSITIF DE VISION TÊTE HAUTE AVEC LAME A SURFACE REFLECHISSANTE', Patent (FR) () (cit. on p. 93).

Rapports Techniques

- [133] Satish Balay, Shrirang Abhyankar, Mark F. Adams, Jed Brown, Peter Brune, Kris Buschelman, Lisandro Dalcin, Victor Eijkhout, William D. Gropp, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Lois Curfman McInnes, Karl Rupp, Barry F. Smith, Stefano

Zampini, Hong Zhang and Hong Zhang, *PETSc Users Manual*, tech. rep. ANL-95/11 - Revision 3.7 (Argonne National Laboratory, 2016) (cit. on pp. 24, 107, 114).

- [134] J. E. Roman, C. Campos, E. Romero and A. Tomas, *SLEPc Users Manual*, tech. rep. DSIC-II/24/02 - Revision 3.6 (D. Sistemes Informàtics i Computació, Universitat Politècnica de València, 2015) (cit. on pp. 24, 107, 113, 114).

MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS POUR LES NANOSTRUCTURES MÉTALLIQUES: APPLICATION AU FILTRAGE SPECTRAL DANS LE VISIBLE ET EXTENSION AU CALCUL MODAL EN PRÉSENCE DE DISPERSION

Résumé: Dans ce travail de Thèse de Doctorat, dans le contexte d'une application de filtrage optique pour la réalité augmentée des Viseurs Tête Haute (VTH), plusieurs possibilités de conception de filtres basés sur des résonances de nanoparticules métalliques sont explorées. Pour ce faire, une formulation de la Méthode des Éléments Finis (FEM) précédemment développée au sein de l'Institut Fresnel est appliquée à différentes structures électromagnétiques complexes. La validité des résultats de la FEM est alors vérifiée, dans une configuration extrêmement résonante d'un réseau bidimensionnel de nanocônes d'or illuminé dans des conditions d'absorption totale de la lumière incidente, par comparaison avec les résultats d'une autre méthode numérique complètement indépendante. Une fois validée dans cette configuration extrême, cette méthode a pu être utilisée afin de conduire une étude paramétrique sur deux types particuliers de réseaux de nanoparticules métalliques. Les résultats de cette étude paramétrique ont conduit aux designs de deux types de composant de filtrage de la lumière visible requis pour l'application VTH: celui de réseaux monodimensionnels de rubans d'argent permettant de réfléchir une partie du spectre lumineux pour une composante de polarisation de la lumière tout en étant globalement transparent pour l'autre composante de polarisation, et celui de réseaux bidimensionnels de nanocylindres à section elliptique permettant de réfléchir deux parties distinctes du spectre en fonction de la polarisation de la lumière incidente et ceci toujours avec des propriétés de transparence globale. Dans un dernier temps, une nouvelle formulation de la FEM est développée afin d'étendre cette méthode numérique au calcul des modes de résonance de ce type de nanostructures métalliques. En présence de structures incorporant des matériaux métalliques, dispersifs et dissipatifs, l'opérateur de Maxwell associé est non-linéaire en fréquence et non-Hermitien et donc difficile à aborder numériquement. Dans le but de linéariser cet opérateur vis-à-vis de la fréquence, le formalisme dit de "champs auxiliaires" a été implémenté numériquement aux éléments finis. La validité des résultats numériques obtenus est enfin vérifiée sur une cavité fermée puis sur différents cristaux photoniques bidimensionnels constitués de tiges métalliques de Drude. Enfin, dans le cas de structures ouvertes, une couche parfaitement adaptée (PML) dispersive est étudiée dans le cadre des problèmes modaux.

Mots clés: Méthode des Éléments Finis, filtrage optique, plasmonique, calcul modal, dispersion, Viseur Tête Haute

FINITE ELEMENT METHOD FOR PLASMONICS NANOSTRUCTURES: APPLICATION TO SPECTRAL FILTERING IN THE VISIBLE RANGE AND EXTENSION TO MODAL COMPUTATION WITH DISPERSION

Abstract: In this PhD, in the frame of a filtering application for augmented reality of Head-Up Display (HUD), several possibilities to design filters based on metallic nanoparticles resonances are explored. To do so, a Finite Element Method formulation previously developed within the Institut Fresnel is initially recalled and its implementation applied to various complex electromagnetic structures. The validity of its results is verified, in the particular case of an extremely resonant configuration consisting in a gold nanocones metallic grating illuminated in the condition of total absorption of light, by comparison with the results of another completely independent numerical method. Thus, the results of this implementation having been validated in this extreme configuration, they could then be used to conduct a parametric study on two particular types of metallic nanoparticles gratings significantly less resonant. The results of this parametric study have led to the design of both types of filtering component of the visible light required for the HUD application: the mono-dimensional silver ribbons gratings allowing to reflect a part of the visible spectrum for one polarization's component of the light while being globally transparent for the other component, and that of two-dimensional silver nanocylinders of elliptic cross section allowing to reflect two distinct parts of the spectrum according to the polarization of incident light while still being globally transparent. In a last time, a new FEM formulation is developed in order to extend this numerical method to the resonances computation of this kind of metallic nanostructures. When metallic materials are involved into electromagnetic structures, the associated Maxwell operator is non-linear and non-Hermitian. The Eigenvalue problem to solve is practically impossible to implement into the FEM. In order to linearize the Maxwell operator toward the frequency, a formalism called "Auxiliary fields formalism" is introduced and implemented numerically. The validity of the results obtained through this implementation is then verified on a closed cavity and on several example of bi-dimensional photonic crystals made of Drude metallic rods. Finally, when tackling open structures, a dispersive perfectly matched layer (PML) is studied in the frame of eigenvalue problems.

Keywords: Finite Element Method, optical filtering, plasmonics, modal computation, dispersion, Head-Up Display