



HAL
open science

Théorie et simulation en nanophotonique : non-localité dans les nanostructures métalliques

Armel Pitelet

► **To cite this version:**

Armel Pitelet. Théorie et simulation en nanophotonique : non-localité dans les nanostructures métalliques. Optique [physics.optics]. Université Clermont Auvergne [2017-2020], 2018. Français. NNT : 2018CLFAC097 . tel-02401483

HAL Id: tel-02401483

<https://theses.hal.science/tel-02401483v1>

Submitted on 10 Dec 2019

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.

UNIVERSITÉ CLERMONT AUVERGNE
U.F.R. SCIENCES ET TECHNOLOGIES

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES FONDAMENTALES
N° 178

THÈSE

présenté pour obtenir le grade de

DOCTEUR D'UNIVERSITÉ
Spécialité : Physique

Par **Armel PITELET**

Master Nanostructures et Nanophotonique

**THÉORIE ET SIMULATION EN NANOPHOTONIQUE :
NON-LOCALITÉ DANS LES NANOSTRUCTURES MÉTALLIQUES**

Soutenue publiquement le 20 Décembre 2018 devant la commission
d'examen :

| | | |
|--------------|-----------------------|--------------------|
| Présidente : | Mme Anne SENTENAC | |
| Examineurs : | M. Christophe SAUVAN | Rapporteur |
| | M. Alexandre VIAL | Rapporteur |
| | Mme Martine MIHAIOVIC | Examinatrice |
| | M. Emmanuel CENTENO | Directeur de thèse |
| | M. Antoine MOREAU | Directeur de thèse |

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Table des matières | 4 |
| Table des figures | 7 |
| Liste des tableaux | 8 |
| Introduction | 9 |
| 1 Plasmon de volume et plasmon de surface | 12 |
| 1.1 Ondes de volume | 12 |
| 1.1.1 Plasmon de volume : le bulk plasmon | 12 |
| 1.1.2 Onde de volume transverse | 16 |
| 1.2 Modèles de matériau | 18 |
| 1.2.1 Drude et Drude-Lorentz | 18 |
| 1.2.2 Brendel et Bormann | 20 |
| 1.2.3 Le modèle de permittivité “généralisé” | 20 |
| 1.3 Plasmon de surface | 21 |
| 1.3.1 Forme générale des champs et relation de dispersion | 21 |
| 1.3.2 Relation de dispersion sans pertes | 23 |
| 1.3.3 Relation de dispersion avec pertes | 29 |
| 1.3.4 Prise en compte des électrons liés | 30 |
| 1.3.5 Sur l’appellation Plasmon, Polariton et Plasmon-Polaritons | 32 |
| 1.4 Localité et non-localité | 35 |
| 1.5 Conclusion | 36 |
| 2 Non-localité et modes guidés plasmoniques | 38 |
| 2.1 Modèle hydrodynamique | 38 |
| 2.1.1 Polarisation non locale des électrons libres et équation d’Euler linéarisée | 39 |
| 2.1.2 Equations d’onde non locales et conditions aux limites | 40 |
| 2.1.3 Forme générale des champs dans un milieu non local | 41 |
| 2.1.4 Relation de dispersion non locale | 42 |
| 2.2 Influence du diélectrique sur le confinement et la non-localité | 45 |
| 2.2.1 Relation de dispersion | 46 |
| 2.2.2 Distances caractéristiques non locales | 47 |
| 2.3 Le gap-plasmon | 51 |
| 2.3.1 Dispersion en fonction de l’épaisseur de diélectrique | 52 |
| 2.3.2 Dispersion du gap-plasmon à épaisseur fixée | 52 |
| 2.4 Les modes de slab fin | 55 |
| 2.4.1 Dispersion en fonction de l’épaisseur de métal | 57 |
| 2.4.2 Dispersion à épaisseur de métal fixée | 59 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 2.5 | Formalisme pour l'étude d'un multi-couche | 62 |
| 2.5.1 | Forme générale des champs et matrices S | 63 |
| 2.5.2 | Coefficients de réflexion et modes guidés | 66 |
| 2.6 | Simplification : un modèle de cavité à un mode | 68 |
| 2.6.1 | Formule de Fabry-Perot pour le I.M.I. | 68 |
| 2.6.2 | Simplification de la formule de Fabry-Perot | 73 |
| 2.6.3 | Généralisation de la simplification aux matrices S | 77 |
| 2.6.4 | Extension du modèle de couche diélectrique mince | 78 |
| 2.7 | Conclusion | 83 |
| 3 | Structures complexes et non-localité | 85 |
| 3.1 | Coupleurs à prisme | 86 |
| 3.1.1 | Couplage par génération d'évanescents | 86 |
| 3.1.2 | Coupleur à gap-plasmon | 87 |
| 3.1.3 | Coupleur à LRSP et SRSP | 91 |
| 3.2 | Coupleurs à réseau | 93 |
| 3.2.1 | Diffraction et ondes évanescentes | 94 |
| 3.2.2 | Contraintes numériques et expérimentales | 95 |
| 3.2.3 | Réseau diélectrique | 99 |
| 3.2.4 | Réseau métallique | 105 |
| 3.2.5 | Caractérisation : problèmes inverses et quantification d'incertitude | 110 |
| 3.3 | Conclusion | 117 |
| 4 | Rayonnement d'un dipôle dans une structure multi-couche | 118 |
| 4.1 | Fonction de Green dans un milieu homogène | 119 |
| 4.1.1 | Théorie de Green | 119 |
| 4.1.2 | Équations intégrales de volume | 120 |
| 4.1.3 | Fonction de Green scalaire | 122 |
| 4.1.4 | Dyadique de Green dans un milieu homogène | 123 |
| 4.1.5 | Décomposition spectrale | 124 |
| 4.1.6 | Décomposition TE/TM | 125 |
| 4.2 | Dyadique de Green pour un multi-couche | 126 |
| 4.2.1 | Conditions aux limites | 128 |
| 4.2.2 | Matrices S et dyadique de Green | 130 |
| 4.2.3 | Amplitudes dans la couche source | 133 |
| 4.2.4 | Passage en coordonnées cylindriques | 136 |
| 4.2.5 | Intégration par quadrature et accélération du calcul | 138 |
| 4.2.6 | Vérifications numériques | 146 |
| 4.3 | Intérêt du dyadique de Green | 149 |
| 4.3.1 | Diagramme de rayonnement | 149 |
| 4.3.2 | Puissance, taux d'émission et temps de vie | 152 |
| 4.3.3 | Autres applications du dyadique de Green | 159 |
| 4.4 | Conclusion | 160 |
| | Conclusion | 162 |
| | Bibliographie | 174 |

Table des figures

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | Courbes de dispersion volumiques | 17 |
| 1.2 | Représentation schématique d'un plasmon de surface | 21 |
| 1.3 | Courbe de dispersion du plasmon de surface (modèle de Drude sans pertes) | 24 |
| 1.4 | Profils de champs et de vecteur de Poynting pour un plasmon de surface | 26 |
| 1.5 | Longueur d'onde effective, direction et intensité des champs d'un plasmon de surface | 27 |
| 1.6 | Densité de charge surfacique d'un plasmon de surface | 28 |
| 1.7 | Courbe de dispersion du plasmon de surface (modèle de Drude) | 28 |
| 1.8 | Distances caractéristiques d'un plasmon de surface | 29 |
| 1.9 | Profils de champs dans la bande interdite et pour le mode de Brewster | 30 |
| 1.10 | Modèle de permittivité de Drude Vs permittivité de Brendel et Bormann | 31 |
| 1.11 | Courbe de dispersion du plasmon de surface (modèle de Brendel et Bormann) | 31 |
| 2.1 | Représentation schématique d'un plasmon de surface non locale | 43 |
| 2.2 | Courbe de dispersion du plasmon de surface non local | 44 |
| 2.3 | Direction du champ et densité de charge associés à un plasmon de surface non local | 45 |
| 2.4 | Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$) non locales en fonction de la permittivité diélectrique | 46 |
| 2.5 | Courbes de dispersion ($\Im(n_{eff})$) non locales en fonction de la permittivité diélectrique | 47 |
| 2.6 | Courbe de dispersion pour une interface TiO ₂ /Ag | 48 |
| 2.7 | Distances de pénétration locales Vs non locales | 49 |
| 2.8 | Distances de propagation pour une interface TiO ₂ /Ag | 49 |
| 2.9 | Différences absolues et relatives entre distances de propagation locales et non locales | 50 |
| 2.10 | Représentation schématique du M.I.M. | 51 |
| 2.11 | Courbe de dispersion du gap-plasmon en fonction de l'épaisseur du gap | 53 |
| 2.12 | Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$ Vs fréquence) du gap-plasmon pour différentes épaisseurs de gap | 54 |
| 2.13 | Courbes de dispersion ($\Im(n_{eff})$ Vs fréquence) du gap-plasmon pour différentes épaisseurs de gap | 54 |
| 2.14 | Représentation schématique de la structure I.M.I. | 55 |
| 2.15 | Indice effectif en fonction de l'épaisseur du système I.M.I. | 58 |
| 2.16 | Distance de propagation du SRSP en fonction de l'épaisseur de métal | 58 |
| 2.17 | Distances caractéristiques du LRSP en fonction de l'épaisseur de métal | 59 |
| 2.18 | Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$ Vs fréquence) du SRSP et du LRSP pour une épaisseur de métal de 60 nm | 61 |

| | | |
|------|--|-----|
| 2.19 | Courbes de dispersion ($\Im(n_{eff})$ Vs fréquence) du SRSP et LRSP pour une épaisseur de métal de 60 nm | 61 |
| 2.20 | Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$ Vs fréquence) du SRSP et LRSP pour une épaisseur de métal de 10 nm | 62 |
| 2.21 | Courbes de dispersion ($\Im(n_{eff})$ Vs fréquence) du SRSP et LRSP pour une épaisseur de métal de 60 nm (zoom) | 63 |
| 2.22 | Modèle à deux modes | 69 |
| 2.23 | Distances de pénétration dans le métal en fonction de l'épaisseur du métal | 73 |
| 2.24 | Distances de pénétration dans le métal de l'onde transverse δ_m et de l'onde longitudinale δ_{nl} en fonction de la fréquence normalisée pour un I.M.I. symétrique | 74 |
| 2.25 | Distances de pénétration L_{nl} et épaisseurs limites h_{lim} dans le visible | 76 |
| 2.26 | Courbes de dispersion du LRSP et SRSP pour un I.M.I. composé de TiO_2 et d'argent d'épaisseur $h = 1.7$ nm | 77 |
| 2.27 | Représentation schématique de la technique des couches minces pour la prise en compte de la non-localité | 79 |
| 2.28 | Représentation schématique de l'équivalence entre les deux systèmes | 81 |
| 3.1 | Illustration de la méthode de couplage par réflexion totale atténuée | 87 |
| 3.2 | Représentation schématique du coupleur à prisme pour l'excitation du gap-plasmon | 88 |
| 3.3 | Réflexivité du prisme excitant un gap-plasmon. (Air) | 89 |
| 3.4 | Réflexivité du prisme excitant un gap-plasmon. (diélectrique) | 90 |
| 3.5 | Représentation schématique du coupleur à prisme pour l'excitation du LRSP et SRSP | 92 |
| 3.6 | Réflexivité du prisme excitant les modes de slab fin | 92 |
| 3.7 | Réflexivité du prisme excitant les modes de slab fin (LRSP non affecté) | 93 |
| 3.8 | Représentation schématique des deux configurations possibles pour exciter un plasmon de surface via un réseau de diffraction | 100 |
| 3.9 | Réflexivité en fonction de la longueur d'onde pour le réseau diélectrique | 101 |
| 3.10 | Intensité de $ H_y $ telle que $\lambda = 528$ nm pour le réseau diélectrique | 102 |
| 3.11 | Champ H_y le long de l'interface diélectrique en dessous du réseau pour $\lambda = 528$ | 103 |
| 3.12 | Intensité de $ H_y $ telle que $\lambda = 668$ nm pour le réseau diélectrique | 104 |
| 3.13 | Champ H_y le long de l'interface diélectrique en dessous du réseau pour $\lambda = 668$ nm | 104 |
| 3.14 | Courbe de dispersion du plasmon de surface ($\Re(k_x)$) pour une épaisseur finie de TiO_2 | 106 |
| 3.15 | Différences entre longueurs d'onde de couplage locales et non locales et distances de propagation du plasmon de surface | 107 |
| 3.16 | Réflexivité pour différentes valeurs de l'épaisseur du réseau h_G et champ magnétique associé | 108 |
| 3.17 | Réflexivité du réseau métallique en fonction de la longueur d'onde incidente | 109 |
| 3.18 | Intensité de $ H_y $ telle que $\lambda = 579.5$ nm pour le réseau métallique | 110 |
| 3.19 | Réflexivités (locales) pour trois épaisseurs de diélectrique h_D | 112 |
| 3.20 | Réflexivités résultant de l'étape I | 113 |
| 3.21 | Réflexivités résultant de l'optimisation direct des quatre paramètres géométriques | 114 |

| | | |
|------|--|-----|
| 3.22 | Réfectivités locale et non locale obtenues en prenant en compte les incertitudes sur les paramètres locaux | 116 |
| 4.1 | Chemin d'intégration choisi pour la résolution de l'équation (4.32) . . . | 123 |
| 4.2 | Schéma du comportement de k_z dans le plan complexe | 140 |
| 4.3 | Intégrande f_{xx} le long de l'axe réel pour un mutli-couche composé de diélectriques sans pertes | 141 |
| 4.4 | Intégrande f_{xx} le long de l'axe réel pour un multi-couche composé de diélectriques à pertes | 142 |
| 4.5 | Intégrande f_{xx} le long de l'axe réel pour une multi-couche incluant un métal | 143 |
| 4.6 | Partie imaginaire de l'intégrande f_{zz} en fonction de la variable d'intégration normalisée (VI.) | 144 |
| 4.7 | Représentation schématique du chemin d'intégration pour le calcul du dyadique de Green | 145 |
| 4.8 | Composante G_{xz} du dyadique calculée par intégration numérique et analytiquement | 147 |
| 4.9 | Erreur numérique donnée par l'équation (4.215) et différence absolue correspondant à la figure 4.8 | 147 |
| 4.10 | Composantes G_{xx} et G_{zx} du dyadique de Green | 148 |
| 4.11 | Diagramme de rayonnement d'une source au dessus d'un multi-couche dans le plan du dipôle ($h = \frac{\lambda}{100}$) | 153 |
| 4.12 | Diagramme de rayonnement d'une source au dessus d'un multi-couche dans le plan du dipôle ($h = \lambda$) | 153 |
| 4.13 | Diagramme de rayonnement d'une source au dessus d'un multi-couche dans le plan du dipôle ($h = \frac{5}{\lambda}$) | 154 |
| 4.14 | Taux d'émission normalisé pour un dipôle au dessus d'un plan métallique parfait | 156 |
| 4.15 | Temps de vie d'un émetteur en fonction de la distance à la surface métallique pour $h_m = 200$ nm | 157 |
| 4.16 | Temps de vie d'un émetteur en fonction de la distance à la surface métallique pour $h_m = 13.3$ nm | 158 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|--|-----|
| 3.1 | Paramètres géométriques et incertitudes correspondantes (en nm) issus de notre procédure de télémétrie | 115 |
| 4.1 | Équivalence entre l'équation (4.186) et les différents développements en fonctions de Bessel | 137 |

Introduction

Depuis plus d'une centaine d'années maintenant, la communauté de l'optique utilise le modèle de Drude[1] pour prédire la réponse optique des métaux. Ce modèle, étonnamment frustré, s'est montré redoutablement efficace. On peut bien sûr attribuer cette efficacité aux améliorations qu'il a subies au cours du temps. Partant de l'idée que la réponse d'un métal est essentiellement - mais pas entièrement - due au gaz d'électrons libres qu'il contient, la communauté a peu à peu inclus l'effet des pertes optiques dans ce gaz d'électrons, puis l'influence de la polarisabilité de la grille d'ions dans laquelle se meuvent les électrons. Ces modèles visaient initialement à expliquer par exemple la couleur des métaux, mais même lorsque qu'il s'agit d'étudier la réponse optique de structures métalliques nanométriques, les modèles de type Drude-Lorentz continuent à se montrer extrêmement pertinents. Ils ont ainsi accompagné, tout au long du vingtième siècle, le développement du champ scientifique qui vise à utiliser les propriétés uniques de la réponse optique des métaux pour contrôler la lumière et en faire toutes sortes de composants optiques (détecteurs, modulateurs, absorbeurs... etc.) et qu'on appelle plasmonique.

On date en général les prémises de la plasmonique du tout début du vingtième siècle, avec les travaux de Wood[2], contemporain de Drude, qui découvre des anomalies dans la réponse optique d'un réseau de diffraction métallique. Une cinquantaine d'années plus tard, on peut dire que le domaine de la plasmonique naît réellement avec la compréhension de ces anomalies : on découvre en effet que les réseaux métalliques sont capables d'exciter des *plasmons de surface*, une onde électromagnétique qui se propage le long d'une interface entre un métal et un diélectrique. Le fait qu'ils soient guidés par l'interface confine les champs électromagnétiques près de la surface, à des échelles inférieures à la longueur d'onde. Cette capacité de confinement exceptionnelle va mener à des développements intenses dans les années 80 avec le développement des capacités expérimentales pour donner un champ scientifique aujourd'hui immense. À cette époque, on s'attend à ce que le modèle de Drude et ses dérivés ne soient plus suffisants pour décrire précisément la réponse des métaux dans un cadre où les champs sont si fortement confinés. Et on dispose d'autres descriptions, plus précises et ancrées dans une physique beaucoup plus complexe.

Parallèlement en effet, les progrès théoriques, dans le cadre de la mécanique quantique notamment, ont énormément amélioré notre compréhension du comportement d'un gaz d'électron dans un métal. Les ordinateurs ont vu leur puissance augmenter exponentiellement, permettant des calculs de plus en plus lourds et donc de plus en plus précis - mais en général pour de très petites structures, avec un nombre relativement restreint d'atomes. On peut avoir le sentiment, au vu de la littérature, qu'il y a eu une certaine divergence entre les expérimentateurs, dont les techniques permettent maintenant la fabrication de structures nanométriques et même subnanométriques mais qui se contentent du modèle de Drude, et les théoriciens, capables de simuler finement un phénomène dans une structure très petite, mais pas toujours capables d'utiliser les modèles les plus complexes pour prédire des résultats expérimentaux réalistes pour

des structures complexes. En somme, les modèles les plus avancés prennent en compte un très grand nombre de phénomènes très complexes[3], mais cela se fait souvent au détriment de l'intuition physique qu'il est possible de se forger avec un modèle classique, rendant ces aspects inaccessibles pour les expérimentateurs.

Des modèles intermédiaires existent cependant. Développés dans les années 80, ils prennent leur justification dans les modèles avancés, mais sont plus simples à mettre en oeuvre. Le premier phénomène à prendre en compte si on veut dépasser l'approche de Drude est sans aucun doute la répulsion entre électrons. Elle complique la réponse des métaux en la rendant *non locale*, c'est à dire que le champ électrique en un endroit du métal génère un courant, qui va influencer le champ électrique plus loin. Dans les années 80, on avait espéré que le confinement qui se produit lorsqu'un plasmon de surface est excité pourrait permettre de mettre en évidence ce phénomène et son influence sur la réponse optique des métaux. Pourtant, les études publiées sur ce sujet montrent toutes que, si il y a sans doute un effet, cet effet est négligeable aux échelles considérées. Le consensus de l'époque est que soit les échelles sont celles typiques en plasmonique et le modèle de Drude est toujours suffisant, soit aux échelles beaucoup plus petites on doit faire appel à des modèles beaucoup plus complexes et précis. C'est la communauté des surfaces[4] (l'étude des propriétés fines des interfaces entre matériaux) qui va continuer à développer ces modèles plus avancés, tandis que la communauté de la plasmonique s'en désintéresse – avec l'idée qu'il n'y a pas de transition douce entre les modèles classiques et les modèles tout quantiques.

Depuis, le domaine de la plasmonique s'est cependant de plus en plus intéressé aux échelles extrêmement petites en considérant des agrégats d'atomes métalliques, des interstices entre particules de l'ordre du nanomètre voir moins[5, 6, 7]. Et ces échelles ont une importance cruciale pour la réponse globale des structures - on peut citer l'augmentation de fluorescence de molécules ou de boîtes quantiques due à une très rapide désexcitation (mille fois plus rapide que dans le vide) à proximité de structures résonantes plasmoniques[8], par exemple. Des expériences récentes[9, 10] ont montré qu'à ces échelles la répulsion entre électrons semble bien avoir un effet mesurable sur les résonances et que les modèles semi-classiques sont capables de rendre compte de ces effets. Ces études ont relancé l'intérêt pour ces modèles en plasmonique, et des techniques numériques adaptées ont vu le jour.

Cependant, pour mettre en évidence ces effets, la communauté se tourne systématiquement vers des nanoparticules synthétisées chimiquement, et les plus petites possibles pour que la répulsion entre électrons puisse avoir la plus grande importance possible. Au final, peu de nouvelles expériences ont été tentées pour mettre ces effets en évidence et l'impression qui s'en dégage est que ces effets sont limités aux plus petites nanoparticules ou aux interstices sub-nanométriques entre nanoparticules.

L'objectif de ce travail est de préciser où il faut s'attendre à trouver les limites du modèle de Drude - pour les théoriciens afin de savoir s'ils doivent étendre leurs études à des systèmes plus grands typiques de la plasmonique, et pour les expérimentateurs pour savoir si les différences qu'ils constatent parfois entre expérience et simulation ne peuvent pas être dues au modèle de Drude lui-même. Pour cela, nous sommes partis d'une analyse physique des raisons qui peuvent faire que la réponse optique d'une structure plasmonique soit sensible aux effets non locaux. En nous basant sur l'idée que c'est une forme de confinement des champs qui fera intervenir ces effets, nous avons cherché jusqu'à quelle échelle, finalement, ils se manifestent suffisamment pour pouvoir être observés ou mesurés. Il s'agit en définitive de jeter un pont entre les modèles les plus avancés et l'expérience.

Dans un premier chapitre nous présenterons le plasmon et plasmon de surface, à

l'origine de la plasmonique. Nous en profiterons pour exposer les modèles classiques que nous utiliserons et nous en servirons pour étudier le comportement du plasmon de surface en considérant des matériaux réalistes. Dans un second chapitre, nous introduirons un modèle semi classique, le modèle hydrodynamique, capable de prendre en compte la nature non locale des métaux. Nous l'utiliserons pour étudier le possible impact de cette nature sur le plasmon de surface, puis sur d'autres modes plasmoniques capables de se propager dans les milieux lamellaires. Nous montrerons que l'influence de la non-localité est en fait difficilement négligeable dès lors que l'on considère un confinement des champs suffisamment grand. Nous verrons comment augmenter ce confinement de façon très générale. Nous verrons que les effets non locaux peuvent alors apparaître pour des épaisseurs bien supérieures à l'échelle subnanométrique. Nous verrons également qu'il est possible de prendre en compte l'impact de la non-localité tout en simplifiant le modèle hydrodynamique. Dans un troisième chapitre nous proposerons des expériences optiques basées sur l'excitation de ces modes plasmoniques pour mettre en évidence et potentiellement mesurer la non-localité. Les propositions que nous ferons impliqueront des échelles largement supérieures au nanomètre, là aussi. Nous montrerons que la non-localité peut avoir une influence visible sur la réponse optique d'interstices pouvant faire plusieurs dizaines de nanomètres d'épaisseur. Nous montrerons ensuite que le plasmon de surface lui même peut être sensible à cette non-localité. Nous donnerons une procédure permettant de la mesurer par un procédé expérimental entièrement basé sur la réponse optique de la structure - et ceci malgré les éventuelles incertitudes sur la géométrie. Enfin dans un quatrième chapitre nous mettrons en place et vérifierons le formalisme nécessaire à l'étude du rayonnement d'un émetteur dans un milieu lamellaire, possiblement plasmonique. Si les outils numériques et théoriques nécessaires ont été mis en place, il reste encore à la valoriser en traitant des situations d'intérêts - et elles sont nombreuses.

Chapitre 1

Plasmon de volume et plasmon de surface

Ce chapitre a pour but d'introduire les notions de plasmon et d'onde de surface pour finalement aborder le plasmon de surface. Pour ce faire nous commencerons par voir ce qu'est un plasmon. Le mot en lui-même désigne une notion de physique quantique mais nous verrons qu'il est possible de considérer le plasmon dans un cadre plus classique. Ce cadre est celui des équations de Maxwell que nous allons introduire en premier lieu. Nous discuterons de manière générale de la propagation des ondes électromagnétiques dans les métaux. Nous décrirons ensuite les différents modèles de matériau que nous utiliserons dans tout le manuscrit. Ces modèles nous serviront pour introduire puis discuter du plasmon de surface. Nous verrons quel est l'effet des pertes sur la propagation du plasmon de surface et introduirons les distances caractéristiques correspondantes. Puis, nous verrons quel est l'effet de la prise en compte des électrons liés sur la propagation du plasmon de surface. Enfin nous terminerons par pointer une des limites de nos modèles en introduisant le concept de non-localité.

1.1 Ondes de volume

1.1.1 Plasmon de volume : le bulk plasmon

La notion de plasmon apparaît pour la première fois en 1956 dans les travaux de Pines[11]. Ce dernier introduit le terme plasmon pour décrire le quantum d'excitation associé aux oscillations collectives des électrons de valence dans un solide. Le plasmon est ce que l'on appelle une excitation élémentaire. Une excitation élémentaire est un phénomène collectif émergent de l'interaction entre un grand nombre de particules. Le terme collectif signifie que les interactions en questions impliquent un nombre considérable de particules se mouvant de manière organisée entre elles. En physique du solide, on décrit souvent grâce à ces excitations élémentaires ou quasi-particules le comportement d'un très grand nombre de particules couplées suffisamment fortement pour qu'on ne puisse pas les considérer sans interactions. Cette quantification permet de considérer un solide comme une collection d'excitations indépendantes, qui émergent des interactions complexes entre les vraies particules constituant le solide. Quelques années avant l'introduction formelle du plasmon, Pines publie avec Bohms une série d'articles sur l'approche collective dans la description d'un gaz d'électrons de haute densité[12, 13, 14]. Il montre alors que les oscillations de densité du plasma émergent de l'interaction collective et organisée des électrons du plasma. A cause de la force de Coulomb à longue portée, chaque électron est capable d'influencer le mou-

vement des autres et l'ensemble des électrons est alors capable d'osciller dans un mouvement coordonné. Le plasmon est à l'origine la quantification des ondes de densité de charge d'un plasma, les ondes de Langmuir[15].

Un métal contient un gaz d'électrons libres. Il se comporte donc essentiellement comme un plasma. A l'intérieur du métal, comme dans un véritable plasma, se propagent à la fois des ondes transverses (dominantes et qui sont décrites ci-après) et des ondes de densité de charge, similaires aux ondes de Langmuir dans les plasmas. Il faut souligner que la communauté a pris l'habitude d'appeler plasmons ces ondes de densité classiques dans le gaz d'électrons libres, hors toute notion de quantification. Bien que la dénomination de plasmon se réfère originellement à des quasi-particules, il est d'usage aujourd'hui d'utiliser le terme plasmon pour décrire l'onde classique de densité de charge. C'est ces ondes que nous allons commencer par décrire dans le cadre des équations de Maxwell.

La différence entre un vrai plasma et un métal est qu'un métal est avant tout un diélectrique (les ions du réseau métallique, immobiles, formant un milieu polarisable) contenant un gaz d'électrons libres (jellium). Dans le métal, on peut donc écrire les équations de Maxwell sous la forme

$$\nabla \wedge \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.1a)$$

$$\nabla \wedge \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (1.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.1c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1.1d)$$

$$(1.1e)$$

avec \mathbf{E} le champs électrique, \mathbf{D} le déplacement électrique, \mathbf{H} le champs magnétique et \mathbf{B} l'induction magnétique. Les densités de courant \mathbf{J} et de charges ρ sont liées entre elles par la conservation de la charge

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1.2)$$

De plus les couples (\mathbf{E}, \mathbf{D}) et (\mathbf{H}, \mathbf{B}) sont liés entre eux par les relations constitutives

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_b = \epsilon_0 \epsilon_b \mathbf{E}, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu \mathbf{H}, \quad (1.4)$$

où ϵ_b et μ sont les permittivité et perméabilité du matériau et \mathbf{P}_b la densité de polarisation due à la réponse des ions. De manière générale nous ne considérerons que des matériaux non magnétiques ($\mu = 1$). Il faut souligner que ces relations constitutives en apparence simples ne sont valables que si les quantités ϵ_b et μ sont simplement des constantes, ou alors en régime harmonique, ces deux quantités étant alors des fonctions de la pulsation ω . Dans le domaine temporel, cela signifierait que \mathbf{D} s'écrit en fait comme une convolution de \mathbf{E} et de la réponse impulsionnelle du matériau. Ces considérations ne changent absolument pas les équations une fois en régime harmonique. Dans la suite, nous ferons en régime temporel comme si ϵ_b et μ étaient des constantes. Elles seront considérées comme dépendantes de ω une fois les équations obtenues en régime harmonique. En posant la proportionnalité entre la polarisation et le champ électrique *au même point*, on fait une hypothèse de localité du diélectrique. Si la polarisation dépendait du champ électrique environnant, la densité de polarisation pourrait aussi s'écrire comme une convolution spatiale du champ électrique par

la réponse spatiale du milieu. Pour le diélectrique, on suppose que cette non-localité joue à l'échelle atomique et qu'on peut la négliger.

Considérons un gaz d'électrons infini et homogène à l'équilibre dans un métal, caractérisé par une densité d'électrons libres n . Si l'on introduit dans le gaz une petite fluctuation de la densité de charge par rapport à l'équilibre, il apparaît un champ \mathbf{E} tel que

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (1.5)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide. Notons que la densité de charge à l'équilibre dans un métal est nulle, puisque le métal est supposé globalement neutre. La densité de charge n'existe qu'à cause des fluctuations de densité du gaz d'électrons libres.

Chaque électron libre situé en un point \mathbf{r} est accéléré sous l'influence de ce champ. Ce déplacement induit une densité de courant $\mathbf{J} = -ne \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t}$. On a pour un électron de masse m et de charge e

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} = -e \mathbf{E}, \quad (1.6)$$

ou encore

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}. \quad (1.7)$$

Enfin, en prenant la divergence de (1.7) et en utilisant 1.2 et 1.5 on obtient

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \omega_p^2 \rho = 0, \quad (1.8)$$

où la quantité $\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}$ est appelée la fréquence plasma. Ainsi le gaz d'électrons libre du métal est capable de supporter des oscillations de densité de charge telles que $\rho(t) = \rho(0)e^{-i\omega_p t}$. Ces oscillations correspondent à une résonance propre du *jellium*.

En posant les équations de Maxwell comme nous l'avons fait, nous avons explicitement considéré le métal comme un diélectrique polarisable accompagné de la densité de courant et de charge du gaz d'électrons libres. Supposons qu'il est possible de décrire le gaz d'électrons lui aussi comme un milieu polarisable, c'est à dire un milieu diélectrique. Nous pouvons alors réécrire les équations de Maxwell pour le métal de la même manière qu'on aurait pu le faire pour un simple diélectrique

$$\nabla \wedge \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.9a)$$

$$\nabla \wedge \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (1.9b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.9c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0. \quad (1.9d)$$

$$(1.9e)$$

On ne peut faire cela qu'en modifiant le vecteur de déplacement électrique \mathbf{D} pour qu'il comprenne la densité de courant des électrons libres. Nous devons donc changer nos relations constitutives. En comparant (1.1b) et (1.1d) avec (1.9b) et (1.9d) nous avons

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{P}_b}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (1.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} + \nabla \cdot \mathbf{P}_b - \rho. \quad (1.11)$$

L'équation (1.10) nous permet de voir la densité de courant des électrons libres $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}$ comme la variation temporelle d'une densité de polarisation \mathbf{P}_f induite par \mathbf{E} . On a

$$\mathbf{J}_f = \frac{\partial \mathbf{P}_f}{\partial t}. \quad (1.12)$$

De plus, la conservation de la charge nous permet d'écrire la densité de charge comme la variation spatiale de cette densité de polarisation

$$\rho = -\nabla \cdot \mathbf{P}_f. \quad (1.13)$$

Finalement, nous pouvons réécrire \mathbf{D} comme

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_b + \mathbf{P}_f. \quad (1.14)$$

Dans le cadre d'un modèle locale, les densités de polarisation sont directement proportionnelles au champ \mathbf{E} . On a

$$\mathbf{P}_b = \epsilon_0 \chi_b \mathbf{E}, \quad (1.15)$$

$$\mathbf{P}_f = \epsilon_0 \chi_f \mathbf{E}, \quad (1.16)$$

avec χ_f, χ_b , les susceptibilités des électrons libres (*jellium*), respectivement liés (réseau métallique). En posant $\epsilon = 1 + \chi_f + \chi_b$ on a donc

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}. \quad (1.17)$$

Dans cette description, le métal peut être considéré comme un diélectrique et caractérisé par une permittivité ϵ alors même que sa réponse est essentiellement conditionnée par celle du gaz d'électrons libres et des courants associés.

Pour avoir des oscillations de la densité de charge dans le plasma, il faut que $\nabla \cdot \mathbf{E} \neq 0$ alors même que l'on a $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$. Cela implique, dans la description purement locale que nous avons adoptée, qu'on doit avoir $\epsilon = 0$. C'est à cette condition qu'on peut avoir des oscillations du gaz d'électrons faisant apparaître une densité volumique de charge non nulle.

La condition $\epsilon = 0$ implique cependant également que $\mathbf{D} = 0$. A partir de là $\nabla \wedge \mathbf{H} = 0$. Enfin, puisque $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ les champs \mathbf{B} et \mathbf{H} doivent finalement être nuls. Finalement, pour que l'équation 1.8 soit valide, c'est à dire qu'on ait une oscillation du *jellium*, il faut que \mathbf{E} soit longitudinal, c'est à dire $\nabla \wedge \mathbf{E} = 0$.

Ces différentes conclusions dessinent le portrait d'une onde longitudinale, sans champ magnétique, associée à une oscillation de densité de charge. Le plasmon, au sens strict, est le quantum d'excitation de cette onde. Pour être plus exact on parle de plasmon de volume (ou *bulk plasmon*), par opposition au plasmon de surface que l'on verra un peu plus loin. Enfin on peut noter que la condition $\mathbf{D} = 0$ implique $\epsilon_0 \mathbf{E} = -\mathbf{P}$. On peut donc voir le plasmon comme une onde de polarisation effective.

1.1.2 Onde de volume transverse

Le plasmon n'est pas, au contraire, la seule solution des équations de Maxwell dans le volume du métal considéré comme un diélectrique de permittivité ϵ - permittivité induite par la polarisabilité du milieu ambiant. Les détails de l'interaction lumière-matière sont contenus dans cette permittivité. Le modèle du plasma n'apparaîtra donc que lorsque l'on voudra préciser cette dernière. Pour l'instant nous considérerons cette permittivité comme une simple fonction de la fréquence ω , avec les précautions données au dessus concernant les équations en temporel.

En prenant le rotationnel de l'équation 1.9a et en utilisant l'équation 1.9b et les équations constitutives on obtient l'équation d'onde :

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{E} + \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (1.18)$$

avec c la célérité de la lumière. Le développement du double rotationnel conduit alors à

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} + \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (1.19)$$

où le terme $\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E})$ est un gradient d'une divergence, et le second $\nabla^2 \mathbf{E}$ un laplacien. En considérant des champs monochromatiques et harmoniques en temps de la forme $\mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ l'équation d'onde devient :

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon \mathbf{E} = 0, \quad (1.20)$$

où $k_0 = \frac{\omega}{c}$ est le nombre d'onde dans le vide. A partir d'ici, on peut envisager deux types de solutions. L'onde de volume que l'on cherche peut être transverse ou bien longitudinale. Mathématiquement cela revient à chercher une solution vérifiant $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ (solution transverse) ou bien $\nabla \wedge \mathbf{E} = 0$ (solution longitudinale). Si l'on envisage une onde longitudinale, le gradient de la divergence et la divergence du gradient s'annulent. L'équation d'onde conduit alors à une relation de dispersion particulière

$$\epsilon = 0. \quad (1.21)$$

La propagation d'une onde de volume longitudinale ne peut donc se faire que lorsque la fonction diélectrique du matériau s'annule. De plus, on peut noter que pour une telle onde $\nabla \cdot \mathbf{E} \neq 0$. Il existe donc dans le volume du métal une densité volumique de charge associée au champ longitudinal. L'équation 1.21 est la relation de dispersion d'une onde longitudinale associée à une oscillation de la densité volumique de charge. Il s'agit donc de la relation de dispersion du plasmon de volume discuté au paragraphe précédent.

Si l'on cherche maintenant une solution transverse, l'équation d'onde devient

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k_0^2 \epsilon \mathbf{E} = 0, \quad (1.22)$$

qui n'est rien d'autre que l'équation d'Helmoltz. En cherchant une solution de la forme $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, on voit apparaître dans cette équation la relation de dispersion de l'onde transverse

$$\mathbf{k}^2 = \epsilon k_0^2 = \epsilon \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (1.23)$$

qui lie le vecteur d'onde \mathbf{k} à la fréquence ω et à ϵ . Pour pouvoir discuter de la propagation de ces ondes, nous devons préciser l'expression de ϵ . On utilise ici le modèle de

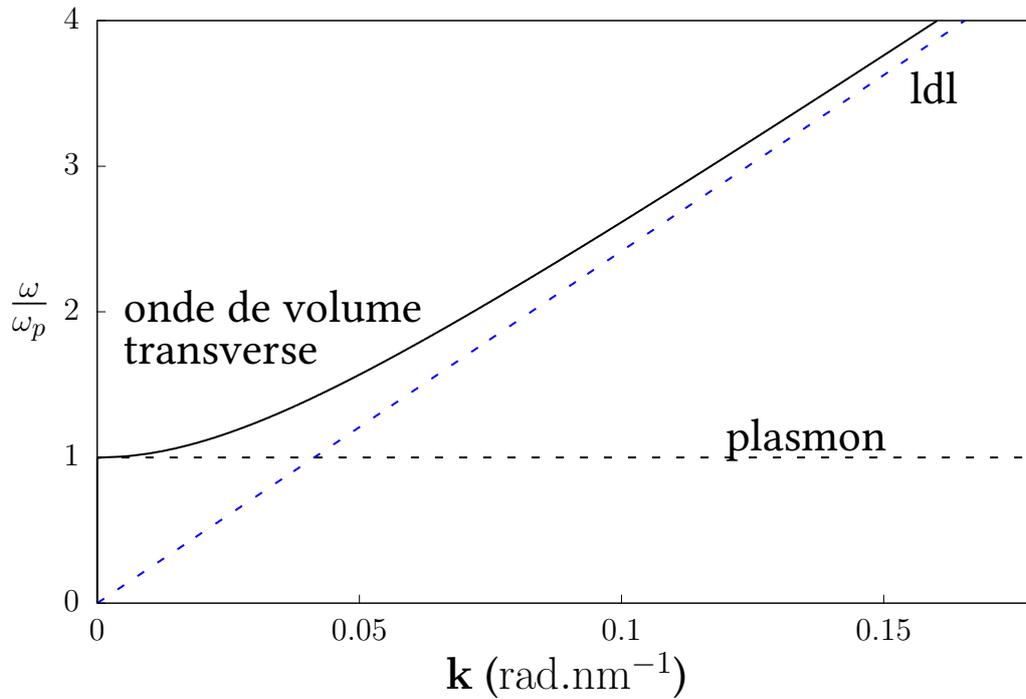


FIGURE 1.1 – Courbes de dispersion des ondes pouvant se propager dans le volume d’un métal tel que $\omega = f(\mathbf{k})$. En pointillés noirs, la courbe de dispersion du plasmon de volume (eq. (1.21)). En trait plein noir, la courbe de dispersion de l’onde de volume transverse (eq. (1.23)). En traits pointillés bleus, la ligne de lumière (ldl) qui est la courbe de dispersion d’une onde EM dans le vide.

Drude sans pertes qui sera détaillé dans la suite de ce chapitre. Ce modèle définit la permittivité métallique comme

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (1.24)$$

Cette relation, une fois injectée dans l’équation (1.23), permet de préciser l’équation de dispersion de l’onde transverse qui devient

$$\omega = \sqrt{\omega_p^2 + k^2 c^2}. \quad (1.25)$$

La figure 1.1 montre les courbes de dispersion pour les deux types d’onde dans le métal. De manière générale, une relation de dispersion lie la fréquence ω au vecteur d’onde \mathbf{k} , ou bien à une de ses projections sur le système d’axe que l’on considère. La figure 1.1 montre aussi la ligne de lumière, qui est la courbe de dispersion d’une onde EM dans le vide. Vue la forme de ϵ , la courbe de dispersion du plasmon (solution longitudinale) est une droite horizontale et située à $\omega = \omega_p$. Cette dispersion est typique d’un métal. Au dessus de cette pulsation la permittivité est positive et le métal se comporte donc comme un matériau diélectrique c’est à dire transparent pour la lumière. En dessous la permittivité est négative et le matériau devient réfléchissant, le comportement optique d’un métal standard. La courbe de dispersion de la solution transverse commence à la fréquence plasma puis tend vers la ligne de lumière pour les fréquences plus hautes.

En raison de cette particularité certain auteurs [16, 17, 18, 19] donnent à la solution transverse le nom de “bulk plasmon polariton”. L’idée derrière ce nom est que l’onde transverse n’est ni une simple onde électromagnétique, ni un plasmon, mais un hybride

entre les deux. La solution transverse résulterait de l'anti-croisement entre la dispersion du bulk plasmon et de la ligne de lumière. Cette onde serait le résultat d'un couplage entre une onde EM (transverse) et un bulk plasmon (longitudinal). Un couplage entre une quasi particule (ou excitation élémentaire) et un photon est appelé un polariton, d'où cette appellation. D'autres l'appellent le "transverse bulk plasmon" [20, 21] par analogie avec le bulk plasmon, parfois appelé "longitudinal bulk plasmon" en raison de sa nature.

Nous verrons un peu plus tard dans ce chapitre que ces appellations sont plutôt une source de confusion. Pour l'instant nous nous contenterons de relever que l'onde transverse satisfait $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ donc que \mathbf{E} n'est pas associé à une densité de charge. Il ne peut donc pas exister de variation de la densité de charge lors de la propagation. Donner à cette onde le nom de plasmon ne me paraît donc pas justifié.

Dans tout les cas, l'onde EM dans un volume de métal nous a permis d'illustrer les notions de plasmon et d'onde de volume (transverse ou longitudinale). De plus nous avons vu que la relation de dispersion d'une onde dépend essentiellement de la permittivité du matériau dans lequel elle se propage. Avant de discuter du plasmon de surface, nous allons donc décrire les différents modèles de matériaux que nous utiliserons.

1.2 Modèles de matériau

En cherchant un modèle de matériau, on veut préciser la forme de la permittivité qui lie les vecteurs \mathbf{E} et \mathbf{D} . En d'autres termes on cherche à caractériser la polarisation induite dans la matière par le passage d'une onde EM. De manière générale nous allons faire une distinction entre la réponse des électrons libres (dit de conduction) et liés (dit de valences). Nous écrirons les permittivités sous la forme très générale

$$\epsilon = 1 + \chi_f + \chi_b, \quad (1.26)$$

où χ_f et χ_b sont les susceptibilités des électrons libres, respectivement liés en régime harmonique. L'intérêt d'écrire la permittivité sous cette forme sera discuté au chapitre suivant.

1.2.1 Drude et Drude-Lorentz

A l'origine conçu par Drude [1] comme une application de la théorie cinétique des gaz pour expliquer la conductivité des métaux, ce modèle est le plus simple que l'on puisse trouver. Cependant, il est toujours très largement utilisé. D'abord à cause de sa simplicité, et ensuite puisqu'il peut être amélioré pour prendre en compte des phénomènes alors ignorés à l'époque. Ce modèle suppose qu'un métal est formé d'un gaz d'électrons libres dans une matrice d'ions fixes. En d'autre terme le métal peut être vu comme un plasma contenu dans une région bien déterminée de l'espace. Les électrons de masse m oscillent sous l'influence d'un champ exciteur \mathbf{E} et subissent des collisions à une fréquence $\gamma = \frac{1}{\tau}$, où τ est le temps de relaxation des électrons libres, typiquement de l'ordre de 10^{-14} s dans le visible [22]. De plus, on considère que les électrons n'interagissent pas entre eux, ou avec les ions.

Soit \mathbf{r} le vecteur position d'un électron supposé ponctuel. Le principe fondamental de la dynamique appliqué à cet électron donne

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + m\gamma \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = -e\mathbf{E}. \quad (1.27)$$

En considérant des champs harmonique en temps $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$, on s'attend à des solutions aussi harmoniques, c'est à dire $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 e^{-i\omega t}$ car les équations sont linéaires. On a donc

$$\mathbf{r} = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}. \quad (1.28)$$

Le déplacement de la densité électronique n par \mathbf{r} induit un vecteur de densité de polarisation

$$\mathbf{P} = -ner = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}. \quad (1.29)$$

De plus \mathbf{P} est lié à \mathbf{D} par la relation

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}, \quad (1.30)$$

c'est à dire pour la permittivité

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (1.31)$$

Dans ce modèle, on a complètement négligé la polarisabilité des électrons liés, c'est à dire $\epsilon = 1 + \chi_f$. On a aussi négligé les détails de la structure cristalline. Pour prendre en compte les effets de la structure cristalline périodique on peut remplacer la masse de l'électron m par sa masse effective m^* , une quantité qu'on peut estimer grâce à la théorie des bandes[23]. Pour modéliser les électrons liés on peut leur appliquer le modèle de Lorentz qui considère que le mouvement d'un électron est décrit par

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + m\gamma \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + m\omega_0^2 \mathbf{r} = -e\mathbf{E}, \quad (1.32)$$

où ω_0 est la fréquence de résonance de l'oscillateur constitué de l'électron lié à son noyau. Cette fréquence émerge d'une force de rappel exercée par le noyau sur l'électron et, d'un point de vue quantique, représente la fréquence d'une transition entre deux états énergétiques possibles pour l'électron. La transition entre ces deux états est un facteur d'absorption important pour les métaux dans le visible. On peut obtenir une équations similaire pour chaque transition possible. La sommes des contributions des électrons liés et libres suggère alors une permittivité de la forme

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} + \sum_j \frac{A_j}{\omega_{0,j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}, \quad (1.33)$$

où A_j représente la force de l'oscillateur j . Cette fois ci on a $\epsilon = 1 + \chi_f + \chi_b$ avec

$$\chi_f = -\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad (1.34)$$

$$\chi_b = \sum_j \frac{A_j}{\omega_{0,j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}. \quad (1.35)$$

Sous cette forme la permittivité est dites de Drude-Lorentz. Cette permittivité permet de modéliser des métaux comme des diélectriques. Cependant, si on l'utilise pour décrire un métal aux fréquences optiques ou proches infra-rouges, le modèle a tendance à prédire une absorption trop forte loin des transitions interbandes et a du mal à reproduire la forme exacte de la fonction diélectrique[24]. En conséquence, pour modéliser les métaux, nous utiliserons un modèle un peu plus récent, le modèle de Brendel et Bormann.

1.2.2 Brendel et Bormann

Le problème du modèle de Drude-Lorentz réside dans la contribution des électrons liés, χ_b . Pour mieux modéliser cette quantité, l'idée de Brendel et Bormann[25] est de remplacer chaque oscillateur de Lorentz par une somme infinie d'oscillateurs pour tenir compte d'un éventuel élargissement des raies par effet Doppler, par exemple. Le nombre d'oscillateurs par intervalle de fréquence est déterminé par une fonction Gaussienne. A la base, les auteurs ont créé ce modèle pour modéliser les solides amorphes dans l'infrarouge. Cependant Rakic et. al[24] ont montré qu'il était possible d'appliquer ce modèle pour la description des métaux dans le visible et l'infrarouge. En plus de donner une formule implémentable, Rakic et. al donnent également les valeurs des paramètres de modélisation qu'ils ont obtenus par ajustement à des données expérimentales. On ne donnera pas ici tout les détails mais juste ce qui est nécessaire pour une implémentation facile et rapide. Encore une fois la permittivité d'un métal est donné par $\epsilon = 1 + \chi_f + \chi_b$. Dans ce modèle, χ_f à la même forme que dans le modèle de Drude. Chaque oscillateur j est représenté par χ_j et la susceptibilité des électrons liés χ_b est donnée par leur somme. On a

$$\chi_j = \frac{i\sqrt{\pi}f_j\omega_p^2}{2\sqrt{2}\sigma_j} \left[w\left(\frac{a_j - \omega}{\sqrt{2}\sigma_j}\right) + w\left(\frac{a_j + \omega}{\sqrt{2}\sigma_j}\right) \right], \quad (1.36)$$

avec $a_j = \sqrt{\omega^2 + i\omega\gamma_j}$ tel que $\Im(a_j) > 0$, σ_j l'écart type de la fonction gaussienne qui est un paramètre à fitter expérimentalement. Enfin, pour un nombre complexe z on a

$$w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz), \quad (1.37)$$

où erfc est la fonction erreur complémentaire[26]. Pour calculer cette fonction, on utilise un code matlab fournit par Weideman dans son article sur le calcul de la fonction erreur complémentaire[27]. Dans la suite du manuscrit, sauf mention contraire, on utilise ce modèle pour la permittivité des métaux. Une exception notable sera l'utilisation d'un modèle de permittivité généralisé lors d'un travail en collaboration avec l'Institut National de Recherche en Informatique et Automatique (INRIA).

1.2.3 Le modèle de permittivité "généralisé"

Ce modèle a été mis au point par l'INRIA dans le cadre du développement du logiciel DIOGENeS qui permet des simulations électromagnétiques dans le domaine temporel. Sa construction peut être trouvée dans [28]. On ne donnera ici que l'adaptation que nous en avons faite pour pouvoir exprimer ϵ comme $1 + \chi_f + \chi_b$, que l'on veuille modéliser un métal ou bien un diélectrique. Le modèle de Brendel et Bormann n'est en effet pas utilisable facilement dans le cadre d'une simulation temporelle. L'expression de χ_f est identique aux deux cas précédents en revanche pour χ_b on a

$$\chi_b = C - \sum_l \frac{c_l - i\omega d_l}{\omega^2 - e_l + i\omega f_l}, \quad (1.38)$$

où C , c_l , d_l , e_l , f_l sont des constantes réelles. Via la recherche de ces coefficients, le modèle généralisé permet de reproduire la fonction diélectrique donnée par un modèle de Drude ou un modèle de Brendel-Bormann. Ce modèle permet également de fitter directement des données expérimentales. D'un point de vue pratique, c'est l'INRIA qui réalise les fits afin de nous fournir les constantes. Le modèle généralisé permet surtout de pouvoir comparer nos simulations avec celle de l'INRIA avec l'assurance de travailler avec les même fonctions diélectriques.

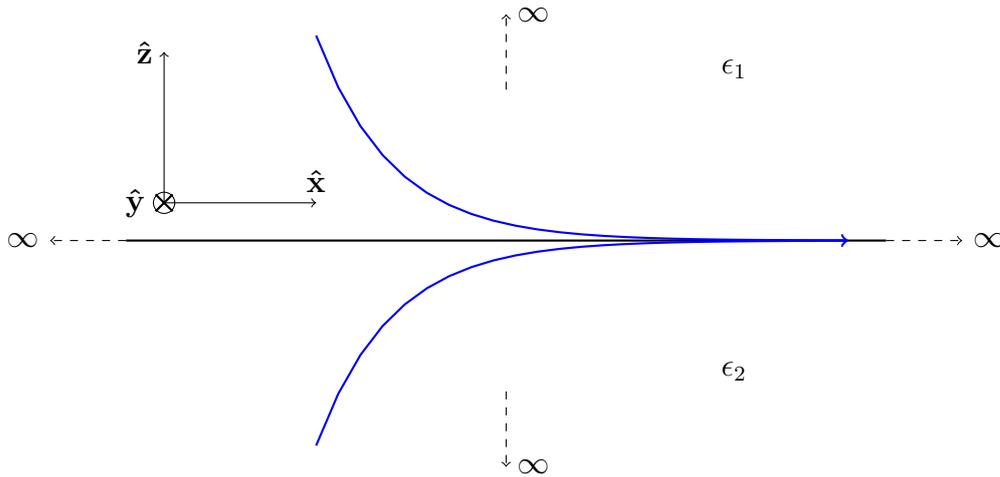


FIGURE 1.2 – Représentation schématique d’une interface supportant un plasmon de surface se propageant de gauche à droite. Les traits bleus schématisent le profil des champs correspondant à une onde de surface, évanescente dans la direction \hat{z} mais propagative dans la direction \hat{x} .

Maintenant que nous avons exposé les modèles de matériau, nous allons pouvoir les utiliser pour discuter du plasmon de surface.

1.3 Plasmon de surface

Tout comme le plasmon de volume, le plasmon de surface est une oscillation collective d’électrons dans un plasma. Cependant, les mouvements des électrons en question sont limités à la proximité immédiate de l’interface d’où le nom de plasmon de surface [29, 30]. Le plasmon de surface est aussi une des solutions des équations de Maxwell sans champ incident, c’est donc un mode guidé. Le plasmon de surface est en fait un mode guidé EM accompagné d’une oscillation de densité de charge. Certains auteurs [22, 31, 17] l’appellent donc le plasmon-polariton de surface. Nous nous contenterons de l’appellation plasmon de surface et reviendrons sur ce choix un peu plus tard. Comme précédemment nous allons chercher cette solution des équations de Maxwell afin d’obtenir une relation de dispersion. Cependant nous ne cherchons pas ici une solution correspondant à une onde se propageant dans un volume mais une onde se propageant le long d’une interface entre deux matériaux caractérisés par les permittivités ϵ_1 et ϵ_2 . En d’autres termes, nous allons imposer la propagation de l’onde le long de cette interface et dans le même temps imposer une solution correspondant à des champs non propagatifs dans le volume des matériaux. Un mode guidé possédant de telles caractéristiques est généralement appelé onde de surface.

La structure et le système d’axes que l’on considère sont montrés sur la figure 1.2. Cette figure schématise également les profils de champs correspondant à une onde de surface, c’est à dire des champs évanescents dans la direction normale à l’interface [32, 33].

1.3.1 Forme générale des champs et relation de dispersion

En reprenant les équations de Maxwell (1.9a, 1.9b, 1.9c, 1.9d) et constitutives (1.17, 1.4) et en considérant la symétrie du problème ($\partial_y = 0$) on obtient deux sous-systèmes

d'équations. Le premier correspond à la polarisation transverse électrique (TE)

$$-\partial_z E_y = i\omega\mu_0 H_x, \quad (1.39a)$$

$$\partial_x E_y = i\omega\mu_0 H_z, \quad (1.39b)$$

$$\partial_z H_x - \partial_x H_z = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_y, \quad (1.39c)$$

et le second correspond à la polarisation transverse magnétique (TM)

$$\partial_z H_y = i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x, \quad (1.40a)$$

$$\partial_x H_y = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_z, \quad (1.40b)$$

$$\partial_z E_x - \partial_x E_z = i\omega\mu_0 H_y. \quad (1.40c)$$

Ces équations permettent d'obtenir une équation d'onde pour chaque polarisation. Encore une fois on considère des champs harmoniques en temps. Pour le cas TE on a

$$(\partial_x^2 + \partial_z^2 + k_0^2 \epsilon) E_y = 0, \quad (1.41)$$

et pour le cas TM on a

$$(\partial_x^2 + \partial_z^2 + k_0^2 \epsilon) H_y = 0. \quad (1.42)$$

Supposons que la solution soit une onde plane se propageant dans la direction \mathbf{r} . Les champs E_y ou H_y se propageant dans un milieu i peuvent s'écrire sous la forme $A_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$, avec A_i une amplitude et \mathbf{k}_i le vecteur d'onde de l'onde tel que $\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} = k_{i,x}x + k_{i,y}y + k_{i,z}z$. Les deux équations précédentes permettent d'obtenir un lien entre les projections du vecteur d'onde sur les directions $\hat{\mathbf{x}}$ et $\hat{\mathbf{z}}$. On a

$$k_{i,z} = \sqrt{k_0^2 \epsilon_i - k_x^2}, \quad (1.43)$$

où l'on n'a pas laissé l'indice i sur k_x car ce dernier est le même quel que soit la couche de matériau considérée.

Ici, nous pouvons expliciter la notion de confinement le long de l'interface. Nous cherchons une onde liée à l'interface, c'est à dire dont les champs sont évanescents dans la direction perpendiculaire à cette dernière. Cette condition d'évanescence se traduit par le fait que $k_{i,z}$ doit être un nombre essentiellement imaginaire positif. Nous voulons de plus que cette onde soit propagative dans la direction de l'interface.

Nous voulons donc que k_x soit une quantité réelle positive. Pour expliciter ces conditions nous réécrivons les champs sous la forme générale

$$A_i e^{ik_x x + ik_{i,z} z} = A_i e^{ik_x x - \kappa_{i,z} z}, \quad (1.44)$$

avec $\kappa_{i,z} = -ik_{i,z} = \sqrt{k_x^2 - \epsilon_i k_0^2}$. La condition d'évanescence devient alors $\Re(\kappa_{i,z} > 0)$. Nous pouvons désormais appliquer les conditions aux limites afin de dégager la relation de dispersion du plasmon de surface. Pour ce faire, nous posons l'origine de nos axes le long de l'interface et considérons dans un premier temps le cas TE. Le champ E_y est donc décrit par l'équation 1.44. La continuité des composantes tangentielles de \mathbf{E} et \mathbf{H} impose

$$A_1 = A_2, \quad (1.45)$$

$$-\kappa_{1,z} A_1 = \kappa_{2,z} A_2, \quad (1.46)$$

ce qui mène à

$$A_1 (\kappa_{1,z} + \kappa_{2,z}) = 0. \quad (1.47)$$

Comme nous désirons $\Re(\kappa_{i,z}) > 0$, la seule solution est d'avoir $A_1 = A_2 = 0$. En conséquence, il est impossible d'obtenir une onde liée à une interface en considérant une polarisation TE. Nous pouvons cependant nuancer en remarquant qu'une telle solution pourrait exister à condition de considérer des milieux magnétiques de perméabilité μ_i opposées. En polarisation TM l'équation 1.44 décrit H_y et la continuité donne

$$A_1 = A_2, \quad (1.48)$$

$$\frac{-\kappa_{1,z}}{\epsilon_1} A_1 = \frac{\kappa_{2,z}}{\epsilon_2} A_2, \quad (1.49)$$

qui mène à

$$\frac{\kappa_{1,z}}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_{2,z}}{\epsilon_2} = 0. \quad (1.50)$$

Cette fois-ci, une onde confinée le long de l'interface existe si $\Re(\epsilon_1)$ et $\Re(\epsilon_2)$ sont de signe opposés. En d'autres termes, une onde de surface ne peut exister qu'à l'interface entre un milieu diélectrique et un milieu métallique. À partir d'ici, on peut donc remplacer ϵ_1 par un ϵ_d et ϵ_2 par un ϵ_m . On peut développer l'équation 1.50 pour obtenir une relation de dispersion analytique

$$k_x = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}}. \quad (1.51)$$

Sous cette forme, la relation de dispersion laisse apparaître une seconde condition d'existence pour le plasmon de surface, en tout cas si l'on considère des permittivités réelles, c'est à dire des matériaux sans pertes. Pour être considérée comme propagative, l'onde doit avoir un vecteur d'onde k_x réel et positif. Cette condition est satisfaite si la quantité $\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}$ sous la racine est positive. Comme le produit $\epsilon_d \epsilon_m$ est négatif, le dénominateur $\epsilon_d + \epsilon_m$ doit l'être également. Pour qu'un plasmon de surface puisse exister il faut donc que $|\epsilon_d| < |\epsilon_m|$. Pour discuter de la relation de dispersion plus en détails, il nous faut maintenant choisir un modèle de matériau. Considérons une interface entre de l'air et de l'argent pour la suite.

1.3.2 Relation de dispersion sans pertes

Nous allons commencer par discuter du plasmon de surface dans le cas le plus simple, sans pertes, ni prise en compte de l'influence des électrons liés responsables eux aussi d'une bonne partie des pertes. Nous représenterons le métal par une permittivité ϵ_m dite de Drude sans pertes, et le diélectrique par une simple constante ϵ_d . En prenant ϵ_m défini par l'équation 1.31 avec $\gamma = 0$ la relation de dispersion devient

$$k_x = n_d k_0 \sqrt{\frac{\omega^2 - \omega_p^2}{(1 + \epsilon_d)\omega^2 - \omega_p^2}} \quad (1.52)$$

où $n_d = \sqrt{\epsilon_d}$ est l'indice optique du diélectrique. La courbe de dispersion correspondante est tracée sur la figure 1.3. Premièrement, cette courbe présente 2 branches qui se distinguent par leur position par rapport à ω_p . Au dessus de la fréquence plasma,

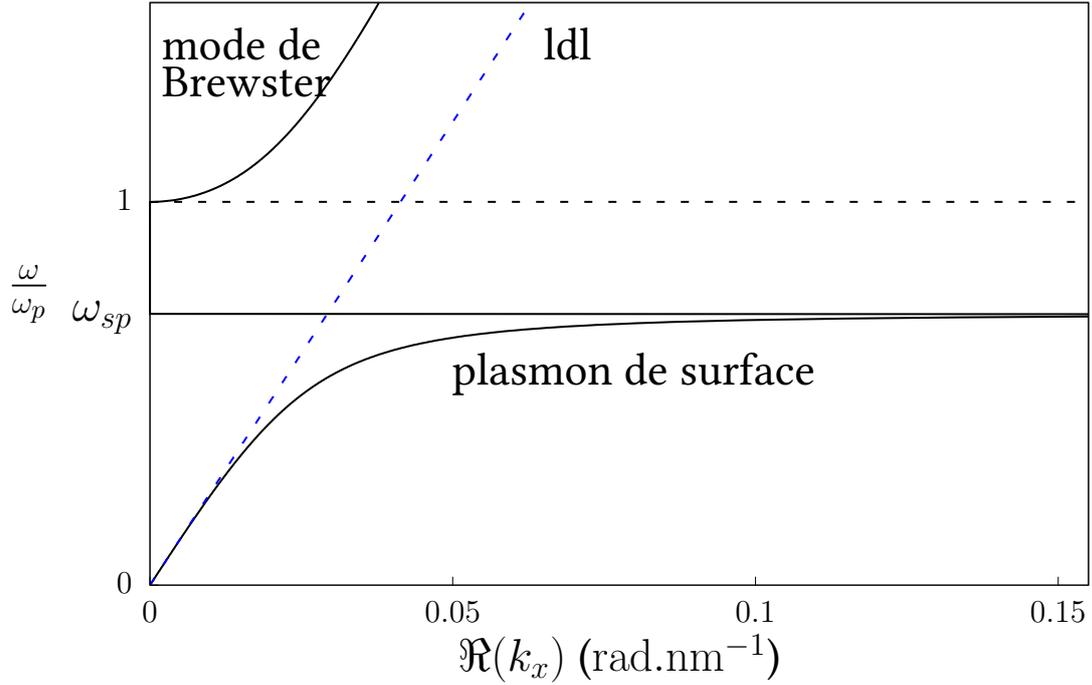


FIGURE 1.3 – Courbe de dispersion du plasmon de surface (voir eq. (1.52)) donnant le lien entre ω et k_x . La réponse du métal est modélisée par un modèle de Drude sans pertes. Les pointillés noirs indiquent la fréquence plasma ω_p . La fréquence du plasmon de surface est $\omega_{sp} = 0.707\omega_p$. Les pointillés bleus correspondent à ce qu'on appelle la ligne de lumière. Dans le cas présent, cette ligne représenterait une onde qui se propage dans le diélectrique parallèlement à l'interface.

ϵ_m est positif, le métal peut être considéré comme un simple diélectrique. Dans ce cas là, l'onde est propagative dans les deux milieux. En conséquence, la branche haute de la dispersion ne correspond pas à une onde de surface au sens propre. Il s'agit en fait de ce que l'on appelle le mode de Brewster [22, 17, 33], qui correspond à un zéro du coefficient de réflexion de l'interface. Cette branche haute caractériserait une onde incidente TM entièrement transmise à travers l'interface, d'où son nom. La branche basse, elle, se situe en dessous de la fréquence plasma. On la trouve, de plus, en dessous du cône de lumière. Cette branche caractérise une onde liée à l'interface, évanescente dans la direction \hat{z} . La branche basse est donc la courbe de dispersion correcte du plasmon de surface. Dans le cas sans pertes cette dispersion possède deux asymptotes caractéristiques. Aux basses fréquences, l'équation 1.52 devient

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} k_x = n_d k_0. \quad (1.53)$$

Plus on se rapproche des basses fréquences et plus la dispersion se rapproche de la ligne de lumière $k_x = k_0$. Dans ce cas l'onde est toujours liée à l'interface mais se rapproche de plus en plus d'une onde qui se propagerait dans le diélectrique parallèlement à l'interface, elle est alors très peu confinée. La seconde asymptote définit une fréquence particulière appelée fréquence du plasmon de surface ω_{sp} [22]. Dans le cadre du modèle de Drude sans pertes sa définition est donnée par

$$\lim_{k_x \rightarrow \infty} \omega = \omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \epsilon_d}}. \quad (1.54)$$

Cette fréquence particulière correspond à la fréquence où permittivité métallique et diélectrique ont la même valeur absolue. Un vecteur d'onde infini signifierait au

contraire une vitesse de groupe nulle et un confinement maximal. L'abaissement de la vitesse de groupe, connue sous le nom de ralentissement plasmonique et la capacité à confiner spatialement la lumière sont les deux caractéristiques qui font l'attrait du plasmon de surface. A l'inverse des basses fréquences, les champs EM sont très concentrés le long de l'interface.

On peut quantifier cette concentration en définissant des distances caractéristiques de pénétration dans les matériaux. Pour ce faire on passe par le vecteur de Poynting \mathbf{S} et plus précisément par sa moyenne temporelle définie en notation complexe par

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} \Re (\mathbf{E} \wedge \mathbf{H}^*). \quad (1.55)$$

Comme les champs ne sont propagatifs que dans la direction de l'interface, le transport de l'énergie EM se fait également dans cette direction et on ne s'intéresse qu'à la composante de $\langle \mathbf{S} \rangle$ dans la direction $\hat{\mathbf{x}}$, qui s'écrit

$$\langle S \rangle_x = \frac{1}{2} \Re (-E_z H_y^*). \quad (1.56)$$

En utilisant l'équation (1.40b) on a dans un milieu $j = m, d$

$$\langle S \rangle_x = \frac{1}{2} \Re \left(\frac{k_x}{\omega \epsilon_j} |H_y|^2 \right). \quad (1.57)$$

On peut alors définir δ_j , la distance de pénétration dans le milieu j comme la distance à partir de laquelle $\langle S(z = \delta_j) \rangle_x = \frac{\langle S(z=0) \rangle_x}{e}$. Avec H_y donné par l'équation (1.44) cela nous laisse comme condition

$$e^{-2\Re(\kappa_{j,z})\delta_j} = \frac{1}{e}, \quad (1.58)$$

pour finalement arriver à

$$\delta_j = \frac{1}{2\Re(\kappa_{j,z})}. \quad (1.59)$$

Il est possible de donner une définition alternative [17] qui considère non pas l'énergie transportée mais simplement l'amplitude du champ. Cela a pour conséquence de faire disparaître le facteur 2 dans l'équation 1.59 mais ne change pas fondamentalement la définition de ces distances. La figure 1.4 montre le profil de H_y et de $\langle S \rangle_x$ en fonction de l'éloignement de l'interface pour une fréquence basse et une fréquence proche de ω_{sp} . Ces profils permettent d'illustrer les distances de pénétration du champ dans le diélectrique δ_d et dans le métal δ_m .

En plus de ces distances de pénétration verticales, un plasmon de surface présente une périodicité horizontale puisque tous les champs s'écrivent avec un facteur $e^{ik_x x}$. La période des champs, donnée par $\frac{2\pi}{k_x}$, est appelée longueur d'onde effective et est notée λ_{eff} . On définit alors l'indice effectif du plasmon de surface par la relation

$$n_{eff} = \frac{k_x}{k_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda_{eff}}. \quad (1.60)$$

Plus cet indice est grand par rapport à celui du diélectrique, plus les champs sont confinés le long de l'interface, parce que plus k_x est grand.

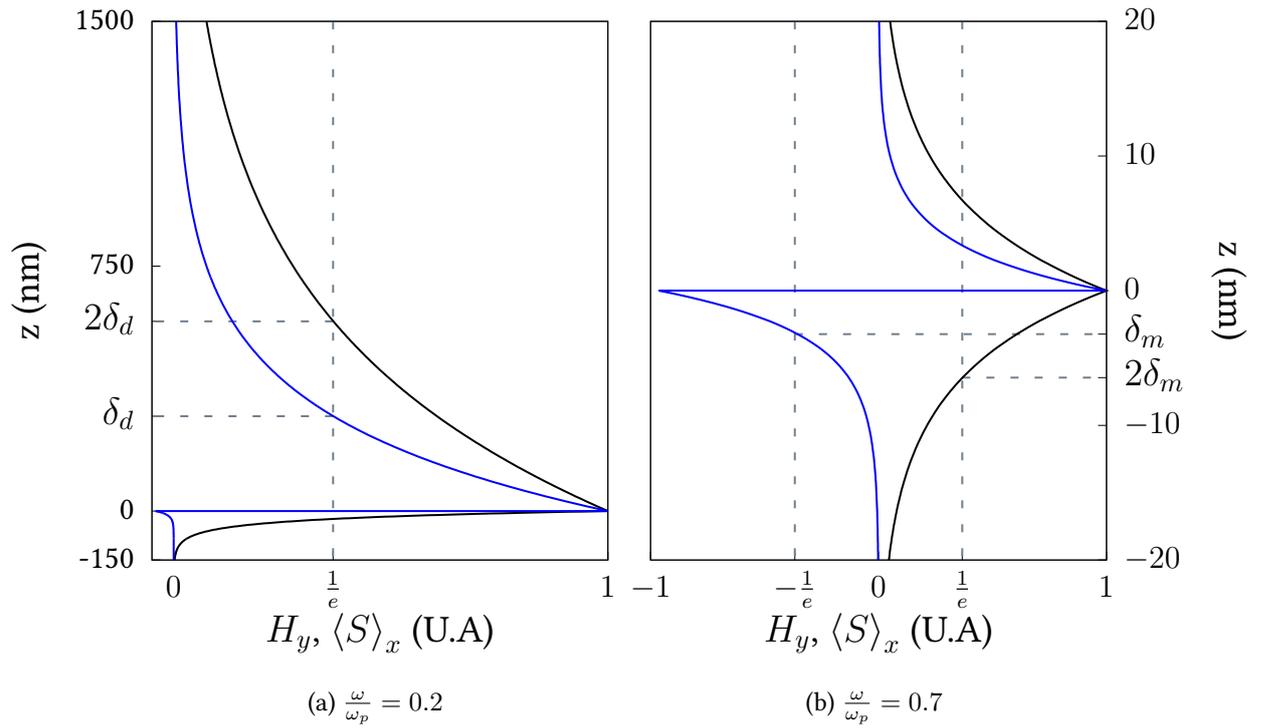


FIGURE 1.4 – Profils de H_y et $\langle S \rangle_x$ en fonction de la distance à l’interface située en $z = 0$. On a pris $x = 0$. La courbe noire correspond à l’amplitude normalisée de H_y (eq.(1.44)). La courbe bleue correspond à l’amplitude normalisée de $\langle S \rangle_x$ (eq.(1.57)). Les traits pointillés permettent de visualiser δ_m et δ_d . Pour la fréquence la plus haute (b), $|\langle S \rangle_x|$ est presque aussi important dans le métal que dans le diélectrique. Dans ce cas, on a une vitesse de groupe très faible liée à ce flux totale faible de vecteur de Poynting. C’est un exemple de “ralentissement plasmonique”.

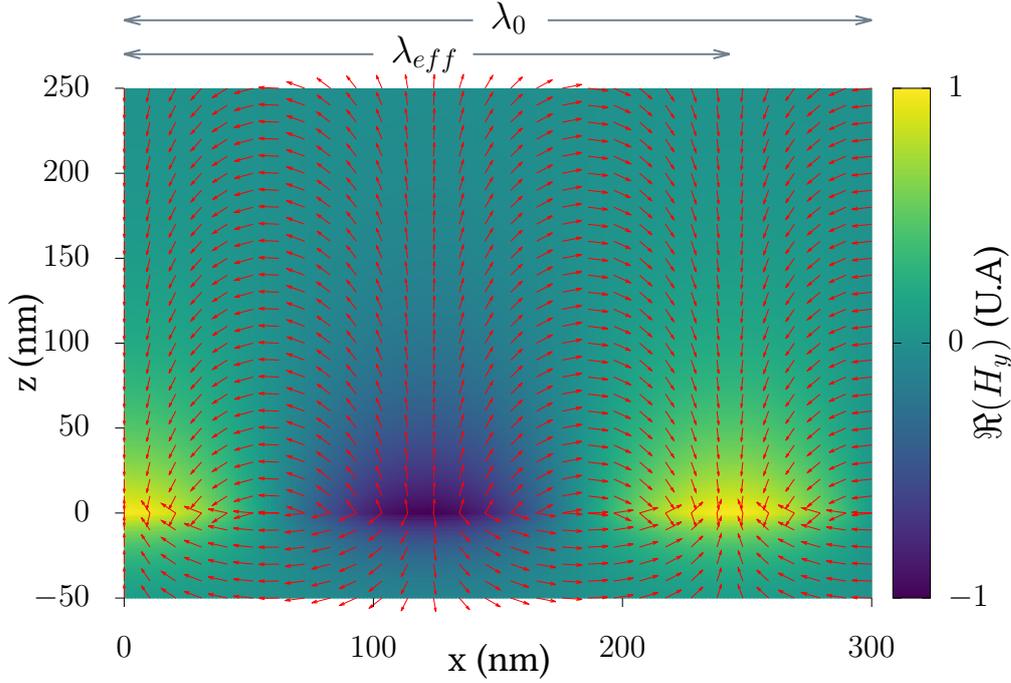


FIGURE 1.5 – Direction du champ $\Re(\mathbf{E})$ et intensité de $\Re(\mathbf{H}_y)$ dans un plan (x, z) pour $\frac{\omega}{\omega_p} = 0.5$. L'interface entre le diélectrique et le métal est fixé à $z = 0$. Les flèches rouges sont des vecteurs unitaires représentant la direction de \mathbf{E} . Ce dernier est calculé en utilisant les équations 1.40a, 1.40b et en prenant H_y défini par 1.44.

La longueur d'onde effective correspond à la distance nécessaire pour que le champ \mathbf{E} ait effectué une révolution complète dans un plan perpendiculaire à l'interface. La figure 1.5 illustre cette notion de longueur d'onde effective du point de vue des champs. Cette longueur d'onde correspond aussi à la distance horizontale entre deux maxima ou deux minima de la densité de charge. Bien que le plasmon de surface obéisse à $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, il est tout de même associé à une certaine densité de charge surfacique σ donnée par

$$\sigma = \mathbf{P}_m \cdot \hat{\mathbf{z}}. \quad (1.61)$$

La figure 1.6 montre la densité de charge surfacique associée à la propagation du plasmon de surface pour deux fréquences normalisées différentes, c'est à dire pour deux indices effectifs différents. De manière générale, plus l'indice effectif est grand, plus le maximum de densité de charge $|\sigma|$ est grand. Cette fois, on peut dire que plus n_{eff} est grand, c'est à dire plus λ_{eff} est faible, plus les charges se retrouvent comprimées lors de la propagation du plasmon de surface, le long de l'interface. Dans le chapitre suivant, ces fluctuations de densité s'étendront en volume également, mais ce n'est pas permis dans le cadre d'un modèle local.

Enfin, pour terminer avec la relation de dispersion (figure 1.3) sans pertes, on peut voir qu'entre ω_{sp} et ω_p se trouve une bande fréquentielle dans laquelle aucun mode n'existe. Dans cette bande de fréquence la permittivité du métal est toujours négative mais la condition $|\epsilon_d| < |\epsilon_m|$ n'est pas remplie et le plasmon de surface ne peut donc en théorie plus exister. Cependant, nous allons voir que la prise en compte des pertes change les choses.

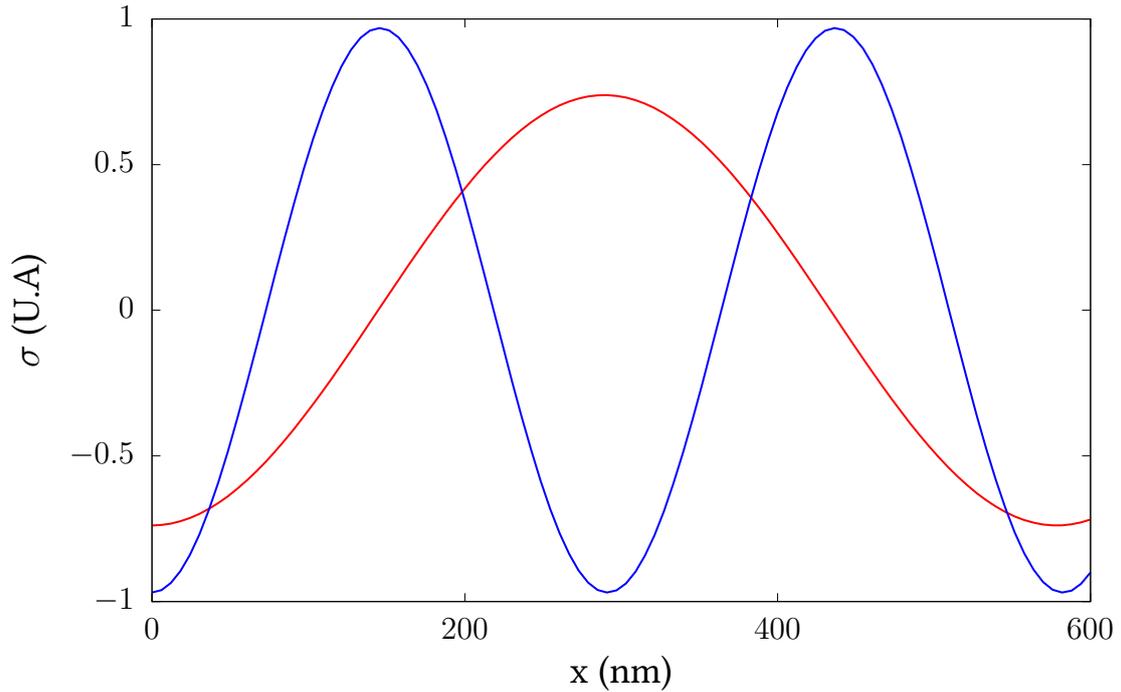


FIGURE 1.6 – Densité de charge surfacique σ en fonction de x . La courbe rouge correspond à $\frac{\omega}{\omega_p} = 0.25$ c'est à dire $\lambda_0 = 600$ nm, $\lambda_{eff} = 578$ nm et $n_{eff} = 1.04$. La courbe bleu correspond à $\frac{\omega}{\omega_p} = 0.45$ c'est à dire $\lambda_0 = 337$ nm, $\lambda_{eff} = 291$ nm et $n_{eff} = 1.16$

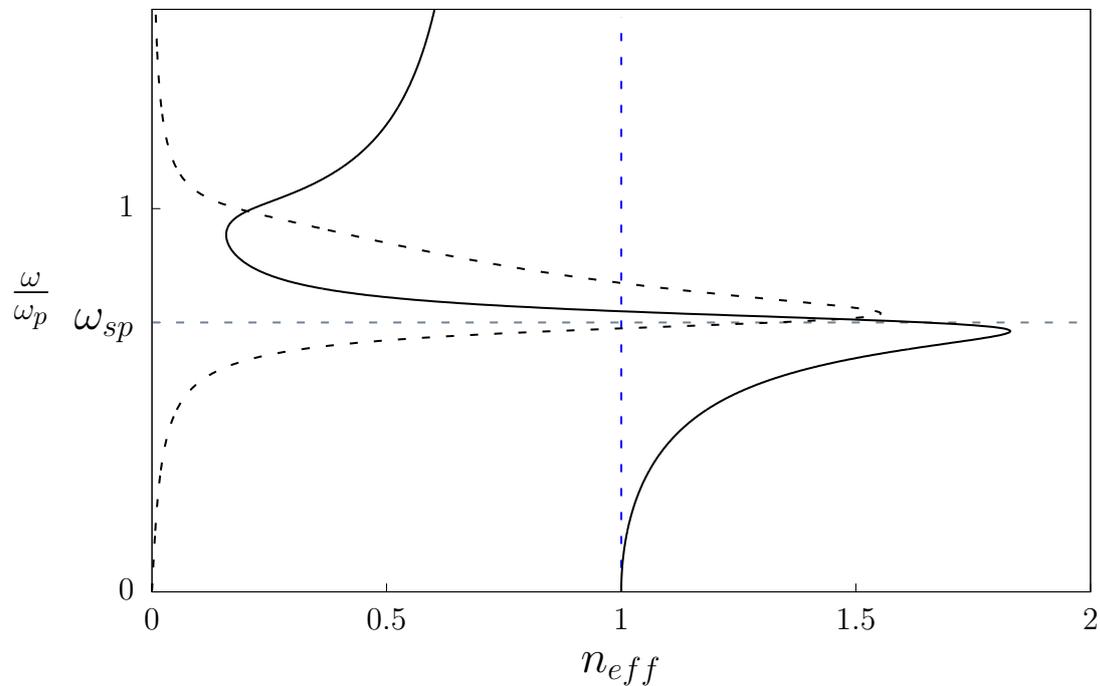


FIGURE 1.7 – Courbe de dispersion du plasmon de surface (eq.1.51) mise sous la forme $\omega = f(n_{eff})$. Le métal est modélisé par un modèle de Drude avec $\gamma = 10^{14} s^{-1}$. Le trait noir plein correspond à $\Re(n_{eff})$ et le trait noir pointillé à $\Im(n_{eff})$. Le trait horizontal en gris pointillé indique $\omega_{sp} = 0.703\omega_p$. Le trait pointillé bleu est la ligne de lumière. Comme on considère des indices effectifs cette dernière est verticale.

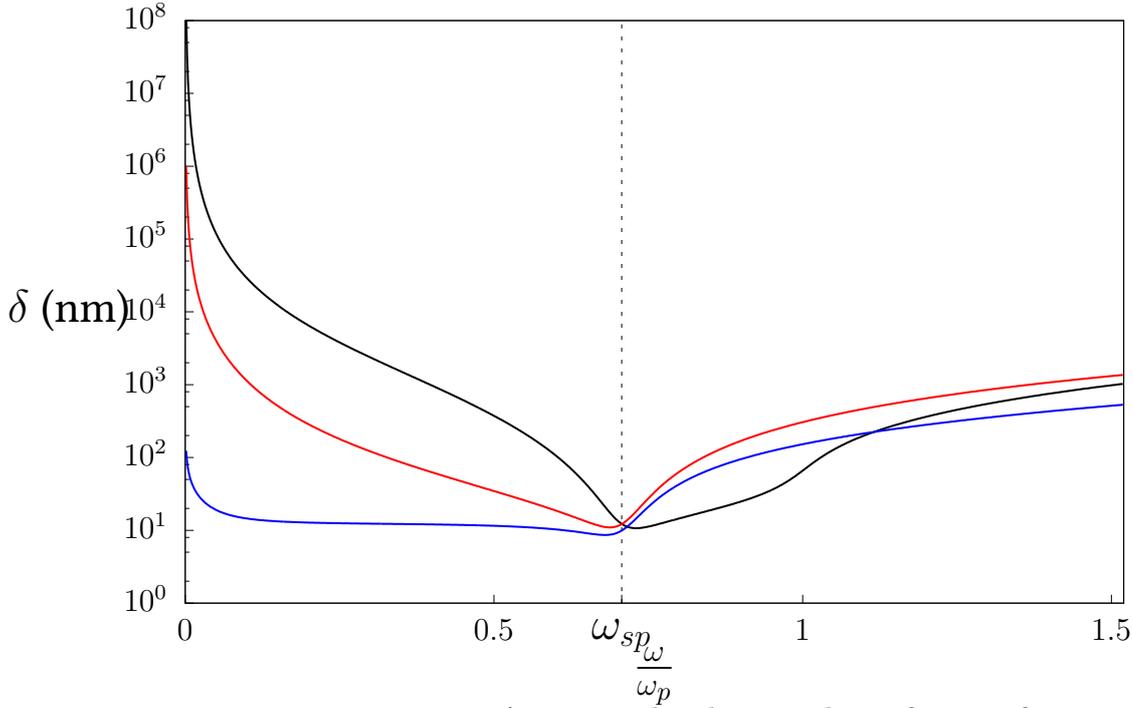


FIGURE 1.8 – Distances caractéristiques du plasmon de surface en fonction de la fréquence normalisée. La courbe rouge est δ_d , la bleu δ_m et la noire δ_x . Les pointillés verticaux indiquent ω_{sp} .

1.3.3 Relation de dispersion avec pertes

Pour prendre en compte les pertes nous allons réutiliser le modèle de Drude mais avec $\gamma \neq 0$. La courbe de dispersion est tracée sur la figure 1.7. Cette fois ci, les quantités impliquées dans la dispersion ne sont plus des nombres purement réels. Le vecteur d'onde k_x du plasmon de surface est alors un aussi nombre complexe, tout comme l'indice effectif n_{eff} . La partie imaginaire de ces deux quantités traduit l'absorption du plasmon de surface lors de sa propagation. La conséquence majeure sur la courbe de dispersion de la prise en compte des pertes est la disparition de l'asymptote normalement présente à ω_{sp} . La partie réelle du k_x subit ce que l'on appelle un *bend-back*, c'est à dire un retour en arrière. Plus haut en fréquence, la dispersion du plasmon de surface se retrouve alors connectée à celle du mode de Brewster. L'existence de ce *bend back* est un gros problème en plasmonique pour deux raisons. Premièrement, le plasmon de surface ne peut plus atteindre des k_x aussi grands que l'on souhaite. En conséquence, le confinement des champs le long de l'interface se trouve limité. De plus, contrairement au cas sans pertes, λ_{eff} possède une valeur minimum. La compression électronique est donc aussi limitée ainsi que la miniaturisation des dispositifs que l'on peut attendre - puisqu'ils ont nécessairement pour taille caractéristique λ_{eff} . Deuxièmement, l'existence d'une partie imaginaire de k_x limite la distance de propagation du plasmon de surface le long de l'interface. Tout comme on a défini des distances de pénétration dans les matériaux, on peut définir une distance de propagation le long de l'interface. Cette distance s'exprime comme

$$\delta_x = \frac{1}{2\Im(k_x)}. \quad (1.62)$$

La figure 1.8 montre les distances caractéristiques correspondant à la dispersion tracée sur la figure 1.7. On peut considérer qu'en approchant de ω_{sp} le plasmon de surface ne se propage plus à cause des pertes. De plus, même si les distances caractéristiques augmentent au dessus de ω_{sp} , la dispersion du plasmon de surface passe

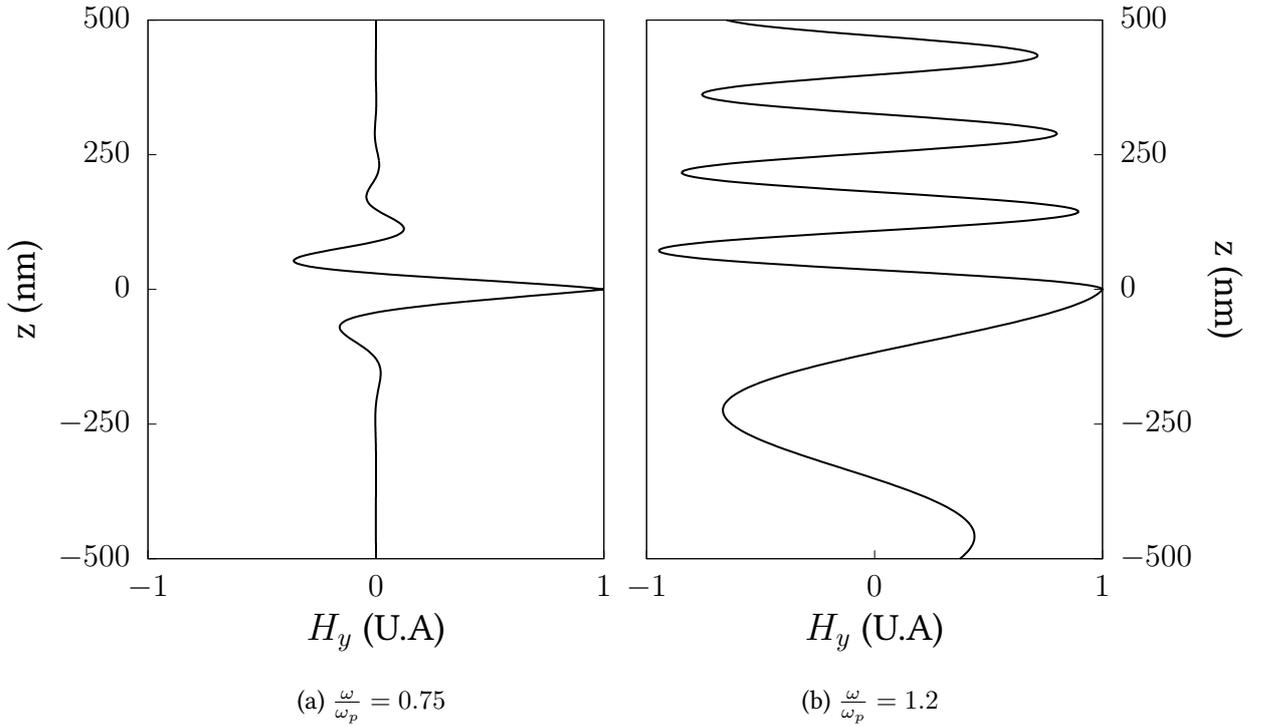


FIGURE 1.9 – (a) : Profil de $\Re(H_y)$ dans la bande fréquentielle entre le plasmon de surface et le mode de Brewster. L’onde est très atténuée à cause des pertes mais n’est pas complètement évanescente. (b) : Profil de $\Re(H_y)$ du mode Brewster. Dans les deux cas, les champs sont propagatifs à la fois dans le diélectrique et dans le métal.

au dessus de la ligne de lumière. Au dessus de ce point de croisement entre dispersion et ligne de lumière, il n’est plus possible de parler d’onde de surface. La figure 1.9 montre le profil de H_y au dessus de ce point critique. Les champs ne sont alors clairement plus évanescents. Enfin, avec la prise en compte des pertes se pose aussi la question de la nature du plasmon de surface aux basses fréquences. Il est possible de trouver dans la littérature plusieurs auteurs[22, 17] qui donnent à la limite aux basses fréquence le nom de mode de Sommerfeld, mode de Zenneck, ou encore mode de Sommerfeld-Zenneck. Selon Sernelius[33] le mode de Zenneck doit avoir une vitesse de phase plus grande ou égale à c , ce qui impliquerait qu’un tel mode réside au dessus de la ligne de lumière - ce qui n’est pas le cas du plasmon de surface aux basses fréquences, même en prenant en compte les pertes. De plus, Sarkar et al[34] clament que ces modes de Sommerfeld ou de Zenneck ne sont pas la limite du plasmon de surface, mais des modes complètement différents. Nous ne prendrons pas part au débat, mais considérerons que la seule onde de surface qui puisse exister à l’interface d’un métal et d’un diélectrique est le plasmon de surface, quel que soit la bande fréquentielle tant que cette dernière est en dessous de ω_{sp} .

Maintenant que nous avons vu l’effet des pertes sur la dispersion, nous allons brièvement discuter de la prise en compte des électrons liés.

1.3.4 Prise en compte des électrons liés

Pour prendre en compte la réponse des électrons liés, nous allons remplacer le modèle de Drude par un modèle de Brendel et Bormann. La permittivité liée aux électrons libres χ_f est inchangée mais cette fois ci $\chi_b \neq 0$, et est décrit par la relation 1.36. La figure 1.10 montre ϵ_m pour ces 2 modèles ainsi que les différentes contributions

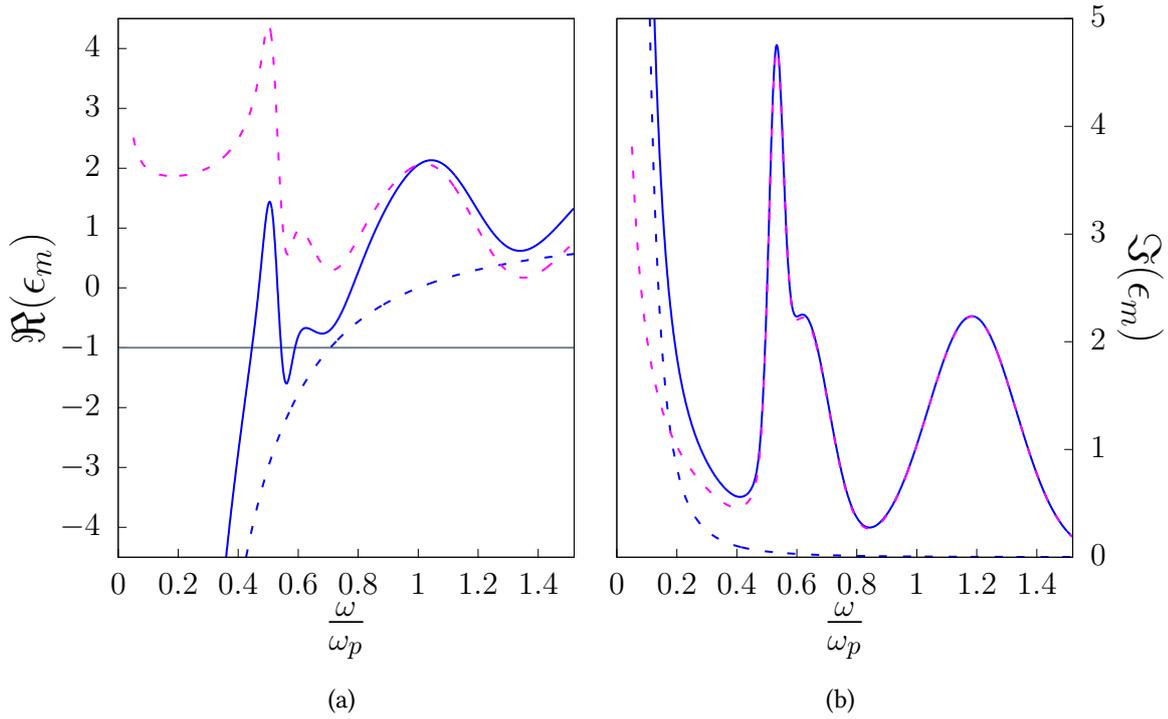


FIGURE 1.10 – Parties réelle (a) et imaginaire (b) de $\epsilon_m = 1 + \chi_f + \chi_b$ en fonction de $\frac{\omega}{\omega_p}$. Les courbes bleues pleines représentent la permittivité métallique tel que $\epsilon_m = 1 + \chi_f + \chi_b$. Les courbes en pointillés bleus représentent $1 + \chi_f$ et les pointillés violets χ_b . Sur (a) le trait gris horizontal représente $-\epsilon_d$.

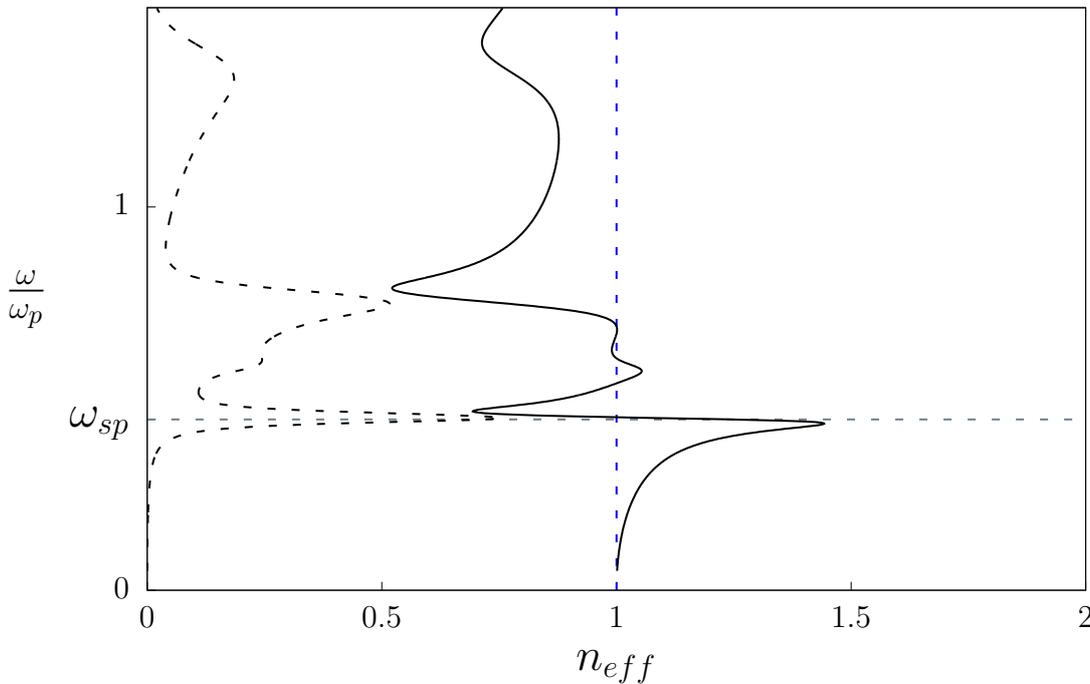


FIGURE 1.11 – Courbe de dispersion du plasmon de surface obtenue en utilisant le modèle de Brendel et Bormann (1.36). Le trait noir plein correspond à $\Re(n_{eff})$ et le trait noir pointillé à $\Im(n_{eff})$. Le trait horizontal en gris pointillé indique $\omega_{sp} = 0.446\omega_p$. Le trait pointillé bleu est la ligne de lumière

des électrons liés ou libres. Le modèle de Brendel-Bormann fait apparaître des pics dans $\Im(\epsilon_m)$ qui correspondent aux transitions interbandes. Ceci est entièrement dû à la prise en compte de la réponse des électrons liés. En plus de cela $\Re(\epsilon_m)$ possède trois zéros, tous situés en dessous de la fréquence plasma. De plus ω_p ne correspond plus à un zéro de $\Re(\epsilon_m)$. Il faut alors nuancer la définition d'un métal du point de vue électromagnétique. Cette fois-ci on ne peut plus dire que le matériau est métallique en dessous de ω_p à cause des bandes fréquentielles dans lesquelles $\Re(\epsilon_m) > 0$. Tout se passe comme si il existait une fréquence plasma effective située vers des fréquences normalisées de 0.8 - quand la permittivité totale devient négative. De plus, il existe désormais plusieurs points de croisement, définis par $|\Re(\epsilon_m)| = \Re(\epsilon_d)$. Cela induit l'existence de plusieurs ω_{sp} . A partir de maintenant on prendra ω_{sp} comme la première fréquence tel que $|\Re(\epsilon_m)| = \Re(\epsilon_d)$. En dessous de cette fréquence $\Re(\epsilon_m)$ est systématiquement négatif et inférieur à $-\epsilon_d$ permettant au plasmon de surface d'être bien défini dans toute cette bande fréquentielle. Avant même de voir la courbe de dispersion, on peut déjà comprendre la conséquence principale de la prise en compte des électrons liés : la fréquence du bend-back ω_{sp} est réduite. C'est ce que l'on peut remarquer sur la figure 1.11 qui montre la courbe de dispersion du plasmon de surface en utilisant le modèle de Brendel et Bormann. On peut aussi voir qu'en plus du plasmon de surface en dessous de ω_{sp} il existe aussi un plasmon de surface au dessus. On pourrait aussi se dire qu'il s'agit en fait du même plasmon de surface, qui est simplement très fortement perturbé par les transitions interbandes. Le fait que la dispersion repasse en dessous de la ligne de lumière pour les fréquences normalisées comprises entre 0.55 et 0.6 est en partie une conséquence de l'existence de la seconde et troisième "fréquence du plasmon de surface" discutées précédemment (ω tel que $|\Re(\epsilon_m)| = \epsilon_d$). En partie seulement puisque les pertes liées aux transitions interbandes compliquent l'interprétation. Par exemple si l'on utilise un diélectrique de permittivité juste suffisamment élevée pour qu'il n'existe plus qu'une seule fréquence du plasmon de surface, il est tout à fait possible que la dispersion repasse en dessous de la ligne de lumière malgré une partie réelle de ϵ_m supérieure à ϵ_d en valeur absolue. Cependant, si l'on augmente encore ϵ_d ce comportement disparaît. Enfin plus haut en fréquence, le mode de Brewster est lui aussi grandement affecté. Finalement, que l'on considère ou non la réponse des électrons liés, la partie imaginaire de k_x et donc les pertes dans le métal sont telles que l'on ne peut pas vraiment parler de propagation au dessus de ω_{sp} . Dans toute la suite du manuscrit, on s'intéressera donc aux fréquences en dessous de ω_{sp} .

Dans la majorité des cas, les dispersions seront données en fréquences normalisées par la fréquence plasma du métal que l'on considère, en général de l'or ou de l'argent. Pour ces deux métaux la fréquence plasma est dans l'ultra-violet avec une longueur d'onde plasma correspondante de l'ordre de 150 nm. Nous allons essentiellement nous intéresser aux longueurs d'ondes visibles approximativement comprises entre les fréquences normalisées 0.19 et 0.38.

Avant d'aller plus loin dans ce domaine, j'aimerais discuter des polaritons, et de leur rapport avec les plasmons et plasmons de surface. Le mot polariton est très souvent associé aux plasmons de surface dans la littérature, ce qui fournit matière à discussion.

1.3.5 Sur l'appellation Plasmon, Polariton et Plasmon-Polaritons

On a vu dans la partie 1.3 que le plasmon de surface est parfois appelé le plasmon-polariton de surface. Ceci est compréhensible dans la mesure où le plasmon de surface est un champ EM transverse lié à une interface et associé à une oscillation de charges qui induit une oscillation dans la densité surfacique de charge. Cependant, le

mot polariton pose selon moi certains problèmes dans le sens où il n'est pas forcément nécessaire et peut conduire à des abus de langage un peu trop importants.

Le mot polariton à été utilisé pour la première fois en 1958 par Hopfield[35]. Dans le cadre de l'électrodynamique quantique, Hopfield cherche à décrire un diélectrique en interaction avec un champ EM. Il part d'une densité de lagrangien pour obtenir un Hamiltonien quantique décrivant le couplage entre une densité de polarisation induite par un champs EM et ce champ EM. Après quantification, ce Hamiltonien s'écrit sous la forme

$$H = H_{EM} + H_P + H_i, \quad (1.63)$$

où H_{EM} est le Hamiltonien représentant des photons dans le vide, H_P celui représentant ce qu'il appelle alors des polaritons et H_i le Hamiltonien d'interaction entre les deux derniers. Ce qu'il appelle alors polariton est la quasiparticule associée au champ de polarisation qui n'interagit pas avec le champ EM. H_P et H_{EM} représentent chacun un système d'oscillateurs harmoniques séparés et H_I représente le couplage entre ces deux systèmes d'oscillateurs. Par une procédure de diagonalisation, et en définissant de nouveau opérateurs de création et annihilation (pour une nouvelle quasiparticule) il arrive à mettre H sous la forme d'une somme de nouveaux oscillateurs harmoniques, sans terme de couplage explicite cette fois ci. Les états propres de H définissent alors les modes normaux du système diélectrique+champ EM. Ces modes normaux sont une combinaison linéaire des modes des deux systèmes découplés. Selon Runyantsev[36], ce sont ces modes normaux que l'on appelle aujourd'hui les polaritons.

Bien qu'il soit le premier à employer le terme, l'idée d'un couplage entre un champ EM et une excitation élémentaire (ou quasi-particule) avait déjà été discuté presque dix ans avant par Huang[37] et Tolpygo[38]. Huang s'intéresse au couplage entre les phonons (des modes de vibration atomique) et les photons alors que Tolpygo décrit le couplage entre des excitons (paires électron-trou en interaction[23]) et des photons mais aucuns des deux ne parlent de polariton. De plus le traitement qu'ils font n'est pas quantique. Quelques années après son article de 1958, Hopfield redonne une définition du polariton comme[39] "a mixed polarization and electromagnetic waves" où "polarization wave" signifie "normal mode of the crystal". On retrouve bien la définition que l'on a donnée au dessus. Entre temps, on peut trouver des définitions plus au moins précise du polariton, et on constate surtout que ce concept n'est plus réservé à la physique quantique.

Loudon définira les polaritons comme[40] des "coupled modes of the electromagnetic field and a crystal excitation". Gottam et Albuquerque comme[19] "a mixed excitation (or wave) made up from dipole-active elementary excitation coupled to photon". Puis vient Mills[41] qui publie en 1974 "Polaritons : the electromagnetic modes of a media". Il précise dans son introduction qu'usuellement on parle de polariton pour désigner une onde seulement lorsque la fréquence de cette dernière est proche d'une résonance dans la permittivité d'un matériau. Dans cette situation, l'onde peut être vue comme résultant du couplage entre un champ EM et les modes normaux du matériau. Mills se permet ensuite d'étendre la définition à toute onde EM qui transporte de l'énergie à la fois sous forme radiative (champ EM propagatif) et sous forme mécanique (excitation élémentaire) quel que soit l'éloignement de la fréquence de l'onde par rapport à la fréquence de résonance du matériau. La justification de cette façon de faire vient du fait qu'une onde EM se propageant dans un milieu est en fait un champ EM accompagné d'un champ de polarisation dû au passage du champ EM. L'énergie transportée par cette onde est alors répartie entre le champ EM lui même et les différents degrés de liberté du matériau excités par le passage du champ. L'excitation de ces degrés de liberté est ce qui cause la polarisation induite dans le milieu. Lorsque la per-

mittivité d'un matériau diffère grandement de 1, une grande part de l'énergie transportée par l'onde est alors contenue dans la polarisation induite dans le matériau et non plus uniquement dans le champ EM lui-même.

Cette définition résume en fait l'idée de Huang[37] qui montre très clairement que les modes de vibrations "purement optiques" et "purement mécaniques" ne peuvent pas être considérés comme indépendants les uns des autres lorsque l'on considère le couplage entre un champ EM et un matériau. Finalement pour Mills le polariton "is a coupled mode of the EM field, and those normal modes of the material which may couple in a linear manner to the EM field by virtue of their electrical or magnetic character". La notion de polariton est donc plutôt large et on pourrait résumer en disant que d'un point de vue classique, on peut appeler polariton toute onde EM qui se propage dans un matériau accompagnée d'un champ de polarisation dû à une excitation élémentaire du matériau.

Dans la pratique, lorsque l'on cherche les modes guidés dans le bulk d'un matériau capable de supporter une excitation élémentaire induisant une polarisation, les solutions que l'on trouvera pourront être appelées des polaritons. Il faudrait cependant nuancer sur le cas des ondes purement longitudinales puisque ces dernières ne transportent pas d'énergie sous forme radiative, mais plutôt sous une forme de potentiel électrostatique[37]. Ces solutions la différencient des modes purement "mécaniques". Ainsi dans le bulk d'un matériau on trouvera des excitations élémentaires accompagnées du terme polariton comme le phonon polariton ou l'exciton polariton. Par analogie avec ces deux excitations qui sont à l'origine de la notion de polariton on trouvera pour les métaux un plasmon-polariton. Mais ce dernier polariton me dérange un peu lorsque l'on parle des plasmons, et par extension des plasmons de surface.

En effet pour que l'on puisse parler de plasmon polariton, il faudrait que l'on ait un couplage entre un champ EM transverse et l'oscillation de la densité de charge. Or un plasmon est longitudinal et ne peut donc pas se coupler avec une onde EM transverse propagative. C'est ce que l'on a vu dans la partie 1.1.2 avec le "bulk plasmon polariton". En fait la définition même du plasmon de volume comme onde longitudinale interdit de parler de plasmon-polariton. Si vraiment on souhaite parler de polariton, il faudrait parler de "bulk polariton"[33] mais surtout pas de plasmon-polariton. Parler de "transverse plasmon" est également un problème puisque par définition un plasmon est longitudinal. On pourrait cependant utiliser le terme d'oscillation de plasma transverse. De plus si ce "bulk polariton" doit être un polariton, il doit être issu du couplage entre les photons (l'onde EM) et une excitation du matériau. Or dans le plasma que l'on a considéré jusque ici, il n'existe pas de modes normaux correspondant à une oscillation collective transverse des électrons[15]. Par analogie avec les phonons[37], si de telles oscillations devaient exister, elle devraient se faire à fréquence nulle. Il n'existe pas d'excitation élémentaire à associer aux photons. L'onde de volume ne peut donc selon moi pas être qualifiée de polariton au sens d'un couplage entre quasiparticule et photon. Cependant, bien que cette onde ne soit pas associée à une excitation élémentaire comme le plasmon, on peut remarquer que cette onde induit tout de même une certaine densité de polarisation. Cette densité de polarisation est associée à un mouvement des électrons. Puisque qu'ils sont en mouvement, ces électrons transportent de l'énergie. L'onde résultante est donc un mélange entre une onde EM propagative et une oscillation électronique, mais pas une oscillation de densité de charge. Cette onde transporte donc de l'énergie à la fois sous forme radiative et sous forme mécanique. Dans ce sens par contre cette onde est un polariton. C'est pour cela que je considère que l'appellation polariton apporte plus de confusion que de précision sur la nature des phénomènes que l'on étudie.

En ce qui concerne le plasmon de surface, le “problème” du polariton est surtout une affaire de sémantique, et il est admis qu’il n’existe pas de terme unifié[42]. On peut trouver des plasmons de surface, des plasmons-polaritons de surface, ou bien des polaritons de surface pour désigner le même phénomène. Certains réservent le terme plasmon de surface à la limite électrostatique de ce dernier et appellent polariton de surface la limite aux basses fréquences. Dans tous les cas, le plasmon de surface est un polariton légèrement différent du polariton de volume puisque c’est l’interface qui permet le “couplage” entre les photons et le plasmon. Dans le cadre des modèles que nous avons vus, on peut remarquer que pour qu’il existe une densité de charge à l’interface, il faut forcément un champ transverse. Sans densité de charge surfacique, il ne peut pas non plus exister de champ lié à l’interface. Dans ce sens là, n’importe quelle onde de surface (entre un métal et un diélectrique) implique forcément une densité de charge et donc une onde de surface ne peut pas exister sans l’oscillation de densité surfacique. En fait, puisque le plasmon de surface est une onde de surface, c’est intrinsèquement un polariton, à savoir un champ EM accompagné d’une excitation élémentaire, cette dernière étant l’oscillation de la densité de charge.

D’un point de vue expérimental, l’excitation d’un plasmon polariton de surface est appelée “surface plasmon resonance”. Si le plasmon de surface est excité à la surface d’une nanoparticule on parle de “localized surface plasmon resonance”. Toujours d’un point de vue historique, le plasmon, et le plasmon de surface ont d’abord été étudiés par la communauté de la physique des surfaces[29, 30]. Ces derniers tendent à utiliser le terme de plasmon de surface et non pas de plasmon-polariton de surface. De plus, la notion de polariton est une notion quantique. On parle de polaritons pour parler d’excitations élémentaires et de photons. Ces deux dernières notions ne sont bien définies que dans le cadre de la physique quantique. Dans le cadre de la description électromagnétique, on n’utilise pas cette quantification de l’énergie des ondes que l’on étudie comme ce serait le cas en optique quantique. Il n’est donc peut-être pas très judicieux d’utiliser ce vocabulaire dans ce cadre. Dans un cadre classique toujours, le plasmon lui même devrait plutôt être appelé onde de plasma, mais l’appellation plasmon est tellement répandue qu’il est difficile de s’en passer. Finalement, un plasmon polariton de surface pouvant laisser penser qu’il existe un plasmon polariton de volume, j’ai choisi d’utiliser l’appellation plasmon de surface que je trouve suffisante et surtout moins confuse. Il faudra cependant garder en tête que tous les modes guidés “plasmoniques” (dans le sens où ils s’apparentent au plasmon de surface) pourraient être appelés des polaritons si on suit la logique ayant guidé à l’appellation de plasmon-polariton.

1.4 Localité et non-localité

Maintenant que l’on a défini le plasmon de surface, sa nature, ses spécificités et distances caractéristiques, nous allons nous intéresser aux limites des modèles que l’on a présentés jusqu’ici. Nous sommes partis du modèle de Drude pour arriver au modèle de Brendel et Bormann. Nous avons progressivement pris en compte l’effet des pertes puis celui des électrons de valence du réseau métallique. Or nous avons systématiquement supposé dans toute cette première partie que la réponse optique d’un métal est locale. Nous avons systématiquement considéré que la densité de polarisation d’un matériau \mathbf{P} en un point \mathbf{r} pouvait être obtenue à partir du champ \mathbf{E} en ce même point \mathbf{r} . Ainsi, $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ ne dépend absolument pas du champ au voisinage du point \mathbf{r} . Faire une telle hypothèse, c’est considérer un matériau *local*. En ce qui concerne les métaux dans le visible, elle est en générale satisfaisante, ce qui explique

la popularité de modèles aussi simples que celui de Drude et ses améliorations successives, dans la communauté de la plasmonique[43, 44]. On pourrait cependant penser qu’il n’y a pas de raison pour que la densité de courant en un point dépende uniquement du champ en ce même point. En effet, cette densité de courant devrait aussi être influencée par les variations de champ au voisinage du point que l’on considère - si on prend en compte juste la répulsion entre électrons. Cependant, dans les modèles de type Drude locaux, on considère qu’après une collision (instantanée) un électron “perd la mémoire” de son trajet avant la collision. Après une collision, un électron possède une vitesse dépendant de la température et non pas du champ avant la collision. Ensuite l’électron est de nouveau entraîné par le champ et sa vitesse ne dépend alors plus que du champ. Si la distance entre deux collisions est petite devant la variation du champ électrique, alors on peut considérer le champ électrique comme constant entre les deux. La vitesse d’un électron est ainsi entièrement déterminée par la valeur du champ électrique en un point. Ainsi, dans le cas où la longueur d’onde de l’onde est grande devant le libre parcours moyen électronique, on peut considérer que la densité de polarisation et donc le courant engendrés en un point ne dépendent que du champ en ce point. Dans le cas contraire, un électron aura le temps de “sentir” une variation du champ électrique entre 2 collisions. A ce moment là, la vitesse d’un électron en un point est alors influencée à la fois par le champ que l’électron a pu ressentir avant d’arriver en r et par le champ en ce point. Les densités de polarisation et de courant en un point se mettent alors à dépendre du champ en ce point et de la variation du champ autour de ce point. Un matériau imposant une telle description est dit non local.

Dans les métaux, le libre parcours moyen électronique est au maximum de quelque dizaines de nanomètres[45] ce qui explique l’étonnant succès de l’hypothèse de localité, y compris quand on considère de très petites nanoparticules, et donc des modèles de type Drude. Jusqu’ici nous avons vu qu’un plasmon de surface est capable de se propager avec une longueur d’onde effective plus petite que la longueur d’onde dans le vide à la fréquence considérée. Si l’on imagine des longueurs d’onde λ_0 dans la gamme du visible, mais des longueurs d’onde du plasmon de surface λ_{eff} plusieurs fois inférieures à λ_0 alors nous nous trouverions dans une situation où la non-localité des métaux doit commencer à se faire sentir sur la propagation du plasmon de surface.

Nous allons voir dans le chapitre suivant que le plasmon de surface peut en effet être sensible à la réponse non locale des métaux. Ce phénomène pose alors une première limite aux modèles locaux.

1.5 Conclusion

Jusqu’ici nous avons utilisé les équations de Maxwell pour introduire le plasmon, les ondes dans les métaux de façon générale, puis le plasmon de surface. Nous avons discuté des différents modèles de matériau que nous utiliserons par la suite pour décrire la réponse optique des métaux. Nous avons utilisé ces modèles pour décrire le plasmon de surface via sa relation de dispersion. Cette dernière nous a ensuite servi à introduire les différentes quantités que l’on peut associer au plasmon de surface (profils de champs, longueur d’onde effective, et autres distances caractéristiques). Ce faisant nous avons vu quel est l’effet des pertes optiques et de la prise en compte de la réponse des électrons liées sur le plasmon de surface. Nous avons replacé ce dernier dans le contexte plus générale des polaritons et avons pointé la confusion que cette appellation peut engendrer dans un cadre non quantique. Finalement, nous avons pointé la limite de nos modèle, à savoir leur caractère local. Ceci nous a permis d’introduire le concept de non-localité. Nous allons voir dans le chapitre suivant comment prendre en

compte la nature non locale des métaux. Nous verrons aussi que d'autres modes guidés plasmoniques peuvent s'avérer encore plus sensibles à la non-localité que le plasmon de surface.

Chapitre 2

Non-localité et modes guidés plasmoniques

Dans ce chapitre, nous allons voir comment décrire la réponse intrinsèquement non-locale des métaux, une propriété souvent appelée dispersion spatiale. Nous commencerons par introduire le modèle hydrodynamique linéarisé, qui fait explicitement apparaître la répulsion entre électrons, ingrédient manquant du modèle de Drude, et nous en servirons pour quantifier l'effet de la non-localité sur le plasmon de surface. Nous verrons que la non-localité peut en fait être ignorée dans la plupart des cas pour ce mode guidé particulier. Cependant, nous montrerons que l'utilisation d'un diélectrique de permittivité élevée permet d'augmenter son influence pour que cette dernière devienne finalement observable. Nous étudierons ensuite des modes guidés pouvant présenter un confinement des champs encore plus intense que le plasmon de surface comme le Gap-Plasmon, ou bien les modes de slab fin. Ces modes sont ceux capables de se propager dans des structures comportant deux interfaces, et des épaisseurs de métal ou de diélectrique de taille nanométrique. Nous allons voir que l'influence de la non-localité sur ces derniers peut être considérablement plus forte que sur le plasmon de surface. Nous donnerons ensuite une méthode pour généraliser l'étude de la non-localité aux modes guidés d'un multi-couche pouvant comporter un nombre arbitraire d'interfaces. Enfin nous terminerons par simplifier ce formalisme, ce qui permet d'étudier la non-localité dans ces structures facilement tant que les épaisseurs de métal considérées ne sont pas plus grandes que quelques nanomètres. Ces études nous serviront de base pour aborder le chapitre suivant dans lequel nous proposerons des expériences capables de mettre en lumière et de mesurer quantitativement l'effet de la non-localité.

2.1 Modèle hydrodynamique

Le modèle de Drude[1] est d'une efficacité redoutable pour ce qui est de reproduire la réponse des métaux à une onde EM incidente. Il est un peu frustrant dans la mesure où il est presque simpliste. Sa force réside dans le fait qu'il capture si bien la physique du problème qu'il apparaît comme l'ordre 0 de n'importe quel modèle de la réponse du métal - aussi compliqué soit-il. Les premières tentatives pour décrire plus précisément le comportement des électrons datent des débuts de la théorie des bandes et remontent à Felix Bloch et aux années 30[46]. A partir des années 60, on s'intéresse à la façon dont on peut appliquer le modèle hydrodynamique à la description des plasmons de surface[47, 48]. Le modèle est encore imparfait, il sera étudié, développé en s'appuyant sur des modèles quantiques de plus en plus avancés. Dans les années 80, deux livres

sont publiés qui résument quelques dizaines d'années de recherche sur le sujet[43, 44]. Cependant, la conclusion de ces travaux est essentiellement que l'impact de la non-localité sur les propriétés optiques est négligeable - c'est donc surtout dans l'étude des surfaces métalliques, notamment grâce aux techniques de Electron Loss Spectroscopy (EELS) que ces problèmes sont abordés[4, 49, 50]. Dans le domaine de l'optique et de la plasmonique, ce sujet tombe plutôt en désuétude, même si quelques études théoriques sont publiées de temps en temps[51]. En 2012, une expérience menée à l'Université de Duke avec des nanoparticules sphériques couplées à un plan métallique montre que le modèle de Drude n'est clairement pas suffisant pour expliquer la position de la résonance du système[9]. Pour une très faible distance entre les deux interfaces métalliques le modèle hydrodynamique semble par contre être suffisamment précis - à condition d'ajuster le paramètre β qui caractérise la non-localité et dont il faut rappeler qu'il n'existe pas d'expression théorique unique[52].

2.1.1 Polarisation non locale des électrons libres et équation d'Euler linéarisée

Dans le chapitre précédent nous avons vu que la densité de polarisation \mathbf{P} en un point pouvait ne pas dépendre uniquement des champs en ce point. Nous avons aussi vu que dans un métal on faisait la distinction entre la polarisabilité due aux électrons de coeurs et celle, effective, dûe aux électrons libres :

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_f + \mathbf{P}_b, \quad (2.1)$$

où \mathbf{P}_f respectivement \mathbf{P}_b sont les densités de polarisation associées aux électrons libres respectivement liés. La nature non locale des métaux est principalement due à la réponse des électrons libres, la mobilité des électrons expliquant que cette dispersion spatiale se fasse à plus grande échelle, et nous considérerons que la réponse des électrons liés est, au contraire, toujours locale. On pourra donc toujours exprimer \mathbf{P}_b comme

$$\mathbf{P}_b = \epsilon_0 \chi_b \mathbf{E}. \quad (2.2)$$

Trouver une expression de \mathbf{P}_f est cependant un peu plus technique. Pour l'obtenir, nous prenons la divergence de l'équation (1.14) ce qui nous donne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} + \nabla \cdot \mathbf{P}_f + \nabla \cdot \mathbf{P}_b = 0. \quad (2.3)$$

En injectant (2.2) dans cette equation nous obtenons une expression pour la divergence de \mathbf{P}_f

$$\nabla \cdot \mathbf{P}_f = -\epsilon_0 (1 + \chi_b) \nabla \cdot \mathbf{E}. \quad (2.4)$$

Afin d'obtenir une expression pour \mathbf{P}_f il nous faut maintenant faire appel à l'équation centrale du modèle hydrodynamique. Cette dernière est obtenue en considérant l'équation d'Euler pour le fluide que constitue le gaz d'électrons, ainsi que la conservation de la charge. En négligeant les termes non linéaires on peut obtenir une équation qui lie la densité de polarisation des électrons libres aux champs EM[53, 54]. On a

$$-\beta^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{P}_f) + \frac{\partial^2 \mathbf{P}_f}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \mathbf{P}_f}{\partial t} = \epsilon_0 \omega_p^2 \mathbf{E}. \quad (2.5)$$

Ici le paramètre β est une constante réelle, liée à la vitesse de Fermi, et elle est cruciale dans le modèle puisqu'elle est en facteur du seul terme qui sépare le modèle hydrodynamique du modèle de Drude. Suivant la théorie considérée, il existe plusieurs valeurs théoriques dans la littérature pour cette constante[52]. En ajustant les valeurs expérimentales[9, 10], on peut obtenir une estimation de β et on trouve de cette façon une valeur intermédiaire entre les deux valeurs théoriques - et donc tout à fait du même ordre de grandeur. Par la suite, pour estimer l'influence de la non-localité on prendra la valeur de $\beta = 1.35 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$ [10].

En considérant des champs monochromatiques nous arrivons cette fois ci à une expression qui lie directement la densité de polarisation aux champs

$$\mathbf{P}_f = -\epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \left(\mathbf{E} - (1 + \chi_b) \frac{\beta^2}{\omega_p^2} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) \right), \quad (2.6)$$

que l'on peut réécrire en identifiant le préfacteur comme la susceptibilité des électrons libres d'un modèle de Drude local

$$\mathbf{P}_f = \epsilon_0 \chi_f \left(\mathbf{E} - (1 + \chi_b) \frac{\beta^2}{\omega_p^2} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) \right). \quad (2.7)$$

Nous avons ainsi l'expression d'une densité de polarisation non-locale. Sous cette forme, cette expression présente l'avantage de faire apparaître les différentes composantes d'une permittivité locale. Nous pourrions donc directement réutiliser les modèles de permittivité locale de la partie 1.2. A partir d'ici, nous allons reprendre les équations de Maxwell et de nouveau chercher à obtenir une équation d'onde.

2.1.2 Equations d'onde non locales et conditions aux limites

La nouvelle expression de \mathbf{P}_f ne modifie qu'une partie des équations de Maxwell dans les métaux. En utilisant (2.7) nous avons pour le rotationnel du champ \mathbf{H}

$$\nabla \wedge \mathbf{H} = -i\omega \mathbf{D}, \quad (2.8)$$

$$= -i\omega \epsilon_0 [(1 + \chi_b) \mathbf{E} + \mathbf{P}_f], \quad (2.9)$$

$$= -i\omega \epsilon_0 \epsilon [\mathbf{E} - \alpha \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E})], \quad (2.10)$$

avec

$$\alpha = \frac{\chi_f (1 + \chi_b) \beta^2}{\epsilon \omega_p^2}, \quad (2.11)$$

un nouveau paramètre non local dépendant directement de β . Sous cette forme, les équations de Maxwell possèdent alors deux solutions[55]. La première est un champ EM transverse, qui satisfait $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ et qui, parce que les équations de Maxwell redeviennent les équations usuelles dans ce cas, est associée à une équation d'onde de type équation d'Helmoltz pour le champ magnétique

$$\nabla^2 \mathbf{H} + \epsilon k_0 \mathbf{H} = 0. \quad (2.12)$$

Si l'on considère un volume de métal infini, homogène et isotrope, cette solution correspond à l'onde de volume transverse discutée dans la partie 1.1.2. Puisque la divergence du champ électrique est nulle, la non-localité n'a aucune influence sur cette solution. En revanche la seconde solution est affectée par la non-localité. Il s'agit d'un champ \mathbf{E} satisfaisant $\nabla \wedge \mathbf{E} = 0$, donc sans champ magnétique associé. Il s'agit d'une onde

longitudinale, à laquelle on peut associer une densité de charge tel que $\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$. En utilisant le fait que le champ magnétique associé est nul et l'équation (2.10), on arrive à l'équation d'onde suivante :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{\alpha} \mathbf{E} = 0. \quad (2.13)$$

Cette équation, et la relation de dispersion correspondante $\mathbf{k}^2 = -\frac{1}{\alpha}$, correspondent au plasmon de volume discuté au chapitre précédent. Parce qu'on a tenu compte, dans le modèle, de la répulsion entre électrons, le plasmon de volume est ici dispersif : on peut le trouver à n'importe quelle fréquence, et il a un vecteur d'onde non nul.

Évidemment, ces solutions se conçoivent bien en milieu infini. Cependant, quand on considère une interface, il faut pouvoir spécifier dans quelles conditions se fait le passage d'un milieu à un autre. Comme il y a maintenant deux ondes dans le métal plutôt qu'une seule, transverse, en temps normal, il faut une condition aux limites supplémentaire. En plus de la continuité des composantes tangentielles de \mathbf{E} et \mathbf{H} , nous allons considérer qu'aucun électron libre n'est capable de sortir du métal - une condition aux limites naturelle et envisagée depuis les débuts du modèle hydrodynamique[48]. La condition aux limites supplémentaire pourra s'écrire

$$\mathbf{P}_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0, \quad (2.14)$$

où $\hat{\mathbf{n}}$ est un vecteur unitaire normal à une interface. Pour appliquer cette condition d'un point de vue pratique, nous utiliserons l'équation (2.9) sous la forme

$$\mathbf{P}_f = \frac{-\nabla \wedge \mathbf{H}}{i\omega\epsilon_0} - (1 + \chi_b)\mathbf{E}, \quad (2.15)$$

et nous décomposerons le champ \mathbf{E} comme une combinaison linéaire d'un champ transverse \mathbf{E}^t et d'un champ longitudinal \mathbf{E}^l , ce qui s'écrit

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^t + \mathbf{E}^l. \quad (2.16)$$

Nous avons désormais tout le nécessaire pour nous intéresser à la propagation des ondes dans un milieu non local.

2.1.3 Forme générale des champs dans un milieu non local

Nous considérerons un système d'axe similaire à celui de la figure 1.2 et des structures dont la symétrie nous permet d'ignorer les dérivées par rapport à la direction $\hat{\mathbf{y}}$. Ce qui suit est donc valable dans un volume, tout autant que le long d'une interface perpendiculaire à la direction $\hat{\mathbf{z}}$. De manière générale dans un milieu indicé i de permittivité ϵ_i nous pouvons écrire H_y comme la somme d'une onde plane montante et d'une onde plane descendante par rapport à $\hat{\mathbf{z}}$:

$$H_{y,i}^{(t)} = (A_i e^{-\kappa_i z} + B_i e^{\kappa_i z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.17)$$

où les A_i respectivement B_i sont les amplitudes des ondes planes montantes respectivement descendantes. Pour la partie transverse, les équations de Maxwell ne sont pas modifiées et l'on a alors pour le champ \mathbf{E}

$$E_{x,i}^{(t)} = \frac{i\kappa_i}{\omega\epsilon_0\epsilon_i} (A_i e^{-\kappa_i z} - B_i e^{\kappa_i z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.18)$$

$$E_{z,i}^{(t)} = \frac{-k_x}{\omega\epsilon_0\epsilon_i} (A_i e^{-\kappa_i z} + B_i e^{\kappa_i z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.19)$$

où les κ_i sont obtenus via l'équation d'onde (2.12). Ces derniers sont identiques au cas local et on a laissé tomber l'indice z pour la lisibilité. Concernant la partie longitudinale de l'onde, on a

$$H_{y,i}^{(l)} = 0. \quad (2.20)$$

Le champ électrique \mathbf{E}^l correspondant est de la forme

$$E_{x,i}^{(l)} = \frac{1}{\omega\epsilon_0} (A_{l,i} e^{-\kappa_{l,i}z} + B_{l,i} e^{\kappa_{l,i}z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.21)$$

$$E_{z,i}^{(l)} = \frac{i\kappa_{l,i}}{k_x \omega \epsilon_0} (A_{l,i} e^{-\kappa_{l,i}z} - B_{l,i} e^{\kappa_{l,i}z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.22)$$

avec $\kappa_{l,i} = \sqrt{k_x^2 + \frac{1}{\alpha_i}} = \sqrt{k_x^2 + \frac{\omega_p^2}{\beta^2} \left(\frac{1}{\chi_{f,i}} + \frac{1}{1 + \chi_{b,i}} \right)}$ la projection du vecteur d'onde de l'onde longitudinale le long de l'axe \hat{z} . Il est obtenu via la seconde équation d'onde (2.13). Pour obtenir $E_z^{(l)}$, on part de $E_x^{(l)}$ et on utilise le fait que l'onde longitudinale est irrotationnelle, c'est à dire que l'on a

$$\partial_z E_x^{(l)} = \partial_x E_z^{(l)}. \quad (2.23)$$

Enfin, nous pouvons lier $H_y^{(t)}$ à $E_z^{(l)}$ en utilisant les équations (2.14), (2.15) et en décomposant E_z comme $E_z^{(t)} + E_z^{(l)}$. On aboutit à

$$E_{z,i}^{(l)} = -\frac{k_x}{\omega\epsilon_0} \left(\frac{1}{1 + \chi_{b,i}} - \frac{1}{\epsilon_i} \right) H_{y,i}^{(t)}. \quad (2.24)$$

En introduisant le paramètre Ω défini par

$$\Omega_i = \frac{k_x^2}{\kappa_{l,i}} \left(\frac{1}{\epsilon_i} - \frac{1}{1 + \chi_{b,i}} \right), \quad (2.25)$$

on peut alors réécrire l'équation précédente comme

$$E_{z,i}^{(l)} = \frac{\kappa_{l,i}}{\omega\epsilon_0 k_x} \Omega H_{y,i}^{(t)} \quad (2.26)$$

Outre le fait que nous utilisons des permittivités locales pour décrire des matériaux non locaux, toute la subtilité de ce formalisme tient au fait qu'ondes transverse et longitudinale ont des projections de vecteur d'onde selon \hat{z} différentes mais partagent la même projection k_x selon l'axe \hat{x} . L'onde longitudinale influence l'onde transverse de cette façon. Nous pouvons désormais l'utiliser pour étudier le plasmon de surface tout en considérant la nature non locale du métal.

2.1.4 Relation de dispersion non locale

Tout comme nous l'avons fait dans le premier chapitre nous allons considérer une interface entre un milieu diélectrique de permittivité ϵ_d et un milieu métallique de permittivité ϵ_m . La figure 2.1 schématise les profils des champs que nous recherchons. Cette fois ci le plasmon de surface est une onde de surface composée d'une partie transverse, présente dans le diélectrique et dans le métal, plus une partie longitudinale présente uniquement dans le métal. Chacune de ces deux parties est bien évidemment évanescence dans la direction \hat{z} mais propagative dans la direction \hat{x}

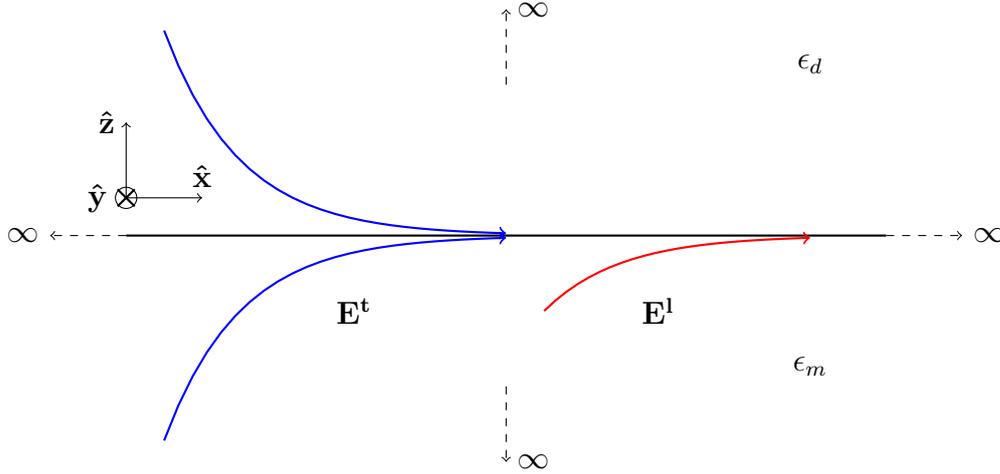


FIGURE 2.1 – Représentation schématique d’une interface supportant un plasmon de surface se propageant de gauche à droite. Les traits bleus schématisent le profil des champs correspondant à la partie transverse du champ EM, et le rouge à la partie longitudinale. Le plasmon de surface est la somme des deux.

Pour obtenir la relation de dispersion du plasmon de surface, nous posons l’origine des axes le long de l’interface. Les conditions aux limites se résument alors par le système d’équations suivant

$$H_{y,m}(z = 0) = H_{y,d}(z = 0), \quad (2.27)$$

$$E_{x,m}(z = 0) = E_{x,m}^{(t)}(z = 0) + E_{x,m}^{(l)}(z = 0) = E_{x,d}(z = 0), \quad (2.28)$$

$$E_z^{(l)}(z = 0) = \frac{\kappa_l}{\omega \epsilon_0 k_x} \Omega H_y(z = 0), \quad (2.29)$$

où l’on a laissé tomber l’indice m sur les quantités longitudinales puisque ces dernières n’existent que dans le métal. Nous savons que le plasmon de surface est un mode guidé. Nous allons donc chercher une solution aux équations de Maxwell sans sources ni champs incidents. Il existe donc dans le diélectrique une onde évanescente pour laquelle H_y est de la forme $A_d e^{-\kappa_d z}$. Dans le métal il existe une onde transverse telle que H_y soit de la forme $B_m e^{\kappa_m z}$ et une onde longitudinale pour laquelle $E_x^{(l)}$ est de la forme $B_l e^{\kappa_l z}$. En injectant ces expressions dans les équations (2.27), (2.28) et (2.29) on arrive à

$$A_d = B_m, \quad (2.30)$$

$$\frac{i\kappa_d}{\omega \epsilon_0 \epsilon_d} A_d = \frac{-i\kappa_m}{\omega \epsilon_0 \epsilon_m} B_m + \frac{1}{\omega \epsilon_0} B_l, \quad (2.31)$$

$$B_l = i\Omega A_d. \quad (2.32)$$

En réorganisant ce système de manière à éliminer les différentes amplitudes A et B nous obtenons la relation de dispersion du plasmon de surface dite non locale

$$\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega = 0, \quad (2.33)$$

qui est une équation transcendante de la forme $f(k_x, \omega) = 0$. Il n’est pas possible d’aller plus loin analytiquement et pour la résoudre nous utilisons un algorithme de descente de gradient dans le plan complexe. Dans la pratique pour chaque fréquence ω réelle nous cherchons dans le plan complexe un vecteur d’onde k_x imaginaire qui satisfasse

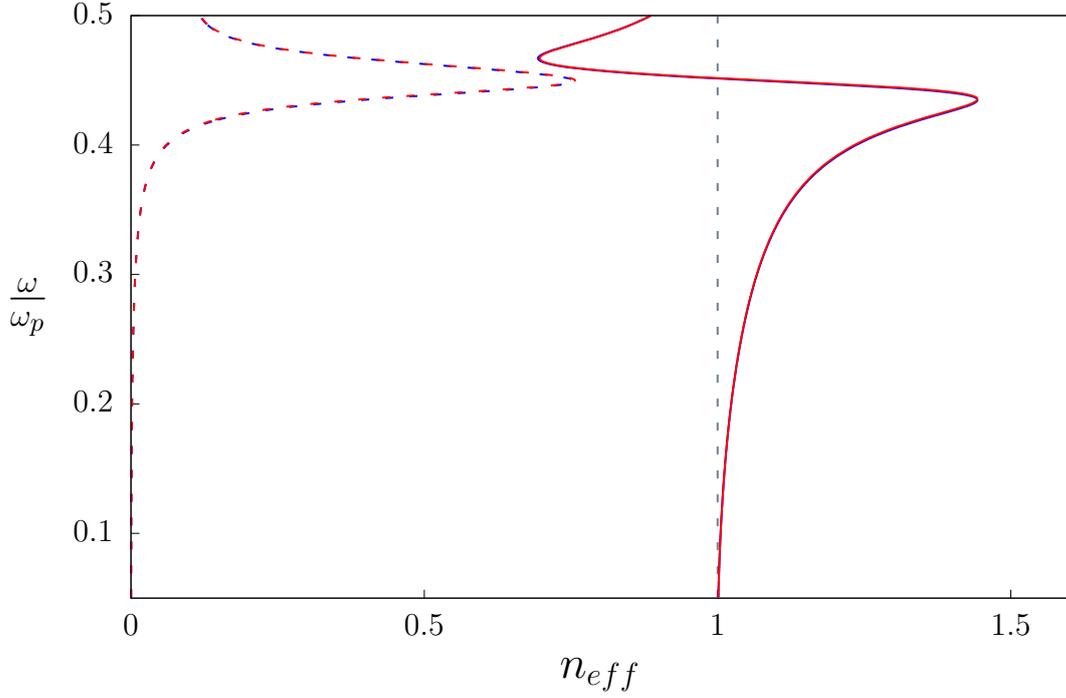


FIGURE 2.2 – Courbe de dispersion du plasmon de surface. Les courbes pleines correspondent à $\Re(n_{eff})$ et les courbes pointillées à $\Im(n_{eff})$. Les courbes bleues correspondent à la dispersion locale et les rouges à la dispersion non locale. Le trait gris pointillé horizontal est la ligne de lumière. Dans le cas d’une interface Air/Ag l’effet de la non-localité est imperceptible et les courbes locales et non locales se chevauchent.

la relation de dispersion (2.33). La courbe de dispersion correspondante du plasmon de surface est tracée sur la figure 2.2 pour une interface entre de l’air et de l’argent.

On voit que dans ce cas, l’effet de la non-localité sur le plasmon de surface est imperceptible. La seule véritable différence entre le cas local et le cas non-local est que dans le cas local, la densité de charge associée au plasmon de surface est réellement surfacique, alors que dans le cas non local cette dernière est volumique. Elle s’étend sur une distance correspondant à la distance de pénétration de l’onde longitudinale dans le métal définie comme

$$\delta_l = \frac{1}{2\Re(\kappa_l)}. \quad (2.34)$$

Dans la gamme de fréquence que l’on a considérée sur la figure 2.2 cette dernière est de l’ordre du dixième de nanomètres – c’est à dire plusieurs ordres de grandeur en dessous des distances de pénétration associées à l’onde transverse. Bien que dans le cas d’une interface Air/Ag, la non-localité n’affecte pratiquement pas la courbe de dispersion ou bien les distances caractéristiques du plasmon de surface, elle affecte néanmoins la direction du champ \mathbf{E} sur des distances de l’ordre de δ_l . La figure 2.3 montre la densité de charge dans le métal sur une épaisseur d’un nanomètre ainsi que la direction de \mathbf{E} dans le cas local et non-local.

A part cette légère différence due à la nouvelle condition aux limites nécessaire dans le modèle hydrodynamique (équation (2.14)), on peut dire que l’influence de la non-localité est complètement négligeable sur le plasmon de surface. Ceci est la raison principale pour laquelle les recherches dans ce domaine se sont arrêtées rapidement après le développement du modèle hydrodynamique dans les années 80 (au moins du point de vue de la communauté de la plasmonique). Cela montre aussi qu’en première approche, un modèle local est tout à fait suffisant. Cependant nous allons voir qu’il

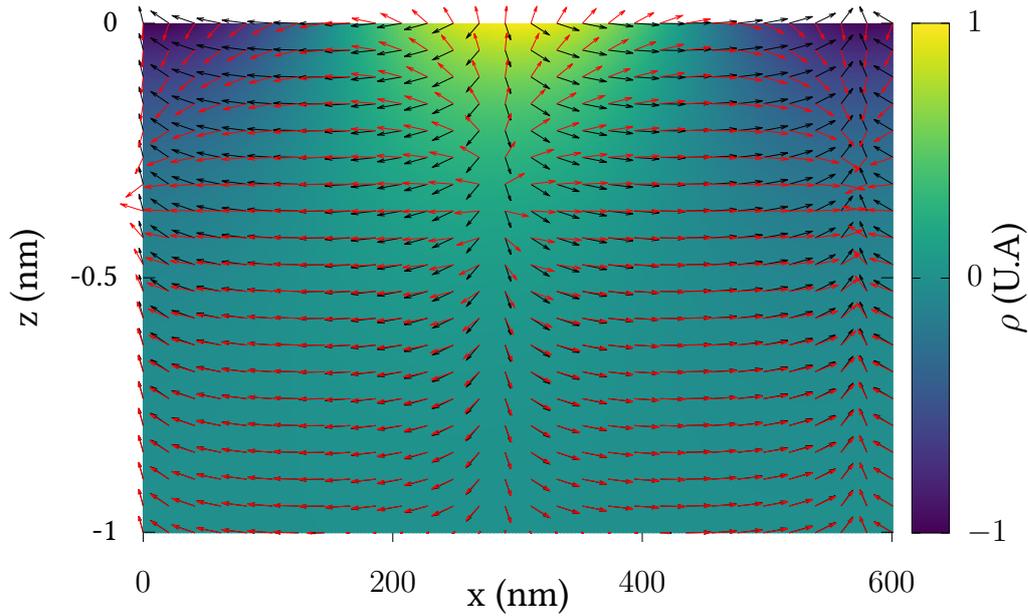


FIGURE 2.3 – Direction du champ $\Re(\mathbf{E})$ et densité de charge dans un plan (x,z) pour $\frac{\omega}{\omega_p} = 0.25$ ($\lambda_0 = 600$ nm). L'interface Air/Ag est placée à $z=0$. Les flèches sont des vecteurs unitaires représentant la direction de \mathbf{E} . Les flèches rouges correspondent au cas non local et les noires au cas local. La non-localité provoque une inversion du signe de E_z sur des distances de l'ordre de l'extension de la densité de charge volumique.

est possible de rendre le plasmon de surface bien plus sensible à l'influence de la non-localité.

2.2 Influence du diélectrique sur le confinement et la non-localité

Dans le cas précédent, le plasmon de surface atteint au maximum des indices effectifs de 1,5. Les longueurs d'onde effectives λ_{eff} sont donc à peu près de l'ordre de grandeur des longueurs d'onde λ_0 et comme nous considérons des λ_0 proches de l'ordre des longueurs d'onde visibles, la compression électronique résultante n'est pas suffisante pour être impactée par la nature non-locale du métal. Les électrons ne sont littéralement pas assez comprimés pour sentir la pression supplémentaire due à la non-localité. Cela peut s'intuiter mathématiquement en observant le terme Ω (équation (2.25)) présent dans la relation de dispersion (équation (2.33)). Bien que Ω soit un nombre complexe, ce dernier est proportionnel au carré du vecteur d'onde k_x du plasmon de surface. Plus ce k_x est élevé et plus Ω (et donc la non-localité) deviennent importants dans la relation de dispersion. Finalement, plus ce terme est important, plus la non-localité aura tendance à modifier le vecteur d'onde k_x et donc la propagation du plasmon de surface. Cela résume en fait l'idée que plus le confinement des champs le long de l'interface est grand, plus la non-localité modifiera le comportement du plasmon de surface.

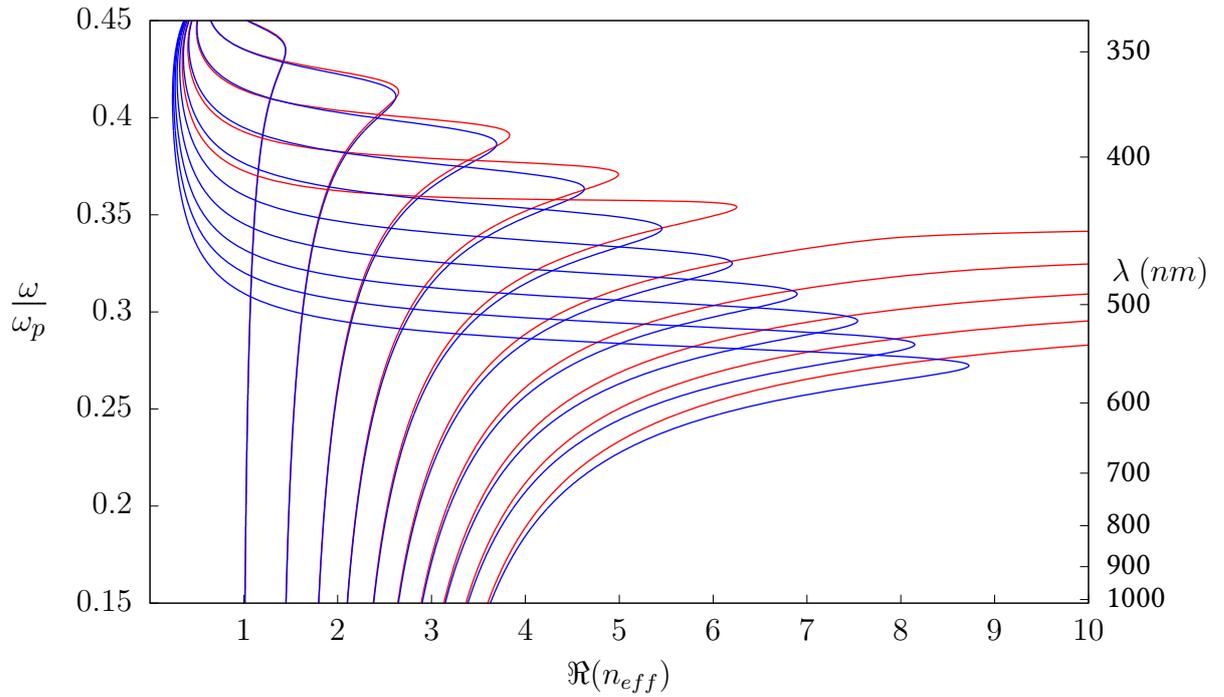


FIGURE 2.4 – Courbes de dispersion du plasmon de surface pour une interface diélectrique/Ag pour ϵ_d allant de 1 (courbe la plus haute) à 10 (courbe la plus basse). Les courbes rouges représentent l'indice effectif non local et les bleues l'indice effectif local. L'argent est modélisé par un modèle généralisé, la contribution des électrons liés χ_b correspond à l'équation (1.38). Les constantes ont été choisies pour reproduire les mesures de Rakic et.al[24] c'est à dire pour reproduire le modèle de Brendel et Bormann que nous avons utilisé jusqu'ici.

2.2.1 Relation de dispersion

Pour pouvoir observer l'influence de la non-localité sur le plasmon de surface, il faut employer des diélectriques de permittivité élevée. La figure 2.4 montre la courbe de dispersion du plasmon de surface pour des valeurs de permittivités diélectriques allant de 1 à 10. En augmentant ϵ_d nous faisons 2 choses importantes. Premièrement nous augmentons l'indice effectif du plasmon de surface aux basses fréquences - simplement parce que le plasmon de surface se déplace à ces fréquences à la même vitesse de phase que dans le diélectrique. Deuxièmement nous abaissons la valeur de la fréquence du plasmon de surface (fréquence de *bend back*). Elle sort de plus en plus du domaine de fréquence où les transitions interbandes et donc les pertes provoquent ce demi-tour de la courbe de dispersion. Il se produit alors de plus en plus loin en termes de vecteur d'onde. La combinaison de ces deux facteurs permet donc au plasmon de surface de voir son indice effectif maximal drastiquement augmenter. En conséquence, le vecteur d'onde du plasmon de surface k_x augmente et, à fréquence équivalente, le confinement des champs augmente lui aussi. La non-localité provoque en général une diminution de l'indice effectif par rapport au cas local. C'est en fait une augmentation de la longueur d'onde effective, et donc une diminution de la compression électronique. Pour une permittivité diélectrique assez élevée, il se produit même un phénomène inattendu. Le *bend back* de la relation de dispersion disparaît et le plasmon peut alors atteindre des indices effectifs extrêmement élevés en théorie.

En 2013, Raza et.al[56] comparent l'effet des pertes et de la non-localité. Ils montrent les courbes de dispersions non-locales de plusieurs modes guidés plasmoniques pour des valeurs de γ du modèle de Drude de plus en plus élevées. Ils remarquent alors que

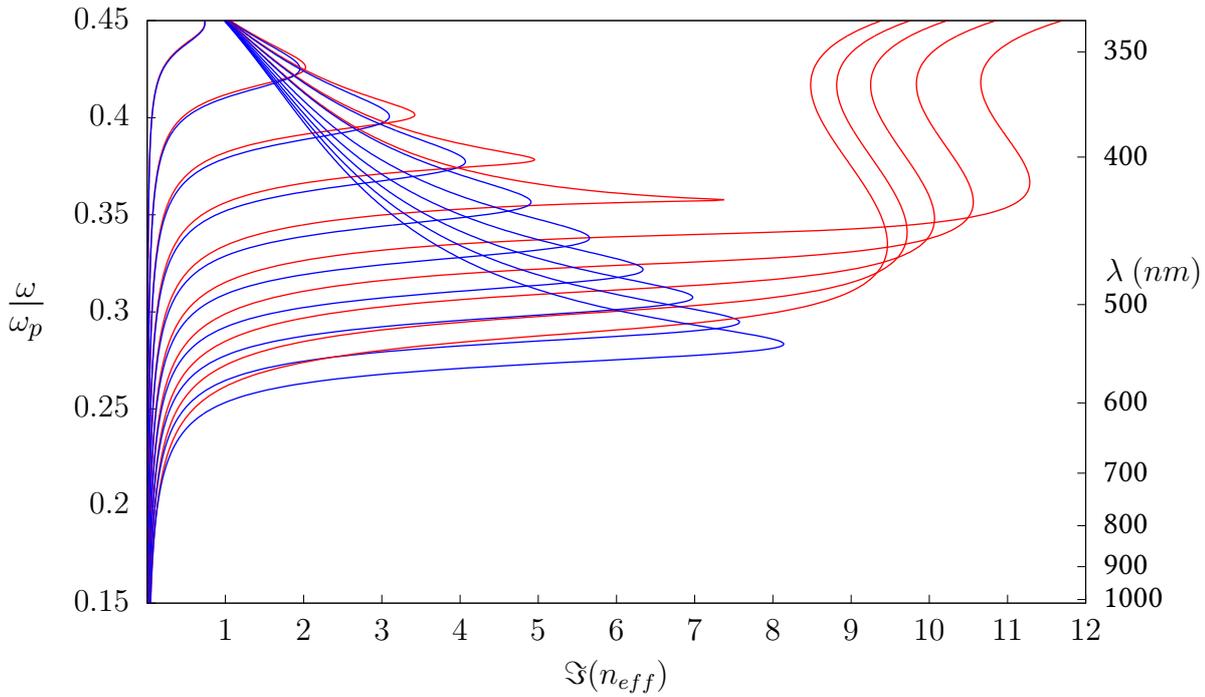


FIGURE 2.5 – Partie imaginaire de l’indice effectif $\Im(n_{eff})$ correspondant aux courbes de dispersion tracées sur la figure 2.4.

pour de faibles valeurs de γ le *bend back* dû aux pertes disparaît. Ils attribuent ce comportement au fait que pour des pertes plus faibles l’effet de la non-localité est capable de dominer l’effet des pertes (à savoir le *bend back*).

En augmentant la permittivité diélectrique, nous décalons la fréquence de *bend-back* vers des fréquences où $\Im(\epsilon_m)$ (qui représente les pertes optiques) est la plus basse (cf figure 1.10). En faisant cela, nous nous plaçons dans une situation où l’effet de la non-localité domine celui des pertes. Il faut cependant nuancer fortement cette conclusion. Bien que la disparition du *bend back* soit un signe fort de l’influence de la non-localité, l’effet principal des pertes, à savoir l’absorption optique, est toujours présent. On a vu dans le premier chapitre qu’en approchant de la fréquence du plasmon de surface, la distance caractéristique de propagation du plasmon de surface chute brutalement, et l’on ne peut plus vraiment parler de plasmon de surface une fois au dessus de la fréquence critique. La figure 2.5 montre la partie imaginaire de l’indice effectif correspondant aux courbes de dispersion tracées sur la figure 2.4. En augmentant ϵ_d nous augmentons aussi $\Im(n_{eff})$. Au dessus de ω_{sp} les pertes sont simplement trop importantes et la disparition du *bend back* due à la non-localité ne pourra donc jamais être constatée expérimentalement. Cela reste tout de même un bon indicateur théorique, et celui qui cherchera à maximiser l’influence de la non-localité devra avant tout chercher ce comportement particulier sur la dispersion.

2.2.2 Distances caractéristiques non locales

En excluant les fréquences supérieures à ω_{sp} les figures 2.4 et 2.5 nous laissent penser que pour un ϵ_d suffisamment élevé, la non-localité diminue le confinement des champs le long de l’interface mais augmente également la distance de propagation le long de cette dernière. La figure 2.6 montre la relation de dispersion du plasmon de surface pour une interface TiO_2/Ag . Le TiO_2 est un diélectrique de permittivité très élevée. Nous allons utiliser cette relation de dispersion plutôt réaliste pour quantifier l’impact de la non-localité sur les distances caractéristiques (de propagation et de pénétration)

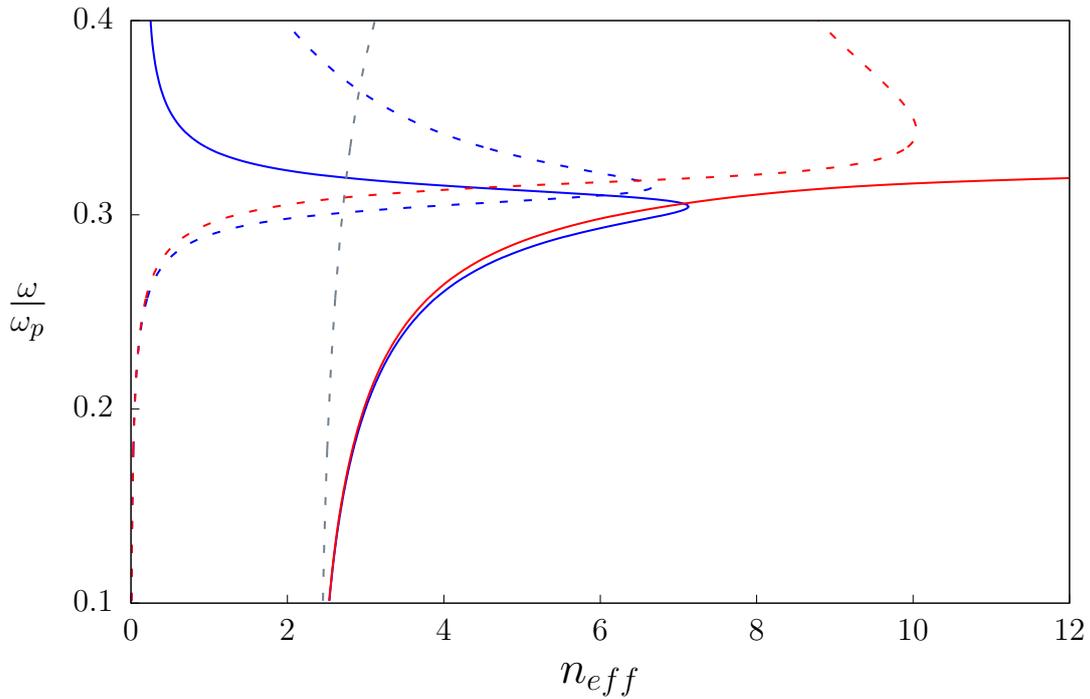


FIGURE 2.6 – Courbe de dispersion du plasmon de surface pour une interface TiO_2/Ag . Les courbes bleues sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local. La permittivité ϵ_d est modélisée par une formule de Cauchy donnée par Devore[57]. La courbe grise pointillée est la ligne de lumière. Puisque nous utilisons un diélectrique dispersif cette dernière est courbée. Dans la bande fréquentielle considérée cela laisse une permittivité comprise entre 6 (basses fréquences) et 10 (hautes fréquences). Cette bande correspond à des longueurs d’onde allant de 1500 à 380 nm.

du plasmon de surface.

La figure 2.7 montre les distances de pénétration du plasmon de surface dans le diélectrique et dans le métal. En comparant avec la figure 1.8 on peut dire que l’utilisation d’un diélectrique de permittivité élevée ne change que très peu δ_m . Ce dernier est toujours de l’ordre de la dizaine de nanomètres. En revanche δ_d est bien plus faible. Les champs sont beaucoup plus confinés le long de l’interface du côté du diélectrique. Si l’on compare maintenant les résultats locaux et non locaux, on peut voir que la seule véritable différence se fait au dessus de la fréquence du plasmon de surface. A cause de la disparition de l’asymptote discutée précédemment, δ_m et δ_d ne remontent plus quand la fréquence est supérieure à ω_{sp} . Au contraire, ces distances ont même tendance à devenir de plus en plus faibles à cause de la non-localité. En dessous, la différence entre cas local et non local est au maximum de 3 nm dans le diélectrique et de 1 nm dans le métal. En excluant les fréquences supérieures à ω_{sp} , la non-localité ne cause qu’une augmentation infime de la distance de pénétration des champs dans les matériaux.

L’influence de la non-localité est cependant un peu plus grande sur la distance de propagation du plasmon de surface le long de l’interface. La figure 2.8 montre cette dernière. On peut voir que δ_x est perturbée par la non-localité sur toute la bande fréquentielle considérée. Tout comme les autres distances, δ_x est réduit par la non-localité au dessus de ω_{sp} , mais également en dessous de la fréquence normalisée $\frac{\omega}{\omega_p} \simeq 0.2$. Cette fréquence correspond à la transition entre longueurs d’onde visibles (au dessus de $\frac{\omega}{\omega_p} \simeq 0.2$) et infrarouges (en dessous de $\frac{\omega}{\omega_p} \simeq 0.2$). Dans l’infrarouge la non-localité a tendance à réduire δ_x alors que dans le visible elle l’augmente.

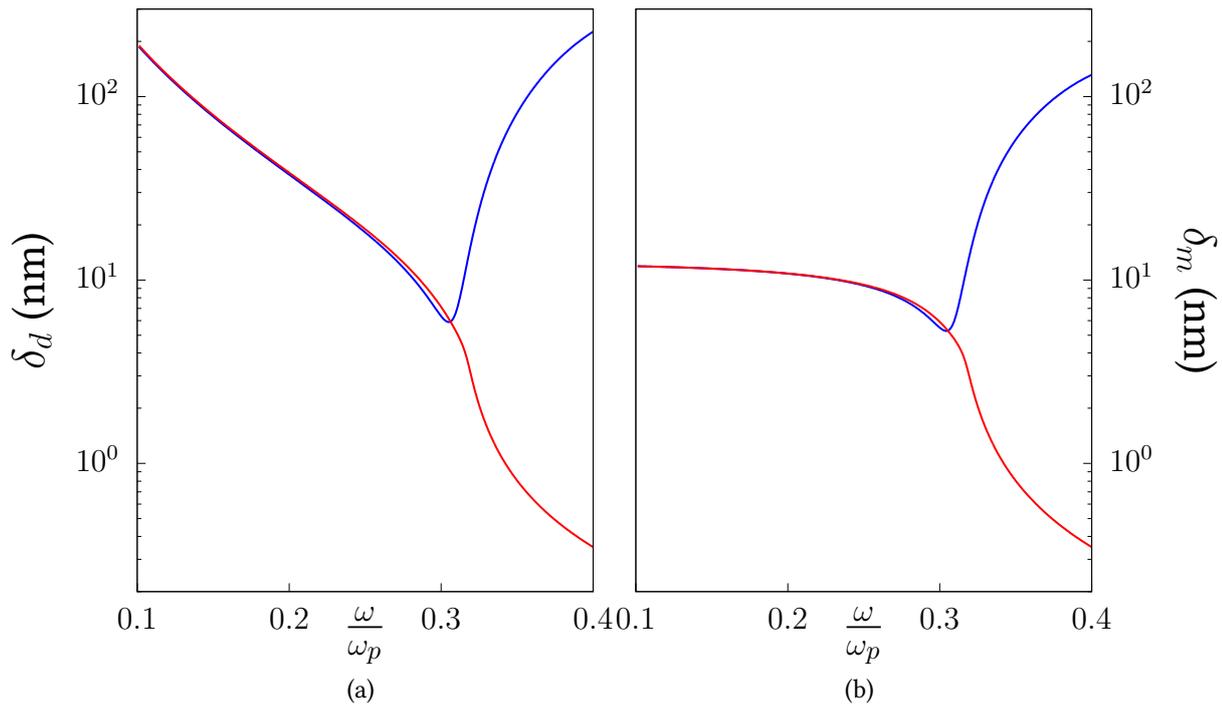


FIGURE 2.7 – Distances de pénétration dans le diélectrique δ_d (a) et dans le métal δ_m (b) du plasmon de surface correspondant à la dispersion tracée sur la figure 2.6. Les courbes bleus sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local.

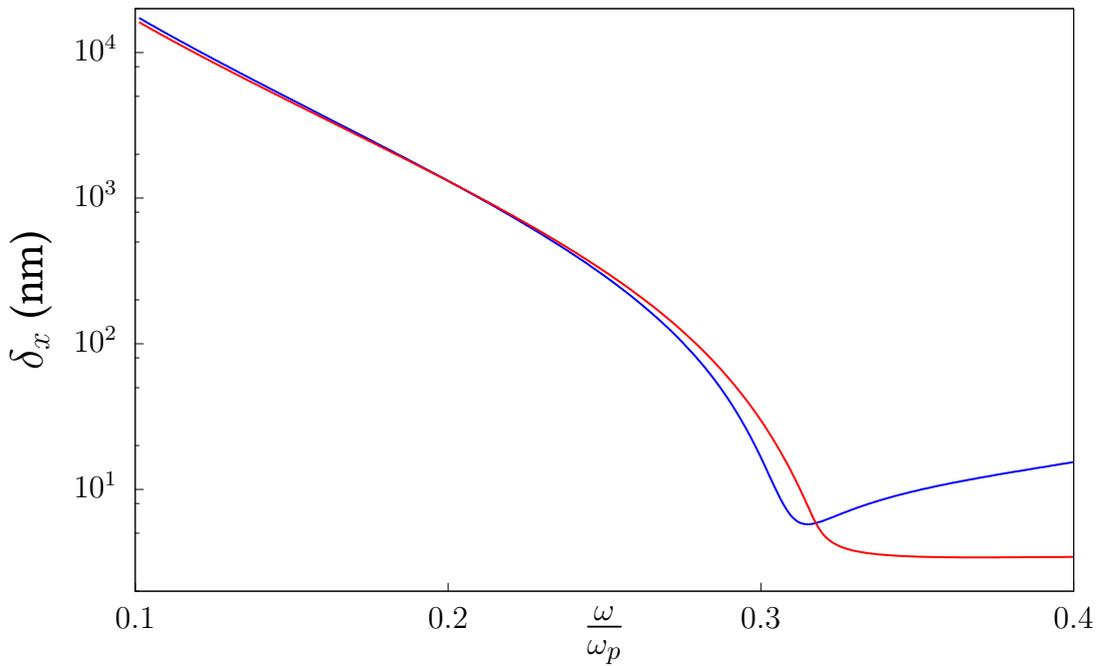


FIGURE 2.8 – Distances de propagation correspondant à la relation de dispersion tracée sur la figure 2.6 pour une interface entre de l'argent et du TiO_2 . Les courbes bleues sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local.

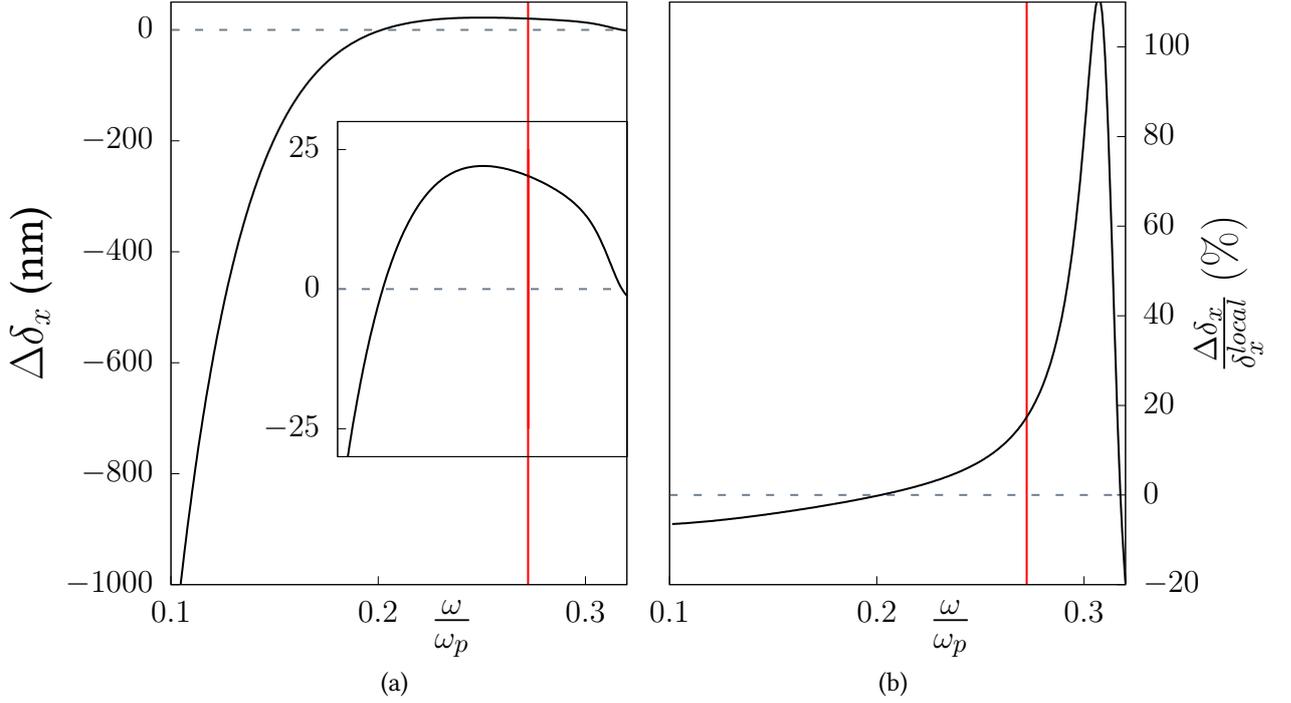


FIGURE 2.9 – Différence entre distances de propagation non locale et locale correspondant à la dispersion tracée sur la figure 2.6 privée de la bande fréquentielle au dessus de ω_{sp} . (a) est une différence absolue et (b) un changement relatif par rapport à δ_x^{local} . L’inset de (a) est un zoom sur les fréquences optiques. Le trait gris pointillé indique le zéro. Le trait vertical rouge représente la moyenne des ω_{max} locale et non locale. Ces derniers étant très proches l’un de l’autre utiliser leur moyenne assure une meilleure visibilité.

Contrairement aux distances de pénétrations, cette modification de la distance de propagation n’est pas tout à fait négligeable. Pour le voir, nous définissons $\Delta\delta_x$ comme la différence entre $\delta_x^{non\ local}$ et δ_x^{local} . De plus, nous définissons une fréquence particulière ω_{max} comme la fréquence à partir de laquelle la distance de propagation devient inférieure à la longueur d’onde effective. Nous considérons ici arbitrairement qu’un plasmon de surface est capable de se propager à partir du moment où sa distance de propagation δ_x est supérieure à sa longueur d’onde effective λ_{eff} . Dans le cas contraire, nous considérons que les pertes sont trop importantes et que le plasmon n’est plus capable de se propager. La figure 2.9 montre $\Delta\delta_x$ et $\frac{\Delta\delta_x}{\delta_x^{local}}$ pour la bande fréquentielle en dessous de la fréquence du plasmon de surface ω_{sp} .

Avec les définitions que l’on a données on peut voir que la non-localité permet une augmentation de la distance de propagation jusqu’à un peu plus de 15 % dans le visible. Au contraire cette dernière peut se trouver réduite d’un peu plus de 5 % dans l’infrarouge. Dans les deux cas, cela n’est pas négligeable.

Finalement, l’utilisation d’un diélectrique de permittivité élevée permet de rendre le plasmon de surface sensible à la non-localité. Cependant pour le voir, il faut chercher son influence dans les bandes fréquentielles les plus extrêmes (les plus proches de ω_{sp}). Nous allons voir dans la suite que le plasmon de surface n’est pas le seul mode à pouvoir être sensible à la non localité. De plus nous allons voir que même si l’utilisation de diélectrique n’est pas forcément nécessaire pour atteindre de grands vecteurs d’onde et ainsi augmenter l’impact de la non-localité, c’est d’une façon très générale un moyen de le faire.

2.3 Le gap-plasmon

Le premier mode autre que le plasmon de surface auquel nous allons nous intéresser est le Gap-Plasmon. Il s'agit du mode capable de se propager dans un gap diélectrique de taille nanométrique. Ce dernier est très étudié puisque c'est lui qui est responsable du confinement de la lumière sous des nanocubes ou nanosphères[58, 59, 60, 61, 62], ou encore dans des interstices diélectriques présent dans les nanoréseaux[63] ou nanofentes[64] en général. Le Gap-Plasmon est capable de confiner la lumière bien plus que le plasmon de surface et il est donc, logiquement, encore plus sensible à l'influence de la non-localité. Nous allons réutiliser le formalisme mis en place dans la partie 2.1.3 pour dériver la relation de dispersion du Gap-Plasmon puis étudier l'influence de la non-localité sur la courbe de dispersion. La structure capable de supporter le Gap-Plasmon sera appelée M.I.M. pour *Metal/Insulator/Metal*. Cette dernière, ainsi que les amplitudes du champ magnétique sont montrées sur la figure 2.10 pour un gap diélectrique d'épaisseur h . Cette structure est capable de supporter plusieurs modes dont le Gap-Plasmon. Ce dernier correspond à un champ \mathbf{H} symétrique par rapport à la couche de diélectrique.

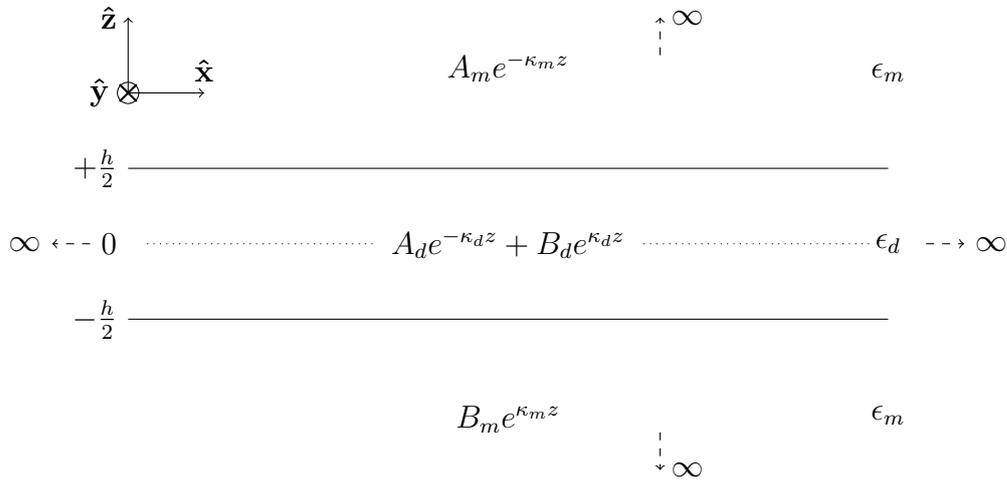


FIGURE 2.10 – Représentation schématique du système M.I.M. Les amplitudes indiquées sont celles du champ magnétique H_y . Pour $i = m, d$ les A_i et B_i sont des amplitudes correspondant à des ondes planes montantes respectivement descendantes.

Notre structure est symétrique par rapport au gap diélectrique. Le métal au dessus et en dessous du gap est supposé identique ici. En conséquence, pour obtenir la relation de dispersion il n'est pas nécessaire de considérer la continuité des champs le long des deux interfaces. Nous posons l'origine de nos axes au centre du gap diélectrique, et écrivons la continuité des champs le long de l'interface haute située en $z = +\frac{h}{2}$. Cela nous permet d'obtenir le système d'équation suivant

$$A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} = A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} + B_d e^{\kappa_d \frac{h}{2}}, \quad (2.35)$$

$$i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} + A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} = i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \left(A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} - B_d e^{\kappa_d \frac{h}{2}} \right), \quad (2.36)$$

$$A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} = -i\Omega (A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} + B_d e^{\kappa_d \frac{h}{2}}). \quad (2.37)$$

En injectant (2.35) et (2.37) dans (2.36) nous obtenons

$$\left(\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega\right) \left(A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} + B_d e^{\kappa_d \frac{h}{2}}\right) = \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \left(A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} - B_d e^{\kappa_d \frac{h}{2}}\right). \quad (2.38)$$

A partir d'ici, il nous faut considérer la symétrie de la solution que nous recherchons pour aller plus loin. On pourrait obtenir la solution antisymétrique en posant $A_d = -B_d$ mais nous recherchons la solution symétrique. Nous posons donc $A_d = B_d$ et utilisons ceci pour éliminer les amplitudes dans l'équation (2.38). Une réorganisation de cette dernière mène directement à la relation de dispersion du gap-plasmon

$$\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \tanh\left(\frac{\kappa_d h}{2}\right) - \Omega = 0. \quad (2.39)$$

Cette dernière est très similaire à celle du plasmon de surface (équation 2.33) à l'exception de la présence du paramètre h . Encore une fois il s'agit d'une equation transcendante, insoluble analytiquement.

2.3.1 Dispersion en fonction de l'épaisseur de diélectrique

Nous considérons ici un M.I.M. composé d'or et d'air. La figure 2.11 montre la courbe de dispersion en fonction de l'épaisseur du gap h . La particularité du gap-plasmon est de présenter un indice effectif augmentant très fortement quand l'épaisseur de diélectrique diminue, ce qu'on peut lier à un confinement des champs de plus en plus fort. La non-localité a donc une influence de plus en plus forte pour des épaisseurs de diélectrique de plus en plus faibles. Ainsi, même en utilisant que de l'air comme diélectrique le gap-plasmon est capable d'atteindre des indices effectifs bien plus grands que ceux du plasmon de surface. Et comme pour le plasmon de surface la non-localité a tendance à diminuer cet indice, et donc le confinement. Mais tout comme le plasmon de surface, une augmentation de $\Re(n_{eff})$ implique également une augmentation de $\Im(n_{eff})$. Là encore, on peut noter que la non-localité tend à diminuer $\Im(n_{eff})$. Tout comme pour le plasmon de surface, la non-localité a donc tendance à augmenter la distance de propagation du gap-plasmon. Ceci est vrai à condition de considérer des longueurs d'onde visibles.

On pourrait se dire que diminuer h a un effet équivalent à augmenter ϵ_d . Ce n'est cependant pas tout à fait le cas. Pour en discuter nous allons cette fois comparer plusieurs relations de dispersion en fréquence pour plusieurs épaisseurs.

2.3.2 Dispersion du gap-plasmon à épaisseur fixée

La figure 2.12 montre les courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$) du gap-plasmon pour 3 épaisseurs différentes de diélectrique. Ces dernières correspondent au même système que sur la figure 2.11. Avant toute chose, on peut remarquer que la courbe de dispersion du gap-plasmon est, en terme d'indice effectif, systématiquement au dessus de celle du plasmon de surface mais reste malgré tout très similaire. Le gap-plasmon possède lui aussi une fréquence de *bend back* et cette dernière est identique à celle du plasmon de surface. De plus, la non-localité provoque les mêmes modifications de la courbe de dispersion que pour le plasmon de surface. On peut voir cependant que l'effet de la non-localité semble légèrement différent par rapport au plasmon de surface. Les maxima d'indice effectif non locaux (au dessus du *bend back*) sont en dessous des maxima locaux. Jusque ici, nous avons vu que c'est le contraire pour le plasmon de surface. En

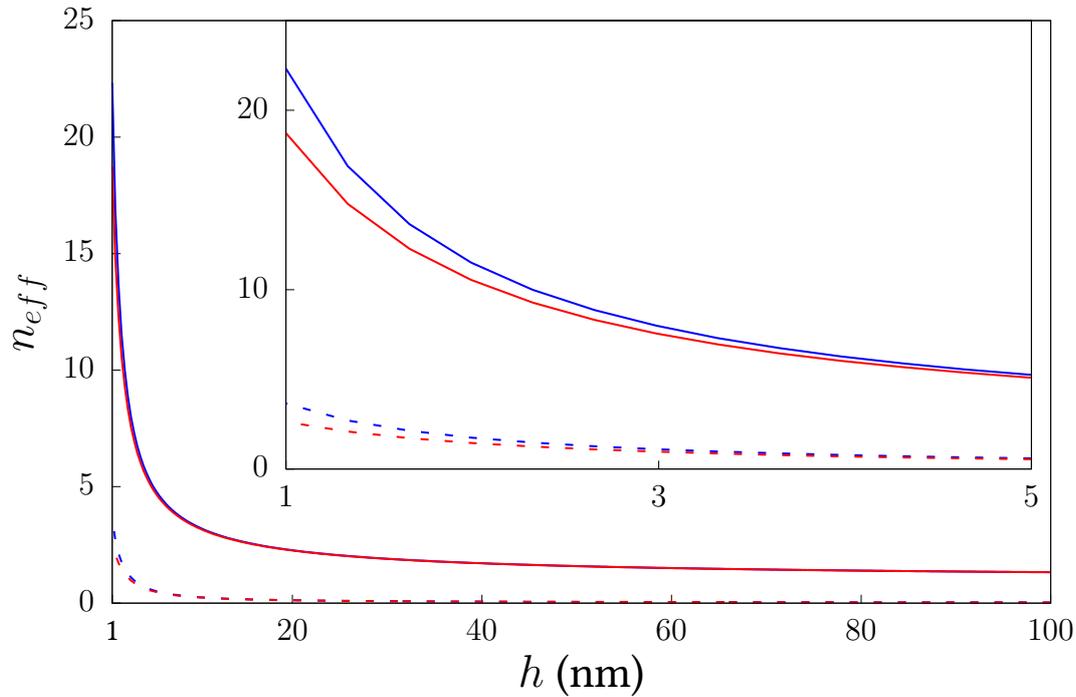


FIGURE 2.11 – Courbe de dispersion du gap-plasmon en fonction de l'épaisseur du gap h pour un M.I.M. fait d'Air et d'Or et $\lambda_0 = 600$ nm. Les courbes bleues sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local. Les courbes pleines sont des $\Re(n_{eff})$ et les pointillées des $\Im(n_{eff})$. L'inset montre un zoom aux très faibles épaisseurs.

fait ceci est entièrement dû au métal que nous avons utilisé. Si l'on avait pris de l'argent à la place de l'or, nous aurions un comportement similaire au plasmon de surface. Mis à part cette petite différence, la relation de dispersion du gap-plasmon est très ressemblante à celle du plasmon de surface. Encore une fois, plus l'indice effectif local est élevé, plus sa contrepartie non locale aura tendance à être en dessous. L'interprétation est identique à celle du plasmon de surface. C'est quand on cherche à augmenter le confinement que la non-localité intervient pour le limiter.

Si nous comparons ces courbes de dispersion à celles du plasmon de surface pour différents diélectriques (courbes tracées sur la figure 2.4) on peut voir que la diminution de la taille du gap augmente l'influence de la non-localité de manière différente de celle due à l'augmentation de la permittivité diélectrique. En effet, cette dernière ne provoque pas de changement de la fréquence de *bend back* locale, mais simplement une augmentation globale de l'indice effectif. Cette augmentation s'accompagne cependant d'une légère augmentation de la fréquence de *bend back* pour les dispersions non locales. Cet effet là est en revanche tout à fait similaire à ce que l'on pourrait voir en augmentant la permittivité diélectrique. Cette similarité avec le plasmon de surface n'est pas la seule. C'est ce que l'on peut voir sur la figure 2.13 qui montre $\Im(n_{eff})$ correspondant à la figure 2.12. L'inset de cette figure nous montre un croisement entre les parties imaginaires des indices effectifs locaux et non locaux. Au dessus de ce point de croisement, la non-localité augmente la distance de propagation du gap-plasmon. En dessous, elle la diminue. On peut même voir que la diminution de l'épaisseur de diélectrique tend à diminuer cette fréquence de croisement.

Enfin, pour en finir avec le gap-plasmon nous pouvons remarquer que l'augmentation de l'indice effectif ne provoque pas la disparition de l'asymptote. Ceci est encore dû au métal que nous utilisons. Les pertes induites par les transitions interbandes sont trop fortes au niveau de la fréquence de *bend back* et continuent à dominer l'effet

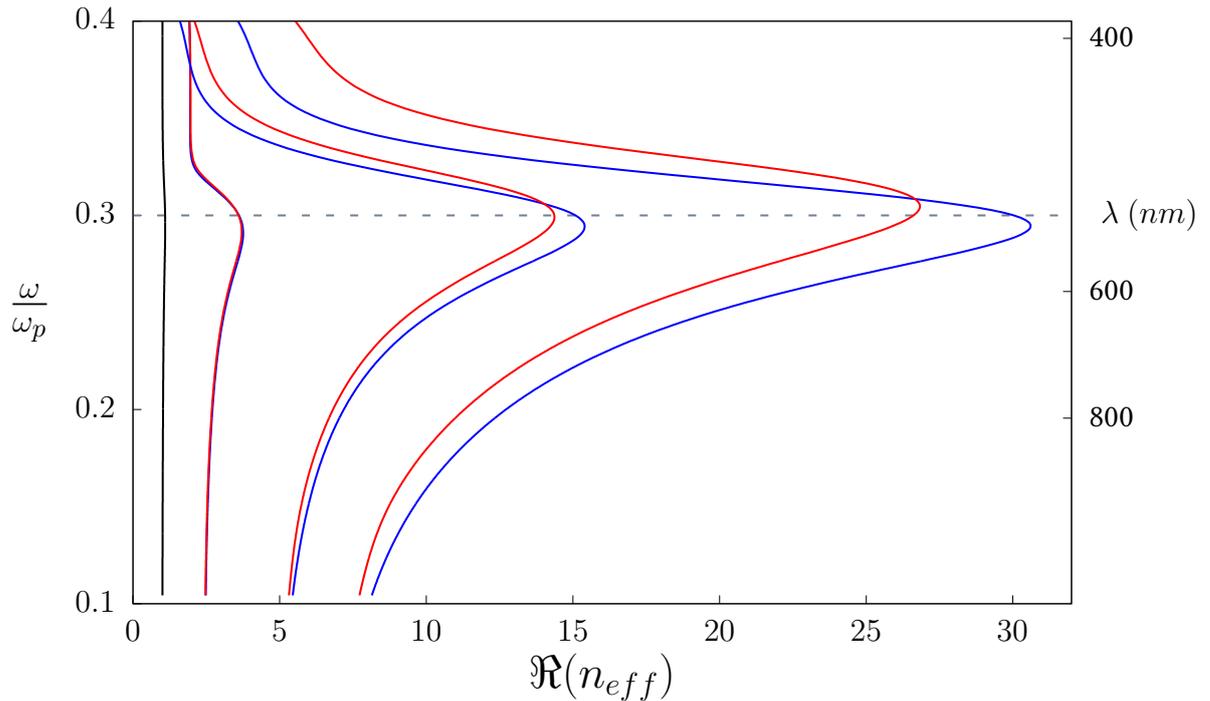


FIGURE 2.12 – Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$ Vs fréquence) du gap-plasmon pour différentes épaisseurs de gap. Les courbes bleus sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local. Les épaisseurs de gap sont, de gauche à droite, de 10 nm, 2 nm et 1 nm. La courbe noire est la relation de dispersion du plasmon de surface. Le trait pointillé gris horizontal indique la fréquence de *bend back*.

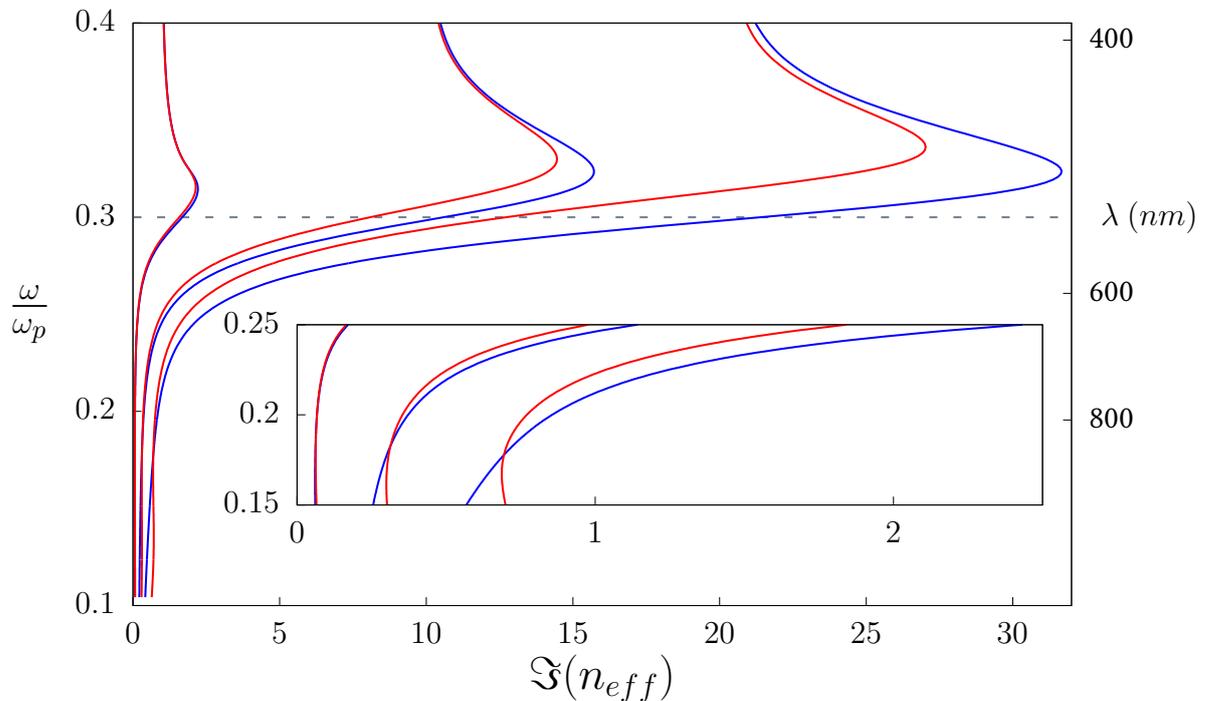


FIGURE 2.13 – $\Im(n_{eff})$ correspondant aux dispersions tracées sur la figure 2.12. L'inset montre un zoom sur la bande fréquentielle de transition entre le visible et les infrarouges.

de la non-localité même pour des indices effectifs aussi élevés. Si nous avons utilisé un diélectrique de permittivité élevée nous aurions pu voir ce comportement. Si nous avons utilisé de l'argent nous aurions également pu constater ce comportement pour des épaisseurs de gap inférieures à 3 nm.

Nous allons désormais nous intéresser au système complémentaire au M.I.M., le I.M.I.

2.4 Les modes de slab fin

La structure et les amplitudes de \mathbf{H} que nous étudions sont schématisées sur la figure 2.14. Il s'agit d'une structure de type I.M.I. pour *Insulator/Metal/Insulator*. Cette fois ci la structure est une épaisseur métallique h noyée dans du diélectrique. On considère donc ici que le diélectrique est le même en dessous et au dessus du métal.

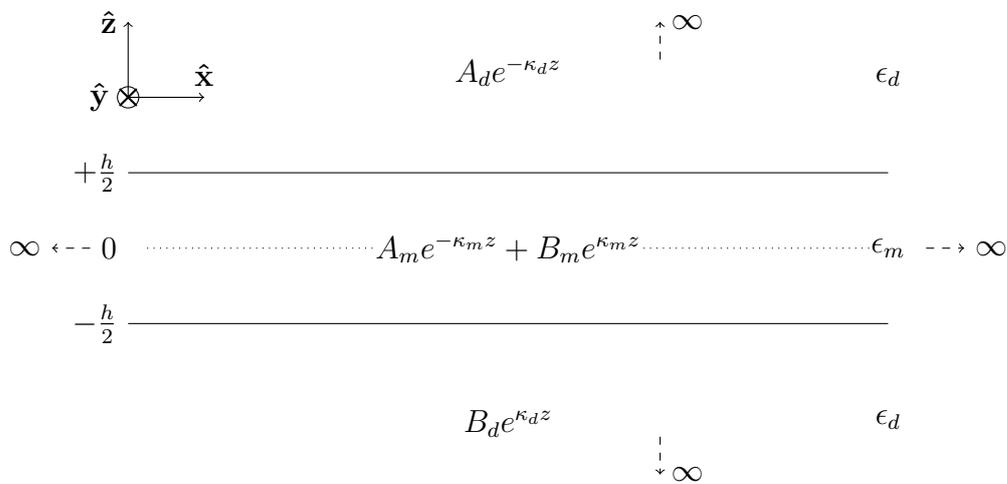


FIGURE 2.14 – Représentation schématique de la structure I.M.I. Les amplitudes indiquées sont celles du champ magnétique H_y . Pour $i = m, d$ les A_i et les B_i sont des amplitudes correspondant à des ondes planes montantes respectivement descendantes.

Pour obtenir les relations de dispersion des modes qui peuvent se propager le long d'une telle structure nous pouvons de nouveau nous appuyer sur la symétrie du problème (par rapport à H_y). Cependant, la partie longitudinale du champ étant décrite par deux amplitudes, la symétrie du champs transverse seule n'est pas suffisante et nous allons voir qu'il faut également considérer la seconde interface. Nous posons l'origine de nos axes au centre du métal et considérons les conditions aux limites au niveau de l'interface supérieure située en $+\frac{h}{2}$. Nous obtenons le système d'équations suivant

$$A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} = A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} + B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}}, \quad (2.40)$$

$$i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}} + = i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} \left(A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} - B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}} \right) + A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} + B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}}, \quad (2.41)$$

$$A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} = -i \Omega A_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}}. \quad (2.42)$$

Concernant la seconde interface, nous n'aurons besoin que de la condition aux limites supplémentaire imposée par notre formulation du modèle hydrodynamique, à savoir

$$A_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} = -i \Omega B_d e^{-\kappa_d \frac{h}{2}}. \quad (2.43)$$

Avant d'aller plus loin, considérons la symétrie du problème. Nous pouvons décomposer les solutions comme un produit de solution symétrique et antisymétrique (par rapport à H_y), exactement comme avec le gap-plasmon. Nous allons ici nous intéresser aux deux cas. Si l'on cherche une solution symétrique alors $A_d = B_d$. Les équations (2.42) et (2.43) mènent alors à

$$A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} = A_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}}, \quad (2.44)$$

ce qui n'est possible que si le champ longitudinal est anti-symétrique. Il n'existe de solution symétrique par rapport à H_y que si $A_l = -B_l$. Si l'on cherche une solution anti-symétrique alors $A_d = -B_d$ et cette fois ci les équations (2.42) et (2.43) conduisent à

$$A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} = - \left(A_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} \right), \quad (2.45)$$

et donc le champ longitudinal doit être symétrique. C'est à dire que pour avoir H_y anti-symétrique il nous faut $A_l = B_l$. Maintenant que nous avons remarqué ceci nous pouvons commencer à manipuler les équations pour dériver les relations de dispersion. La procédure est légèrement différente par rapport au cas du gap-plasmon. Nous commençons par réécrire (2.41) et (2.42) sous la forme du système suivant

$$A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} = -i\Omega \left(A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} + B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}} \right), \quad (2.46)$$

$$A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} + B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}} = i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \left(A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} + B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}} \right) - i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} \left(A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} - B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}} \right). \quad (2.47)$$

Nous divisons ensuite l'équation (2.47) par l'équation (2.46) pour obtenir

$$\frac{A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} + B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}}}{A_l e^{-\kappa_l \frac{h}{2}} - B_l e^{\kappa_l \frac{h}{2}}} = - \frac{\kappa_d}{\epsilon_d \Omega} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m \Omega} \left(\frac{A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} - B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}}}{A_m e^{-\kappa_m \frac{h}{2}} + B_m e^{\kappa_m \frac{h}{2}}} \right). \quad (2.48)$$

A partir d'ici, nous pouvons faire appel à la symétrie pour obtenir les relations de dispersion. Considérons d'abord la solution symétrique. Nous avons $A_m = B_m$ ainsi que $A_l = -B_l$. Une rapide réorganisation de l'équation (2.48) mène à la relation de dispersion du mode qui est communément appelé le "Long Range Surface Plasmon" (LRSP)

$$\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} \tanh\left(\frac{\kappa_m h}{2}\right) - \Omega \tanh\left(\frac{\kappa_l h}{2}\right) = 0. \quad (2.49)$$

Et finalement, si l'on cherche la solution antisymétrique en posant $A_m = -B_m$ et donc $A_l = B_l$ nous obtenons la relation de dispersion du "Short Range Surface Plasmon" (SRSP)

$$\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} \coth\left(\frac{\kappa_m h}{2}\right) - \Omega \coth\left(\frac{\kappa_l h}{2}\right) = 0. \quad (2.50)$$

Ces deux dénominations font référence aux distances de propagation de ces modes. Le SRSP se propage sur des distances plus faibles que le plasmon de surface et le LRSP sur des distances bien plus grandes. Ces modes sont moins étudiés que le gap-plasmon mais sont connus depuis longtemps[65, 66, 67, 68] et ont même été pressentie par les tous premiers auteurs sans être nommé[69, 32]. L'influence de la non-localité sur ces derniers est également connue[70, 56] mais en générale considérée avec de l'air. Le LRSP est bien plus étudié que le SRSP puisque qu'il possède une application pratique. C'est en effet lui qui est utilisé dans les biosenseurs plasmoniques[71, 72]. Nous allons désormais pouvoir étudier l'influence de la non-localité sur ces deux modes guidés.

2.4.1 Dispersion en fonction de l'épaisseur de métal

Nous commencerons par observer le comportement du LRSP et SRSP en fonction de l'épaisseur du métal. Nous considérons une épaisseur d'argent noyée dans du TiO_2 . L'influence de la non-localité sera donc augmentée à la fois par le diélectrique et par la diminution en épaisseur. C'est tout du moins à quoi on peut s'attendre si ces deux modes se comportent comme le gap-plasmon. Nous allons voir que c'est le cas pour le SRSP mais absolument pas pour le LRSP. La figure 2.15 montre les indices effectifs des deux modes en fonction de l'épaisseur de métal. Le SRSP se comporte bien comme le gap-plasmon. Il présente un indice effectif divergent avec la diminution de l'épaisseur métallique et la non-localité a tendance à diminuer ce dernier, que l'on parle de sa partie réelle ou bien imaginaire. La diminution en épaisseur provoque donc une diminution des distances caractéristiques et la non-localité aura tendance à réduire cette diminution. Tout comme le plasmon de surface, les distances de pénétration dans les matériaux ne sont que très peu modifiées (de l'ordre du nanomètre) et l'impact de la non-localité est surtout visible sur sa distance de propagation.

Cette dernière est tracée sur la figure 2.16 pour une plage d'épaisseur un peu plus large que celle montrée figure 2.15. Bien évidemment le confinement des champs augmentant avec la diminution en épaisseur, la distance de propagation devient rapidement très faible, et la non-localité ne l'augmente finalement que très peu. On peut voir que l'influence de la non-localité est plus marquante pour des épaisseurs supérieures à la centaine de nanomètres. Pour ces épaisseurs là, l'influence de la non-localité est augmentée grâce au diélectrique et non pas grâce à la diminution en épaisseur. Finalement l'influence de la non-localité sur le SRSP est similaire à celle sur le gap-plasmon, c'est la partie réelle de l'indice effectif qui est la plus affectée.

Intéressons nous maintenant au LRSP. En observant sa dispersion (figure 2.15) on pourrait se dire que la non-localité n'a que peu d'influence sur ce dernier. De plus on peut voir que la diminution en épaisseur ne provoque pas une augmentation de l'indice effectif mais le contraire. Plus l'épaisseur de métal est faible, plus le confinement du LRSP diminue. Comme le confinement diminue en même temps que l'épaisseur, l'influence de la non-localité sur l'indice effectif diminue elle aussi. En revanche, la non-localité peut avoir un impact très important sur ses distances caractéristiques. Ceci n'est cependant pas vrai pour la distance de pénétration dans le métal. Cette dernière est de l'ordre de la dizaine de nanomètres pour des épaisseurs supérieures à la centaine de nanomètres et à peine plus pour des épaisseurs plus faibles. La non-localité n'augmente cette dernière qu'au maximum d'un nanomètre. En revanche, la non-localité a un effet tout à fait remarquable sur la distance de propagation, et encore plus sur la distance de pénétration dans le diélectrique.

Ces distances sont tracées sur la figure 2.17. Pour une longueur d'onde équivalente (600 nanomètres) les distances de propagation et de pénétration dans le diélectrique

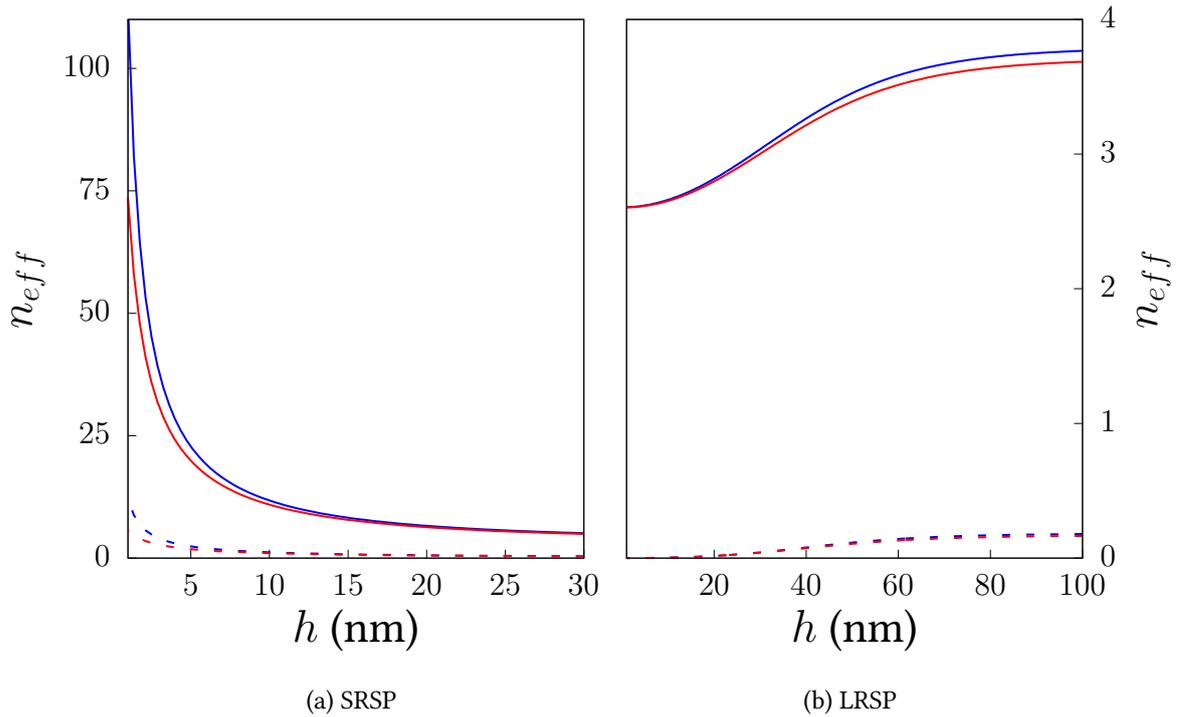


FIGURE 2.15 – Indices effectifs en fonction de l'épaisseur du métal pour le SRSP (a) et le LRSP (b) pour une longueur d'onde $\lambda_0 = 600$ nm. Les courbes bleues sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local. Les courbes pleines représentent $\Re(n_{eff})$ et les pointillées $\Im(n_{eff})$. Les échelles sont choisies pour mettre en valeur l'influence de la non-localité.

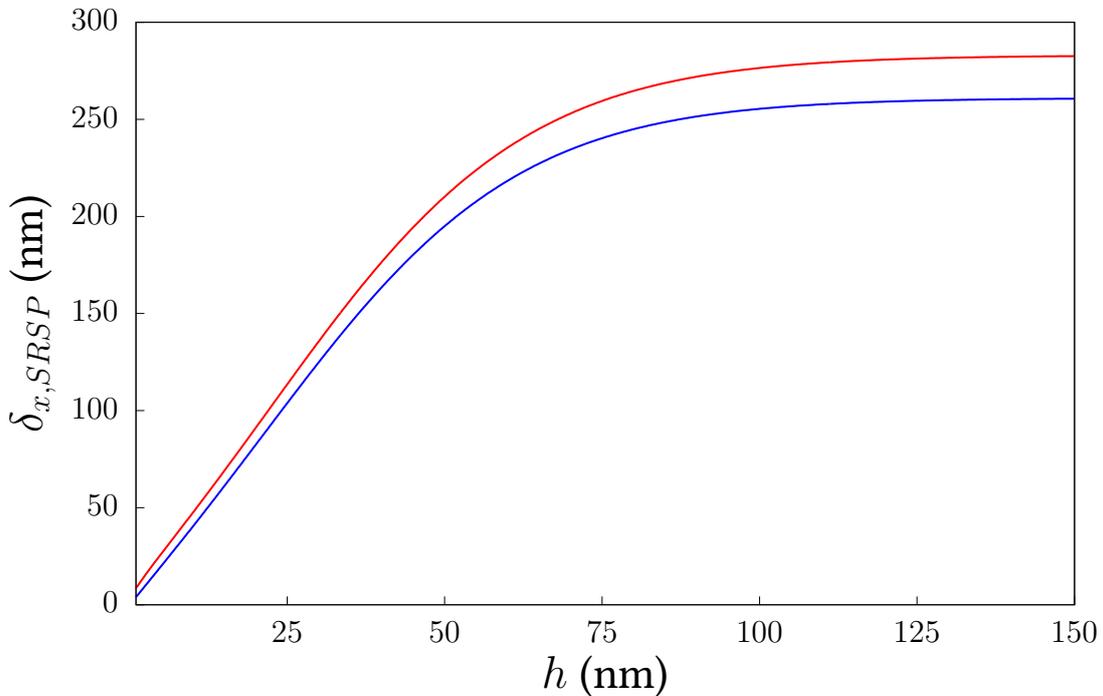


FIGURE 2.16 – Distance de propagation du SRSP en fonction de l'épaisseur de métal pour $\lambda_0 = 600$ nm. Les courbes bleues sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local.

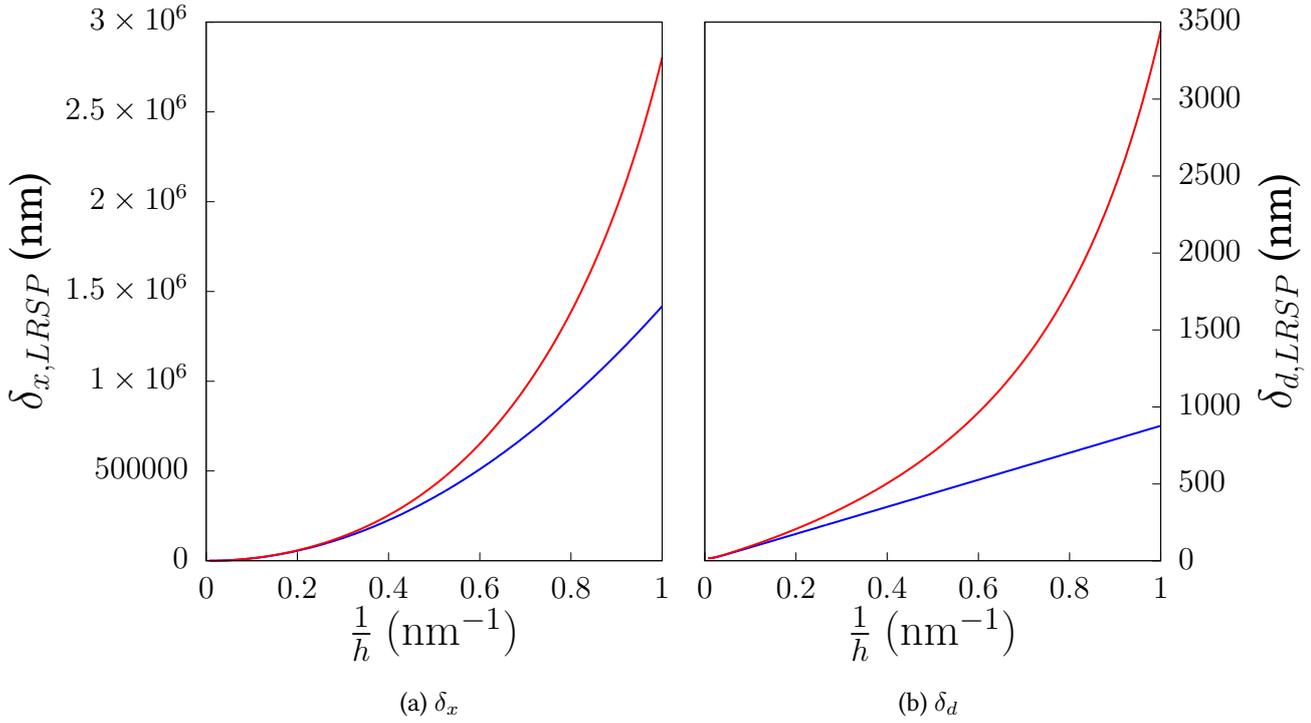


FIGURE 2.17 – Distances caractéristiques du LRSP en fonction de l'épaisseur de métal pour une longueur d'onde $\lambda_0 = 600$ nm. Les courbes bleues sont obtenues en considérant un métal local et les rouges un métal non local. La présentation en $\frac{1}{h}$ facilite grandement la lisibilité.

du plasmon de surface sont de l'ordre de la centaine de nanomètres. La distance de pénétration dans le diélectrique du LRSP peut être jusqu'à 1 ordre de grandeur supérieur. La distance de propagation jusqu'à 4 ordres de grandeur supérieurs. Malgré le peu d'influence que la non-localité peut avoir sur la dispersion du LRSP (figure 2.15), cette dernière augmente énormément les distances caractéristiques. Pour une épaisseur de 150 nm, la non-localité cause une augmentation de la distance de propagation de presque 8 % et presque 100 % pour une épaisseur de 1 nm. Sur la distance de pénétration dans le diélectrique, la non-localité permet une augmentation de presque 300 %. Contrairement au plasmon de surface où cette augmentation se chiffre en dizaines de nanomètres, les distances associées au LRSP sont plus de l'ordre du micromètre voir du centimètre. Bien que la non-localité ne change pratiquement pas la longueur d'onde d'excitation de ce mode, son influence n'est en aucun cas négligeable sur la propagation du mode, particulièrement lorsque l'on considère des épaisseurs de l'ordre du nanomètre.

Bien évidemment ces observations sont valables pour une longueur d'onde particulière et nous allons voir que tout comme le plasmon de surface et le gap-plasmon, l'influence de la non-localité sur le LRSP et SRSP dépend énormément de la longueur d'onde que l'on considère.

2.4.2 Dispersion à épaisseur de métal fixée

Nous allons cette fois ci fixer l'épaisseur du métal et observer les courbes de dispersions. Nous comparerons LRSP et SRSP au plasmon de surface pour faciliter la discussion. La figure 2.18 montre les courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$) du LRSP, du SRSP et du plasmon de surface en fonction de la fréquence pour une épaisseur de

métal de 60 nm. Pour l'épaisseur de métal choisie, ces 3 modes sont très proches les uns des autres. Nous pouvons cependant dire de manière générale (quelle que soit l'épaisseur de métal) que sous la fréquence de *bend back* locale la relation de dispersion du LRSP est systématiquement au dessus de celle du plasmon de surface, elle-même systématiquement située au dessus de la dispersion du SRSP. Dans cette bande fréquentielle la non-localité ne change pas cela et se contente simplement d'abaisser l'indice effectif de chacun de ces 3 modes. On peut aussi remarquer qu'au dessus de la fréquence de *bend back*, les dispersions du SRSP et LRSP sont bien moins proches de celle du plasmon de surface qu'en dessous de cette fréquence. Cet effet est encore plus criant sur la figure 2.19 qui montre la partie imaginaire de l'indice effectif de ces trois modes. C'est un point intéressant d'un point de vue théorique et ce comportement est directement lié aux pertes dans le métal. Si l'on utilise un modèle local et sans pertes on peut montrer [22, 68] que le plasmon de surface est en fait la limite aux grandes épaisseurs du LRSP et du SRSP. Dans le cas sans pertes, LRSP et SRSP possèdent la même asymptote à la fréquence du plasmon de surface (cf figure 1.3), et ceci quelle que soit l'épaisseur de métal considérée. Les pertes détruisent ce phénomène mais la non-localité le rétablit. Au dessus de la fréquence de *bend back* les trois dispersions non locales se rejoignent, faisant en sorte de cacher la dégénérescence du plasmon de surface en SRSP et LRSP. Pour constater un tel phénomène, il faut bien évidemment que la non-localité soit plus forte que les pertes, c'est à dire qu'il faut que la non-localité cause la disparition du *bend back* de la courbe de dispersion. Pour l'épaisseur que l'on a considérée, les trois dispersions possèdent cette caractéristique. Si l'on augmentait l'épaisseur du métal cela serait toujours le cas, cet effet étant dû à l'utilisation du TiO₂ comme diélectrique. Pour des épaisseurs de métal supérieures à la centaine de nanomètres, les trois dispersions seraient même indiscernables les unes des autres en dessous de la fréquence de *bend back* et il ne resterait plus que les fréquences supérieures pour pouvoir discerner les trois.

Cependant si nous diminuons l'épaisseur de métal ce n'est plus le cas. La figure 2.20 montre les trois courbes de dispersion pour une épaisseur de métal de 10 nm. Diminuer l'épaisseur de métal provoque l'augmentation de la séparation entre SRSP/LRSP et plasmon de surface. Le SRSP agit un peu comme le gap-plasmon. Diminuer l'épaisseur de métal pousse la dispersion vers des indices effectifs plus haut, mais ne change pas la fréquence de *bend back*. La non-localité a alors de plus en plus d'impact sur l'indice effectif de ce mode. Le SRSP lui se comporte différemment. Plus l'épaisseur de métal diminue et plus ce dernier est poussé proche de la ligne de lumière, tout en restant systématiquement au dessus de cette dernière (en terme d'indice effectif). Le confinement de ce mode diminue donc avec l'épaisseur. En conséquence l'influence de la non-localité est de moins en moins apparente sur l'indice effectif de ce mode. Cela rejoint directement les observations faites dans la partie précédente (2.4.1). La dispersion du LRSP reste en dessous de la ligne de lumière au moins pour une certaine bande de fréquences puisque diminuer l'épaisseur de métal fait remonter la fréquence de *bend back* du LRSP. De fait, le LRSP se retrouve de nouveau dominé par les pertes et la non-localité ne provoque plus la disparition du *bend back*. Il faut tout de même nuancer cette "domination" des pertes, puisqu'un indice effectif plus bas signifie aussi une propagation plus longue pour ce mode, c'est à dire un impact des pertes plus faible. Enfin, la figure 2.21 montre un zoom sur la partie imaginaire de l'indice effectif tracée sur la figure 2.19. On peut voir que pour chacun des trois modes, il existe un point de croisement entre dispersion locale et non locale. Tout comme le plasmon de surface et le gap-plasmon, la non-localité aura donc tendance à augmenter les distances de propagation au dessus de ce point et à les diminuer en dessous. Par rapport au plasmon de

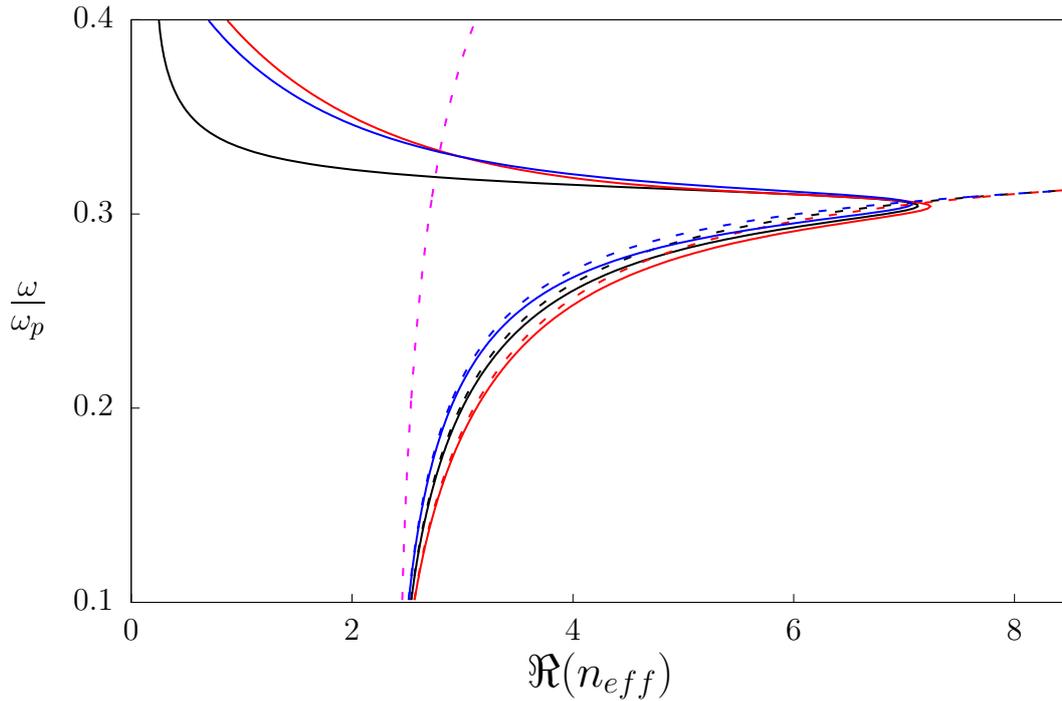


FIGURE 2.18 – Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$ Vs fréquence) du SRSP, du LRSP et du plasmon de surface pour une épaisseur de métal de 60 nm. Les courbes bleues correspondent au LRSP, les noires au plasmon de surface et les rouges au SRSP. Les courbes pleines sont obtenues en considérant un métal local et les pointillées un métal non local. Les pointillés violets représentent la ligne de lumière.

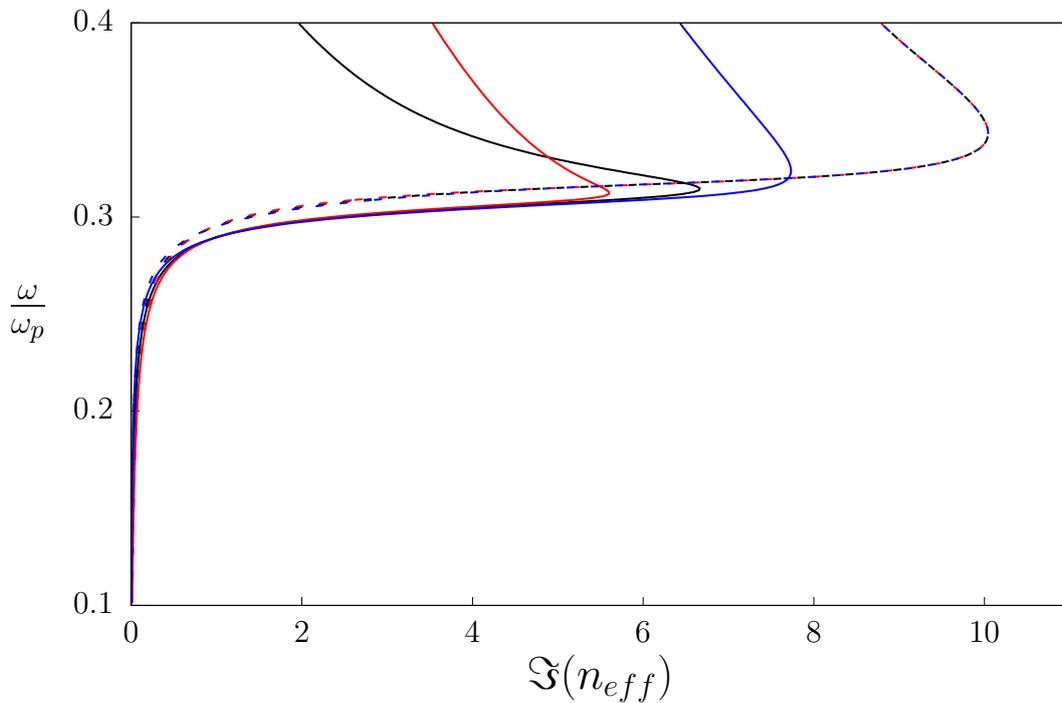


FIGURE 2.19 – $\Im(n_{eff})$ correspondant aux courbes de dispersion tracées sur la figure 2.18.

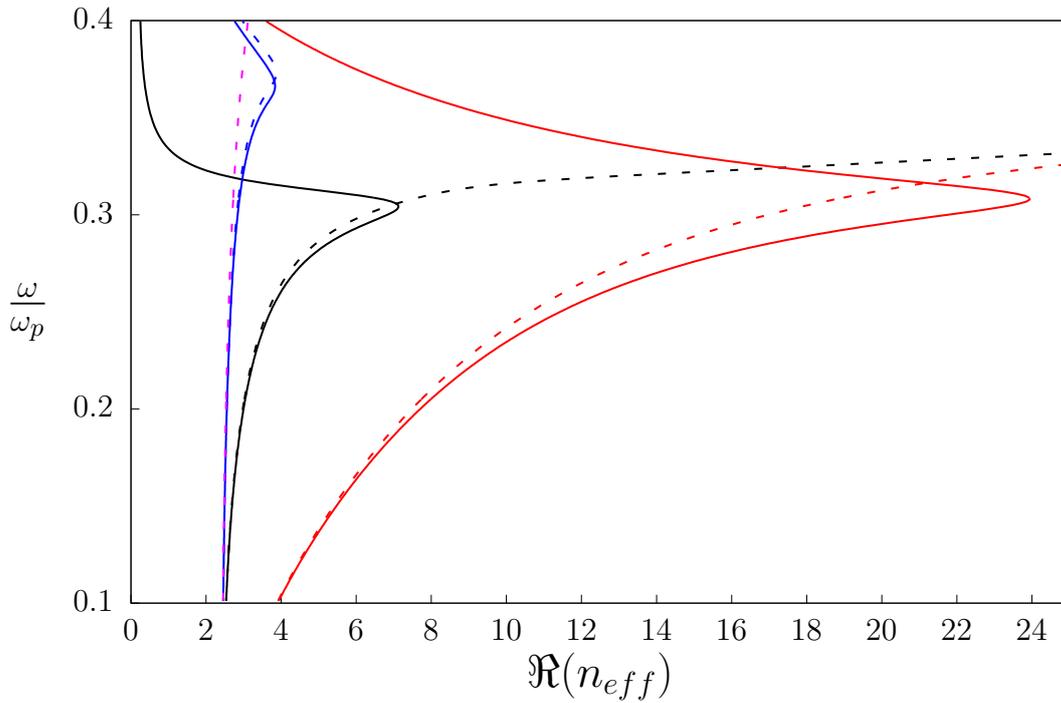


FIGURE 2.20 – Courbes de dispersion ($\Re(n_{eff})$ Vs fréquence) du SRSP, LRSP et plasmon de surface pour une épaisseur de métal de 10 nm. Les courbes bleues correspondent au LRSP, les noires au plasmon de surface et les rouges au SRSP. Les courbes pleines sont obtenues en considérant un métal local et les pointillées un métal non local. Les pointillés violets sont la ligne de lumière.

surface, ce point de croisement est situé à des fréquences plus basses pour le SRSP et plus hautes pour le LRSP. Diminuer l'épaisseur du métal augmentera cet écart mais ne changera pas cette position relativement au plasmon de surface. Dans le paragraphe précédent (2.4.1) nous étions au dessus de ce point, ce qui explique l'augmentation spectaculaire des distances caractéristiques du LRSP. En dessous, nous aurions bien évidemment observé l'effet inverse.

2.5 Formalisme pour l'étude d'un multi-couche

Jusqu'ici nous avons considéré des modes de surface particuliers supportés par une ou deux interfaces. Afin d'obtenir des relations de dispersion nous avons systématiquement fait usage de considérations de symétrie. Nous allons ici mettre en place un formalisme qui nous permettra de nous affranchir de ces dernières. De plus, ce formalisme permet de considérer un nombre arbitraire d'interfaces, et donc de couches dont les épaisseurs et matériaux peuvent être différents. Nous allons utiliser ici le formalisme des matrices de diffusion (matrices S , pour *Scattering*), une alternative à celui des matrices de transfert. Ce formalisme est une manière de lier des ondes planes montantes et descendantes, se propageant dans des couches de matériaux homogènes et isotropes, et se réfléchissant aux interfaces entre ces couches. Cette méthode est en fait le coeur du logiciel MOOSH[73], que nous utiliserons par la suite. Je n'ai pas créé ce formalisme, mais l'ai simplifié pour l'étude de la non-localité. Avant de voir comment cela est possible, il faut voir ce qu'il est dans sa version complète, capable de prendre en compte la non-localité dans les métaux. Nous ne donnerons pas ici tous les détails[74] mais le nécessaire pour pouvoir simplifier ces matrices pour l'étude de la non-localité.

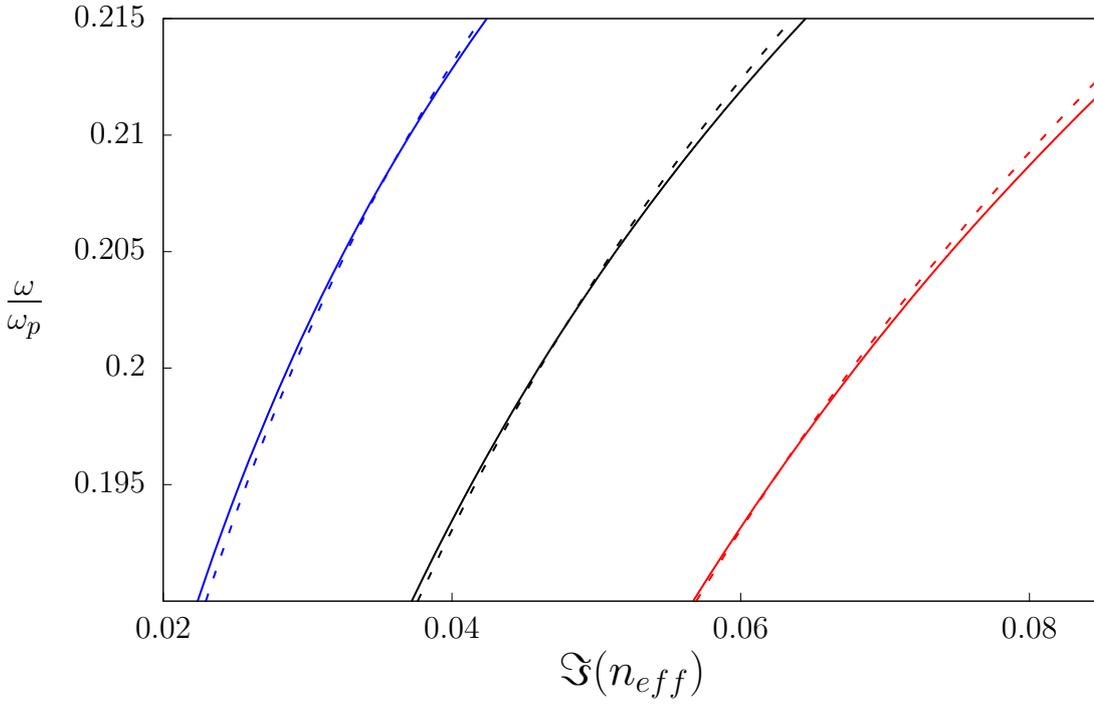


FIGURE 2.21 – Zoom sur les points de croisement entre les parties imaginaires des dispersions locales et non locales tracées sur la figure 2.19.

2.5.1 Forme générale des champs et matrices S

Pour une structure lamellaire capable de supporter des ondes planes, le principe des matrices S est de décrire les amplitudes sortantes de la structure en fonction des amplitudes entrantes. Si A_{sup} et B_{sup} représentent les amplitudes des ondes planes respectivement montantes et descendante au dessus de la structure et A_{inf} , B_{inf} les amplitudes montantes respectivement descendantes en dessous de la structure, on a de manière générale

$$\begin{pmatrix} A_{sup} \\ B_{inf} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} B_{sup} \\ A_{inf} \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

avec S la matrice de diffusion représentant la structure. Cette matrice S peut représenter une structure lamellaire contenant un nombre N d'interfaces pour $N + 1$ couches. La connaissance des amplitudes entrantes et de la matrice S permet d'obtenir les amplitudes sortantes. Pour construire cette matrice nous avons besoin de construire deux types de matrices. Nous allons associer à chaque interface i séparant un milieu i et $i + 1$ une matrice d'interface $S_{i \rightarrow i+1}$ qui représente la diffusion des ondes planes à travers l'interface. Et à chaque couche i nous allons associer une matrice de couche S_i qui représente la propagation des ondes planes dans cette couche. Nous pouvons ensuite cascader les matrices d'interface avec celles de couche pour obtenir la matrice S de toute la structure. Une fois les amplitudes entrantes et sortantes connues, il nous est également possible d'obtenir les amplitudes des ondes planes dans chaque couche considérées.

Les matrices d'interface sont obtenues en considérant la continuité des champs. Les structures qui vont nous intéresser sont des empilements de couches diélectriques et métalliques. En reprenant le formalisme de la section 2.1.3 et en considérant un système d'axe similaire à celui de la figure 2.14 nous allons construire ces matrices. Pour chaque interface i située en z_i , nous allons fixer le 0 des z en z_i . Nous allons

considérer 2 types d'interfaces i possibles. Soit le milieu i est un diélectrique et le milieu $i + 1$ un métal, soit le milieu i est un métal et le milieu $i + 1$ un diélectrique. Dans les deux cas, les équations nécessaires pour la construction de ces matrices sont identiques. La continuité des champs nous donne pour les amplitudes locales A_d, B_d, A_m, B_m , et non locales A_l et B_l

$$A_d + B_d = A_m + B_m, \quad (2.52)$$

$$i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} (A_d - B_d) = i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} (A_m - B_m) + A_l + B_l, \quad (2.53)$$

$$A_l - B_l = -i\Omega (A_m + B_m) = -i\Omega (A_m + B_m). \quad (2.54)$$

Ici, on peut remarquer que nos matrices seront de taille 3×3 et non pas 2×2 à cause de la présence de l'onde longitudinale. Commençons par chercher la matrice $S_{d \rightarrow m}$ qui lie les amplitudes de la manière suivante

$$\begin{pmatrix} A_d \\ B_m \\ B_l \end{pmatrix} = S_{d \rightarrow m} \begin{pmatrix} B_d \\ A_m \\ A_l \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

Pour ce faire nous allons chercher à obtenir successivement chacune des amplitudes à gauche dans l'équation (2.55) en fonction de celles à droite. L'astuce de calcul consiste donc à éliminer les autres. Pour obtenir A_d , nous multiplions l'équation (2.52) par $i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m}$ et additionnons le résultat à l'équation (2.53) pour obtenir

$$i \left(\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \right) A_d + \left(\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \right) B_d = 2i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} A_m + A_l + B_l, \quad (2.56)$$

et reformulons l'équation (2.54) pour la mettre sous la forme

$$B_l = i\Omega (A_d + B_d) + A_l. \quad (2.57)$$

En injectant cette dernière dans l'équation précédente et en réorganisant un petit peu le résultat nous obtenons A_d en fonction de B_d, A_m, A_l

$$A_d = \frac{1}{\left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega \right)} \left[\left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} - \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega \right) B_d + 2 \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} A_m - 2i A_l \right]. \quad (2.58)$$

Pour obtenir B_m nous multiplions l'équation (2.52) par $i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d}$ et retranchons au résultat l'équation (2.53) afin d'obtenir une équation similaire à celle sur A_d . En reformulant cette fois ci l'équation (2.54) sous la forme

$$B_l = i\Omega (A_m + B_m) + A_l, \quad (2.59)$$

nous arrivons a

$$B_m = \frac{1}{\left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega \right)} \left[2 \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} B_d + \left(\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \Omega \right) A_m - 2i A_l \right]. \quad (2.60)$$

Enfin B_l est obtenu en reformulant l'équation (2.54) comme

$$i\Omega A_d = -A_l + B_l - i\Omega B_d, \quad (2.61)$$

et en utilisant l'équation (2.58) multipliée par Ω pour finalement obtenir

$$B_l = \frac{1}{\left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega\right)} \left[2i\Omega \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} B_d + 2i\Omega \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} A_m + \left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega\right) A_l \right]. \quad (2.62)$$

Finalement nous avons pour notre première matrice d'interface

$$S_{d \rightarrow m} = \frac{1}{\left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega\right)} \begin{pmatrix} \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} - \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega & 2\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} & -2i \\ 2\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} & \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \Omega & -2i \\ 2i\Omega \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} & 2i\Omega \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} & \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Si maintenant nous considérons l'autre type d'interface, à savoir celle décrite par la matrice $S_{m \rightarrow d}$ telle que

$$\begin{pmatrix} A_m \\ A_l \\ B_d \end{pmatrix} = S_{m \rightarrow d} \begin{pmatrix} B_m \\ B_l \\ A_d \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

une procédure très similaire permet d'obtenir

$$S_{m \rightarrow d} = \frac{1}{\left(\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega\right)} \begin{pmatrix} \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \Omega & 2i & 2\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \\ -2i\Omega \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} & \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega & -2i\Omega \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} \\ 2\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} & 2i & \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \Omega \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Il nous reste maintenant à obtenir les matrices de propagation. Dans une couche i d'épaisseur h_i nous pouvons définir des amplitudes juste en dessous de l'interface i , A_i^+ et B_i^+ , ainsi que des amplitudes juste au dessus de l'interface $i+1$, A_i^- et B_i^- . Dans le cas où la couche que l'on considère est composée d'un diélectrique d'épaisseur h_d nous pouvons lier ces amplitudes entre elles de la manière suivante

$$A_d^+ = A_d^- e^{-\kappa_d h_d}, \quad (2.66)$$

$$B_d^- = B_d^+ e^{-\kappa_d h_d}, \quad (2.67)$$

où l'on a considéré la propagation des ondes planes de manière à être cohérent avec la définition de nos matrices d'interface. Si nous considérons une couche de métal d'épaisseur h_m , la logique est identique et il suffit simplement de considérer les amplitudes non locales en plus des amplitudes locales. Nous avons donc

$$A_m^+ = A_m^- e^{-\kappa_m h_m}, \quad (2.68)$$

$$A_l^+ = A_l^- e^{-\kappa_l h_m}, \quad (2.69)$$

$$B_m^- = B_m^+ e^{-\kappa_m h_m}, \quad (2.70)$$

$$B_l^- = B_l^+ e^{-\kappa_l h_m}. \quad (2.71)$$

Finalement, il ne nous reste plus qu'à définir les matrices S_d et S_m telles que

$$\begin{pmatrix} A_d^+ \\ B_d^- \end{pmatrix} = S_d \begin{pmatrix} B_d^- \\ A_d^+ \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

et

$$\begin{pmatrix} A_m^+ \\ A_l^+ \\ B_m^- \\ B_l^- \end{pmatrix} = S_m \begin{pmatrix} B_m^+ \\ B_l^+ \\ A_m^- \\ A_l^- \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

pour obtenir les matrices de propagation telles que

$$S_d = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\kappa_d h_d} \\ e^{-\kappa_d h_d} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.74)$$

$$S_m = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e^{-\kappa_m h_m} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\kappa_l h_m} \\ e^{-\kappa_m h_m} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\kappa_l h_m} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$

Nous utiliserons ce formalisme dans le chapitre 3 pour étudier la non-localité sur des structures ne disposant pas forcément de symétrie, et ceci de deux manières différentes.

2.5.2 Coefficients de réflexion et modes guidés

La premier intérêt de ce formalisme est de pouvoir obtenir les coefficients de réflexion (et de transmission[75]) d'une structure lamellaire. En effet on peut remarquer que la définition même des matrices S contient ces coefficients. Dans le cas où les milieux supérieur et inférieur sont des diélectriques (c'est à dire des milieux locaux), la méthode des matrices S nous permet d'obtenir une matrice 2×2 telle que

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.76)$$

En reprenant l'équation (2.51) nous avons donc

$$A_{sup} = S_{11}B_{sup} + S_{21}A_{inf}. \quad (2.77)$$

Par définition, le coefficient de réflexion en amplitude de la structure est le quotient de l'amplitude montante sur l'amplitude descendante

$$r = \frac{A_{sup}}{B_{sup}}. \quad (2.78)$$

Si l'on considère une structure éclairée uniquement par le dessus, alors $A_{inf} = 0$ et donc

$$r = S_{11}. \quad (2.79)$$

A partir de là, si le milieu supérieur est sans pertes, le coefficient en énergie peut être simplement obtenu en prenant le module au carré de r . Par définition R le coefficient en énergie de la structure est le quotient du flux d'énergie montant sur le flux

d'énergie descendant. Ces flux sont définis à travers les moyennes temporelles du vecteur de Poynting $\langle S \rangle$. Plus précisément, on utilise la projection de $\langle S \rangle$ le long de l'axe perpendiculaire à la structure lamellaire, l'axe \hat{z} . On a

$$\langle S \rangle_z = \frac{1}{2} \Re(E_x \cdot H_y^*), \quad (2.80)$$

$$= \frac{1}{2} \Re \left(\frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon} \partial_z H_y \cdot H_y^* \right), \quad (2.81)$$

$$= \frac{1}{2} \Re \left(\frac{i\kappa}{\omega \epsilon_0 \epsilon} (A_{sup} - B_{sup})(A_{sup}^* + B_{sup}^*) \right), \quad (2.82)$$

ce qui pour un milieu sans pertes (dans lequel la quantité $\frac{i\kappa}{\epsilon}$ est réelle) peut s'écrire

$$\langle S \rangle_z = \frac{i\kappa}{2\omega \epsilon \epsilon_0} (|A|^2 - |B|^2). \quad (2.83)$$

Nous pouvons alors définir un flux d'énergie montant

$$\langle S \rangle_z^{up} = \frac{i\kappa |A|^2}{2\omega \epsilon \epsilon_0}, \quad (2.84)$$

et un flux d'énergie descendant

$$\langle S \rangle_z^{down} = \frac{i\kappa |B|^2}{2\omega \epsilon \epsilon_0}. \quad (2.85)$$

Ainsi, en prenant le rapport de ces deux dernières quantités nous avons

$$\frac{\langle S \rangle_z^{up}}{\langle S \rangle_z^{down}} = \frac{|A|^2}{|B|^2}, \quad (2.86)$$

c'est à dire pour le coefficient de réflexion en énergie

$$R = |r|^2, \quad (2.87)$$

$$= |S_{11}|^2. \quad (2.88)$$

Le deuxième intérêt des matrices S est que ce formalisme permet d'accéder simplement à la relation de dispersion de n'importe quel mode guidé dans la structure lamellaire. Par définition un mode guidé est une solution des équations de Maxwell sans champ incident puisqu'elle ne présente que des champs sortant évanescents. Reprenons l'équation (2.78) et considérons $B_{sup} = 0$. Cela nous donne une relation de dispersion générale qu'on peut écrire

$$\frac{1}{r} = 0. \quad (2.89)$$

Le formalisme des matrices S peut ainsi nous donner accès à la relation de dispersion de n'importe quel mode supporté par la structure. Il suffit de chercher dans le plan complexe les couples k_x, ω qui satisfont à l'équation (2.89). La seule limitation est que

notre structure doit commencer et terminer par des milieux locaux. Si ce n'est pas le cas, la matrice S n'est pas de taille 2×2 et les coefficients de réflexion ne sont pas bien définis. Nous allons cependant voir dans la suite comment outrepasser cette dernière limite et ainsi obtenir des relations de dispersion sans aucune limitation sur la nature des couches de début et de fin de la structure lamellaire. La technique employée n'est pas parfaite et sa validité est limitée aux structures lamellaires comprenant des couches métalliques d'épaisseur supérieure à quelque nanomètres pour des longueurs d'onde incidentes λ_0 dans le visible.

2.6 Simplification : un modèle de cavité à un mode

Pour comprendre comment cela est possible, nous allons commencer par revisiter la relation de dispersion des modes guidés supportés par la structure I.M.I. en ne considérant aucune symétrie. Notre objectif est de trouver analytiquement le coefficient de réflexion de cette structure, puis nous montrerons comment le simplifier. Nous généraliserons cette simplification en utilisant les matrices S et montrerons qu'elle est même équivalente à une autre que l'on peut trouver dans la littérature[76].

2.6.1 Formule de Fabry-Perot pour le I.M.I.

Nous reprenons donc la structure I.M.I. montrée sur la figure 2.14 mais avec cette fois ci un diélectrique au dessus du métal décrit par ϵ_1 et en dessous par ϵ_2 . Le métal est toujours décrit par ϵ_m . Nous allons considérer que cette structure est éclairée par le dessus par une onde plane, qui sera réfléchiée et transmise à la première interface. Nous aurons donc des ondes planes montantes et descendante à la fois dans le métal et dans le diélectrique supérieur. En revanche dans le diélectrique inférieur nous n'avons qu'une onde transmise c'est à dire une onde plane uniquement descendante. Cette fois ci nous plaçons l'origine des axes le long de l'interface entre le diélectrique supérieur et le métal. La seconde interface se situe donc en $z = -h$, avec h l'épaisseur de la couche métallique. La continuité des champs pour l'interface haute en $z = 0$ s'écrit

$$A_1 + B_1 = A_m + B_m, \quad (2.90)$$

$$i \frac{\kappa_1}{\epsilon_1} (A_1 - B_1) = i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} (A_m - B_m) + A_l + B_l, \quad (2.91)$$

$$A_l - B_l = -i\Omega(A_m + B_m), \quad (2.92)$$

et la continuité à l'interface basse en $z = -h$ s'écrit

$$A_m e^{\kappa_m h} + B_m e^{-\kappa_m h} = B_2 e^{-\kappa_2 h}, \quad (2.93)$$

$$i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} (A_m e^{\kappa_m h} - B_m e^{-\kappa_m h}) + A_l e^{\kappa_l h} + B_l e^{-\kappa_l h} = -i \frac{\kappa_2}{\epsilon_2} B_2 e^{\kappa_2 h}, \quad (2.94)$$

$$A_l e^{\kappa_l h} - B_l e^{-\kappa_l h} = -i\Omega(A_m e^{\kappa_m h} + B_m e^{-\kappa_m h}). \quad (2.95)$$

À partir d'ici, notre but va être de réorganiser ces deux systèmes d'équations pour obtenir un coefficient de réflexion non local tel que $r_{nl} = \frac{A_1}{B_1}$. Nous allons commencer par écrire les différentes amplitudes les unes par rapport aux autres en considérant que ces dernières s'alimentent mutuellement à travers des coefficients de réflexion et de transmission. Cette méthode est inspirée de [63] qui propose un modèle de cavité à 2 modes pour prendre en compte la non-localité dans un nanoréseau - lui même inspiré de [77] qui étudie les microcavités dans le cristaux photoniques. Le principe de

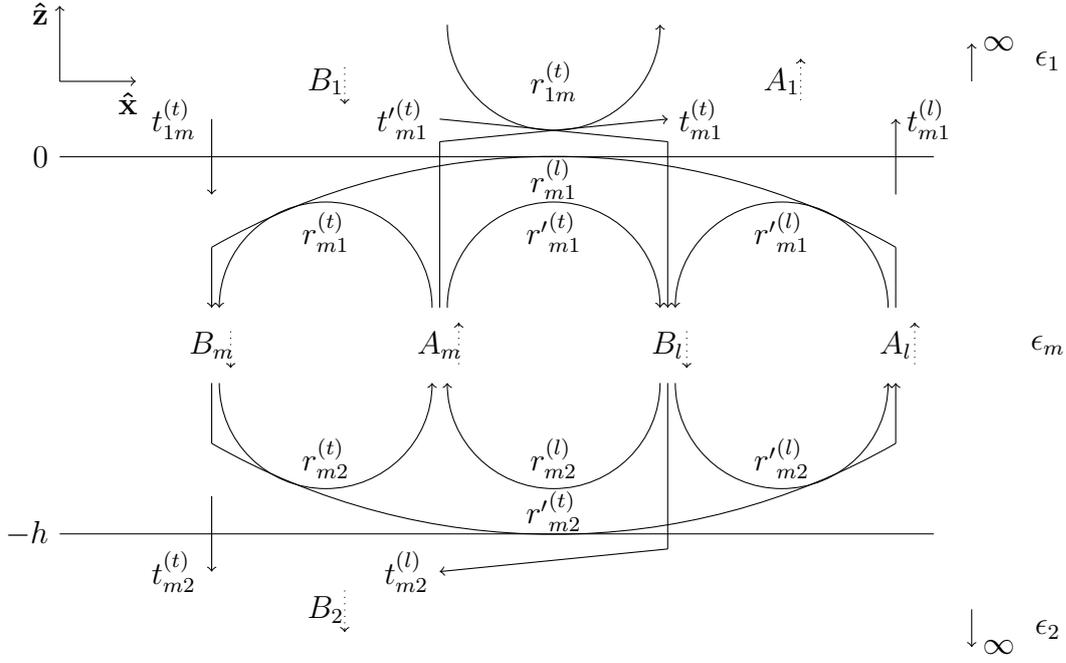


FIGURE 2.22 – Représentation schématique du modèle à deux modes pour une structure de type I.M.I. Les flèches pleines indiquent les coefficients de réflexion et de transmission effectifs. Les flèches pointillées indiquent le sens d'évanescence des champs.

la méthode est résumé sur la figure 2.22 qui représente l'interconnexion de chacune des amplitudes.

Ce schéma correspond à la réorganisation suivante des deux systèmes d'équations précédents

$$A_1 = r_{1m}^{(t)} B_1 + t_{m1}^{(t)} A_m + t_{m1}^{(l)} A_l, \quad (2.96)$$

$$B_m = t_{1m}^{(t)} B_1 + r_{m1}^{(t)} A_m + r_{m1}^{(l)} A_l, \quad (2.97)$$

$$B_l = t'_{1m}^{(t)} B_1 + r'_{m1}^{(t)} A_m + r'_{m1}^{(l)} A_l, \quad (2.98)$$

$$A_m = r_{m2}^{(t)} B_m e^{-2\kappa_m h} + r_{m2}^{(l)} B_l e^{-(\kappa_m + \kappa_l)h}, \quad (2.99)$$

$$A_l = r'_{m2}^{(t)} B_m e^{-(\kappa_m + \kappa_l)h} + r'_{m2}^{(l)} B_l e^{-2\kappa_l h}, \quad (2.100)$$

$$(2.101)$$

avec les différents coefficients donnés par

$$r_{1m}^{(t)} = \frac{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} - \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad t_{m1}^{(t)} = \frac{2\frac{\kappa_m}{\epsilon_m}}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad t_{m1}^{(l)} = \frac{-2i}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega},$$

$$t_{1m}^{(t)} = \frac{2\frac{\kappa_1}{\epsilon_1}}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad r_{m1}^{(t)} = \frac{\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \Omega}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad r_{m1}^{(l)} = \frac{-2i}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega},$$

$$t'_{1m}{}^{(t)} = \frac{2\Omega\frac{\kappa_1}{\epsilon_1}}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad r'_{m1}{}^{(t)} = \frac{2\Omega\frac{\kappa_m}{\epsilon_m}}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad r'_{m1}{}^{(l)} = \frac{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega}{\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega},$$

$$r_{m2}^{(t)} = \frac{\frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \frac{\kappa_2}{\epsilon_2} + \Omega}{\frac{\kappa_2}{\epsilon_2} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad r_{m2}^{(l)} = \frac{2i}{\frac{\kappa_2}{\epsilon_2} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega},$$

$$r'_{m2}{}^{(t)} = \frac{-2\Omega}{\frac{\kappa_2}{\epsilon_2} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}, \quad r'_{m2}{}^{(l)} = \frac{\frac{\kappa_2}{\epsilon_2} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} + \Omega}{\frac{\kappa_2}{\epsilon_2} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} - \Omega}.$$

où les indices (t) , respectivement (l) et prime ($'$) indiquent un échange d'onde transverse à onde transverse, respectivement d'onde longitudinale à onde longitudinale et d'onde transverse ou longitudinale à onde longitudinale. On peut remarquer que ces derniers correspondent bien évidemment aux différentes composantes des matrices d'interface que l'on a définies dans la partie précédente. A partir d'ici notre objectif est d'éliminer toutes les amplitudes. Nous commençons par remplacer A_l pour obtenir

$$A_1 = r_{1m}^{(t)}B_1 + t_{m1}^{(t)}A_m + t_{m1}^{(l)}\left(r'_{m2}{}^{(t)}B_m e^{-(\kappa_m+\kappa_l)h} + r'_{m2}{}^{(l)}B_l e^{-2\kappa_l h}\right), \quad (2.102)$$

$$B_m = t_{1m}^{(t)}B_1 + r_{m1}^{(t)}A_m + r_{m1}^{(l)}\left(r'_{m2}{}^{(t)}B_m e^{-(\kappa_m+\kappa_l)h} + r'_{m2}{}^{(l)}B_l e^{-2\kappa_l h}\right), \quad (2.103)$$

$$B_l = t'_{1m}{}^{(t)}B_1 + r'_{m1}{}^{(t)}A_m + r'_{m1}{}^{(l)}\left(r'_{m2}{}^{(t)}B_m e^{-(\kappa_m+\kappa_l)h} + r'_{m2}{}^{(l)}B_l e^{-2\kappa_l h}\right), \quad (2.104)$$

$$A_m = r_{m2}^{(t)}B_m e^{-2\kappa_m h} + r_{m2}^{(l)}B_l e^{-(\kappa_m+\kappa_l)h}. \quad (2.105)$$

Ce qui nous permet d'obtenir une nouvelle expression de B_l

$$B_l = \overline{t'_{1m}{}^{(t)}} + \gamma B_m + \overline{r'_{m1}{}^{(t)}}, \quad (2.106)$$

avec

$$\overline{t'_{1m}{}^{(t)}} = \frac{t'_{1m}{}^{(t)}}{1 - r'_{m1}{}^{(l)}r'_{m2}{}^{(l)}e^{-2\kappa_l h}}, \quad (2.107)$$

$$\gamma = \frac{r'_{m1}{}^{(l)}r'_{m2}{}^{(t)}e^{-(\kappa_l+\kappa_m)h}}{1 - r'_{m1}{}^{(l)}r'_{m2}{}^{(l)}e^{-2\kappa_l h}}, \quad (2.108)$$

$$\overline{r'_{m1}{}^{(t)}} = \frac{r'_{m1}{}^{(t)}}{1 - r'_{m1}{}^{(l)}r'_{m2}{}^{(l)}e^{-2\kappa_l h}}. \quad (2.109)$$

On remplace ensuite B_l dans les équations précédentes, pour avoir

$$A_1 = \overline{r_{1m}^{(t)}} B_1 + \overline{t_{m1}^{(t)}} A_m + \Gamma B_m, \quad (2.110)$$

$$B_m = \overline{t_{1m}^{(t)}} B_1 + \overline{r_{m1}^{(t)}} A_m + \overline{r_{m1}^{(l)} r_{m2}^{\prime(t)}} e^{-(\kappa_m + \kappa_l)h} B_m + \overline{r_{m2}^{\prime(l)} r_{m1}^{(l)}} \left(\overline{t_{1m}^{(t)}} + \gamma B_m + \overline{r_{m1}^{(t)}} \right) e^{-2\kappa_l h}, \quad (2.111)$$

$$A_m = \overline{r_{m2}^{(t)}} B_m e^{-2\kappa_m h} + \overline{r_{m2}^{(l)}} \left(\overline{t_{1m}^{(t)}} + \gamma B_m + \overline{r_{m1}^{(t)}} \right) e^{-(\kappa_m + \kappa_l)h}, \quad (2.112)$$

avec

$$\overline{r_{1m}^{(t)}} = \overline{r_{1m}^{(t)}} + \overline{t_{1m}^{\prime(t)} r_{m2}^{\prime(l)} t_{1m}^{\prime(t)}} e^{-2\kappa_l h}, \quad (2.113)$$

$$\overline{t_{m1}^{(t)}} = \overline{t_{m1}^{(t)}} + \overline{t_{m1}^{(l)} r_{m2}^{\prime(l)} r_{m1}^{\prime(t)}} e^{-2\kappa_l h}, \quad (2.114)$$

$$\Gamma = \overline{t_{m1}^{(l)} r_{m2}^{\prime(t)}} e^{-(\kappa_m + \kappa_l)h} + \overline{t_{m1}^{(l)} r_{m2}^{\prime(l)}} \gamma e^{-2\kappa_l h}. \quad (2.115)$$

Cela permet de mettre le système sous la forme

$$A_1 = \overline{r_{1m}^{(t)}} B_1 + \overline{t_{m1}^{(t)}} A_m + \Gamma B_m, \quad (2.116)$$

$$B_m = \overline{t_{1m}^{(t)}} B_1 + \overline{r_{m1}^{(t)}} A_m, \quad (2.117)$$

$$A_m = \overline{t_{m1}^{\prime(t)}} B_1 + \overline{r_{m2}^{(t)}} B_m e^{-2\kappa_l h}, \quad (2.118)$$

avec

$$\overline{\overline{t_{1m}^{(t)}}} = \overline{t_{1m}^{(t)}} + \frac{\overline{t_{1m}^{\prime(t)} r_{m2}^{\prime(l)} r_{m1}^{(l)}} e^{-2\kappa_l h}}{1 - \overline{r_{m2}^{\prime(t)} r_{m1}^{(l)}} e^{-(\kappa_l + \kappa_m)h} - \gamma \overline{r_{m2}^{\prime(l)} r_{m1}^{(l)}} e^{-2\kappa_l h}}, \quad (2.119)$$

$$\overline{\overline{r_{m1}^{(t)}}} = \frac{\overline{r_{m1}^{\prime(t)} r_{m2}^{\prime(l)} r_{m1}^{(l)}} e^{-2\kappa_l h} + \overline{r_{m1}^{(t)}}}{1 - \overline{r_{m2}^{\prime(t)} r_{m1}^{(l)}} e^{-(\kappa_l + \kappa_m)h} - \gamma \overline{r_{m2}^{\prime(l)} r_{m1}^{(l)}} e^{-2\kappa_l h}}, \quad (2.120)$$

$$\overline{\overline{t_{m1}^{\prime(t)}}} = \frac{\overline{t_{1m}^{\prime(t)} r_{m2}^{(l)}} e^{-(\kappa_l + \kappa_m)h}}{1 - \overline{r_{m1}^{\prime(t)} r_{m2}^{(l)}} e^{-(\kappa_l + \kappa_m)h}}, \quad (2.121)$$

$$\overline{\overline{r_{m2}^{(t)}}} = \frac{\overline{r_{m2}^{(t)}} + \gamma \overline{r_{m2}^{(l)}} e^{-(\kappa_l - \kappa_m)h}}{1 - \overline{r_{m1}^{\prime(t)} r_{m2}^{(l)}} e^{-(\kappa_l + \kappa_m)h}}, \quad (2.122)$$

pour ensuite réorganiser le système encore une fois en remplaçant B_m par son expression

$$A_1 = r_0 B_1 + t_0 A_m, \quad (2.123)$$

$$B_m = \overline{\overline{t_{1m}^{(t)}}} B_1 + \overline{\overline{r_{m1}^{(t)}}} A_m, \quad (2.124)$$

$$A_m = \overline{\overline{t_{m1}^{\prime(t)}}} B_1 + \overline{\overline{r_{m2}^{(t)}}} \left(\overline{\overline{t_{1m}^{(t)}}} B_1 + \overline{\overline{r_{m1}^{(t)}}} A_m \right) e^{-2\kappa_l h}, \quad (2.125)$$

où les nouveaux coefficients effectifs introduits sont

$$r_0 = \overline{r_{m1}^{(t)}} + \Gamma \overline{t_{1m}^{(t)}}, \quad (2.126)$$

$$t_0 = \overline{t_{m1}^{(t)}} + \Gamma \overline{r_{m1}^{(t)}}. \quad (2.127)$$

Puis, remplacer A_m dans l'expression de B_m permet d'avoir

$$B_m = \frac{\overline{t_{1m}^{(t)}} + \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{t_{m1}^{(t)}}}{1 - \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{r_{m2}^{(t)}} e^{-2\kappa_l h}}, \quad (2.128)$$

ce qui permet d'obtenir A_1 en fonction de B_1

$$A_1 = \left(r_0 + t_0 \overline{t_{m1}^{(t)}} \right) 1 + \frac{\overline{r_{m2}^{(t)}} t_0 \left(\overline{t_{1m}^{(t)}} + \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{t_{m1}^{(t)}} \right)}{1 - \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{r_{m2}^{(t)}} e^{-2\kappa_m h}} B_1 e^{-2\kappa_m h}. \quad (2.129)$$

Comme par définition le coefficient global de la structure est $r_{nl} = \frac{A_1}{B_1}$, en posant

$$r_{eff} = r_0 + t_0 \overline{t_{m1}^{(t)}}, \quad (2.130)$$

$$t_{eff} = t_0 \left(\overline{t_{1m}^{(t)}} + \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{t_{m1}^{(t)}} \right), \quad (2.131)$$

on arrive finalement à une formule de type Perot-Fabry généralisée pour le coefficient de réflexion

$$r_{nl} = r_{eff} + \frac{\overline{r_{m2}^{(t)}} t_{eff} e^{-2\kappa_m h}}{1 - \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{r_{m2}^{(t)}} e^{-2\kappa_m h}}, \quad (2.132)$$

où les différents coefficients sont des coefficients effectifs qui tiennent compte des conditions aux limites particulières et de l'existence d'un deuxième mode (l'onde longitudinale). En plus d'une expression analytique pour le coefficient de réflexion en amplitude, l'équation (2.89) nous permet d'écrire la relation de dispersion des modes supportés par le I.M.I.

$$1 - \overline{r_{m1}^{(t)}} \overline{r_{m2}^{(t)}} e^{-2\kappa_m h} = 0. \quad (2.133)$$

Cette dernière est valable quel que soient les diélectriques. Si l'on considère $\epsilon_1 = \epsilon_2$ alors on peut développer (2.133) comme un produit des équations (2.49) et (2.50). On peut se demander pourquoi avoir fait tous ces efforts alors que nous avons à disposition le formalisme des matrices S.

2.6.2 Simplification de la formule de Fabry-Perot

Nous avons déjà évoqué dans la partie 2.1.4 que la distance de pénétration dans le métal de l'onde longitudinale est très inférieure à la distance de pénétration de l'onde transverse. Ceci est toujours le cas même lorsque nous utilisons du TiO_2 comme diélectrique. Ces distances caractéristiques sont tracées en fonction de l'épaisseur métallique sur la figure 2.23 pour une longueur d'onde λ_0 de 600 nm c'est à dire $\frac{\omega}{\omega_p} \simeq 0.25$. Comme on l'a déjà remarqué la non localité a très peu d'influence sur δ_m . La chose intéressante à noter ici est le fait que δ_{nl} ne varie pratiquement pas en fonction de l'épaisseur. La projection du vecteur d'onde longitudinale κ_l à beau être proportionnelle à k_x^2 cette dernière est surtout une fonction des paramètres matériau du métal. La valeur de k_x ne joue en fait que pour des épaisseurs de l'ordre du nanomètre et uniquement sur le SRSP qui présente un k_x augmentant très fortement avec la diminution en épaisseur. Concernant la pénétration dans le métal, selon que l'on considère un SRSP ou un LRSP, δ_m peut varier du nanomètre à la dizaine de nanomètres. Sur la figure 2.24 nous avons tracé ces distances en fonction de la fréquence pour une épaisseur de 10 nm et de 1 nm. Dans la gamme du visible, quel que soit le mode que l'on considère, il existe une différence d'au moins un ordre de grandeur entre δ_{nl} et δ_m pour $h = 10$. Pour une épaisseur de $h = 1$ nm ceci est toujours vrai pour le LRSP mais l'écart se réduit considérablement pour le SRSP bien que δ_m reste supérieur à δ_{nl} sur toute la gamme de fréquence montrée.

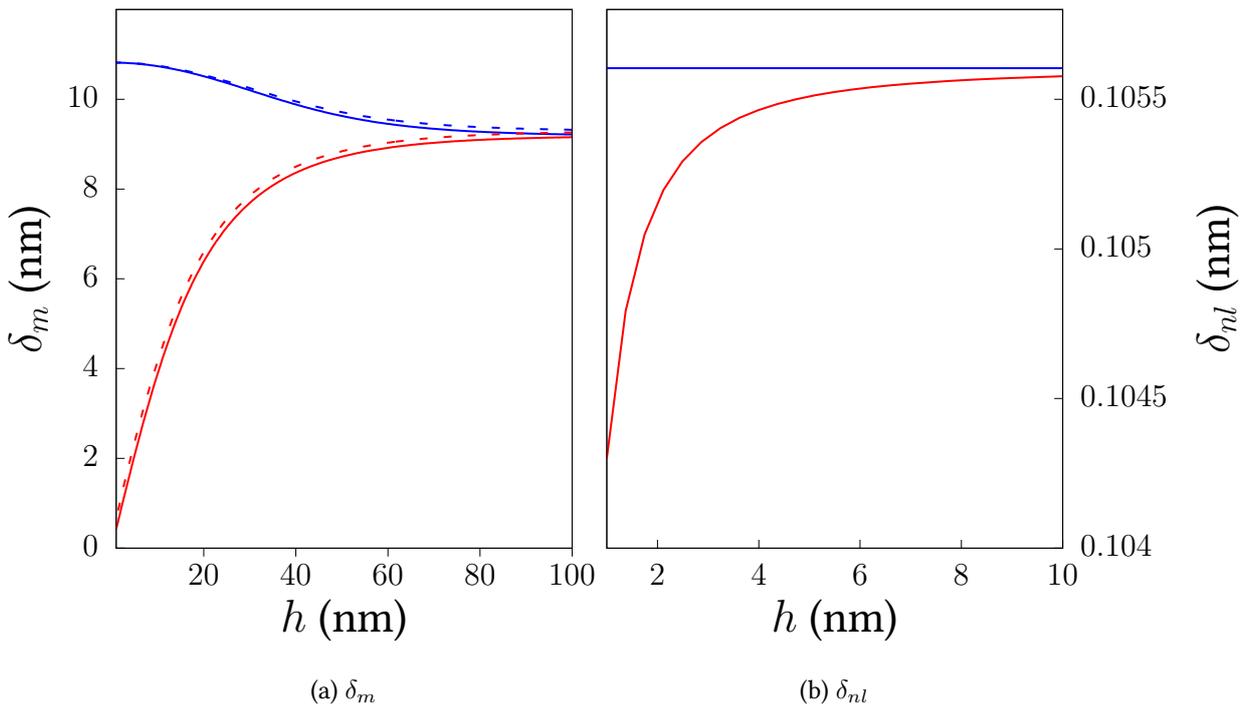


FIGURE 2.23 – Distances de pénétration dans le métal de l'onde transverse δ_m (a) et de l'onde longitudinale δ_{nl} (b) en fonction de l'épaisseur du métal pour une structure I.M.I symétrique d'argent et de TiO_2 et une longueur d'onde λ_0 de 600nm. Les courbes rouges correspondent au SRSP et les bleues au LRSP. Les courbes pleines sont obtenues en considérant un métal local et les pointillées un métal non local.

Cela suggère que pour des épaisseurs de métal supérieures à quelques nanomètres, il devrait être possible de négliger la pénétration de l'onde longitudinale devant celle de l'onde transverse, ce que nous allons faire. On peut en fait reprendre les équations

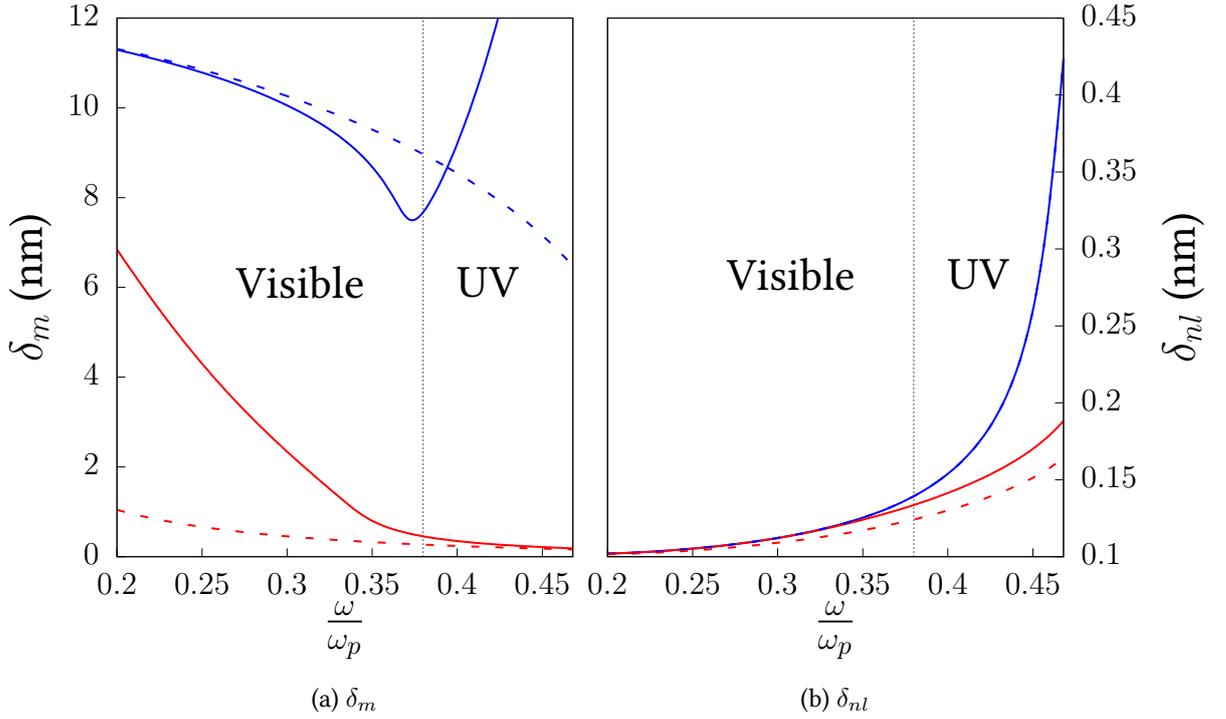


FIGURE 2.24 – Distances de pénétration dans le métal de l'onde transverse δ_m (a) et de l'onde longitudinale δ_{nl} (b) en fonction de la fréquence normalisée pour un I.M.I. symétrique de TiO_2 et d'argent d'épaisseur $h = 10$ nm (courbes pleines) et $h = 1$ nm (courbes pointillées). Les courbes rouges correspondent au SRSP et les bleues au LRSP. Chacune est obtenues en considérant un métal non local. Pour le LRSP δ_{nl} est identique quel que soit l'épaisseur alors que δ_m varie à cause de l'augmentation de la fréquence de *bend back* avec la diminution en épaisseur.

(2.96) à (2.100) en considérant la pénétration de l'onde longitudinale comme nulle devant l'épaisseur de métal h , c'est à dire en prenant $e^{-\kappa_l h} \rightarrow 0$. Comme on néglige en fait l'un des deux modes présent dans le métal, nous appelons cette simplification l' "approximation à un mode" (ou *one mode approximation*) abrégée 1MA. En reprenant les équations précédentes nous avons pour les différents coefficients effectifs

$$\overline{\overline{r_{m1}^{(t)}}} \rightarrow r_{m1}^{(t)}, \quad (2.134)$$

$$\overline{r_{m2}^{(t)}} \rightarrow r_{m2}^{(t)}, \quad (2.135)$$

$$r_{eff} \rightarrow r_{1m}^{(t)}, \quad (2.136)$$

$$t_{eff} \rightarrow t_{m1}^{(t)} t_{1m}^{(t)}. \quad (2.137)$$

Ceci permet alors de reprendre le coefficient de réflexion de la structure I.M.I. comme

$$r_{nl} \rightarrow r_{1m}^{(t)} + \frac{r_{m2}^{(t)} t_{m1}^{(t)} t_{1m}^{(t)} e^{-2\kappa_m h}}{1 - r_{m1}^{(t)} r_{m2}^{(t)} e^{-2\kappa_m h}}. \quad (2.138)$$

De la même manière la relation de dispersion générale (2.133) devient

$$1 - r_{m1}^{(t)} r_{m2}^{(t)} e^{-2\kappa_m h} = 0. \quad (2.139)$$

Dans le cas où l'on considère une situation symétrique, les relations de dispersions deviennent

$$\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} \tanh\left(\frac{\kappa_m h}{2}\right) - \Omega = 0, \quad (2.140)$$

pour le LRSP et

$$\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} + \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} \coth\left(\frac{\kappa_m h}{2}\right) - \Omega = 0, \quad (2.141)$$

pour le SRSP. Il est intéressant de comparer ces deux dernières relations à celle du gap-plasmon (2.39) puisque qu'on peut remarquer que la simplification conduit à une sorte de complémentarité entre le M.I.M. et le I.M.I. lorsque l'on considère la non-localité. En effet dans ce cadre, sous la condition d'interchanger les indices m et d la relation de dispersion du gap-plasmon (2.39) devient celle du LRSP (2.140) (solution symétrique par rapport à H_y) et celle du SRSP (2.141) devient celle du mode antisymétrique pouvant se propager dans un gap diélectrique [55, 56] (que l'on n'a pas étudié).

Nous allons maintenant tester cette approximation et en définir les limites. Pour ce faire nous allons reconsidérer une structure I.M.I. symétrique composée de TiO_2 et d'argent. Le TiO_2 nous assure encore une fois une grande sensibilité à la non localité. Nous définissons les quantités R_{exact} et R_{1MA} comme

$$R_{exact} = \overline{|r_{m1}^{(t)} r_{m2}^{(t)}|}, \quad (2.142)$$

$$R_{1MA} = |r_{m1}^{(t)} r_{m2}^{(t)}|. \quad (2.143)$$

Ces deux dernières apparaissent dans les relations de dispersion générale (2.133) et approximée (2.139). En conséquence nous allons tester notre modèle en comparant ces deux dernières quantités. Nous définissons l'épaisseur limite h_{lim} comme l'épaisseur de métal à partir de laquelle l'erreur relative faite en utilisant R_{1MA} au lieu de R_{exact} est de 10^{-4} . Cette erreur est définie comme

$$err = \frac{|R_{exact} - R_{1MA}|}{\max(R_{exact}, R_{1MA})}. \quad (2.144)$$

La figure 2.25 montre cette épaisseur limite pour le LRSP et le SRSP. Cette figure montre aussi la quantité L_{nl} qui est en fait la distance de pénétration de l'onde longitudinale redéfinie pour qu'elle satisfasse $e^{-2\Re(\kappa_l)L_{nl}} = 10^{-2}$. À une distance δ_{nl} de l'interface, le champ transporte encore 37% de son énergie initiale. À L_{nl} cette valeur n'est plus que de 1%. Globalement h_{lim} et L_{nl} varient de manière similaire quand la fréquence varie. Cela nous indique que pour des épaisseurs suffisamment grandes comparées à L_{nl} , l'approximation reproduit très bien les coefficients de réflexion, et donc les relations de dispersion. La relation entre ces deux quantités n'est cependant pas si évidente et l'approximation se montre moins robuste lorsque l'on s'approche des fréquences UV. Pour la gamme de fréquence du visible, le modèle que nous avons mis en place ne dévie du calcul exact que pour des épaisseurs inférieures à 3 nm (en tout cas pour le SRSP). Pour le LRSP l'approximation reste valide pour des épaisseurs inférieures au nanomètre. Pour de telles épaisseurs de métal, la principale question à

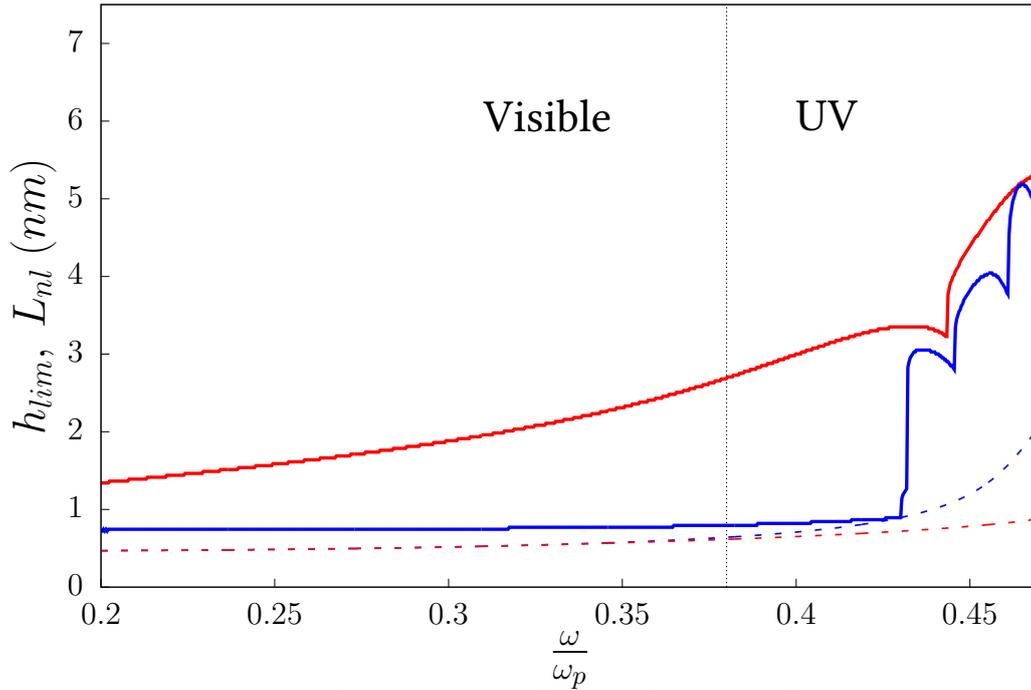


FIGURE 2.25 – Distances de pénétration L_{nl} (courbes pointillées) et épaisseurs limites h_{lim} (courbes pleines) pour des fréquences correspondants aux longueurs d’ondes du visible et du proche ultra-violet. Les courbes rouges correspondent au SRSP et les bleues au LRSP. Comme la distance de pénétration non locale ne varie pratiquement pas avec l’épaisseur, on a calculé L_{nl} pour une épaisseur de 10 nm (ce qui maximise cette quantité par rapport à des épaisseurs plus faibles).

se poser n’est pas la validité de notre approximation mais la validité du modèle hydrodynamique lui même. Ce dernier ne prend pas en compte d’autres phénomènes d’origine quantique comme le *spill-out*[78, 3] des électrons hors du métal et l’on peut considérer qu’en dessous de l’épaisseur critique du nanomètre il n’est simplement plus valable. L’approximation semble donc plutôt robuste, au moins avec les critères que l’on a définis. Il faut aussi souligner que personne n’est pour l’instant parvenu à réaliser de si fins films métalliques sans avoir de gros problèmes de rugosité.

Pour avoir une idée de la validité de ce critère de test, nous avons tracé sur la figure 2.26 les dispersions du LRSP et SRSP pour une épaisseur de métal de 1,7 nm, soit une douzaine de couches atomiques. En comparant ces dispersions avec la figure 2.25 on peut dire que la définition de h_{lim} que nous avons choisie est largement suffisante. Même pour la partie de la dispersion se situant dans le proche UV et pour laquelle $h < h_{lim}$, la différence entre calcul exact et approximé n’est pas très importante. Le comportement global des deux modes est bien reproduit et finalement, c’est surtout sur la partie imaginaire de l’indice effectif que la différence est notable. En conséquence la figure 2.25 donne une excellente idée de la validité de notre approche et tant que les épaisseurs que l’on considère sont supérieures aux épaisseurs limites données par cette figure, nous pouvons nous contenter d’utiliser les coefficients de Fresnel non locaux et négliger la propagation de l’onde longitudinale à travers le métal.

En plus de simplifier considérablement les calculs pour les structures I.M.I., l’approximation que l’on a présentée permet de simplifier globalement le formalisme des matrices S . Et en plus de cela, elle permet de lever l’obligation de considérer des milieux supérieur et inférieur locaux pour obtenir des relations de dispersion sous la forme d’un pôle d’un coefficient de réflexion.

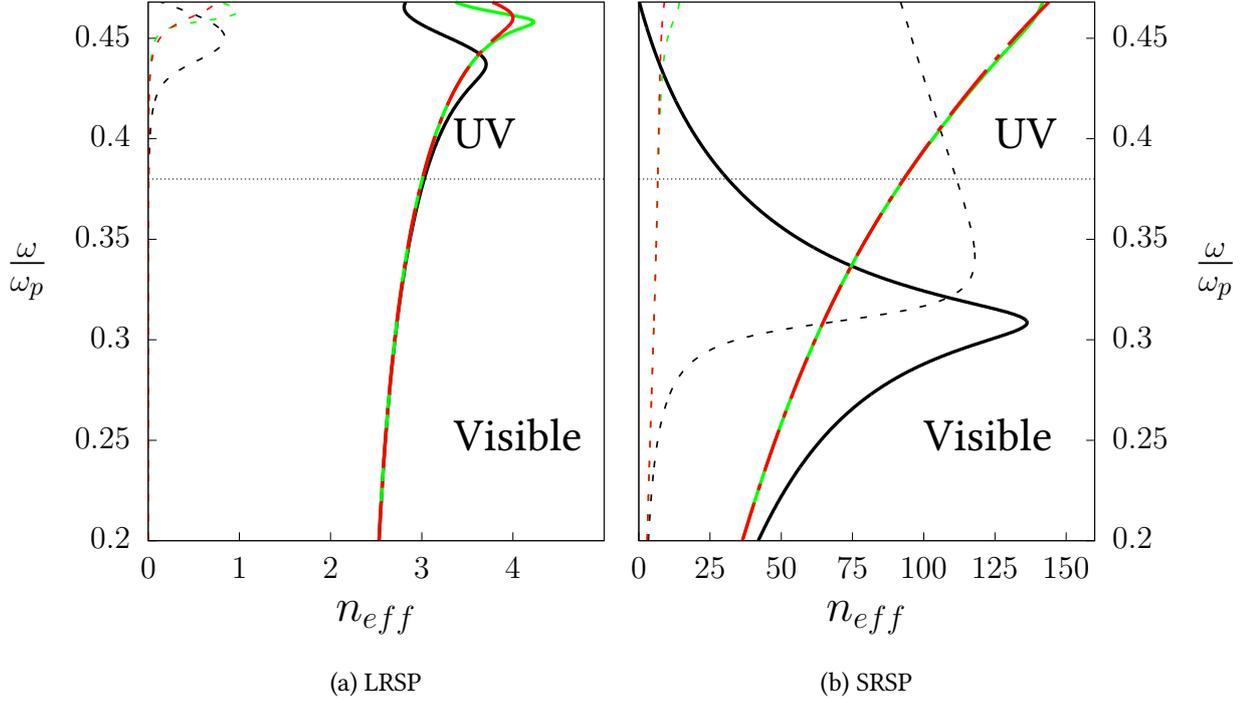


FIGURE 2.26 – Courbes de dispersion du LRSP (a) et SRSP (b) pour un I.M.I. composé de TiO_2 et d'argent d'épaisseur $h = 1.7$ nm. Les courbes pleines correspondent à $\Re(n_{eff})$ et les pointillées à $\Im(n_{eff})$. Les courbes rouges correspondent aux courbes de dispersion non locales exactes et les vertes aux courbes de dispersion non locales approximées. Les courbes noires sont les courbes de dispersion calculées en utilisant un modèle local.

2.6.3 Généralisation de la simplification aux matrices S

Pour le montrer, il suffit de reprendre la continuité des champs - les relations qui nous permettent d'obtenir les matrices d'interface (2.63) et (2.65). Nous allons donc réécrire la continuité des champs aux interfaces en considérant que les épaisseurs de métal sont suffisantes pour que l'approximation puisse s'appliquer. Pour une interface entre un diélectrique (milieu i) et un métal (milieu $i + 1$) la continuité des champs nous donne

$$A_d + B_d = A_m + B_m, \quad (2.145)$$

$$i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} (A_d - B_d) = i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} (A_m - B_m) + B_l, \quad (2.146)$$

$$B_l = i\Omega(A_d + B_d). \quad (2.147)$$

Cela revient à dire qu'il ne peut pas y avoir d'onde longitudinale montante dans la couche de métal ($A_l = 0$). Cette dernière s'atténue trop vite en épaisseur pour qu'une onde longitudinale montante arrive à l'interface que l'on considère depuis une interface plus basse. Pour une interface entre un métal (milieu i) et un diélectrique (milieu $i + 1$) nous avons

$$A_m + B_m = A_d + B_d, \quad (2.148)$$

$$i \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} (A_m - B_m) + A_l = i \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} (A_d - B_d), \quad (2.149)$$

$$A_l = -i\Omega(A_m + B_m). \quad (2.150)$$

Cette fois nous considérons qu'il ne peut pas y avoir d'onde longitudinale descendante dans la couche de métal. Cette dernière s'atténue trop vite en épaisseur pour qu'une onde longitudinale descendante arrive à l'interface que l'on considère depuis une interface plus haute. Dans les deux cas, cela nous permet d'écrire de manière générale les matrices d'interface sous la forme

$$S_{i \rightarrow i+1} = \begin{pmatrix} r_{i,i+1} & t_{i+1,i} \\ t_{i,i+1} & r_{i+1,i} \end{pmatrix}. \quad (2.151)$$

avec

$$r_{i,i+1} = \frac{\frac{\kappa_i}{\epsilon_i} - \frac{\kappa_{i+1}}{\epsilon_{i+1}} + \Omega}{\frac{\kappa_i}{\epsilon_i} + \frac{\kappa_{i+1}}{\epsilon_{i+1}} - \Omega}, \quad (2.152)$$

$$t_{i,i+1} = \frac{2 \frac{\kappa_i}{\epsilon_i}}{\frac{\kappa_i}{\epsilon_i} + \frac{\kappa_{i+1}}{\epsilon_{i+1}} - \Omega}, \quad (2.153)$$

que l'on peut considérer comme des coefficients de Fresnel non locaux. Tout se passe en fait comme si l'onde longitudinale ne faisait que modifier le comportement de l'onde transverse, mais sans pouvoir se propager au delà des interfaces. Bien évidemment, il faut aussi modifier les matrices de couche. Ce que nous faisons revient à complètement négliger la propagation de l'onde longitudinale à travers les couches métalliques et la matrice de couche dans un métal est alors

$$S_m = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\kappa_m h} \\ e^{-\kappa_m h} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.154)$$

Finalement, nous ne considérons la propagation que de l'onde transverse, et la non-localité est prise en compte à travers une modification des coefficients de Fresnel locaux.

L'approximation nous a permis de transformer les matrices d'interface de taille 3×3 en matrices de taille 2×2 . Les matrices de couche métalliques elles, sont passées d'une taille 4×4 à une taille 2×2 . Ainsi, quels que soient les milieux supérieur et inférieur que l'on considère, une structure lamellaire composée de $N + 1$ couches pour N interfaces peut toujours être décrite par une matrice S de taille 2×2 . Ceci permet de définir un coefficient de réflexion global dans n'importe quelle situation et donc de pouvoir retrouver les relations de dispersion de n'importe quelle structure lamellaire.

2.6.4 Extension du modèle de couche diélectrique mince

Ce que nous avons fait revient à considérer que l'on peut prendre en compte la non-localité simplement en modifiant les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude de l'onde transverse. En 2013, Luo[76] a montré qu'il était possible de prendre en compte la non-localité en considérant un métal local mais en ajoutant à l'interface entre diélectrique et métal une fine couche d'un autre diélectrique. Il montre alors que l'ajout de cette couche à l'interface permet de reproduire les coefficients de réflexion et de transmission non locaux et par extension les relations de dispersion. Il montre cette équivalence pour un plasmon de surface puis un gap-plasmon. L'intérêt de la méthode de Luo est de pouvoir appliquer des techniques d'optique transformationnelle[79, 80, 81, 82, 83, 84] au système purement local tout en prenant en

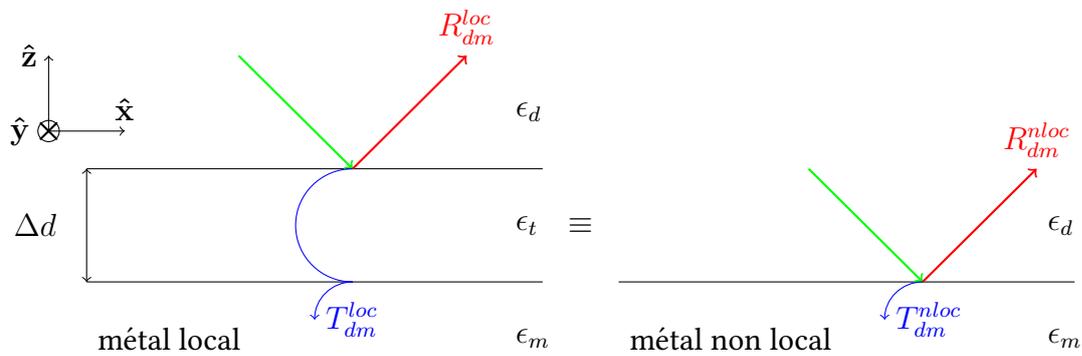


FIGURE 2.27 – Représentation schématique de l'équivalence entre un système composé, de haut en bas, d'un diélectrique (ϵ_d), d'une fine couche d'un autre diélectrique (ϵ_t) d'épaisseur Δd et d'un métal local (ϵ_m) et d'un système composé d'un diélectrique (ϵ_d) et d'un métal non local (ϵ_m). Les flèches vertes représentent une onde incidente d'amplitude unité, les rouges la part réfléchi dans le diélectrique et les bleus la part transmise jusqu'au métal.

compte la non-localité, ce qui évite une trop grande complexité mathématique. Nous allons ici donner l'équivalence entre notre formalisme et celui de Luo. Le succès de notre approximation permet de montrer que la méthode de Luo pourrait en fait être appliquée à n'importe quel multi-couche et pas seulement à une interface ou bien un gap diélectrique. De plus nous redonnerons la formule de Luo qui donne l'épaisseur et la permittivité de la couche de diélectrique additionnelle. La formule que nous donnerons est un peu plus générale que celle de Luo puisqu'elle permet de changer la condition aux limites supplémentaire que l'on considère dans le modèle hydrodynamique. La figure 2.27 schématise l'idée de Luo.

Pour montrer l'équivalence entre les deux structures présentées sur la figure 2.27 nous allons reprendre les calculs donnés par Luo et chercher à obtenir les coefficients de réflexion et de transmission locaux R_{dm}^{loc} , T_{dm}^{loc} pour pouvoir les comparer aux coefficients non locaux qui sont simplement donnés par les équations (2.152) et (2.153). Toute la subtilité réside dans le fait que les coefficients locaux prennent en compte la propagation dans la couche de diélectrique additionnel de permittivité ϵ_t et d'épaisseur Δd . Bien que dans le cas local il n'existe qu'une onde transverse, le calcul est plutôt pénible. Nous ne présenterons les étapes clef du calcul que pour un coefficient puis donnerons directement l'autre. Nous donnerons ensuite les résultats pour le cas où l'on inverse le métal et le diélectrique supérieur afin d'obtenir R_{md}^{loc} et T_{md}^{loc} , puis nous comparerons ces coefficients aux coefficients non locaux. En utilisant les mêmes approximations que Luo (paragraphe *a small thickness solution* dans le Supplementary de [76]) nous rendrons les coefficients locaux identiques aux non locaux. Puisque notre approximation revient à prendre en compte la non-localité en modifiant les coefficients de Fresnel locaux, cela montrera en fait que l'on peut étendre la méthode de Luo à des structures multi-couches. Avant de faire la continuité des champs nous écrirons H_y et E_x de la même manière que Luo, nous posons l'origine de nos axe le long de l'interface

supérieure. Pour une onde plane incidente d'amplitude unité nous avons donc

$$\left. \begin{aligned} H_y &= 1e^{\kappa_d z} + R_{dm}^{loc} e^{-\kappa_d z} \\ \frac{\omega \epsilon_0}{i} E_x &= \frac{\kappa_d}{\epsilon_d} (1e^{\kappa_d z} - R_{dm}^{loc} e^{-\kappa_d z}) \end{aligned} \right\} z > 0,$$

$$\left. \begin{aligned} H_y &= A_t e^{\kappa_d z} + B_t e^{-\kappa_d(z+\Delta d)} \\ \frac{\omega \epsilon_0}{i} E_x &= \frac{\kappa_t}{\epsilon_t} (A_t e^{\kappa_t z} - B_t e^{-\kappa_t(z+\Delta d)}) \end{aligned} \right\} -\Delta d < z < 0, \quad (2.155)$$

$$\left. \begin{aligned} H_y &= T_{md}^{loc} e^{\kappa_m(z+\Delta d)} \\ \frac{\omega \epsilon_0}{i} E_x &= \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} T_{dm}^{loc} e^{\kappa_m(z+\Delta d)} \end{aligned} \right\} z < \Delta d.$$

Ici, la subtilité réside dans le fait que le coefficient A_t est une amplitude prise à l'interface basse et B_t une amplitude prise à l'interface haute, d'où l'asymétrie dans les propagateurs. Cela permet d'écrire la continuité des champs sous la forme

$$1 + R_{dm}^{loc} = A_t + B_t e^{-\kappa_t \Delta d}, \quad (2.156)$$

$$\frac{\kappa_d}{\epsilon_d} (1 - R_{dm}^{loc}) = \frac{\kappa_t}{\epsilon_t} (A_t + B_t e^{-\kappa_t \Delta d}), \quad (2.157)$$

$$A_t e^{-\kappa_t \Delta d} + B_t = T_{md}^{loc}, \quad (2.158)$$

$$\frac{\kappa_t}{\epsilon_t} (A_t e^{-\kappa_t \Delta d} - B_t) = \frac{\kappa_m}{\epsilon_m} T_{md}^{loc}. \quad (2.159)$$

La première chose à faire à partir d'ici est d'obtenir le coefficient A_t en fonction de B_t . En divisant (2.159) par (2.158) et en réorganisant un peu le résultat on peut obtenir

$$A_t = \frac{1 + \frac{\kappa_t \epsilon_m}{\kappa_m \epsilon_t}}{\frac{\kappa_t \epsilon_m}{\epsilon_t \kappa_m} - 1} B_t e^{\kappa_t \Delta d}. \quad (2.160)$$

La seconde étape du calcul est d'obtenir une expression pour R_{dm}^{loc} . Pour ce faire nous multiplions (2.157) par $\frac{\epsilon_d}{\kappa_d}$ et soustrayons au résultat l'équation (2.156) pour obtenir

$$2R_{dm}^{loc} = A_t \left(1 - \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) + B_t e^{-\kappa_t \Delta d} \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right), \quad (2.161)$$

puis en multipliant (2.157) par $\frac{\epsilon_d}{\kappa_d}$ et en additionnant au résultat l'équation (2.156) nous avons

$$A_t \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) + B_t e^{-\kappa_t \Delta d} \left(1 - \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) = 2. \quad (2.162)$$

Ces deux dernières équations permettent d'obtenir

$$R_{dm}^{loc} = \frac{A_t \left(1 - \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) + B_t e^{-\kappa_t \Delta d} \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right)}{A_t \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) + B_t e^{-\kappa_t \Delta d} \left(1 - \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right)}. \quad (2.163)$$

En injectant (2.160) dans (2.163) et en réorganisant le résultat nous obtenons

$$R_{dm}^{loc} = \frac{\left(1 - \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_m}{\kappa_m \epsilon_t}\right) e^{\kappa_t \Delta d} + \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) \left(\frac{\kappa_t \epsilon_m}{\kappa_m \epsilon_t} - 1\right) e^{-\kappa_t \Delta d}}{\left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) \left(1 + \frac{\kappa_t \epsilon_m}{\kappa_m \epsilon_t}\right) e^{\kappa_t \Delta d} + \left(1 - \frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t}\right) \left(\frac{\kappa_t \epsilon_m}{\kappa_m \epsilon_t} - 1\right) e^{-\kappa_t \Delta d}}. \quad (2.164)$$

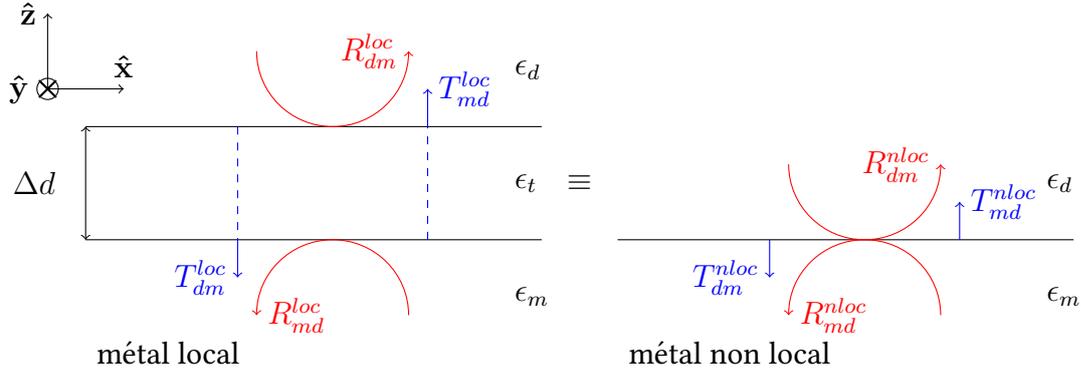


FIGURE 2.28 – Représentation schématique de l'équivalence entre les deux systèmes. Les différents coefficients sont tous des coefficients en amplitude.

A partir d'ici, il faut développer chacun des préfacteurs devant les propagateurs, factoriser ces derniers pour les transformer en fonctions trigonométriques et réorganiser une dernière fois pour obtenir le même résultat que Luo, à savoir

$$R_{dm}^{loc} = \frac{\left(1 - \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \cosh(\kappa_t \Delta d) - \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} - \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \sinh(\kappa_t \Delta d)}{\left(1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \cosh(\kappa_t \Delta d) + \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \sinh(\kappa_t \Delta d)}. \quad (2.165)$$

Pour obtenir T_{dm}^{loc} il faut suivre une procédure similaire. La seule astuce supplémentaire nécessaire est l'usage de la relation $(a + b)^2 - (a - b)^2 = 4ab$. Nous avons

$$T_{dm}^{loc} = \frac{2}{\left(1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \cosh(\kappa_t \Delta d) + \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \sinh(\kappa_t \Delta d)}. \quad (2.166)$$

Enfin, si nous inversons le diélectrique supérieur et le métal, c'est à dire considérons une onde incidente dans le métal nous obtenons les coefficients suivant

$$R_{md}^{loc} = \frac{-\left(1 - \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \cosh(\kappa_t \Delta d) - \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} - \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \sinh(\kappa_t \Delta d)}{\left(1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \cosh(\kappa_t \Delta d) + \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \sinh(\kappa_t \Delta d)}, \quad (2.167)$$

et

$$T_{md}^{loc} = \frac{2 \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}}{\left(1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \cosh(\kappa_t \Delta d) + \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \sinh(\kappa_t \Delta d)}. \quad (2.168)$$

La figure 2.28 résume le sens de ces différents coefficients et leur équivalence avec nos coefficients non locaux.

Pour obtenir cette équivalence nous allons d'abord réécrire les coefficients non lo-

caux donnés par les équation (2.152) et (2.153) sous la forme

$$R_{dm}^{nloc} = \frac{1 - \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m} + \frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega}{1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m} - \frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega}, \quad (2.169)$$

$$T_{dm}^{nloc} = \frac{2}{1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m} - \frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega}, \quad (2.170)$$

$$R_{dm}^{loc} = \frac{-(1 - \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}) + \frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega}{1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m} - \frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega}, \quad (2.171)$$

$$T_{dm}^{loc} = \frac{2 \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}}{1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m} - \frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega}. \quad (2.172)$$

On peut à ce moment là voir que pour que les coefficients locaux et non locaux se valent il nous faut

$$\kappa_t \Delta d \rightarrow 0. \quad (2.173)$$

Si nous utilisons un diélectrique anisotrope Luo a montré qu'on peut obtenir une solution exacte. Nous allons cependant nous intéresser à la deuxième solution (pour sa simplicité) qui est d'utiliser une couche de diélectrique isotrope d'épaisseur suffisamment faible pour pouvoir s'approcher de la condition (2.173). Nous allons considérer que Δd est petit devant la pénétration ($\propto \frac{1}{\kappa_t}$) de l'onde dans le diélectrique et allons faire un développement en série de Taylor des fonctions trigonométriques au voisinage de zéro et irons pour l'instant jusqu'au deuxième ordre. Nous avons par exemple pour R_{dm}^{loc}

$$R_{dm}^{loc} = \frac{\left(1 - \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \left(1 + \frac{\kappa_t^2 \Delta d^2}{2}\right) - \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} - \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \kappa_t \Delta d}{\left(1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) \left(1 + \frac{\kappa_t^2 \Delta d^2}{2}\right) + \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \kappa_t \Delta d}, \quad (2.174)$$

puis en négligeant les termes de second ordre

$$R_{dm}^{loc} = \frac{\left(1 - \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) - \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} - \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \kappa_t \Delta d}{\left(1 + \frac{\kappa_m \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_m}\right) + \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \kappa_t \Delta d}. \quad (2.175)$$

Nous pouvons faire de même avec chacun des coefficients locaux que l'on a obtenus. Dans tout les cas, cela nous mène aux même conditions pour que les coefficients locaux et non locaux soient identiques. Par comparaison entre ces derniers, il nous faut

$$\frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega = - \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} - \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \kappa_t \Delta d, \quad (2.176)$$

$$-\frac{\epsilon_d}{\kappa_d} \Omega = \left(\frac{\kappa_t \epsilon_d}{\kappa_d \epsilon_t} + \frac{\kappa_m \epsilon_t}{\kappa_t \epsilon_m}\right) \kappa_t \Delta d. \quad (2.177)$$

Enfin, en utilisant ces deux équations nous arrivons à une expression pour les quantités ϵ_t et Δd , à savoir

$$\epsilon_t = \frac{-\kappa_t^2 \Delta d}{\Omega}, \quad (2.178)$$

avec, pour rappel, $\kappa_t = \sqrt{k_x^2 - \epsilon_t k_0^2}$. Pour l'instant cette expression n'est pas tout à fait équivalente à celle de Luo. Pour que cela soit le cas il nous faut considérer un ϵ_t suffisamment petit pour avoir $\kappa_t \simeq k_x$, ce qui permet alors d'écrire

$$\epsilon_t = \frac{-k_x^2 \Delta d}{\Omega}. \quad (2.179)$$

La grande différence avec le travail de Luo est que cette expression permet de changer la condition aux limites supplémentaire nécessaire au modèle hydrodynamique. Cela revient à changer Ω et κ_l . De plus ce formalisme permet d'utiliser n'importe quel ϵ_m , avec ou sans prise en compte de la réponse des électrons liés. On peut trouver les différentes expressions à utiliser en fonction des conditions aux limites qu'on veut utiliser dans [55]. Luo a considéré la continuité des composantes normales du champ \mathbf{E} , ce qui mène à la formule qu'il donne dans son article

$$\epsilon_t = \frac{\epsilon_m \epsilon_d \kappa_l \Delta d}{\epsilon_m - \epsilon_d}. \quad (2.180)$$

De notre côté nous avons considéré la nullité de la composante normale de la densité de polarisation des électrons libres ce qui nous mène à

$$\epsilon_t = \frac{(1 + \chi_b) \epsilon_m}{\chi_f} \kappa_l \Delta d. \quad (2.181)$$

Dans les deux cas, nous avons utilisé deux approximations. L'épaisseur de la fine couche de diélectrique doit être faible devant les distances de pénétration et la permittivité de cette couche ϵ_t doit être suffisamment faible pour pouvoir considérer $\kappa_t \simeq k_x$. Dans notre formalisme, en observant les équations (2.180) et (2.181) cela se résume aux deux conditions suivantes

$$\Delta d \ll \delta_{nl}, \quad (2.182)$$

$$n_{eff} \gg n_t, \quad (2.183)$$

où n_t est l'indice optique de la fine couche de diélectrique. La condition (2.182) contient également la condition sur la distance de pénétration dans la fine couche de diélectrique puisque $\delta_t \gg \delta_{nl}$.

Finalement, en montrant l'équivalence de chacun des coefficients locaux et non locaux, nous avons montré que le modèle de Luo pourrait très bien s'appliquer à des multi-couches tant que les couches métalliques considérées sont plus épaisses que la distance de pénétration non locale et que les couches de diélectrique à ajouter aux interfaces ont des épaisseurs inférieures à cette distance de pénétration et un indice optique plus faible que l'indice effectif des modes que l'on considère – ce qui s'applique très bien aux modes guidés plasmoniques. Que l'on décide d'ajouter un diélectrique pour mimer l'effet de la non-localité ou bien de directement modifier les coefficients de Fresnel locaux, nous avons montré ici qu'il n'est pas nécessaire de considérer le modèle hydrodynamique dans son entier et ces simplifications sont tout à fait suffisantes dans la très grande majorité des cas.

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié l'impact de la non-localité sur quatre modes emblématiques de la plasmonique : le plasmon de surface, le gap-plasmon ainsi que le

LRSP et SRSP. Ce faisant nous avons montré que l'utilisation d'un diélectrique de permittivité élevée et/ou l'utilisation de gaps nanométriques permet d'augmenter grandement l'influence de la non-localité sur les modes guidés plasmoniques. Nous avons pointé les effets les plus notables de la non-localité comme la possible augmentation des distances caractéristiques mais surtout la diminution de l'indice effectif des modes. Puis, nous avons mis en place un formalisme nous permettant de pouvoir par la suite étudier n'importe quels modes supportés par un multi-couche via des coefficients de réflexion et des relations de dispersion. Constatant la grande différence entre distance de pénétration de l'onde transverse et longitudinale, nous avons ensuite simplifié ce formalisme. Enfin nous avons utilisé cette simplification pour étendre la validité du modèle de Luo[76]. Ces travaux sur la simplification du modèle hydrodynamique ont donné lieu à une publication[85].

Chapitre 3

Structures complexes et non-localité

Nous allons voir dans ce chapitre quelles types d'expériences *optiques* il serait possible de conduire pour mesurer l'influence de la non-localité. Nous avons vu dans le chapitre précédent que cette dernière joue sur les distances caractéristiques, à travers son influence sur l'indice effectif des modes guidés notamment. Ces distances ne sont cependant pas facilement mesurables. Nous allons plutôt nous concentrer sur l'abaissement de l'indice effectif, qui conduit au fameux *blue-shift* de la longueur d'onde de résonance de façon générale. Nous proposons ici deux types d'expériences possibles qui devraient être en mesure, pour peu qu'elles soient un jour réalisées, d'observer ce décalage entre les prédictions du modèle de Drude et celle du modèle hydrodynamique, et donc de déterminer le paramètre β du modèle hydrodynamique - c'est à dire de pleinement quantifier l'impact de la non-localité.

Il existe essentiellement trois manières d'exciter optiquement un mode guidé plasmonique : le couplage par la tranche, le couplage assisté par un prisme ou bien le couplage par un réseau de diffraction. Pour les deux dernières nous donnerons une estimation théorique de l'influence de la non-localité sur le paramètre expérimentalement mesurable (angle de couplage ou bien fréquence de résonance). Nous nous placerons systématiquement dans un cadre où la non-localité a, bien sûr, l'impact le plus fort. Nous allons donc utiliser des diélectriques de permittivité élevée et/ou considérerons des couches de métal ou de diélectrique de faible épaisseur. Ce travail est motivé par une expérience conduite en 2012 qui a été la première à rendre compte d'une mesure de β ainsi que de la viabilité du modèle hydrodynamique pour la prise en compte de la non-localité[9]. Malheureusement ce travail a été soumis à certaines critiques parce qu'il repose sur la réponse d'un grand nombre de nanosphères déposées sur un substrat métallique. L'influence de la non-localité se fait sentir lorsque les gaps entre nanosphères et substrat sont de taille sub-nanométrique. Sans même évoquer la difficulté technique nécessaire au contrôle d'objets de cette taille, le problème est double. À une telle échelle, la non-localité n'est pas le seul phénomène à influencer sur la réponse optique du système. De plus le nombre conséquent de nanosphères impliquées, et donc d'interstices de tailles différentes, limite la précision des résultats. Les structures que nous proposerons sont conçues dans l'idée d'impliquer des échelles systématiquement supérieures au nanomètre ainsi que de reposer sur des modes guidés facilement contrôlables et identifiables. C'est l'avantage d'étudier les modes pouvant se propager le long d'interfaces planes. Nous commencerons par considérer l'excitation des modes supportés par des structures lamellaires semi-infinies via des prismes. Puis nous exciterons un plasmon de surface à l'aide d'un réseau et montrerons que l'influence de la non-localité sur ce dernier peut ainsi être observée. Ces études se feront dans la gamme du visible et proche infrarouge.

3.1 Coupleurs à prisme

La première méthode que nous allons utiliser est celle du couplage assisté par un prisme. Originellement proposée pour le plasmon de surface, dans les années 60 par Otto[86], puis par Kretschmann et Raether[87] dans une configuration alternative, elle se base sur la transmission d'une onde évanescente à travers un petit gap de diélectrique ou de métal pour exciter les modes guidés de structures 2D telles que celles que nous avons étudiées précédemment.

3.1.1 Couplage par génération d'évanescents

Nous avons vu que la courbe de dispersion d'un mode guidé plasmonique se situe en dessous de la ligne de lumière – et que cette dernière représente une onde se propageant dans le diélectrique parallèlement à l'interface. En d'autres termes, sans configuration particulière, un mode guidé plasmonique ne peut pas être excité par une onde propagative arrivant directement depuis le milieu diélectrique. L'idée d'Otto est d'utiliser le principe de réflexion totale frustrée. Ce dernier peut être compris simplement en utilisant les lois de l'optique géométrique. Lorsqu'une onde arrive à l'interface entre deux milieux diélectriques, cette dernière peut être réfractée et/ou réfléchi en fonction de l'indice optique des matériaux de part et d'autre de l'interface. Quand on passe d'un milieu noté i à un milieu noté r , une onde incidente avec un certain angle θ_i par rapport à la normale à l'interface est réfractée avec un angle θ_r selon la loi de Descartes

$$n_i \sin(\theta_i) = n_r \sin(\theta_r). \quad (3.1)$$

On peut voir la loi de Descartes comme la simple conservation du vecteur d'onde k_x à travers les différentes couches. Si $n_i > n_r$, il existe un angle critique θ_c au delà duquel l'onde n'est plus réfractée mais seulement réfléchi. Cet angle est donné par

$$\theta_c = \arcsin\left(\frac{n_r}{n_i}\right). \quad (3.2)$$

Au delà de θ_c , il n'y a pas d'onde (propagative) transmise de l'autre côté de l'interface. En revanche, pour assurer la conservation des composantes transverses du champ \mathbf{E} il faut qu'il existe tout de même un certain champ dans le milieu inférieur. Ce champ là n'est pas propagatif mais évanescent. Ainsi, en situation de réflexion totale, le champ incident génère un champ évanescent au delà de l'interface. Il se passe la même chose en mécanique quantique quand on envoie une particule sur une barrière de potentiel plus haute que l'énergie de la particule. Classiquement, aucune énergie n'est transmise via cette onde évanescente, mais si il existe en dessous de l'interface une structure capable de supporter un mode guidé plasmonique, alors l'onde incidente pourra exciter ce dernier. Pour que cela se produise, il suffit que la projection du vecteur d'onde transmis k_i soit équivalente au vecteur d'onde du mode guidé k_x . La condition de couplage s'écrit simplement

$$k_x = k_i, \quad (3.3)$$

c'est à dire en terme d'indice

$$n_{eff} = n_i \sin(\theta_i). \quad (3.4)$$

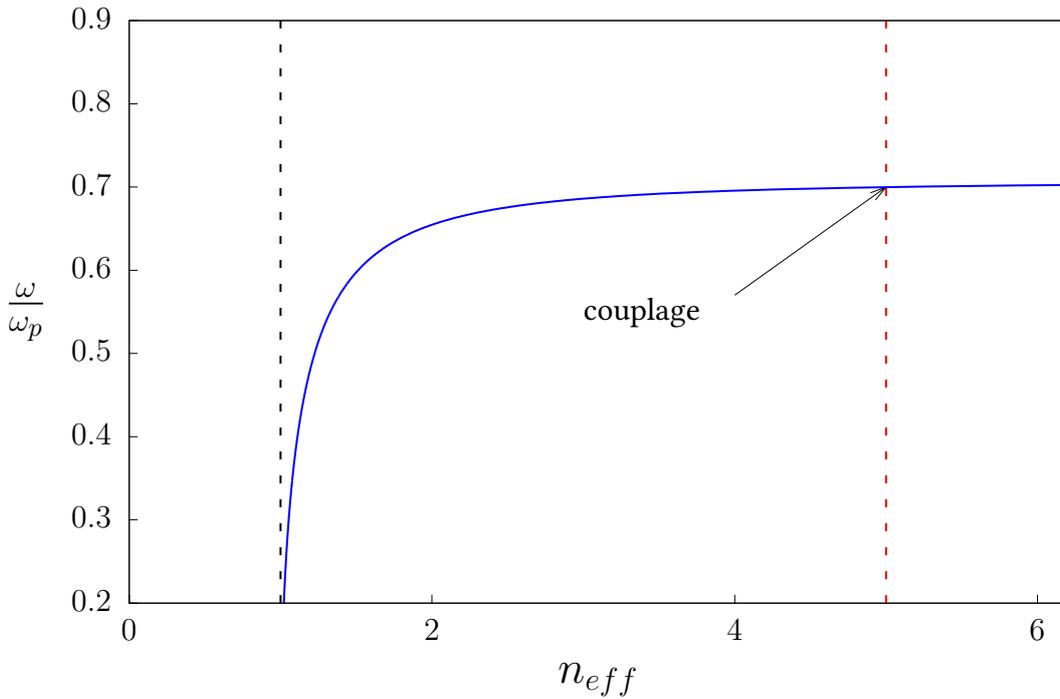


FIGURE 3.1 – Illustration de la méthode de couplage par réflexion totale atténuée sur la courbe de dispersion d’un plasmon de surface se propageant le long d’une interface Air/Ag. La courbe bleu est la courbe de dispersion. Les lignes verticales pointillées sont les lignes de lumière de l’air (bleu) et du prisme (rouge) pour un indice optique $n_p = 5$.

La figure 3.1 illustre ce principe de couplage sur la courbe de dispersion d’un plasmon de surface, sans considérer de pertes, pour une interface entre air et argent. La ligne de lumière de l’air ne croise jamais la dispersion du plasmon de surface. La différence entre ligne de lumière et courbe de dispersion du plasmon de surface illustre la différence de vecteur d’onde (*momentum mismatch* en anglais) entre onde propagative et plasmon de surface. En utilisant un milieu d’incidence possédant un indice n_p supérieur à l’indice effectif du plasmon de surface, on peut augmenter le vecteur d’onde incident, rattraper cette différence, et ainsi réaliser un couplage au mode guidé. Il est aussi possible de générer une onde évanescente en éclairant directement un métal de la même manière. Dans tous les cas, l’intérêt de la méthode est d’avoir accès directement à l’indice du mode que l’on excite, ce dernier étant proportionnel au sinus de l’angle d’incidence. Lorsque l’on réalise le couplage, l’énergie de l’onde incidente est transmise au mode guidé et n’est pas totalement réfléchi si le mode est à perte, par exemple. Le couplage d’un mode guidé est donc vu comme un creux dans la réflectivité de toute la structure (prisme compris). Bien évidemment, la non-localité faisant diminuer l’indice effectif du mode guidé, son impact apparaîtra comme une diminution de l’angle de couplage par rapport au cas local. De telles études théoriques ont déjà été menées sur le plasmon de surface [51] mais des différences d’angle de l’ordre du centième de degré seulement ont été prédites. En choisissant bien nos matériaux et les modes que nous étudions nous allons voir que nous pouvons obtenir des différences de l’ordre du degré, soit deux ordres de grandeur plus grand. De plus, nous allons voir que ce n’est pas le seul impact notable de la non-localité.

3.1.2 Coupleur à gap-plasmon

Le premier mode guidé que nous allons exciter via cette méthode est le gap-plasmon. L’ensemble de la structure que l’on considère est montrée sur la figure 3.2. Il s’agit d’un

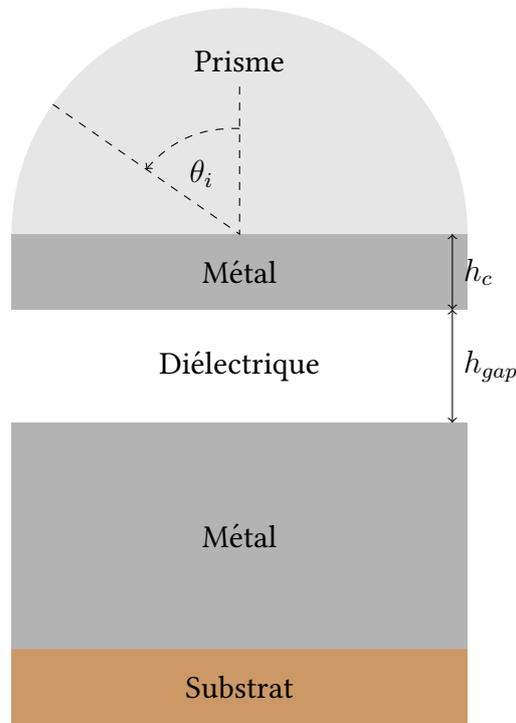


FIGURE 3.2 – Représentation schématique du coupleur à prisme pour l’excitation du gap-plasmon. L’épaisseur de métal en dessous du diélectrique est telle que l’on peut ignorer la présence d’un quelconque substrat dans les simulations.

coupleur à prisme en configuration dite de Kretschmann-Raether. Le gap permettant le couplage par transmission d’évanescents n’est pas un diélectrique mais la première épaisseur de métal d’un système M.I.M. En utilisant le logiciel Moosh[73] qui se base sur le formalisme présenté dans la partie 2.5 nous allons observer l’impact de la non localité sur $R(\theta_i)$ la réflectivité de la structure calculée dans le prisme de TiO_2 . Pour discuter de l’influence de la non-localité nous définissons $\Delta\theta_i$ comme la différence entre angle de couplage local et non local. Ces angles sont repérés comme le minimum de $R(\theta_i)$. Nous utilisons de l’or comme métal et dans un premier temps de l’air comme diélectrique. L’épaisseur de la couche de couplage h_c doit être prise suffisamment fine pour que l’onde évanescente puisse traverser cette dernière, c’est à dire de l’ordre de la distance de pénétration d’un plasmon de surface. Elle ne doit cependant pas être trop fine car dans ce cas le mode est perturbé par le prisme. Les simulations montrent qu’un régime intermédiaire intéressant est en général obtenu pour une épaisseur autour de $h_c = 18 \text{ nm}$.

La figure 3.3 montre la réflectivité de la structure pour deux épaisseurs de gap h_{gap} différentes et une longueur d’onde incidente de 600 nm. La partie de gauche ($h_{gap} = 13.75 \text{ nm}$) permet d’observer un $\Delta\theta_i$ supérieur à un degré, ce qui est deux ordres de grandeur au dessus de ce quoi on pourrait s’attendre en excitant un plasmon de surface. Dans cette situation la réflectivité tombe pratiquement à zéro ce qui indique que presque toute l’énergie incidente est transmise au gap-plasmon puis absorbée par le métal. Dans ce cas l’indice effectif du gap-plasmon est inférieur à l’indice effectif maximum que l’on peut espérer atteindre en utilisant un prisme – ce qui résulte en un couplage que l’on peut qualifier de complet ou plein. Le couplage est bien réalisé et l’angle de couplage peut même être déduit de la courbe de dispersion, ce qui facilite le design d’une telle structure.

En contraste avec cette situation de couplage plein, la partie droite de la figure 3.3

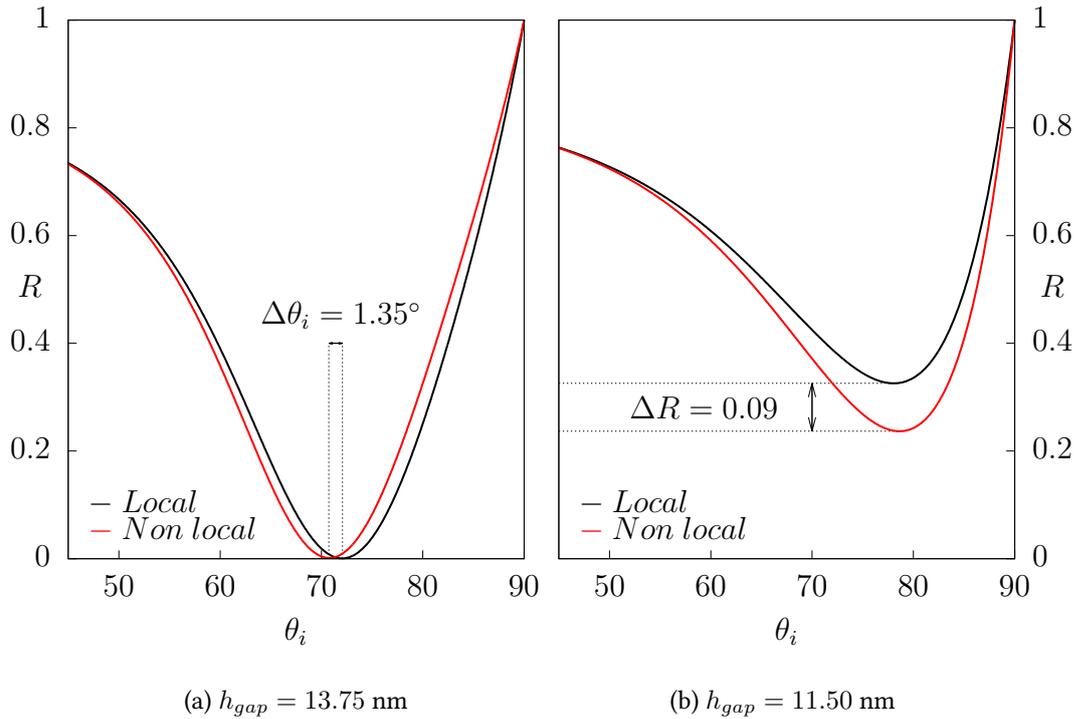


FIGURE 3.3 – Réflectivité de la structure montrée sur la figure 3.2 pour une structure composée de haut en bas de $\text{TiO}_2/\text{Au}/\text{Air}/\text{Au}$ éclairé avec une longueur d’onde de 600 nm. Le mode excité est un gap-plasmon. La permittivité de l’or est $\epsilon_m = -8.44 + 1.41i$ et celle du prisme $\epsilon_p = 6.78$.

($h_{gap} = 11$ nm) montre une réflectivité pour laquelle l’indice effectif du gap-plasmon est légèrement au dessus de l’indice maximum atteignable (celui du prisme). L’indice effectif du gap-plasmon est cependant suffisamment proche de celui du prisme pour toujours impacter la réflectivité de la structure. Dans ce régime particulier, il n’est plus possible de prédire une quelconque différence d’angle en utilisant une relation de dispersion. Dans cette situation particulière, nous réalisons un couplage que l’on peut appeler partiel ou proche. Le gap-plasmon n’est qu’imparfaitement excité mais provoque toujours un creux dans la réflectivité. Plus l’indice effectif du mode guidé est loin de l’indice du prisme et moins ce dernier influencera la réflectivité. La prise en compte de la non-localité conduit toujours à un abaissement de l’indice effectif, ce qui conduit à un “meilleur” couplage, même s’il reste imparfait. En conséquence, la non-localité provoque une diminution de la réflectivité ΔR . Cet effet n’est très marqué que pour une incidence rasante ce qui n’est pas forcément désirable expérimentalement parlant. Cependant, une différence de presque 10% dans la réflectivité pourrait être plus facile à mettre en évidence qu’une différence angulaire de l’ordre du degré.

Pour l’instant nous avons montré qu’un simple coupleur à prisme permettrait de mettre en évidence la non-localité à condition d’étudier une couche d’air d’une épaisseur d’une dizaine de nanomètres. De telles épaisseurs nous permettent de pouvoir négliger sereinement le phénomène de *spill-out* (le fait que la fonction d’onde des électrons présente elle même une queue évanescence en dehors du métal), parce qu’elles sont un à deux ordres de grandeurs plus grandes que celles nécessaires pour voir des effets avec des nanoparticules métalliques, par exemple. Cependant, cela nécessiterait de contrôler l’épaisseur du vide ou du diélectrique (un gaz) entre deux structures solides. Nous allons montrer que l’on peut obtenir des résultats similaires en utilisant une structure entièrement solide, probablement plus facile à créer et à contrôler expérimentalement.

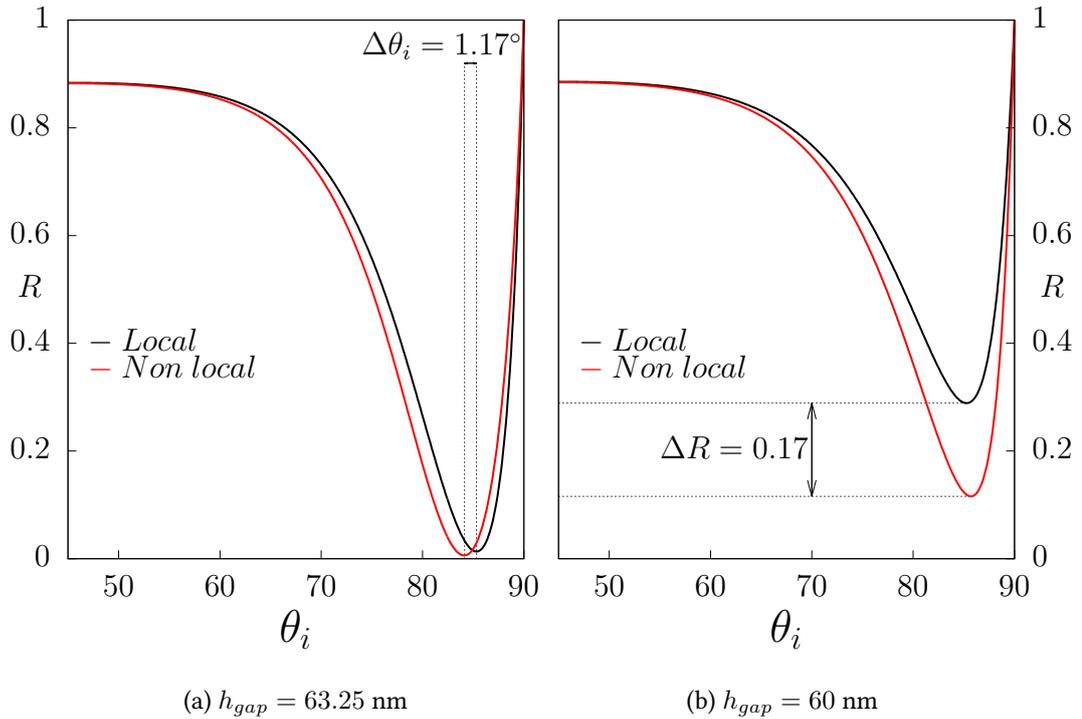


FIGURE 3.4 – Réflectivité de la structure montrée sur la figure 3.2 pour une structure composée de haut en bas de $\text{TiO}_2/\text{Au}/\text{LASF9}/\text{Au}$ éclairée avec une longueur d’onde de 750 nm. Le mode excité est un gap-plasmon. La permittivité de l’or est $\epsilon_m = -18.50 + 1.50i$, celle du diélectrique $\epsilon_d = 3.37 + 10^{-7}i$ et celle du prisme $\epsilon_p = 6.41$.

Nous allons de nouveau considérer un gap-plasmon supporté par un M.I.M. Nous réutiliserons du TiO_2 pour le prisme et de l’or pour le métal. Nous allons remplacer l’air par du LASF9, un verre optique commercial[88] d’indice proche de 1.8 dans le visible et dont le coefficient d’extinction est très faible (de l’ordre de 10^{-7}). Bien que traditionnellement employé comme substrat ou prisme, nous utilisons ce matériau uniquement pour sa permittivité mais des résultats similaires pourraient bien sûr être obtenus avec n’importe quel matériau diélectrique possédant un indice optique et coefficient d’extinction similaires.

La figure 3.4 montre les résultats obtenus avec ce nouveau matériau. Tout comme avec l’air, il est possible d’utiliser le coupleur dans les deux régimes de fonctionnement discutés précédemment. Ce cas précis montre une différence angulaire légèrement plus faible mais une différence de réflectivité presque deux fois supérieure. Les résultats sont cependant très similaires. La différence se situe surtout au niveau des dimensions que l’on a considérées. Premièrement, pour donner au gap-plasmon un indice effectif suffisamment grand, nous avons eu besoin d’un gap presque six fois plus large que précédemment. Cela montre qu’il n’est pas nécessaire d’étudier des gaps extrêmement fins pour étudier la non-localité. Surtout, cette dernière peut avoir une influence sur des structures de dimensions bien plus larges que le nanomètre (ici 60 nm). Deuxièmement, la longueur d’onde que nous avons utilisée (750 nm) est bien au dessus de la longueur d’onde plasma (150 nm) et sort même pratiquement du spectre visible. Par rapport au cas précédent cela a pour effet de permettre l’obtention de creux plus fins, c’est à dire d’exciter un gap-plasmon moins sensible aux pertes mais pourtant tout aussi sensible à la non-localité. En contrepartie, les angles concernés sont plus grands, presque rasants, quel que soit le régime de couplage que l’on souhaite étudier. Ce défaut pourrait se régler en utilisant un prisme de permittivité encore plus élevée que le TiO_2 ou bien en

augmentant légèrement la longueur d'onde du faisceau incident.

Finalement l'étude du gap-plasmon se propageant dans un diélectrique de permittivité élevée permet d'augmenter à la fois la longueur d'onde de travail et les dimensions du gap impliqués. Cependant ce setup souffre du même problème majeur que le précédent. L'extraction du paramètre β se base sur des comparaisons entre simulation locale et non locale. Ces dernières ont besoin de paramètres matériaux et géométriques fiables, qui sont souvent estimés par comparaison entre simulation et expérience. La non-localité pourrait donc être masquée par une mauvaise détermination des paramètres matériau, c'est à dire directement gommée par un ϵ ou bien un h_{gap} légèrement différent. Il serait tout à fait possible de confondre influence de la non localité et écart artificiel dans les paramètres locaux. Il n'est pas possible de lever cette ambiguïté en étudiant un seul mode guidé. Cela devient cependant possible en étudiant l'excitation par un même prisme d'un LRSP et d'un SRSP.

3.1.3 Coupleur à LRSP et SRSP

Nous allons donc étudier cette fois les modes guidés d'une structure I.M.I. La figure 3.5 schématise la structure que nous étudions. Il s'agit d'un coupleur en configuration qu'on pourrait qualifier d'Otto. Le gap permettant le couplage est la première épaisseur de diélectrique du I.M.I. Nous allons observer l'impact de la non localité sur $R(\theta_i)$ la réflectivité de la structure calculée dans le prisme de TiO_2 . Nous réutilisons de l'or comme métal et du LASF9 comme diélectrique. L'optimisation des paramètres géométriques est un peu plus délicate que dans le cas précédent puisque cette fois ci l'épaisseur du diélectrique de couplage a une influence importante sur la propagation des deux modes guidés. Les modes LRSP et SRSP possèdent des distances caractéristiques différentes et il n'est pas simple d'optimiser le couplage aux deux avec une même structure. Pour déterminer l'épaisseur optimale nous avons testé plusieurs épaisseurs pour différentes longueurs d'ondes en recherchant des creux les plus profonds possibles et une influence de la non-localité la plus grande possible.

La figure 3.6 montre la réflectivité de la structure pour deux jeux d'épaisseurs (h_{gap}, h_c) différents et une longueur d'onde de 650 nm. Tout comme pour le gap-plasmon, la non-localité peut provoquer deux effets différents. En régime de couplage plein, LRSP et SRSP subissent un décalage en angle. Ce dernier est cependant moins marqué que pour le gap-plasmon, ce qui n'est pas très surprenant – au moins pour le LRSP. Cependant, cette figure montre que l'influence de la non-localité peut être tout de même de l'ordre de plusieurs dixièmes de degrés sur le LRSP et s'approcher du degré pour le SRSP. En régime de couplage proche, la non-localité peut entraîner une différence de la réflectivité de l'ordre de 5% en valeur. Là encore c'est un décalage moins important que pour le gap-plasmon. Mais ces décalages sont tout de même bien plus importants que ce qui a déjà été montré en utilisant un plasmon de surface. On peut également noter qu'il serait possible d'étudier le LRSP dans ce régime de couplage, mais on perdrait alors la possibilité d'étudier à la fois le SRSP et le LRSP sur une même courbe de réflectivité.

Cette possibilité est en fait le véritable intérêt de cette structure. Au prix d'une influence de la non-localité un peu moins visible que dans le cas du gap-plasmon, il est possible de trouver des jeux de paramètres qui permettent de mettre le LRSP dans un régime de couplage plein dans lequel la non-localité ne l'affecte en fait pratiquement pas. C'est ce qui est montré sur la figure 3.7. Cette figure présente encore les réflectivités pour deux épaisseurs h_{gap} différentes, mais cette fois ci h_c est fixé. De plus, la longueur d'onde du faisceau incident est légèrement plus grande. Cette figure montre

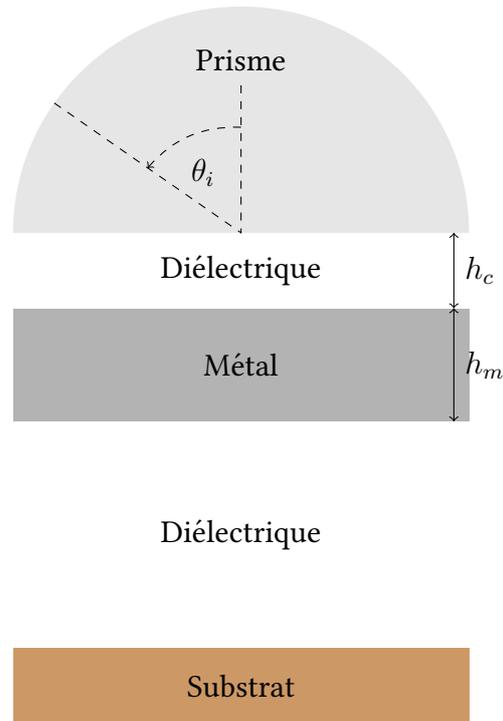


FIGURE 3.5 – Représentation schématique du coupleur à prisme pour l’excitation du LRSP et SRSP. L’épaisseur de diélectrique en dessous du métal est telle que l’on peut ignorer la présence d’un quelconque substrat dans les simulations.

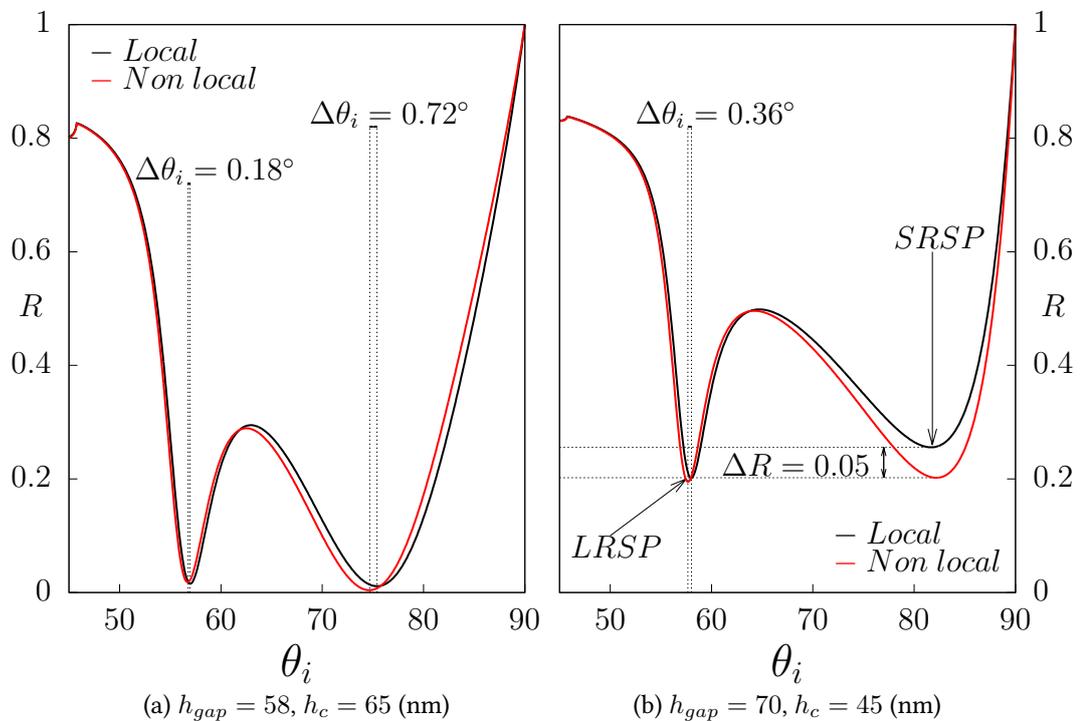


FIGURE 3.6 – Réflectivité de la structure montrée sur la figure 3.5 pour une structure composée (de haut en bas) de $\text{TiO}_2/\text{LASF9}/\text{Au}/\text{LASF9}$, éclairée avec une longueur d’onde de 650 nm. Les modes excités sont de gauche à droite un LRSP et un SRSP. La permittivité de l’or est $\epsilon_m = -11.69 + 1.25i$, celle du diélectrique $\epsilon_d = 3.40 + 10^{-7}i$ et celle du prisme $\epsilon_p = 6.62$.

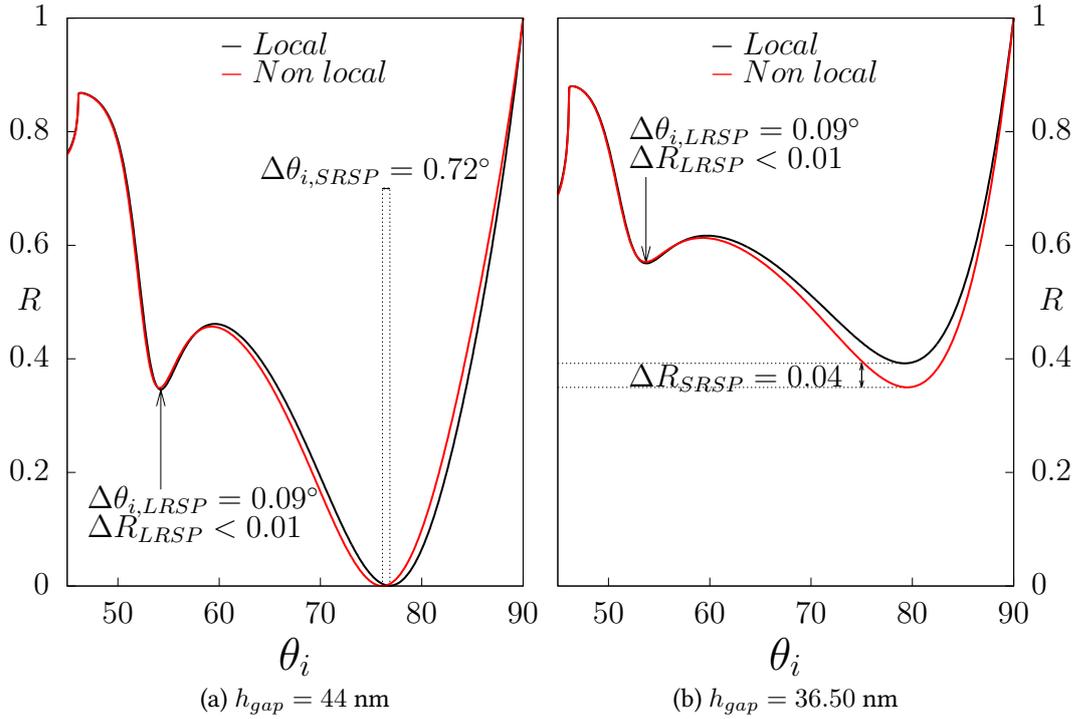


FIGURE 3.7 – Réflectivité de la structure montrée sur la figure 3.5 pour une structure composée (de haut en bas) de $\text{TiO}_2/\text{LASF9}/\text{Au}/\text{LASF9}$, éclairée avec une longueur d’onde de 700 nm. Les modes excités sont (de gauche à droite) un LRSP et un SRSP. L’épaisseur de couplage h_c est de 65 nm. La permittivité de l’or est $\epsilon_m = -15.04 + 1.31i$, celle du diélectrique $\epsilon_d = 3.38 + 10^{-7}i$ et celle du prisme $\epsilon_p = 6.50$.

qu’en jouant sur h_{gap} et λ , il est possible d’obtenir une influence de la non-localité sur le SRSP presque identique à celle montrée sur la figure précédente. Mais dans le même temps, quel que soit le régime de couplage au SRSP, le LRSP est lui pratiquement insensible à la non-localité et reste suffisamment bien couplé pour causer un creux caractéristique. Expérimentalement, le creux causé par l’excitation du LRSP pourrait être utilisé pour remonter aux paramètres matériau et aux paramètres géométriques alors que celui causé par le SRSP pourrait être utilisé pour extraire une valeur de β . Comme les indices des deux modes dépendent des mêmes paramètres et que la longueur d’onde incidente est fixée cela empêcherait toute confusion entre influence de la non-localité et une mauvaise détermination des paramètres locaux. Finalement, bien que moins sensible que le coupleur reposant sur un M.I.M, le coupleur I.M.I. présente un intérêt certain. Pour finir, la dimension de la couche métallique est suffisamment élevée pour posséder les mêmes avantages que le coupleur à M.I.M. C’est avec cette idée de pouvoir obtenir paramètres locaux et non locaux que nous allons maintenant explorer un second type de coupleur.

3.2 Coupleurs à réseau

Le second type de couplage que l’on va considérer est celui du couplage par un réseau de diffraction. Tout comme le coupleur à prisme, le principe est d’exciter un mode guidé en utilisant une onde incidente propagative qui génère une onde évanescente de vecteur d’onde équivalent au mode guidé. Au lieu d’utiliser la réflexion totale atténuée, comme dans le cas du prisme, nous allons cette fois ci utiliser le principe de la diffrac-

tion par un réseau périodique 1D pour générer ces évanescents. Nous allons montrer qu'il serait possible d'étudier expérimentalement la non-localité sur le plasmon de surface lui-même, malgré le fait qu'il soit l'un des modes guidés plasmoniques le moins sensible à cette dernière.

3.2.1 Diffraction et ondes évanescentes

Usuellement utilisé en spectroscopie dans les spectroscopes ou les monochromateurs, les réseaux de diffraction permettent de séparer un faisceau incident en plusieurs ordres de diffraction m qui peuvent être transmis ou bien réfléchis. Ce phénomène de diffraction permet également de générer des ordres évanescents, qui peuvent être utilisés pour exciter les modes guidés plasmoniques. Le principe est très similaire au couplage assisté par un prisme, sauf que contrairement à cette méthode, le couplage par réseaux de diffraction n'est pas limité en terme de vecteurs d'onde atteignables. Il est cependant un peu plus complexe à simuler et à maîtriser. Pour une interface entre deux milieux possédant une corrugation de périodicité d , la formule des réseaux permet de prédire le vecteur d'onde et donc la direction des différents ordres réfléchis ou transmis. Si on note k_i la projection du vecteur d'onde d'une onde incidente monochromatique le long de l'interface corruguée et $k_{t,m}$ celle d'un ordre de diffraction m transmis ou réfléchi, nous avons

$$k_{t,m} = k_i + \frac{2\pi m}{d}. \quad (3.5)$$

Chaque ordre de diffraction m peut voir son vecteur d'onde augmenté d'un pas $\frac{2\pi m}{d}$ avec m un entier. En utilisant ce principe il est donc possible de combler la différence de moment entre une onde propagative et un mode guidé plasmonique ce qui permet de réaliser le couplage. Si n_i est l'indice du milieu d'incidence d'une radiation de longueur d'onde λ éclairant un réseau (une interface corruguée périodiquement) avec un angle θ_i nous avons donc comme condition de couplage à un mode guidé d'indice effectif n_{eff} ,

$$n_{eff} = n_i \sin(\theta_i) + \frac{m\lambda}{d}. \quad (3.6)$$

En théorie, un réseau de diffraction est capable de générer un nombre infini d'ordres de diffraction puisque m est un entier relatif quelconque, ce qui permet d'imaginer un couplage avec n'importe quel mode guidé, quel que soit son indice effectif. On peut même imaginer que le mode guidé soit supporté par l'interface corruguée elle-même et pas seulement par la structure située en dessous. L'idée est encore une fois d'éclairer une structure capable de supporter un mode guidé et ensuite de voir l'impact sur la réflectivité de la structure complète. Encore une fois, on s'attend à ce que la non-localité apparaisse comme un décalage dans les creux (résonances) de cette réflectivité. Malgré la simplicité de l'idée, le design d'un tel réseau pour étudier la non-localité est loin d'être évident. L'équation de couplage 3.6 ne prend en compte que la périodicité de la corrugation d , l'angle d'incidence θ_i , et la longueur d'onde de couplage λ . Cette formule ne donne aucune information concernant les autres paramètres comme la forme des corrugations, la profondeur de ces dernières ou encore la fraction de remplissage entre les deux milieux composant l'interface corruguée. Elle ne permet absolument pas de prédire la répartition de l'énergie entre les différents ordres de diffraction, et donc l'efficacité du couplage pour chaque ordre. Cette formule permet en revanche d'intuiter

quelles seraient les configurations les plus propices à l'observation de la non-localité. De plus elle permet de voir qu'un même mode guidé peut être excité par plusieurs ordres de diffraction, c'est à dire à plusieurs longueurs d'onde différentes. Comme l'influence de la non-localité dépend de l'indice effectif, lui même dépendant de la longueur d'onde, cela suggère que l'on pourrait voir sur une même courbe de réflectivité un impact de la non-localité différent en fonction de l'ordre de diffraction qui excite le mode guidé. À la manière de la comparaison entre SRSP et LRSP, ceci est un point important qui incite à mener une telle étude – puisqu'un dispositif expérimental de ce type, avec une réponse plus riche, devrait mieux permettre d'estimer tous les paramètres intervenant dans le modèle. Dans cette partie, nous allons chercher à trouver les paramètres géométriques d'un coupleur capable de montrer l'impact de la non-localité. Comme notre but est de proposer une expérience la plus simple possible, nous allons nous imposer plusieurs contraintes qui permettent de simplifier au maximum l'étude. Ces contraintes nous sont également imposées par la complexité des simulations numériques nécessaires à une telle étude.

3.2.2 Contraintes numériques et expérimentales

Pour simuler la réflectivité de structures que nous allons étudier nous allons utiliser 2 méthodes différentes. La première est la méthode modale de Fourier[75, 89, 90, 91]. Nous disposons ici de codes capables de donner la réflectivité de structures lamellaires comprenant des interfaces corruguées périodiquement. L'avantage est que ces codes sont rapides et peuvent être exécutés sur une machine conventionnelle en quelques heures, voire minutes selon les cas. Malheureusement ces codes, basés sur la méthode modale de Fourier, ne sont pas capables de considérer la nature non locale des métaux. Nous les utiliserons en conjonction avec les relations de dispersion pour concevoir une structure en théorie sensible à la non-localité. Pour obtenir des réflectivités prenant en compte la non-localité nous avons travaillé en collaboration avec l'INRIA qui dispose de codes basés sur la méthode de Galerkin discontinue[92]. Cette collaboration nous permet en plus de valider les résultats de notre méthode modale en comparant avec leurs simulations locales. Les méthodes modales de Fourier sont connues pour souffrir d'une mauvaise convergence dans certains cas[93] et cela nous permet d'outrepasser ce problème. Le plus gros problème des codes de l'INRIA est le temps et la puissance de calcul qu'ils nécessitent. Ce temps est plus de l'ordre de la semaine sur un *cluster*, ce qui empêche une étude prospective brutale.

La première contrainte qui nous est imposée est que le logiciel DIOGENeS utilisé par l'INRIA ne pouvait à ce moment pas simuler de réseaux de diffraction éclairés autrement qu'en incidence normale. Contrairement à la première partie où nous avons calculé des réflectivités en fonction de l'angle d'incidence du faisceau, nous allons cette fois ci fixer ce dernier à zéro et faire varier uniquement la longueur d'onde du faisceau incident. Nous considérerons donc des spectres de la réflectivité en fonction de la longueur d'onde d'incidence. En réalité cette contrainte est plutôt une bonne chose. Pour la simplicité de l'expérience il est en fait bienvenu que toute la lumière réfléchi le soit dans l'ordre 0. En incidence normale, la formule des réseaux pour les ordres m réfléchis est

$$n_i \sin(\theta_{r,m}) = -\frac{m\lambda}{d}, \quad (3.7)$$

où $\theta_{r,m}$ est l'angle de l'ordre m réfléchi. Il existe un ordre réfléchi propagatif si

$$-1 \leq \sin(\theta) \leq 1, \quad (3.8)$$

c'est à dire

$$\left| \frac{m\lambda}{n_i d} \right| \leq 1. \quad (3.9)$$

L'expérience imposera que le capteur collectant la lumière réfléchi soit situé au dessus de la structure, c'est à dire dans l'air. De plus, nos méthodes ou bien celle de l'INRIA imposent un faisceau incident dans un milieu sans pertes. En imposant une onde incidente normale à l'interface corruguée et de l'air comme milieu d'incidence la condition d'existence d'un ordre réfléchi devient

$$\left| \frac{m\lambda}{d} \right| \leq 1. \quad (3.10)$$

Tant que nous considérons des longueurs d'onde λ supérieures à la périodicité de la corrugation d , nous sommes donc certains qu'il n'existe qu'un seul ordre de diffraction réfléchi. Ceci est vrai tant qu'il y a de l'air directement au dessus de l'interface corruguée. Mais c'est en fait également vrai même si une couche de diélectrique sépare l'air de l'interface corruguée. L'équation (3.9) nous permet d'imaginer que si le milieu diélectrique au dessus de la corrugation n'est pas de l'air, alors on peut avoir un ordre réfléchi pour $\lambda \geq d$. On peut imaginer que cet ordre réfléchi le soit alors dans le diélectrique – mais en aucun cas cela ne peut générer de nouvel ordre de diffraction dans l'air pour autant. Je vais détailler ici le principe de la méthode modale de Fourier, dans le cadre de laquelle il apparaît très clairement que ce n'est pas possible. On pourra trouver les détails complets de la méthode dans [75].

Dans le cadre des méthodes modales, on définit l'efficacité par ordre de diffraction réfléchi R_m comme un rapport entre flux d'énergie montants et descendants moyennés sur une période du réseau. Pour un milieu lamellaire homogène par morceau dans la direction \hat{z} et une structure globale présentant une périodicité d dans la direction \hat{x} on a

$$R_m = \frac{\Pi_{z,m}^{up}}{\sum_m \Pi_{z,m}^{down}}, \quad (3.11)$$

avec

$$\Pi_{z,m}^{up} = \Re \left(\frac{1}{d} \int_0^d \langle S \rangle_{z,m}^{up} \right), \quad (3.12)$$

$$\Pi_{z,m}^{down} = \Re \left(\frac{1}{d} \int_0^d \langle S \rangle_{z,m}^{down} \right). \quad (3.13)$$

Pour obtenir ces quantités, on repart en fait d'une équation d'onde pour chaque polarisation (TE ou TM). Grâce à la périodicité du problème on peut utiliser le théorème de Bloch pour décomposer les champs E_y ou H_y (selon la polarisation) sous une forme pseudo-périodique. Parce que justement la structure est périodique, on peut décomposer la permittivité de chaque couche, de la forme $\epsilon(x)$, en série de Fourier. Puis, on projette l'équation d'onde sur la base de Fourier afin d'obtenir une équation d'onde par composante de Fourier. Cela permet d'écrire le problème comme un problème aux valeurs propres – une matrice à diagonaliser en somme. La dimension du problème est en théorie infinie, puisqu'il y a une infinité de modes de Fourier. En pratique, on choisit un

certain ordre N de troncature des séries de Fourier pour le résoudre numériquement. Cela revient à considérer uniquement un certain nombre d'ordres de diffraction n tel que $n = 2N + 1$. Pour la polarisation TM, le champ H_y dans un milieu homogène s'exprime comme

$$H_y = \sum_{-N}^N (A_m e^{ik_{z,m}z} + B_m e^{-ik_{z,m}z}) e^{i(k_{x,m}x - \omega t)}, \quad (3.14)$$

avec $k_{z,m} = \sqrt{k^2 \epsilon - k_{x,m}^2}$ la constante de propagation de l'ordre m dans la direction \hat{z} et $k_{x,m} = k_{x,0} + \frac{m2\pi}{d}$ la constante de propagation de l'ordre m dans la direction \hat{x} (direction de périodicité). Ici $k = \frac{\omega}{c}$ correspond au nombre d'onde dans le vide. Il n'est pas indicé 0 pour éviter la confusion. Les différents coefficients en amplitude sont différents pour chaque milieu i de permittivité ϵ_i , périodique dans la direction \hat{x} ou non, et sont liés entre eux par des matrices S construites sur la continuité des champs à chaque interface, condition qu'on décompose aussi sur la base de Fourier. On peut ensuite montrer que pour un milieu homogène sans pertes la moyenne sur une période du flux du vecteur de Poynting peut se décomposer en un flux montant

$$\Pi_{z,m}^{up} = \Re \left(\frac{k_{z,m}}{2\omega\epsilon_0\epsilon} |A_m|^2 \right), \quad (3.15)$$

et un flux descendant

$$\Pi_{z,m}^{down} = \Re \left(\frac{k_{z,m}}{2\omega\epsilon_0\epsilon} |B_m|^2 \right). \quad (3.16)$$

En considérant l'onde incidente comme l'unique ordre descendant dans le milieu supérieur de la structure lamellaire, on a pour un ordre m

$$R_m = \frac{\Pi_{z,m}^{up}}{\Pi_{z,0}^{down}}, \quad (3.17)$$

$$= \Re \left(\frac{k_{z,m} |A_m^{sup}|^2}{k_{z,0}} \right). \quad (3.18)$$

où l'on a considéré une amplitude unité pour le faisceau incident ($B_0 = 1$). Tout comme nous l'avons vu au chapitre précédent, seuls les ordres propagatifs contribuent au flux du vecteur de Poynting. Dans un milieu sans pertes, $k_{z,m}$ peut être réelle ou imaginaire pure. Et finalement un ordre réfléchi est propagatif si

$$\frac{k_{z,m}}{k_{z,0}} \in \mathbb{R}. \quad (3.19)$$

En incidence normale, la constante de propagation dans la direction \hat{x} de l'ordre zéro est nulle ($k_{x,0} = 0$) et donc

$$k_{z,0} = k\sqrt{\epsilon}, \quad (3.20)$$

$$k_{z,m} = \sqrt{k^2 \epsilon - \left(\frac{m2\pi}{d} \right)^2}. \quad (3.21)$$

La condition pour qu'un ordre réfléchi soit propagatif devient alors

$$\frac{|m|\lambda}{d} \leq \sqrt{\epsilon}. \quad (3.22)$$

Cette équation n'est pas tout à fait similaire à l'équation (3.9) puisque le $\sqrt{\epsilon}$ est l'indice optique de la couche supérieure. Si l'on choisit de l'air comme milieu supérieur, alors l'équation (3.9) montre que quel que soit la structure en dessous, c'est à dire quel que soit la structure entre l'air et la corrugation, alors $\lambda > d$ est la seule et unique condition à respecter pour s'assurer d'avoir un unique ordre propagatif réfléchi. Au delà de la notion de contrainte expérimentale ou numérique, le fait de se placer en incidence normale permet aussi de faciliter les prédictions basées sur les courbes de dispersion. En reprenant la relation de couplage (équation (3.6)) et en considérant une incidence normale nous obtenons une longueur d'onde de couplage $\lambda_{c,m}$ pour un ordre m tel que

$$\lambda_{c,m} = \frac{\Re(n_{eff}(\lambda_{c,m}))}{m}d. \quad (3.23)$$

Nous utiliserons un peu plus tard cette relation pour estimer l'impact de la non-localité avant même de calculer les réflectivités.

La prochaine contrainte que nous allons aborder est celle de la forme de la corrugation. Jusqu'ici nous n'avons rien précisé sur cette dernière. Dans le cadre des méthodes modales, la simplicité est de considérer une interface avec une corrugation rectangulaire, et non pas sinusoidale, par exemple. C'est, d'autre part, le plus simple d'un point de vue expérimental puisque ce type de structuration peut être obtenue par lithographie notamment. Comme nous voulons étudier le plasmon de surface, cela nous permet de pouvoir imaginer l'excitation d'un plasmon de surface directement le long d'une interface métallique crénelée.

Dans une méthode modale, la structure est divisée en couches successives périodiques. Une couche réseau, lorsqu'elle est présente, permet de produire une structure crénelée naturellement, puisqu'il s'agit d'une couche contenant deux milieux de permittivités différentes ϵ_1 et ϵ_2 répartis de telle manière que pour $x \in [0; d] \pmod d$ on a

$$\epsilon(x) = \epsilon_1 \text{ si } x \leq a_G, \quad (3.24)$$

$$\epsilon(x) = \epsilon_2 \text{ sinon.} \quad (3.25)$$

avec a_G la largeur du créneau de permittivité ϵ_1 .

Enfin, il nous reste à considérer les contraintes concernant la non-localité. Comme nous voulons rendre sensible le plasmon de surface à cette dernière, il paraît évident qu'il faut utiliser un diélectrique de permittivité élevée. À cause de cela, les longueurs d'onde que nous allons considérer seront bien évidemment au minimum dans la gamme du visible, c'est à dire là où on s'attend à le plus d'influence de la non-localité sans pour autant avoir trop de pertes. De plus, puisque nous souhaitons pouvoir voir sur une même courbe de réflectivité un plasmon de surface à la fois sensible et insensible à la non-localité nous étendrons la gamme de longueur d'onde jusqu'au proche infrarouge.

Il serait bien évidemment possible d'essayer d'exciter des modes de plus grands indices effectifs que le plasmon de surface [94, 95, 96, 97]. Mais nous allons voir que l'interprétation des spectres en réflexion obtenus dans le cas d'un coupleur à réseau est bien plus complexe que celle que l'on peut obtenir dans le cas d'un coupleur à prisme. Ainsi, se focaliser sur le seul plasmon de surface semble un bon compromis entre influence de la non-localité et simplicité d'interprétation des résultats.

Finalement, en considérant ces contraintes, on peut imaginer deux structures différentes aptes à mettre en lumière la non-localité. Ces deux configurations sont montrées sur la figure 3.8. La première (à gauche sur la figure 3.8) se compose de haut en bas, d'air comme milieu d'incidence, puis d'un réseau gravé sur un diélectrique d'épaisseur h_G , lui même posé sur une couche homogène de ce même diélectrique d'épaisseur h_D ,

et enfin d'une couche de métal. Dans cette configuration, la corrugation entre air et diélectrique ne sert que pour le couplage. Le plasmon de surface est alors excité le long de l'interface entre diélectrique et métal. Le fait que l'interface métallique soit parfaitement plane permet au plasmon de surface de se propager en étant perturbé seulement par le fait que la queue évanescente de ce dernier atteint l'air au dessus du diélectrique. Ceci aura tendance à diminuer son indice effectif et donc la longueur d'onde de couplage. La seconde structure consiste de haut en bas, d'air comme milieu d'incidence, d'une couche homogène d'un diélectrique d'épaisseur h_D , puis d'une couche réseau composée du même diélectrique et d'un métal, et enfin d'une couche homogène de métal. Dans cette configuration, le plasmon de surface est excité directement le long de la corrugation. Nous allons voir que ceci perturbe grandement sa propagation, mais ce n'est pas une mauvaise chose pour l'étude de la non-localité.

Dans les deux configurations, l'épaisseur de métal est supérieure à la centaine de nanomètres pour nous permettre de négliger un quelconque substrat dans les simulations. Concernant les matériaux nous utiliserons de l'argent comme métal, et du TiO_2 comme diélectrique. Les deux sont modélisés par un modèle généralisé pour pouvoir comparer le plus exactement possible avec les simulations de l'INRIA. Ce TiO_2 est différent de celui utilisé jusque ici. Nous le modélisons en reprenant les données expérimentales de Siefke et.al[98] qui correspondent à du TiO_2 déposé par *atomic layer deposition* (ALD). Nous utilisons ces données dans l'idée que l'ALD sera la méthode utilisée pour la conception de la structure. De plus ces dernières données sont bien plus récentes que celle de Devore utilisées jusque ici. Cela implique une permittivité légèrement plus basse pour le TiO_2 ainsi que la prise en compte de pertes dans le matériau.

Nous allons commencer par discuter de la première configuration impliquant un réseau gravé directement sur le diélectrique et une interface diélectrique/métal parfaitement plane.

3.2.3 Réseau diélectrique

La configuration que nous considérons ici présente plusieurs avantages. C'est en fait la plus simple à la fois à concevoir et à étudier. D'un point de vue expérimental, il est en effet simple de d'abord concevoir un système bicouche composé d'un diélectrique déposé sur un métal, puis de graver un réseau à la surface de ce dernier par des techniques de lithographie. Le choix des paramètres sera détaillé dans la partie suivante et nous nous concentrerons pour l'instant sur l'interprétation des résultats.

La figure 3.9 montre un exemple de réflectivité pour une telle structure. Les couples de barres verticales représentent la position théorique des résonances dues à l'excitation du plasmon de surface sans prise en compte de la non-localité mais en prenant en compte l'épaisseur finie du diélectrique. La position des résonances correspondant aux premiers ordres $m = 1, 2$ varie énormément en fonction de l'épaisseur totale de diélectrique mais la résonance est quelque part entre les deux. Elle n'est cependant pas exactement au milieu ce qui pourrait s'expliquer par le fait que la position des résonances est également sensible à la fraction de remplissage d'air f définie comme

$$f = \frac{a_G}{d_G}. \quad (3.26)$$

Comme la surface métallique est parfaitement plane, la position de ces résonances en fonction de la longueur d'onde est assez bien prédite par la formule (3.23). Ce n'est pas le cas pour la résonance qui pourrait correspondre à l'ordre $m = 4$. La différence entre simulations locales et non locales définie comme

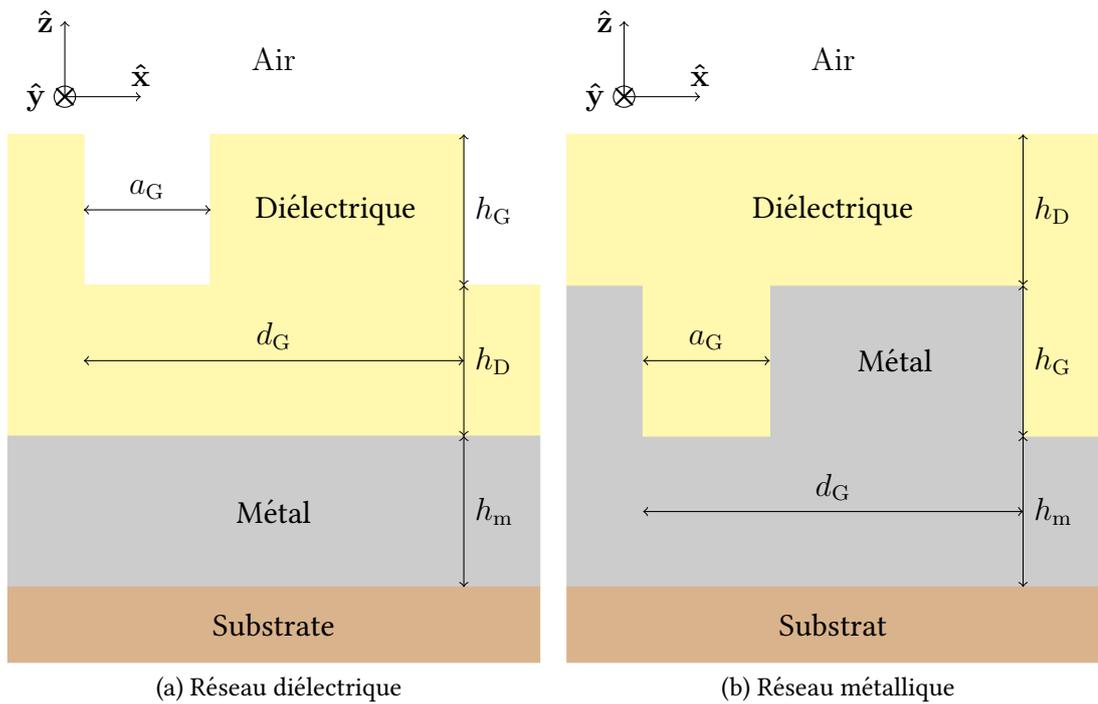


FIGURE 3.8 – Représentation schématique des deux configurations possibles pour exciter un plasmon de surface via un réseau de diffraction. Dans les deux cas le faisceau incident arrive de l'air en incidence normale. Les structures sont invariantes selon \hat{y} et périodiques selon \hat{x} . (a) : le réseau est gravé sur le diélectrique. Le plasmon de surface est excité le long de l'interface diélectrique/métal. (b) : le réseau est gravé le long de l'interface métallique. Le plasmon de surface est excité sur l'interface haute du réseau ou bien dans les fentes de ce dernier.

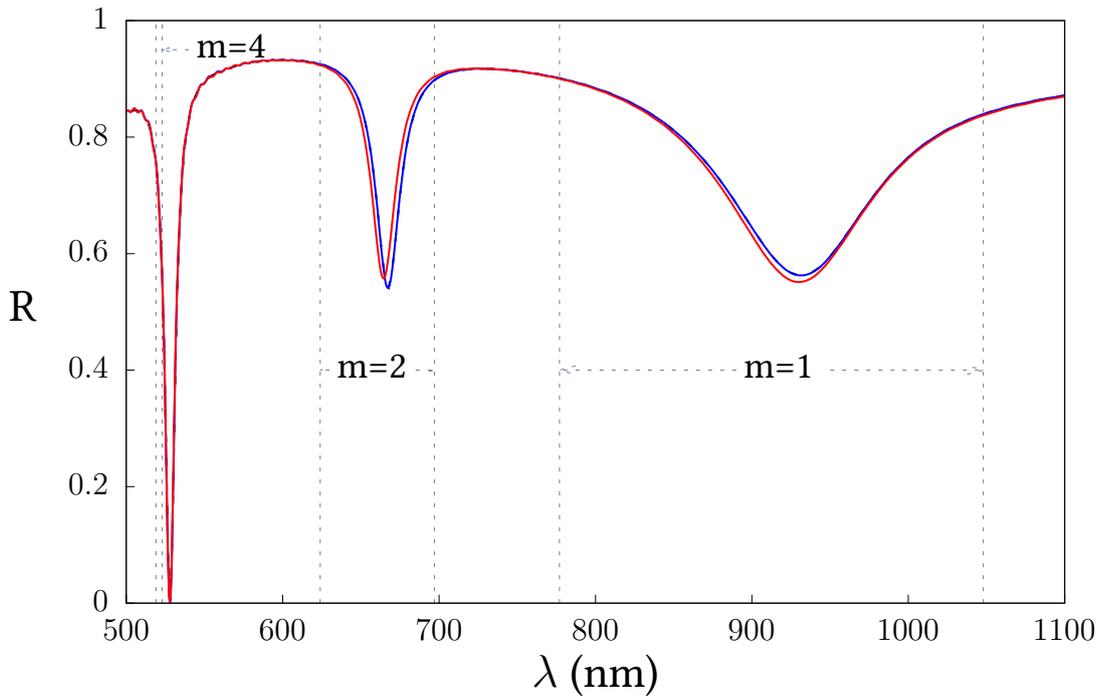


FIGURE 3.9 – Réflectivité R en fonction de la longueur d'onde λ . Le métal est de l'argent et le diélectrique du TiO_2 . Les paramètres géométriques sont $h_m = 150$ nm, $d_G = 500$ nm, $h_G = 80$, $a_G = \frac{1}{3}d_G$. Les couples de barres horizontales représentent $\lambda_{c,m}$. Pour chaque couple, les barres les plus à gauche représentent la position des résonances en tenant compte d'une épaisseur de diélectrique h_D et celle de droites une épaisseur $h_G + h_D$.

$$\Delta\lambda_{c,m} = \lambda_{c,m}^{\text{local}} - \lambda_{c,m}^{\text{nonlocal}}, \quad (3.27)$$

est pratiquement identique avec ce qui peut être prédit en utilisant les relations de dispersion pour les ordres $m = 1, 2$ (respectivement 1 et 3 nm). Cependant le creux que l'on pourrait attribuer à l'ordre $m = 4$ ne présente aucune différence entre cas local et cas non local, alors qu'il devrait présenter un décalage d'au moins 5 nm – en tout cas si il était d'origine plasmonique. Cela pourrait s'expliquer par une mauvaise convergence de la méthode modale mais les simulations locales de l'INRIA donnaient à ce stade là le même résultat que notre méthode modale. Selon Nikolai Schmitt avec qui j'ai réalisé ce travail, il n'était pas nécessaire d'attendre une meilleure convergence puisque si la non-localité avait dû avoir un impact nous l'aurions déjà vu à ce stade de la simulation. En fait, il est plus probable qu'il s'agisse d'une résonance liée à un mode guidé propagatif (par opposition au plasmon de surface évanescent dans la direction \hat{z}) dans la couche diélectrique. Nous avons bien vu ci-dessus qu'il ne pouvait pas y avoir d'ordre remontant dans l'air autre que l'ordre 0. Cela implique aussi qu'il est tout à fait possible d'exciter un mode guidé propagatif dans la couche de diélectrique, voir dans le créneau diélectrique de la couche réseau. En reprenant la formule des réseaux en incidence normale, on a potentiellement un ordre propagatif si

$$\frac{|m|\lambda}{dn_{\text{TiO}_2}} \leq 1. \quad (3.28)$$

On a n_{TiO_2} compris entre 2.25 et 2.5. Il est donc possible d'avoir des ordres propagatifs pour des longueurs d'onde inférieures à 1150 nm. Chacun des trois creux est donc

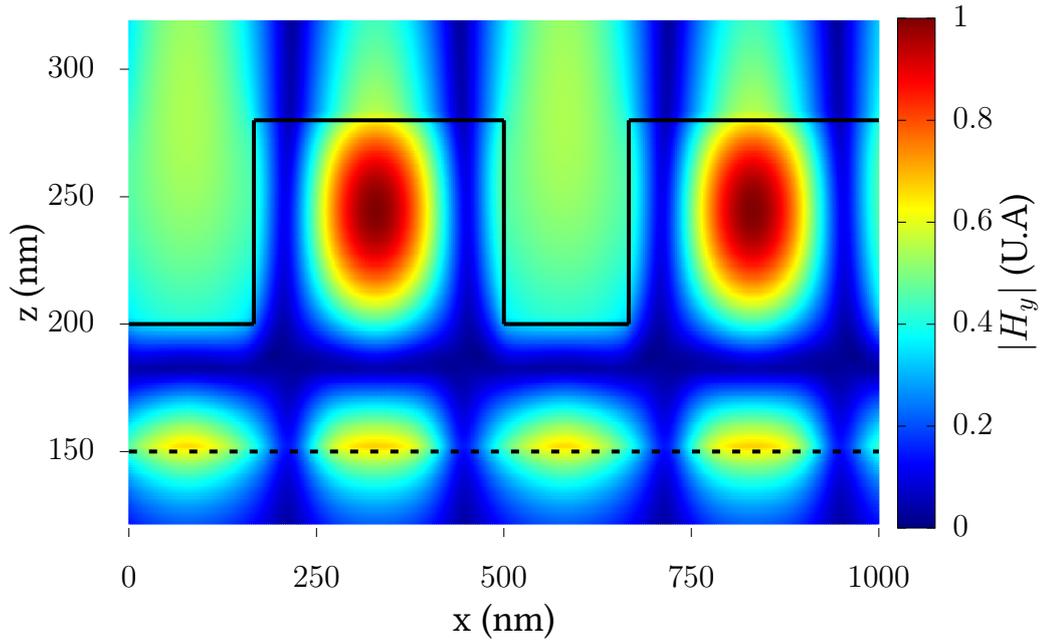


FIGURE 3.10 – Intensité de $|H_y|$ telle que $\lambda = 528$ nm (creux le plus à gauche sur la figure 3.9) pour 2 périodes de la structure montrée sur 3.8a. Les traits pointillés indiquent l’interface diélectrique/métal. Les traits pleins représentent le réseau.

potentiellement dû à l’excitation d’un de ces modes. Cependant le fait que la non localité ait de l’influence est un signe fort que la résonance que l’on excite est d’origine plasmonique. En fait, la résonance que l’on pourrait attribuer à un plasmon couplé via l’ordre de diffraction $m = 4$ est essentiellement l’excitation d’un mode propagatif alors que les deux autres sont essentiellement d’origine plasmonique. Concernant $m = 4$, il ne s’agit cependant pas uniquement d’un mode propagatif.

La figure 3.10 montre l’intensité du champ $|H_y|$ (équation (3.14)) pour notre structure éclairée par une onde plane. On peut voir que la majorité du champ se trouve dans le créneau diélectrique, mais qu’il existe aussi un plasmon de surface à l’interface métallique. Ce dernier présente des noeuds et des ventres à cause de l’incidence normale. En incidence normale, l’excitation d’un ordre m est systématiquement accompagné de l’ordre $-m$, ce qui mène à un phénomène d’interférence. On peut alors lire la longueur d’onde effective du plasmon de surface sur ce genre de carte. La distance entre deux maxima de $|H_y|$ doit en effet correspondre à une demi longueur d’onde effective, au moins tant que le plasmon n’est pas trop perturbé par le phénomène d’interférence. Cependant dans le cas de l’ordre $m = 4$ ceci n’est pas tout à fait vrai. La figure 3.11 montre les parties réelle et imaginaire du champ H_y au niveau de l’interface métallique. Si le plasmon était bien excité, on pourrait lire sa longueur d’onde effective directement sur la valeur absolue de H_y (qui correspond à l’énergie). Cependant pour l’ordre $m = 4$, cette longueur d’onde effective ne peut se lire que dans la pseudo périodicité de $\Im(H_y)$. Et encore, on peut lire trois valeurs différentes ce qui indique une très fortes perturbation du plasmon. Cependant additionner chacune des distances entres les crêtes et diviser par le nombre de longueurs d’onde que cela représente permet d’obtenir une estimation d’une longueur d’onde effective. Cela à revient à compter le nombre de longueur d’onde effective par pas du réseau. En comparaison, les figures 3.12 et 3.13 montrent la valeur absolue, la partie réelle et la partie imaginaire du champ pour la résonance $m = 2$. Cette fois, bien que légèrement perturbé, le champ est sur-

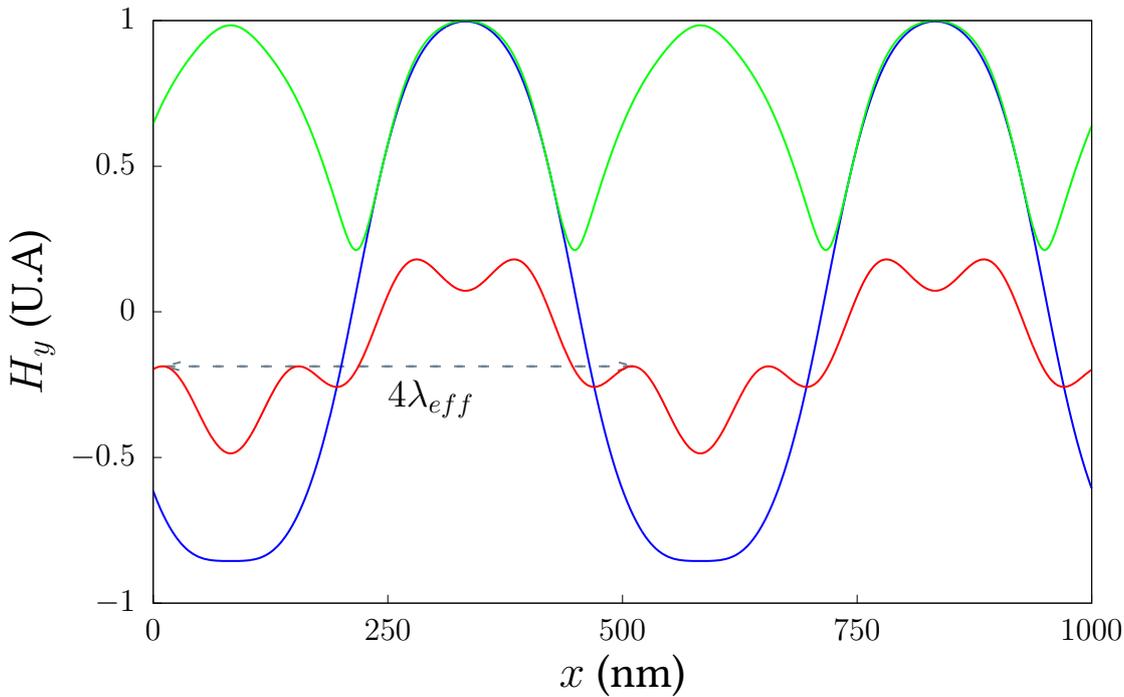


FIGURE 3.11 – Valeur absolue (courbe verte), partie réelle (courbe bleu) et partie imaginaire (courbe rouge) de H_y le long de l’interface diélectrique métal pour $\lambda = 528$ nm et $x \in [0 : 2d_G]$. On peut lire un λ_{eff} de 125 nm dans la partie imaginaire. Le λ_{eff} calculé avec une dispersion serait de 128 nm.

tout concentré le long de l’interface métallique et la distance entre 2 maxima de $|H_y|$ correspond bien à une demi longueur d’onde effective du plasmon de surface. Finalement, c’est ce qui rend le coupleur à réseau plus complexe à étudier que le coupleur à prisme. Le phénomène d’interférence complique l’interprétation et la nature d’une résonance, plasmonique ou classique, n’est jamais parfaitement bien déterminée. Les cartes de champ ne sont donc qu’indicatives. Par contre, plus un mode est d’origine plasmonique, plus le champ est fort dans le métal et plus l’influence de la non-localité se fait sentir.

Quoi qu’il en soit nous n’avons pas poussé plus loin l’étude car cette configuration présente également un inconvénient de taille. Ce sont les paramètres h_G et a_G qui jouent sur la répartition en énergie des différents ordres de diffraction. Comme le réseau est gravé sur le diélectrique, et qu’il est nécessaire que ce dernier possède une certaine épaisseur pour exciter correctement plusieurs ordres, il est très difficile de trouver des cas où de multiples ordres sont excités correctement, c’est à dire d’avoir des creux profonds et fins, sensibles à la non-localité. Si l’on augmente trop l’épaisseur totale de diélectrique, cette dernière sera trop épaisse pour permettre à l’onde évanescente générée de venir exciter le plasmon de surface. On augmente aussi le risque d’avoir des modes guidés non plasmoniques. Si l’on prend une épaisseur totale trop fine, la queue évanescente du plasmon de surface sera majoritairement située dans l’air, ce qui diminuera grandement l’impact de la non-localité en diminuant l’indice effectif. L’interconnexion entre l’impact de l’épaisseur de la couche réseau sur la répartition en énergie par ordres et l’impact de la non-localité fait que cette configuration n’est pas forcément la plus simple à concevoir. De plus il semble difficile d’exciter des résonances plasmoniques pour des ordres de diffraction élevés et donc de maximiser $\Delta\lambda_{c,m}$. Cependant cette configuration présente malgré tout quelques avantages : comme l’interface métallique est parfaitement plane, la formule (3.23) est assez précise pour prédire les résonances plasmoniques, et les $\Delta\lambda_{c,m}$ lues sur la réflectivité sont en

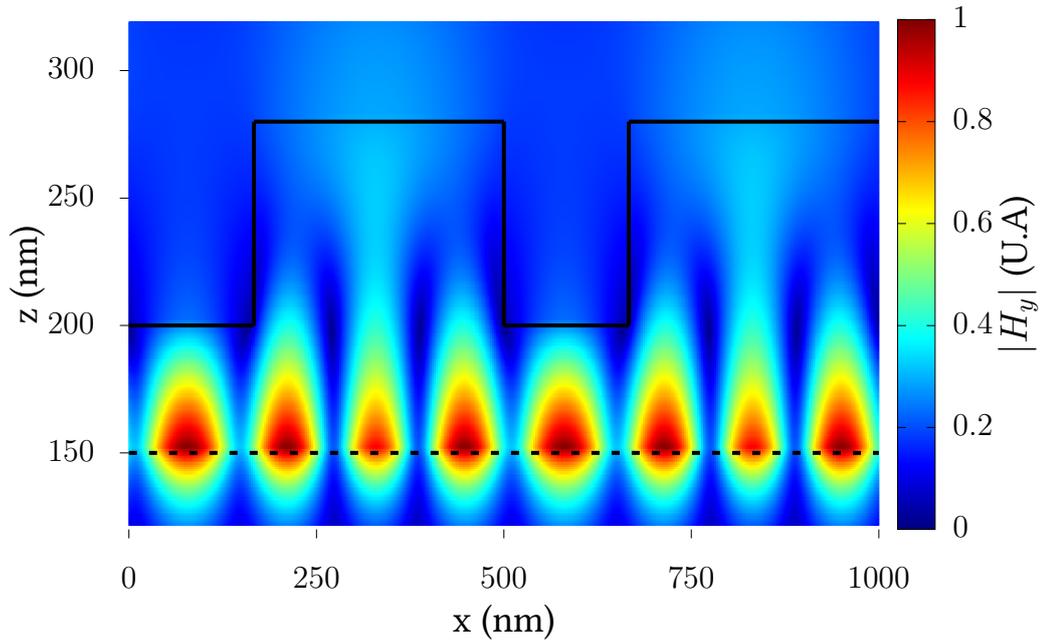


FIGURE 3.12 – Intensité de $|H_y|$ telle que $\lambda = 668$ nm (résonance $m = 2$ sur la figure 3.9) pour 2 périodes de la structure montrée sur 3.8a. Les traits pointillés indiquent l'interface diélectrique/métal. Les traits plein représentent le réseau.

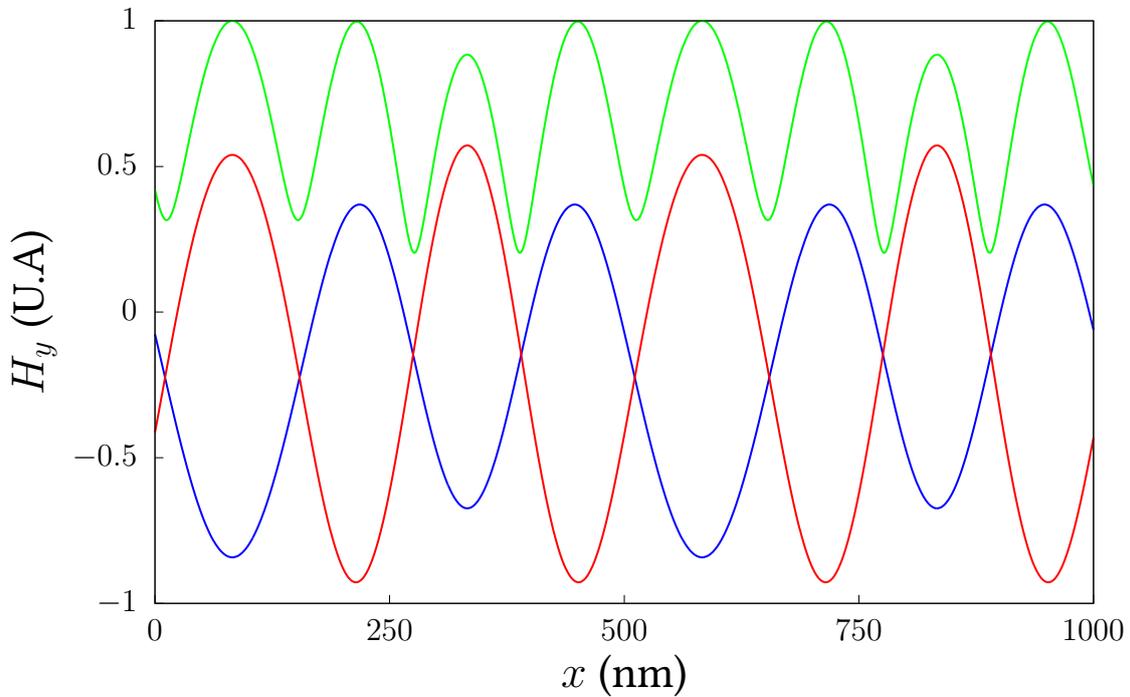


FIGURE 3.13 – Valeur absolue (courbe verte), partie réelle (courbe bleu) et partie imaginaire (courbe rouge) de H_y le long de l'interface diélectrique/métal pour $\lambda = 668$ nm et $x \in [0 : 2d_G]$. On peut lire un λ_{eff} de 250 nm dans la valeur absolue. Le λ_{eff} calculé avec une dispersion serait compris entre 230 et 310 nm.

accords avec les prédictions basées sur les relations de dispersions. On peut de plus noter que d'un point de vue numérique, le fait que le réseau soit entièrement diélectrique permet une convergence rapide des méthodes modales. L'ordre de troncature n'as pas besoin d'être plus grand que $N = 50$ ce qui permet des simulations (locales) assez rapides.

Finalement, nous avons préféré nous concentrer plutôt sur la seconde configuration. Cette configuration, bien que plus complexe en terme d'interprétation est aussi plus riche en phénomènes physique, dont certain augmentent l'impact de la non-localité.

3.2.4 Réseau métallique

La structure que nous considérons cette fois ci est montrée sur la partie droite de la figure 3.8. Le réseau est gravé directement à l'interface diélectrique/métal. Le plasmon peut alors se propager sur la partie haute du réseau ou bien dans les fentes elle même. À partir d'ici nous allons détailler la stratégie que nous avons mise en place pour déterminer les différents paramètres géométriques. Cette stratégie n'est pas parfaite, et il a tout de même fallu de la prospection brutale pour arriver à un résultat intéressant.

Le paramètre le plus évident à déterminer est l'épaisseur de la couche métallique h_m . La seule contrainte sur ce dernier est d'ordre expérimentale. Afin que le plasmon de surface ne soit pas perturbé par la présence d'un quelconque substrat h_m doit être pris suffisamment large. Nous avons choisis $h_m = 150$ nm, une valeur au moins dix fois supérieure à δ_m .

Plus difficile à déterminer, l'épaisseur de la couche diélectrique h_D doit être choisie en considérant l'impact de la non-localité et la présence éventuelle de modes guidés classiques susceptibles de perturber l'interprétation des résultats. L'idéal pour que l'influence de la non-localité soit maximum est de maximiser h_D . Cependant faire cela poserait deux problèmes. L'apparition de modes guidés conventionnels, nombreux, ainsi que l'impossibilité d'étudier le plasmon de surface non influencé par la non-localité. Heureusement, plus l'indice effectif du plasmon de surface est haut et plus sa pénétration dans le diélectrique est faible. Il est donc possible de trouver un compromis pour lequel le plasmon excité par une petite longueur d'onde est très confiné alors que ce même plasmon excité par une grande longueur d'onde l'est beaucoup moins. Aux grandes longueurs d'onde la queue évanescence du plasmon de surface peut atteindre l'air ce qui contribue à diminuer son indice effectif et donc l'influence de la non-localité. Après plusieurs tests nous avons trouvé qu'une valeur de h_D de 85 nm est un bon compromis qui permet d'obtenir un plasmon à la fois sensible et presque insensible à la non-localité suivant sa longueur d'onde d'excitation. Ce choix limite également la présence de modes guidés classiques dans le diélectrique. La figure 3.14 montre la courbe de dispersion d'un plasmon de surface se propageant le long de l'interface métallique en prenant en compte la valeur finie de h_D . Cette figure montre aussi les courbes de dispersion du plasmon de surface se propageant le long d'une interface Air/Ag et TiO₂/Ag en considérant un diélectrique d'épaisseur infinie. Évidemment, la courbe de dispersion calculée avec un h_D fini se situe entre les deux. Elle tend vers celle calculée en utilisant de l'air pour les basses fréquences et vers celle calculée en utilisant du TiO₂ pour les fréquences plus hautes. Cette figure illustre également le couplage par le réseau. Chacune des barres verticales représente l'augmentation du vecteur d'onde causée par la diffraction pour les cinq premiers ordres. Chaque point de croisement entre ces barres et la courbe de dispersion correspond à la réalisation de la condition de couplage.

En utilisant cette dispersion en conjonction avec l'équation (3.23) on a ensuite es-

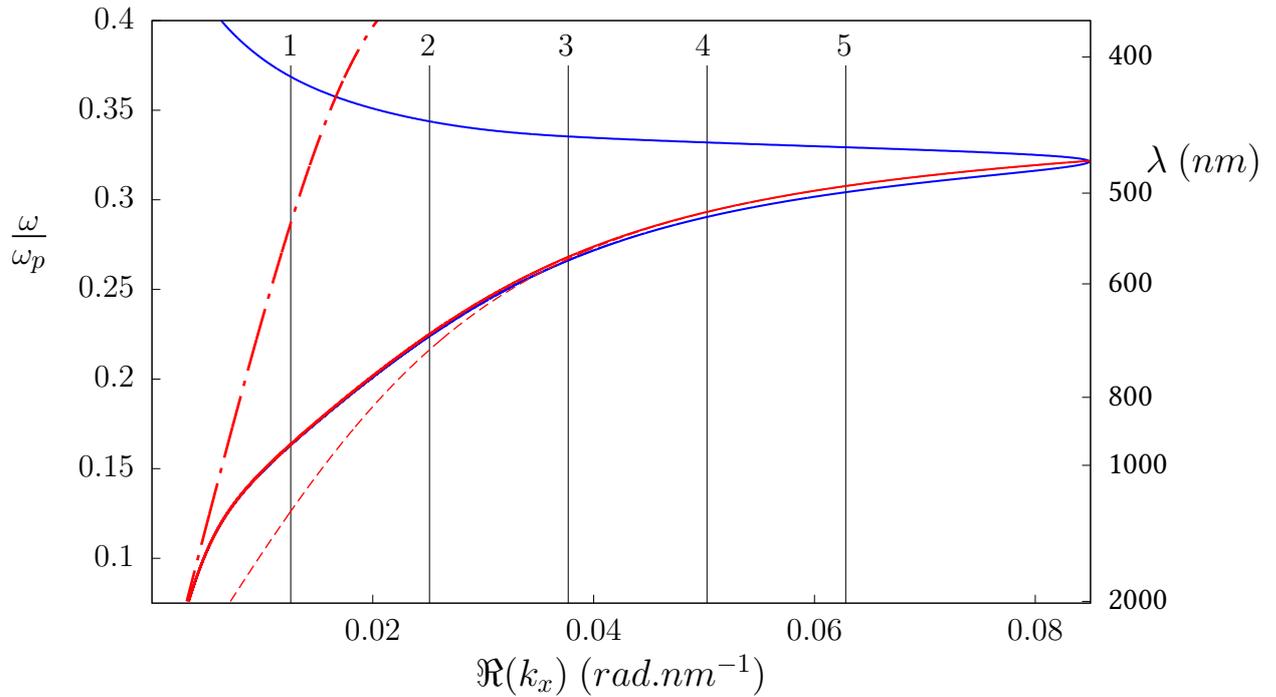


FIGURE 3.14 – Courbe de dispersion du plasmon de surface ($\Re(k_x)$) pour une épaisseur finie de TiO_2 , $h_D = 85$ nm. La courbe pleine bleue est le résultat du calcul local et la rouge le résultat du calcul non local. Les courbes pointillées sont les résultats du calcul non local pour un diélectrique d'épaisseur infinie. De haut en bas on a considéré une interface Air/Ag et TiO_2/Ag . Les barres verticales numérotées illustrent le gain de vecteur d'onde dû à la diffraction par le réseau pour des ordres caractérisés par $m \in [1 : 5]$ pour $d_G = 500$ nm. Le cinquième ordre permet un couplage pour une longueur d'onde d'approximativement 500 nm soit un indice effectif de 5.

timé $\Delta\lambda_{c,m}$ en fonction du pas du réseau. C'est ce que montre la figure 3.15a. Cette figure nous permet de choisir le pas optimal pour la mise en évidence de la non-localité. En considérant que l'ordre $m = 5$ soit le plus haut que l'on puisse atteindre, nous avons choisi un pas de 500 nm. Nous espérons alors un *blue shift* maximum de 5.5 nm pour cet ordre. Il serait en théorie possible d'obtenir des $\Delta\lambda_{c,m}$ plus grands en considérant un pas plus faible. Cela permettrait d'atteindre la partie haute de la relation de dispersion avec un ordre m plus faible que le cinquième mais comme nous voulons préserver au maximum le premier ordre de diffraction cela ne serait pas dans notre intérêt. De plus, il ne semble pas réaliste d'essayer d'exciter le plasmon de surface pour des longueurs d'onde inférieures à 500 nm. C'est ce que montre la figure 3.15b qui montre la distance de propagation typique du plasmon de surface le long de l'interface. Globalement, la distance de propagation du plasmon de surface se retrouve inférieure à la centaine de nanomètres pour des longueurs d'onde inférieures au pas choisi.

Enfin, il nous reste à déterminer a_G et h_G . Alors que dans le cas du réseau diélectrique ces derniers gouvernaient surtout l'efficacité de couplage, ici ils influencent aussi la propagation du plasmon de surface. Il faut les choisir de façon à ce qu'ils ne perturbent pas trop la propagation du plasmon de surface tout en assurant un couplage efficace pour plusieurs ordres de diffraction. Il n'existe pas de formule simple permettant de les relier directement à l'efficacité de couplage. Il a donc fallu adopter une approche prospective et tester différents jeux de paramètres. L'idée de départ est que pour h_G suffisamment faible, le plasmon de surface n'est que très peu perturbé. La formule (3.23) est donc applicable et doit permettre l'identification des creux comme un couplage d'un ordre m avec le plasmon de surface. Avec l'augmentation en épaisseur de la corruga-

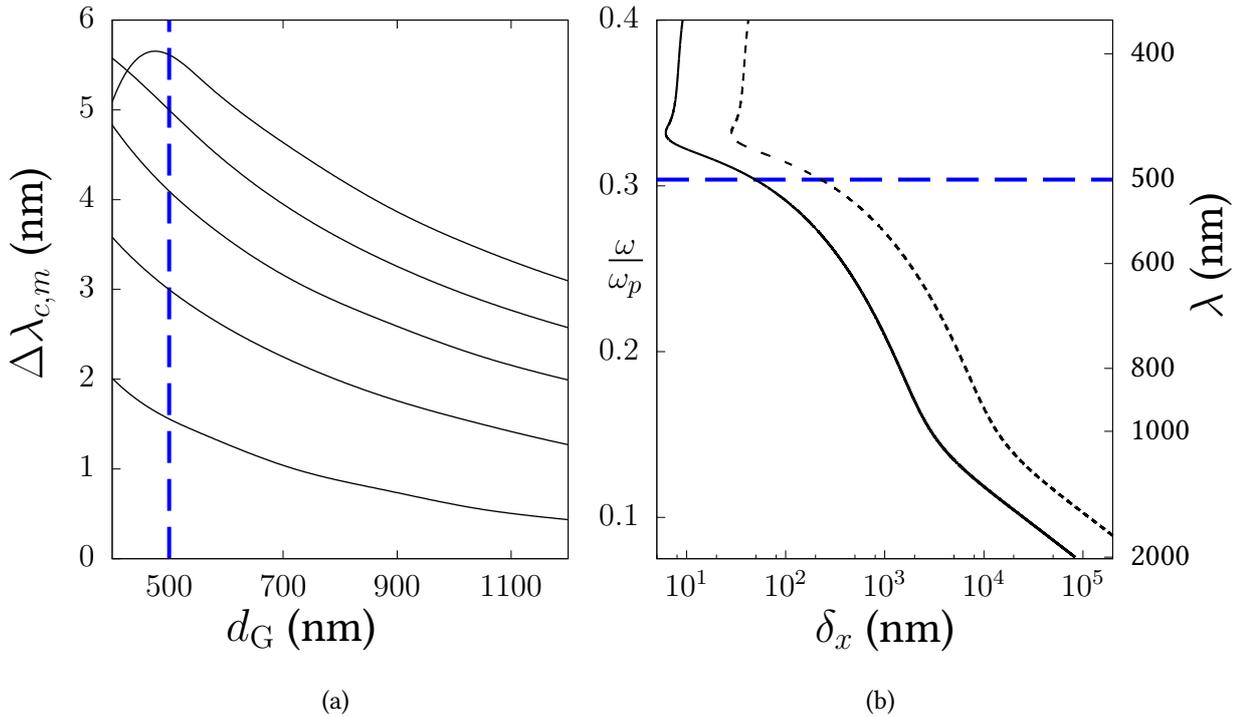


FIGURE 3.15 – (a) : Différences entre longueurs d’onde de couplage locales et non locales pour les cinq premiers ordres de diffraction. L’ordre va de 1 (courbe la plus basse) à 5 (courbe la plus haute). Le trait bleu horizontal illustre le pas que l’on a choisi. (b) : Distances de propagation du plasmon de surface. La courbe pleine correspond à δ_x tel que $e^{-2\Im(k_x)x} = \frac{1}{e}$ et la courbe pointillée tel que $e^{-2\Im(k_x)x} = \frac{1}{100}$. La barre bleu horizontal illustre la longueur d’onde minimale que l’on cherchera à atteindre.

tion, le plasmon de surface est perturbé et les longueurs d’onde de résonance décalées. En commençant avec une épaisseur réseau très faible et en l’augmentant petit à petit, on s’attend à être capable de suivre ce décalage. Comme la méthode requiert un grand nombre de simulations, il n’était pas envisageable de faire des simulations non locales pour cela et notre approche se base uniquement sur les calculs locaux de la méthode modale de Fourier. Pour plusieurs fraction de remplissage diélectrique f , nous avons calculé des réflectivités en partant de $h_G = 2$ nm et en augmentant peu à peu ce dernier jusqu’à obtenir des creux profonds et fins caractéristiques d’un couplage efficace. Il se trouve qu’en utilisant $f = \frac{1}{3}$ la positions des creux sur la réflectivité est très proche de ce qui peut être prédit par l’équation (3.23). La figure 3.16 illustre la procédure que nous avons menée.

En commençant par $h_G = 2$ nm on peut identifier trois creux très peu profonds pouvant correspondre à l’excitation du plasmon de surface via les trois ordres de diffractions $m = 1, 2, 5$. Augmenter peu à peu l’épaisseur du réseau permet de voir apparaître un quatrième creux pour un quatrième ordre de diffraction $m = 4$. À chaque augmentation de h_G on peut également voir les creux existants commencer à se décaler vers des longueurs d’onde plus grandes signe que le plasmon est de plus en plus perturbé par la corrugation. Finalement nous stoppons le processus lorsque les résonances correspondant aux ordres $m = 2$ et $m = 4$ atteignent une valeur presque nulle, signe d’un bon couplage avec un mode guidé. Cela laisse une épaisseur réseau de $h_G = 68$ nm. Le résultat final est montré sur la figure 3.17 qui compile les calculs de notre méthode (locale) et celle de l’INRIA (locale et non locale). Avant de discuter de ces résultats, revenons un peu à notre procédé “perturbatif”. Au cours du processus, la to-

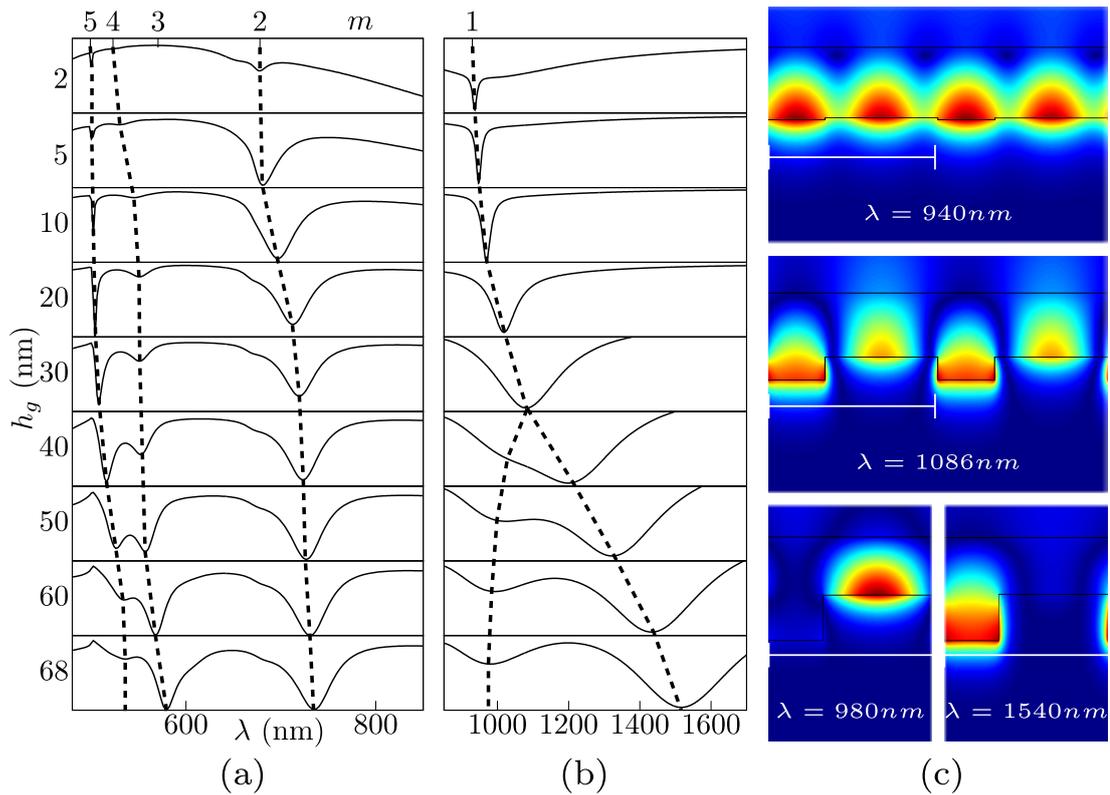


FIGURE 3.16 – (a) : Réflectivité pour différentes valeurs de l'épaisseur du réseau h_G pour $\lambda \in [480, 850]$ nm. (b) : Réflectivité pour différentes valeurs de h_G pour $\lambda \in [850, 1700]$ nm. Dans les deux cas l'échelle verticale est choisit pour la visibilité. L'échelle horizontale est gardée constante de haut en bas. Les numéros indiquent la position théorique des résonances par ordre en considérant la dispersion montrée sur la figure 3.14. (c) : Intensité de $|H_y|$ (en U.A) pour le couplage correspondant à l'ordre = 1. Les couples (h_G, λ) sont de haut en bas (2,940), (30,1086), (68,980) à gauche et (68,1540) à droite.

talité des résonances a subi un décalage vers le rouge. On peut immédiatement penser à un phénomène similaire à celui discuté dans la partie précédente. Le plasmon peut se propager sur le haut de la couche réseau ou bien dans les fentes. Dans le cas où se dernier se propage dans les fentes, il ressent une épaisseur diélectrique plus importante et possède donc une longueur d'onde de couplage plus élevée. C'est ce qu'illustrent les cartes de champ de la figure 3.16 pour l'ordre $m = 1$. Pour $h_G = 30$ nm, la résonance est en fait composite, un intermédiaire entre les deux possibilités. Puis pour des épaisseurs plus élevées cet ordre de résonance subit une dissociation complète. La résonance de la partie supérieure repart alors vers des longueurs d'onde plus faibles et celle liée au bas de la corrugation continue à voir sa longueur d'onde d'excitation augmenter. Pour cette raison, nous appelons la résonance la plus basse en longueur d'onde $m = 1t$ (pour *top*) et la plus haute $m = 1b$ (pour *bottom*). Cependant, la figure 3.14 nous montre que pour les ordres supérieurs à $m = 2$, l'épaisseur de diélectrique choisie permet au plasmon de se propager comme si le TiO_2 était d'extension infinie. Les ordres $m = 4$ et $m = 5$ ne devraient donc pas subir de décalage à cause de ce phénomène. De plus d'un point de vue quantitatif, même en considérant une épaisseur totale de diélectrique de $h_D + h_G$, la résonance $m = 1b$ ne devrait pas se situer au delà de $\lambda = 1085$ nm. Il en est de même pour la résonance $m = 2$ qui devrait se situer au maximum à $\lambda = 701$ nm. C'est donc la perturbation par la corrugation qui est responsable de ce décalage vers le

rouge. On pourrait penser que celui-ci peut être lié à un phénomène de cavité. Que le plasmon soit excité en haut du réseau ou dans une fente, il pourrait se propager d'un coté à l'autre, être réfléchi par un angle ou un mur du réseau et ainsi interférer avec lui même. Sans parler de l'interconnexion possible entre les deux. En plus du phénomène d'interférence lié à l'incidence normale, notre structure semble capable de supporter des "cavités à plasmon de surface" responsables du décalage en longueur d'onde. Il faudrait utiliser un formalisme plus approprié pour vérifier cela, ce qui est au delà de nos ambitions pour cette structure.

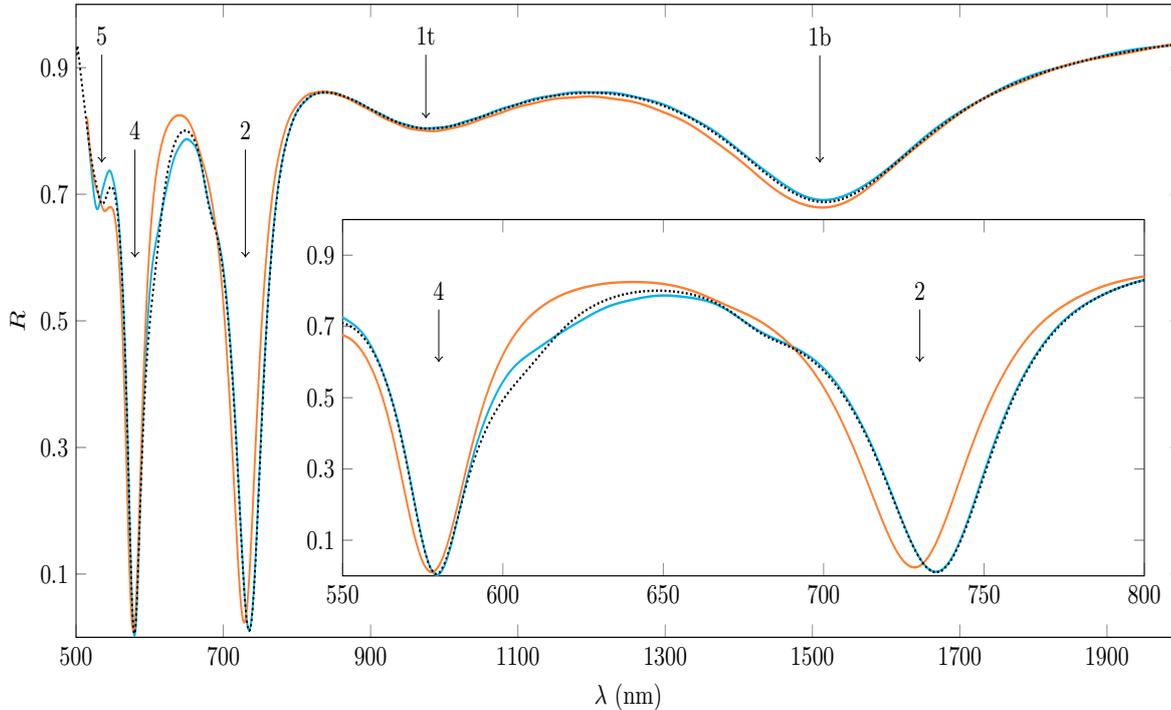


FIGURE 3.17 – Réflectivité du réseau métallique (figure 3.8b) en fonction de la longueur d'onde incidente. La courbe noire pointillée est obtenue via la méthode modale de Fourier locale. La courbe bleu est le résultat du calcul local de l'INRIA. La courbe orange est le résultat non local de l'INRIA. L'inset montre un zoom sur les résonances intéressantes pour l'étude de la non-localité. Les paramètres de la structures sont $d_G = 500$ nm, $h_G = 68$ nm, $a_G = \frac{1}{3}d_G$ et $h_d = 85$ nm.

Revenons maintenant à la réflectivité obtenue (figure 3.17). Du point de vue de la non-localité, il y a deux choses très intéressantes dans cette réflectivité. Premièrement, en plus de se dédoubler, l'ordre $m = 1$ se retrouve plus ou moins sensible à l'influence de la non-localité. L'ordre $m = 1t$ est pratiquement insensible à cette dernière et l'ordre $m = 1b$ l'est à peine plus. Deuxièmement, alors que l'on s'attendait à une influence de la non-localité grandissante avec l'ordre de diffraction, il se trouve que la résonance excitée par l'ordre $m = 2$ est bien plus sensible que la résonance $m = 4$. Tout comme on l'a vu avec le réseau diélectrique, la résonance $m = 4$ n'est en fait pas d'origine purement plasmonique, ce qui explique l'impact de la non-localité plus faible qu'espéré ($\Delta\lambda_{c,m}$ de 2 au lieu de 5.5). La figure 3.18 confirme cette analyse. Le plasmon de surface est bien excité mais une certaine partie du champ réside dans le diélectrique. En revanche, la résonance $m = 2$ subit une influence de la non-localité plus de deux fois supérieure à ce que l'on pouvait prédire ($\Delta\lambda_{c,m}$ de 7 nm au lieu de 3 nm). On peut attribuer cela au décalage des résonances vers des longueurs d'onde plus hautes. En dehors de l'étude de la non-localité, on peut noter une différence entre la méthode

modale et la méthode de l'INRIA sur des régions particulières et limitées du spectre. Ceci est dû à une convergence extrêmement difficile de la méthode modale aux permittivités considérés, un problème connu et référencé[93]. Ce problème de convergence est le plus gros désavantage de cette configuration, mais est heureusement compensé par les simulation locales de l'INRIA. De plus ce problème de convergence n'intervient qu'en dehors des résonances (en terme de longueur d'onde). Finalement, et surtout, on peut identifier deux régions d'intérêt dans le spectre. La première, comprenant les longueurs d'onde telles que $\lambda \in [550 : 800]$ nm, comprend deux ordres de diffraction clairement affectés par la non-localité. Toute la bande de longueurs d'onde entre ces deux résonances est également grandement affectée. Cette région est utile pour l'extraction du paramètre β . La seconde, pour $\lambda \in [800 : 2000]$ nm, n'est pratiquement pas affectée par la non-localité et est utile pour l'extraction des paramètres locaux. Comme nous essayons de mesurer des $\Delta\lambda_{c,m}$ de l'ordre du pourcent, nous devons nous assurer que la non-localité n'est pas masquée par une quelconque erreur sur les paramètres locaux.

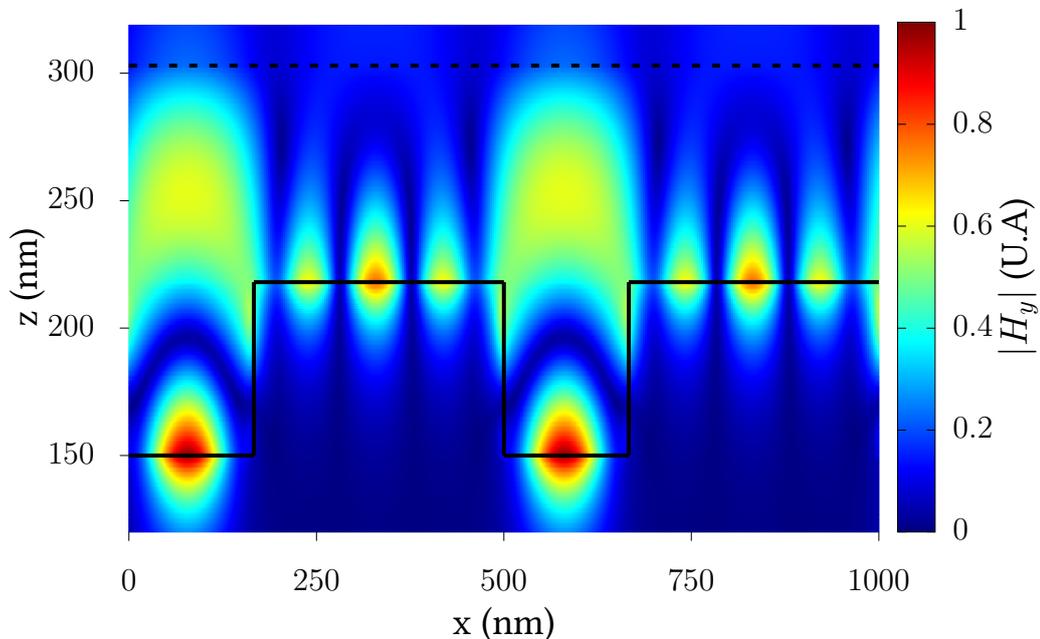


FIGURE 3.18 – Intensité de $|H_y|$ pour une longueur d'onde d'excitation de $\lambda = 579.5$ nm, correspondant à la résonance $m = 4$. Les traits pleins indiquent la position du réseau et les pointillés l'interface Air/TiO₂.

3.2.5 Caractérisation : problèmes inverses et quantification d'incertitude

En considérant que l'on connaisse parfaitement les permittivités, nous avons essayé de mettre en place une stratégie qui permette de répondre aux questions suivantes :

- L'influence de la non-localité est elle plus grande que les possibles imperfections géométriques dues à la fabrication ?
- Pouvons nous remonter au paramètre β , et donc calibrer correctement le modèle hydrodynamique avec la structure que nous proposons ?

Pour répondre à ces deux questions, nous avons étendu notre collaboration en travaillant avec D.Loukrezis, de l'Institut de Technologie de Darmstadt. Il est expert dans

le domaine mathématique de la quantification d’incertitude (abrégé UQ pour *uncertainty quantification* par la suite). Ces méthodes permettent d’évaluer les décalages que l’on pourrait attendre pour les résonances dans le cas où on tiendrait compte de l’incertitude sur les paramètres géométriques. Cette collaboration a permis l’élaboration d’une procédure permettant de conclure que l’influence de la non-localité dans notre structure devrait être mesurable. Découvert à l’origine comme une anomalie dans la réponse optique d’un réseau par Wood[2] au tout début du vingtième siècle, le plasmon de surface, dans notre configuration, est en théorie suffisant pour l’étude de la non-localité dans les métaux.

Nous considérons ici que la structure a été fabriquée en suivant le protocole très idéalisé suivant. Le réseau est gravé par lithographie le long d’une interface Air/Ag. Puis, du TiO_2 est déposé par ALD dans les fentes de profondeur h_G . Enfin, le reste du TiO_2 est déposé par dessus l’ensemble de la structure de manière à obtenir la couche d’épaisseur h_D , considérée comme plane sur le dessus (ce qui est une hypothèse forte). On pourrait aussi penser à un protocole impliquant une croissance continue suivie d’un lissage de la couche de TiO_2 , l’important est de conserver la géométrie la plus plane possible. L’utilisation de technique de lithographie laisse en général une incertitude de ± 5 nm[99] sur les paramètres d_G , h_G et a_G . Le dépôt de TiO_2 par ALD se fait par une croissance de 0.045 ± 0.005 [100] nm par cycle, ce qui laisse une incertitude d’approximativement 11% sur l’ensemble de l’épaisseur diélectrique $h_G + h_D$. La figure 3.19 montre des réflectivités en prenant en compte uniquement la possible variation de l’épaisseur diélectrique h_D . Sur la bande de longueurs d’onde susceptible d’être affectée par la non-localité, une variation de l’épaisseur de diélectrique masquerait complètement son influence. Cependant, une fois la structure fabriquée, il est possible d’obtenir une bien meilleure précision sur ces paramètres en comparant des réflectivités mesurées expérimentalement et calculées numériquement. En nous appuyant sur des méthodes d’optimisation, nous avons mis en place une procédure de télémétrie qui permet de remonter aux paramètres locaux. Cette procédure nous donne de nouvelles incertitudes beaucoup plus faibles que celles de fabrication. Dans le même temps la méthode permet de faire abstraction de l’influence de la non-localité sur la détermination des paramètres géométriques. Cela justifie alors l’application des méthodes UQ, plus subtiles qu’un simple calcul de réflectivité en prenant les valeurs limites. Enfin nous remonterons au paramètre non local β . Dans cette partie, je ne détaillerai pas tout le formalisme mathématique déployé[92, 101, 102, 103, 104, 105], mais je me concentrerai sur la discussion des résultats.

Comme nous n’avons pas accès à de véritables données expérimentales puisque l’expérience n’a pas été faite, nous simulons des données expérimentales artificielles $R_{measured}$ en réutilisant les méthodes modales, ou de l’INRIA, et en ajoutant aux résultats un bruit gaussien réaliste (inspiré de spectres expérimentaux). Pour une longueur d’onde donnée nous autorisons $R_{measured} = R_{init} \pm \Delta_{exp}$ avec $max(\Delta_{exp}) = 0.04$ et R_{init} le résultat exact du calcul. Ensuite, en utilisant exclusivement les méthodes modales nous cherchons les paramètres géométriques sous la forme d’un problème inverse. C’est un problème d’optimisation qui revient en fait à chercher $R_{optimized}$ qui se rapproche le plus de $R_{measured}$ pour un certain jeu de paramètres. Pour chaque optimisation, chacun des paramètres considérés est autorisé à varier dans un intervalle déterminé par le protocole expérimental. Nous avons envisagé en tout quatre stratégies. De manière générale l’ensemble de la procédure comprend de deux à trois étapes qui permettent

- **I** : La détermination des paramètres d_G , h_G , a_G ,
- **II** : la détermination du paramètre h_D ,
- **III** : la détermination du paramètre β .

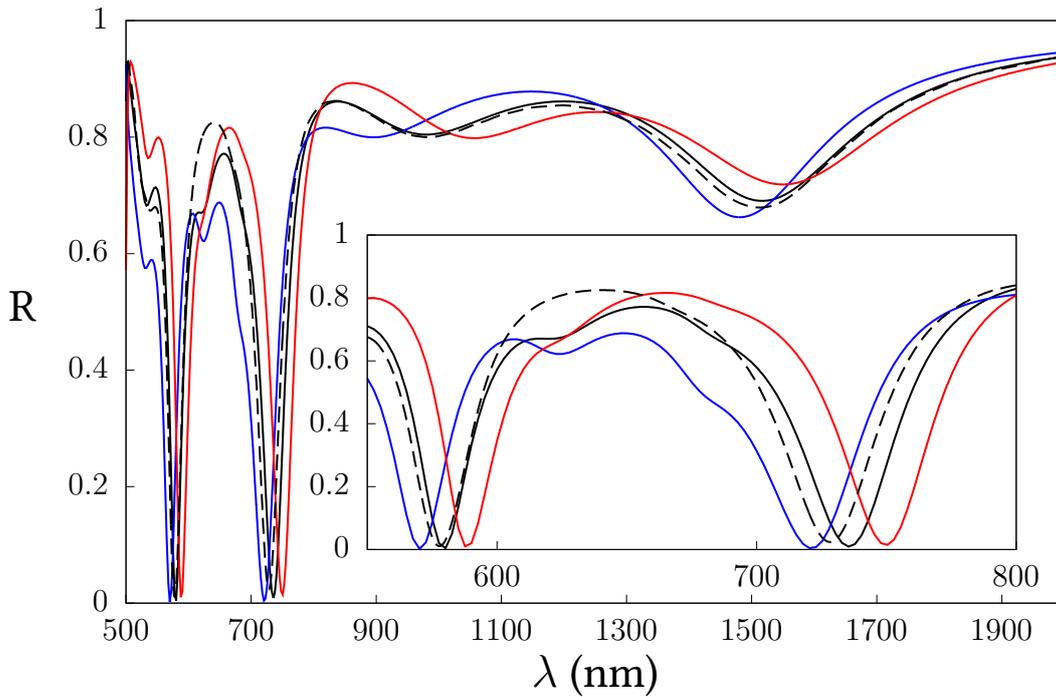


FIGURE 3.19 – Réflectivités (locales) pour trois épaisseurs de diélectrique h_D . La courbe noire correspond à la valeur initiale $h_D = 85$. La courbe rouge à $h_D = 95$ et la bleue à $h_D = 75$ nm. La courbe pointillée est la réflectivité non locale pour $h_D = 85$ nm.

Deux des stratégies envisagées regroupent les étapes **I** et **II** en une seule optimisation. Nous allons voir que la séparation de ces étapes est importante. Un autre point clef de notre méthode est que $R_{optimized}$ est calculé en utilisant exclusivement la méthode modale, c'est à dire en faisant abstraction de la non-localité. Aucune hypothèse quantitative concernant la non-localité n'est impliquée. C'est une très bonne chose puisque cela permet par la suite une mesure indirecte de β indépendante des autres paramètres. Enfin on utilise ces paramètres locaux à l'étape **III** pour extraire le paramètre non local β en utilisant la version non locale de la méthode de l'INRIA. Les méthodes UQ sont utilisées entre les étapes **II** et **III** pour confirmer qu'une mesure de la non localité est possible malgré l'incertitude sur les paramètres géométriques.

La première étape s'effectue après le gravage du réseau et avant la déposition du TiO_2 . L'idée est de récupérer la réflectivité du réseau alors que ce dernier est encore exposé à l'air. Comme le plasmon se propage dans l'air, ce dernier n'est pas affecté par la non-localité. Ceci permet de récupérer les paramètres du réseau d_G , h_G et a_G en s'assurant que la non-localité n'influence pas le spectre obtenu. La figure 3.20 présente les réflectivités originale, bruitée et obtenue par optimisation ainsi que les paramètres correspondants. L'optimisation se montre ici très efficace et permet d'obtenir des valeurs très proches des valeurs utilisées pour le calcul initial. Cela peut s'expliquer par le grand nombre de valeurs artificielles ainsi que par la présence d'une seule résonance marquée dans la réflectivité. De plus la méthode de calcul utilisée pour obtenir R_{init} et $R_{measured}$ est la même.

La seconde étape consiste à récupérer la réflectivité de la structure complète, après la déposition du TiO_2 . Grâce à l'étape I, il ne reste plus que h_D à déterminer. Cette fois ci R_{init} est issue d'un calcul non local. Il s'agit en fait de la partie droite de la figure 3.17 c'est à dire tel que $\lambda \in [800, 2000]$ nm. Bien que l'optimisation soit faite avec un calcul local à partir de données supposées expérimentales non locales, elle permet tout de même d'obtenir une excellente estimation de l'épaisseur diélectrique $h_D = 84.83$ nm. Ce succès tient à deux choses. Premièrement, la non-localité n'a que très

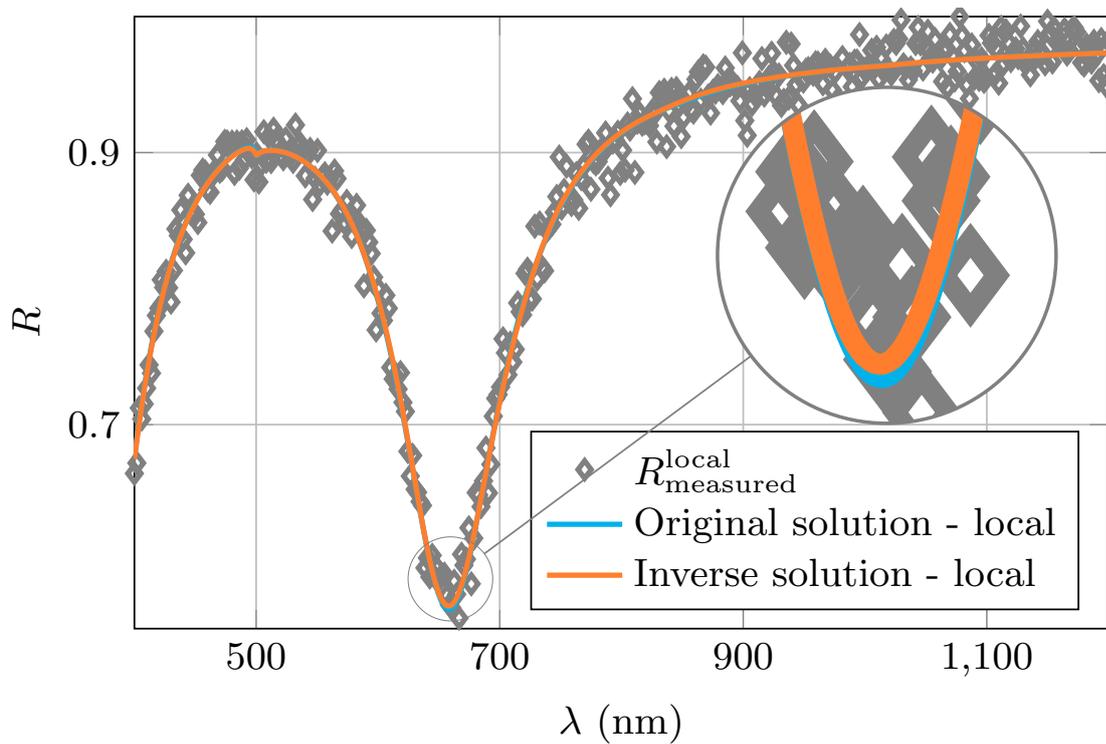


FIGURE 3.20 – Réflectivités résultant de l’étape I. La structure comprend uniquement une interface corruguée entre l’air et l’argent. Les paramètres géométriques utilisés pour calculer R_{init} (courbe bleu) sont $d_G = 500$ nm, $h_G = 68$ nm et $a_G = 166.67$ nm. La résolution du problème inverse (courbe orange) donne $h_G = 499.15$ nm, $h_G = 68.08$ nm et $a_G = 165.34$ nm. Les intervalles de contrainte pour l’optimisation sont $d_G \in [495, 505]$ nm, $h_G \in [62, 73]$ et $a_G = [161, 171]$.

peu d’influence sur la gamme de longueurs d’ondes considérée. Et deuxièmement le problème est suffisamment bien contraint grâce à l’étape I. La réunion de ces deux caractéristiques est en fait absolument nécessaire pour pouvoir extraire les paramètres géométriques correctement en utilisant un modèle local pour l’optimisation – ce qui n’est pourtant pas tout à fait évident.

A titre de comparaison nous avons essayé de réaliser l’étape II en utilisant cette fois ci un R_{init} issu d’un calcul local. Cela nous laisse une épaisseur diélectrique h_D de 84.82 nm soit une différence de seulement 0.01 nm. Ensuite, nous avons essayé de nous passer de la première étape. La détermination de la géométrie se fait donc en une seule optimisation qui laisse varier chacun des quatre paramètres locaux. Si l’on considère un R_{init} local, puis que l’on cherche à obtenir tous les paramètres géométriques en une seule fois nous obtenons de bons résultats. La géométrie du réseau est identique à celle trouvée en passant par l’étape I et l’épaisseur diélectrique “mesurée” est alors de $h_D = 85.45$ nm. Sans l’influence de la non localité, un problème inverse laisse donc d’excellents résultats. Cela paraît normal puisque R_{init} et R_{measured} sont alors obtenus en utilisant le même modèle. La forme et la position des deux creux étudiés est, de plus, plutôt sensible à un changement de paramètres (cf figure 3.19 et 3.16). L’influence de la non-localité étant très faible on pourrait se dire que cela serait en fait suffisant pour l’obtention des paramètres locaux. Cependant la dernière stratégie que nous avons essayée montre le contraire, justifiant ainsi l’absolue nécessité de la subdivision de la procédure en deux étapes.

Pour cette dernière stratégie nous avons essayé de retrouver les quatre paramètres géométriques en utilisant des données “expérimentales” influencées par la non-localité.

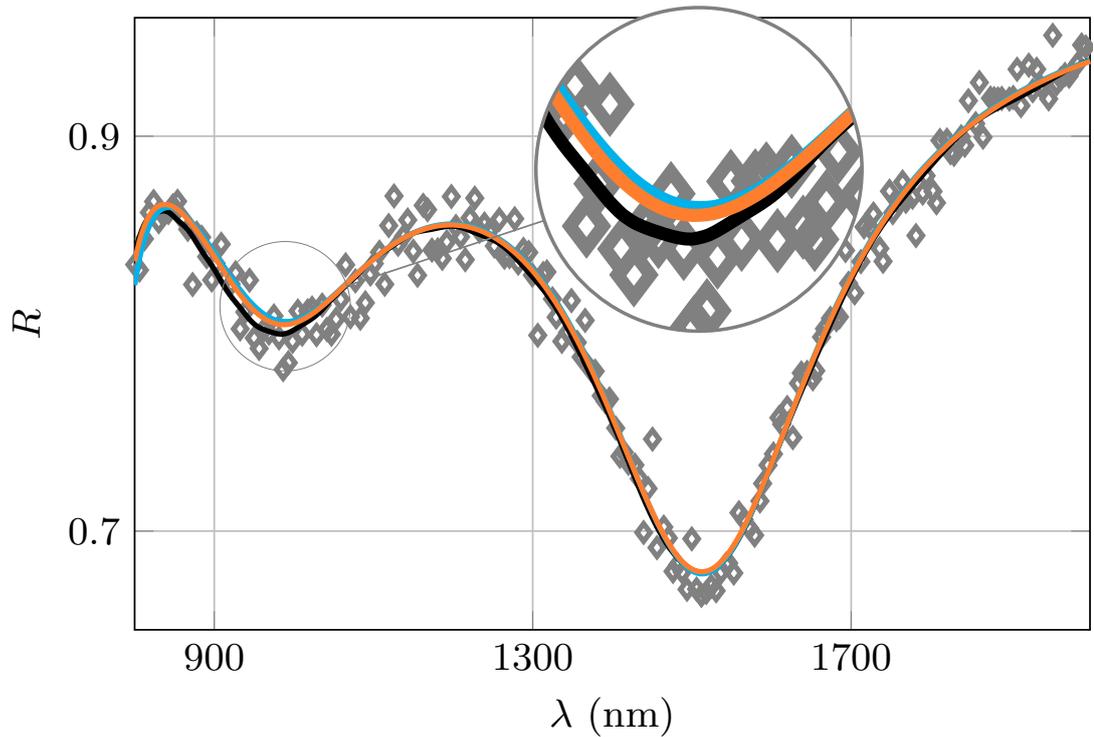


FIGURE 3.21 – Réflectivités résultant de l’optimisation direct des quatre paramètres géométriques en utilisant des données “expérimentales” issus d’un calcul non local. La courbe noire est R_{init} obtenue avec $d_G = 500$ nm, $h_G = 68$ nm, $a_G = 166.67$ nm et $h_D = 85$ nm. Les diamants gris représentent $R_{measured}$. En bleu, le résultat du problème inverse tel que $d_G \in [495, 505]$ nm, $h_G \in [62, 73]$ nm, $a_G \in [161, 171]$ et $h_D \in [75, 95]$ ce qui laisse $d_G = 499.71$ nm, $h_G = 67.23$ nm, $a_G = 161$ nm et $h_D = 85.96$ nm. La courbe orange est le résultat de l’optimisation en utilisant des intervalles de contraintes deux fois plus larges. On a $d_G \in [490, 510]$ nm, $h_G \in [57, 78]$ nm, $a_G \in [156, 176]$ et $h_D \in [70, 100]$. On obtient alors $d_G = 491.08$ nm, $h_G = 67.36$ nm, $a_G = 158.15$ nm et $h_D = 85.99$ nm

Tout comme pour notre première stratégie à deux étapes, R_{init} est celui montré sur la figure 3.17. Mais cette fois ci la procédure d’optimisation échoue. C’est à dire que l’un des paramètres (a_G) laissés libres atteint la limite imposée par les procédés de fabrication. En augmentant les limites autorisées pour les paramètres libres, on arrive bien à un résultat mais celui ci ne correspond alors plus au résultat attendu. Ce résultat est montré sur la figure 3.21. En comparant avec la stratégie précédente (basée sur R_{init}^{local}), on peut attribuer ce fait à l’influence de la non-localité. Bien que l’influence de la non-localité soit vraiment très faible visuellement, il semblerait que l’optimisation basée sur un modèle local essaie de reproduire la non-localité en abaissant d’abord la largeur des fentes a_G , puis par extension le pas du réseau d_G . L’épaisseur diélectrique et l’épaisseur du réseau restent très proches de ce qui a été trouvé avec les autres stratégies. Cela parait normal puisque h_D et h_G ont tendance à influencer sur la position en longueur d’onde des résonances. Il est intéressant de noter que l’algorithme d’optimisation ne semble pas avoir de mal à reproduire la forme de la résonance $m = 1b$ (la plus à droite), alors que c’est la plus affectée des deux par la non localité. Puisque c’est surtout a_G (et par extension seulement d_G) qui est affecté, c’est un peu comme si l’optimisation mimait la non localité en essayant de modifier l’efficacité de couplage, qui affecte surtout la profondeur des résonances (par rapport à leurs positions). Cela pourrait expliquer pourquoi le fait de contraindre a_G via l’étape I permet à un modèle

| Paramètre | z | δ_z |
|-----------|---------|------------|
| h_G | 68.082 | 0.1 |
| d_G | 499.156 | 1.0 |
| a_G | 165.36 | 1.5 |
| h_D | 84.83 | 0.3 |

TABLE 3.1 – Paramètres géométriques et incertitudes correspondantes (en nm) issus de notre procédure de télémétrie.

local de quand même retrouver des paramètres corrects – au moins si la non-localité a un impact différent et faible sur chacune des résonances étudiées. Si la non-localité avait un impact plus fort, l’optimisation avec un modèle local commencerait sûrement à essayer de changer les autres paramètres (h_G et h_D) pour compenser les différences en longueur d’onde de couplage. De plus si toutes les résonances considérées étaient affectées de manière similaire par la non-localité, il serait sûrement possible de trouver un jeu de paramètre compris dans les limites autorisées qui mime l’influence de la non-localité. Étant donné que la non-localité modifie différemment les résonances $m = 1t$ et $m = 1b$, il est donc fort possible qu’un tel comportement de l’algorithme d’optimisation ne soit observable que sur une réflectivité présentant plusieurs résonances différemment affectées par la non-localité. La clef du succès est de toute évidence dans ces faibles différences relatives.

Dans tout les cas, la procédure en deux étapes utilisant des données non locales pour la seconde permet de remonter avec précision aux paramètres locaux. A partir d’ici nous définissons δ_z tel que

$$\delta_z = |z_{measured} - z_{init}|, \quad (3.29)$$

avec $z_{measured}$ un paramètre obtenu via l’optimisation et z_{init} le même paramètre qui a servi au calcul non local de départ. Ce δ_z , donné dans le tableau 3.1, est notre nouvelle incertitude paramétrique.

La méthode télémétrique permet une amélioration conséquente de δ_z par rapport à ce que l’on obtient en considérant uniquement la procédure de fabrication. Les données du tableau 3.1 paraissent même un peu faibles pour h_G et h_D . Le nombre conséquent de point de “mesure” n’est sans doute pas sans rapport avec cet état de fait. Il y a fort à parier qu’une véritable expérience laisserait des δ_z plus grands.

Quoi qu’il en soit ces données sont le point de départ d’une série d’analyse de quantification d’incertitude. L’idée est d’essayer de donner une “largeur” à nos courbes de réflectivité compte tenu de l’incertitude sur les paramètres locaux, pour voir si la non-localité est discernable malgré tout. La base de cette étude statistique est de considérer les paramètres comme des variables aléatoires distribuées uniformément dans un intervalle $\mathcal{U}[z - \delta_z, z + \delta_z]$ pour réaliser un très grand nombre de simulations en changeant à chaque fois les paramètres. En plus de réutiliser la méthode de Fourier, la réflectivité est également calculée à l’aide d’une série de polynômes qui permettent d’obtenir une valeur espérée $\mathbb{E}(R)$ et une variance $\mathbb{V}(R)$. Enfin la déviation standard, ou écart type, est définie comme $\sqrt{\mathbb{V}(R)}$. L’impact de l’incertitude est alors vue comme un intervalle $\pm 2\sigma$ autour de $\mathbb{E}(R)$. L’intervalle choisi regroupe alors plus de 95% des données obtenues au cours de cette étude statistique. Ce genre de méthode est très coûteuse en terme de calculs, et donc de temps, et n’a été menée qu’avec les simulations locales. Pour obtenir une idée de l’impact de l’incertitude tout en considérant la non-localité, nous avons fait des simulations non locales en prenant toutes les combinaisons pos-

sibles des valeurs minimales et maximales des paramètres donnés dans le tableau 3.1. Les figures 3.22a et 3.22b montrent les résultats de cette étude pour les deux résonances $m = 4$ et $m = 2$.

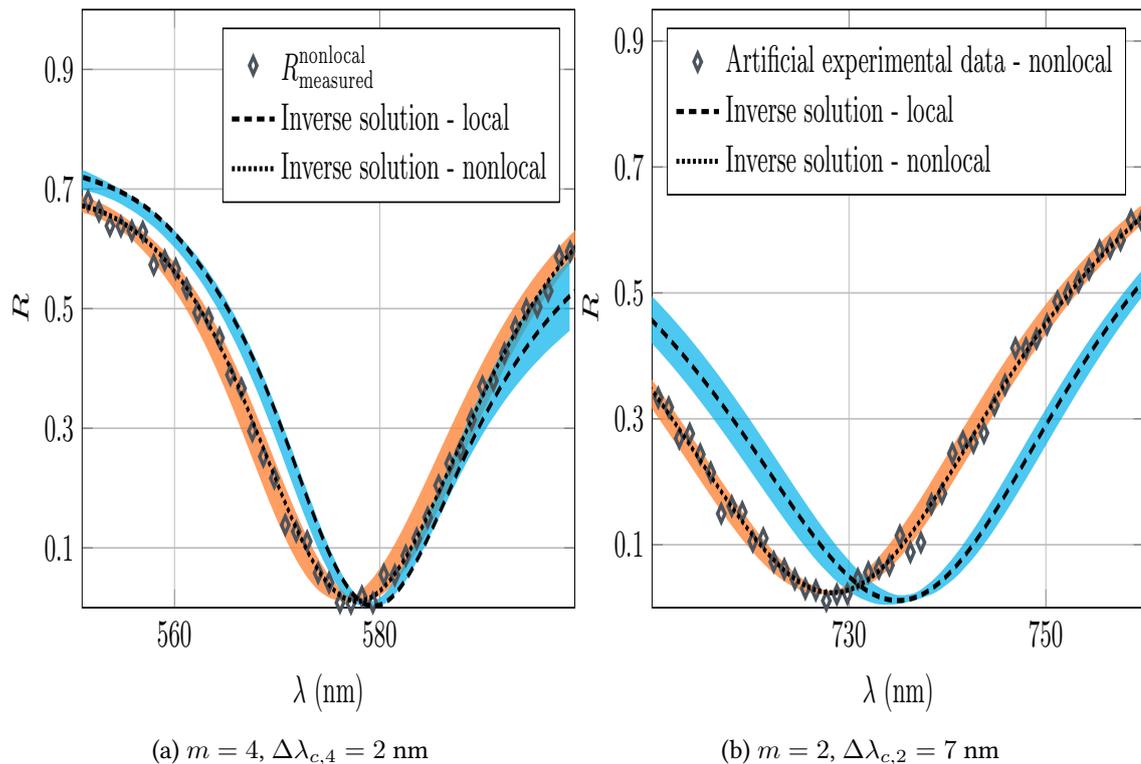


FIGURE 3.22 – Réflectivités locale et non locale obtenues en prenant en compte les incertitudes sur les paramètres locaux. Les courbes pointillées sont obtenues en considérant les données du tableau 3.1. En bleu : les résultats de l’étude UQ donnant $\mathbb{E}(R) \pm 2\sigma$. En orange : les résultats de l’étude minimum-maximum sur la réflectivité non locale. L’intervalle est obtenu en considérant toutes les combinaisons possibles de paramètres $z' = z \pm \delta_z$.

On peut voir que pour l’ordre $m = 4$ les deux courbes “élargies” se chevauchent au niveau des minima de la réflectivité. Même si les incertitudes déterminées sont très faibles, elles masquent malgré tout le décalage de la longueur d’onde de résonance dû à la non-localité. En revanche pour la résonance que l’on attribue à l’ordre $m = 2$ les deux courbes “élargies” sont distinctement séparées. Nous en concluons donc que l’influence de la non-localité ne peut pas être confondue avec une quelconque incertitude sur les paramètres géométriques. Nous avons également réalisé un calcul non local en utilisant une valeur de β plus faible. Avec $\beta = 0.85 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$ [106] le décalage de l’ordre $m = 2$ est de 5 nm. Ce décalage reste plus grand que ce que peut provoquer l’incertitude sur les paramètres géométriques. Ainsi, sous la condition d’avoir des incertitudes géométriques telles que données dans le tableau 3.1 nous sommes certains de pouvoir réaliser une estimation de β avec cette configuration.

On peut donc enfin passer à l’étape III. Cette dernière étape consiste encore une fois en un problème inverse. La différence est que cette fois-ci la méthode utilisée pour l’optimisation est la méthode non locale de l’INRIA. Les données initiales R_{init} sont encore une fois celles présentées sur la figure 3.17. Les paramètres locaux sont fixés à ceux trouvés par la méthode télémétrique et le β est laissé libre de varier dans l’intervalle $[0.85, 1.4] \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$ [106, 107]. Cette ultime optimisation nous donne $\beta = 1.385 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$ ce qui n’est pas si éloigné de la valeur initiale de $1.35 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$.

La conclusion de l'étude du réseau est qu'il est possible d'observer l'impact de la non-localité sur le plasmon de surface. La signature de la non-localité est unique et ne peut pas être confondue avec une incertitude sur les paramètres géométriques. Ce résultat réclame cependant le suivi scrupuleux de notre procédure ainsi qu'un procédé expérimental impliquant une précision de l'ordre du nanomètre.

3.3 Conclusion

Nous avons ici montré que l'utilisation d'un diélectrique de permittivité élevée et de faibles épaisseurs en général favorisent l'impact de la non-localité sur la réponse optique des systèmes étudiés. Nous avons notamment montré qu'un gap-plasmon excité par un prisme est suffisamment sensible à la non-localité pour que cette dernière soit visible expérimentalement. Nous avons montré qu'un bon choix de matériau permet même d'observer l'influence de la non-localité pour des épaisseurs de gaps de 60 nm. Nous avons proposé d'étendre l'étude de la non-localité dans cette configuration en remplaçant le gap diélectrique par une fine couche de métal entourée de diélectrique. Les modes supportés par la couche métallique permettent également l'étude expérimentale de la non-localité. Nous avons montré qu'il serait même possible de préserver le LRSP de l'influence de la non-localité tout en étudiant cette dernière sur le SRSP. Ensuite nous avons conçu un coupleur à réseau capable d'exciter un plasmon de surface sensible à la non-localité. Nous avons proposé une procédure de télémétrie permettant d'extraire les paramètres locaux sans que ces derniers ne soient influencés par la non-localité. En testant plusieurs stratégies, nous avons ensuite montré qu'un très faible impact de la non-localité peut conduire à une mauvaise détermination des paramètres géométriques. Nous avons déduit de notre procédure une incertitude sur la géométrie de notre structure. Partant de ces incertitudes, nous avons montré à l'aide d'outils mathématiques avancés que la non-localité ne peut pas être confondue avec une incertitude sur les paramètres géométriques dans la configuration que nous avons choisie. Nous avons au passage donné une estimation de la précision nécessaire pour mesurer une différence de longueur d'onde de couplage de l'ordre du pourcent. La première partie de ces travaux, concernant le coupleur à prisme, a été publiée[108] la deuxième partie en collaboration avec l'INRIA et l'université de Darmstadt a été soumise.

Chapitre 4

Rayonnement d'un dipôle dans une structure multi-couche

Dans ce chapitre nous allons nous éloigner un peu de la non-localité et de la plasmonique pour nous concentrer sur un problème de photonique plus classique. Nous allons mettre en place tout le formalisme nécessaire à l'étude du rayonnement d'un dipôle ponctuel 3D situé dans un multi-couche pouvant comporter un nombre arbitraire de couches. En soi, ce chapitre ne présente pas de résultats nouveaux. La plupart des résultats exposés se trouvent dans une très vaste littérature[109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120]. L'intérêt du chapitre réside dans la compilation de ces derniers. Nous verrons dans un premier temps comment le calcul du dyadique de Green permet d'obtenir les champs émis par un dipôle dans un diélectrique homogène et non absorbant. Nous étendrons ce résultat aux structures multi-couches pouvant comporter des diélectriques à pertes ou bien des métaux. Nous utiliserons ces résultats pour calculer le diagramme de rayonnement du dipôle au dessus du multi-couche. Ensuite nous chercherons à calculer la modification du taux d'émission de l'émetteur en fonction de son environnement, ce que l'on appelle couramment l'effet Purcell[121, 122, 123, 124, 8]. Enfin nous discuterons brièvement des différentes méthodes permettant des calculs dans des structures plus générales, toutes basées sur le calcul du dyadique de Green dans un environnement multi-couche. Ces travaux ont abouti à la création d'un code de calcul entièrement nouveau pour l'équipe et ce chapitre est en quelque sorte un guide permettant l'amélioration et l'adaptation de ce dernier, pour une éventuelle inclusion, sous une forme ou sous une autre, dans le code de calcul Moosh écrit et maintenu par l'équipe[73]. Ce chapitre présente donc en détail les calculs nécessaires à la compréhension du code. Le code a été testé en le comparant avec des résultats de la littérature, et ceci nous permettra de faire une liste des points délicats du fonctionnement du code. L'ensemble du code a été écrit en Python, ce qui contraste avec les codes utilisés pour obtenir les résultats précédents, mais aussi avec les usages de l'équipe. L'idée est d'utiliser le côté "orienté objet" de ce langage pour à terme aboutir à un code comprenant toutes les méthodes numériques que nous avons considérées dans les chapitres précédents (matrices S, méthodes modales, calculs de dispersions) sous forme de modules - ce qui permettrait l'écriture rapide de script courts pour l'étude des multi-couches en général, voire plus. C'est un objectif très ambitieux que je n'ai pas pu mener à terme mais c'est un premier pas. Les autres avantages de ce langage sont sa portabilité, ses possibilités d'interfaçage et de parallélisation ainsi que sa très vaste bibliothèque de modules.

4.1 Fonction de Green dans un milieu homogène

Nous commencerons par introduire les fonctions et les dyadiques de Green qui nous permettent d'obtenir les champs \mathbf{E} et \mathbf{H} - dans un milieu homogène et non absorbant pour commencer. Nous mettrons ensuite en place le formalisme le plus adapté pour l'extension à l'étude d'un multi-couche.

4.1.1 Théorie de Green

Soit \mathcal{L} un opérateur linéaire, $\mathbf{R}(\mathbf{r})$ le champ de vecteur représentant la réponse d'un système soumis à un champ de vecteur $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ dû à une source. On a l'équation inhomogène

$$\mathcal{L}\mathbf{R}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Le théorème de superposition permet de dire que la solution de cette équation va être la superposition d'une solution générale homogène ($\mathbf{B} = 0$) et d'une solution particulière inhomogène dont l'unicité est assurée par les conditions aux limites. On suppose la solution générale \mathbf{R}_0 connue et on va considérer le terme de source nul sauf en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ avec \mathbf{r} le vecteur position du point d'observation et \mathbf{r}' celui de la position de la source ponctuelle. Pour chaque composante $i = x, y, z$ du champ de vecteur source on va avoir

$$\mathcal{L}\mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\mathbf{n}}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.2)$$

avec $\hat{\mathbf{n}}_i$ les vecteurs unitaires du système de coordonnées. Le vecteur \mathbf{G}_i est solution de (4.2) pour la source ponctuelle dont la composante i est $\hat{\mathbf{n}}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ alors que \mathbf{R} est solution de l'équation (4.1) pour la source \mathbf{B} .

On peut regrouper toutes ces équations en une seule en utilisant le formalisme des dyadiques. L'équation s'écrit

$$\mathcal{L}\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.3)$$

où $\overleftrightarrow{\mathbf{I}}$ est le dyadique unité c'est à dire $\overleftrightarrow{\mathbf{I}} = \hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}$ et $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est le dyadique de Green représentant la réponse du système à une source ponctuelle.

Ici nous considérons que les différents produits entre vecteurs sont des produits tensoriels. Ce que l'on appelle dyadique est donc une matrice de taille 3×3 . Ici $\overleftrightarrow{\mathbf{I}}$ est défini par la somme des produits tensoriels pour chaque vecteur de la base du repère considéré. De manière générale dans toute la suite de ce chapitre, un produit entre vecteurs sera supposé comme tensoriel si il n'implique pas le symbole "." du produit scalaire ou " \wedge " du produit vectoriel. Un produit entre un dyadique et un vecteur sans aucun symbole sera supposé comme étant matriciel. Nous ne verrons pas de produit tensoriel entre dyadiques. Enfin, on peut noter que strictement parlant, on devrait parler d'un dyade (et non pas dyadique) pour un tenseur d'ordre deux et de rang un qui est le résultat d'un produit dyadique. C'est par exemple le cas pour $\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}$. Par abus de langage on parlera simplement de dyadique, comme il est d'usage dans la communauté.

L'opérateur \mathcal{L} agit séparément sur chaque colonne de $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$. Si on suppose $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ connu, on peut multiplier (par la droite) l'équation (4.3) par $\mathbf{B}(\mathbf{r}')$ et intégrer sur le volume contenant la source (où $\mathbf{B}(\mathbf{r}') \neq 0$) pour avoir

$$\int_V \mathcal{L} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{B}(\mathbf{r}') dV' = \int_V \mathbf{B}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' = \mathcal{L} \mathbf{R}(\mathbf{r}), \quad (4.4)$$

où V' est le volume de la source. Sous l'hypothèse que $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ est bien défini on peut sortir \mathcal{L} de l'intégrale pour avoir

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = \int_V \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{B}(\mathbf{r}') dV'. \quad (4.5)$$

Cependant ceci n'est pas possible lorsque $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ diverge, ce qui est souvent le cas lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Il faut alors invoquer un volume d'exclusion et prendre en compte la dépolarisation du volume d'exclusion[125]. C'est un des points les plus techniques de la théorie de Green mais nous allons voir qu'il n'est pas nécessaire de le prendre en compte si on se limite à des calcul de champs hors de la source dans des structures multi-couches.

On peut aussi effectuer des calculs de taux d'émission tant que la source se situe dans un milieu linéaire et non dispersif. Il est cependant indispensable de prendre en compte ce point si l'on cherche à résoudre des problèmes de diffraction plus complexes, comme ceux impliquant un champ incident sur des géométries arbitraires, ou bien des inhomogénéités quelconques incluses dans un milieu homogène ou multi-couches comprenant une source. Nous allons maintenant voir comment lier les champs EM à un dyadique.

4.1.2 Équations intégrales de volume

Nous allons ici chercher à obtenir ce qu'on appelle les équations intégrales de volume[120]. Il est possible de les obtenir en partant d'une équation d'onde vectorielle sur $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et dyadique sur $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, en considérant une source dans un milieu sans bords et en utilisant les identités de Green[126, 127]. Nous allons cependant voir ici une méthode que je trouve plus simple permettant d'arriver au même résultat et qui a l'avantage de ne pas faire appel aux identités de Green[120].

On considère un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ harmonique en temps ($e^{-i\omega t}$), un potentiel scalaire $\Psi(\mathbf{r})$ dans un espace infini et homogène caractérisé par ϵ et μ en présence d'une source de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$. On a

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla \Psi(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r})}{\mu_0 \mu}, \quad (4.7)$$

que l'on insère dans les équations de Maxwell avec $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r})$ pour avoir

$$\nabla \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -i\omega \mathbf{D}(\mathbf{r}) - \nabla \Psi(\mathbf{r}). \quad (4.8)$$

Cela mène à

$$\frac{\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r})}{\mu_0 \mu} = \mathbf{J}(\mathbf{r}) - i\omega \epsilon_0 \epsilon [i\omega \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla \Psi(\mathbf{r})]. \quad (4.9)$$

Pour rendre $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ unique on choisit de fixer les potentiels en jauge de Lorentz $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = i\omega \epsilon_0 \epsilon \mu_0 \mu \Psi(\mathbf{r})$ et on utilise l'identité $\nabla \wedge \nabla \wedge = -\nabla^2 + \nabla(\nabla \cdot)$ pour arriver à

$$[\nabla^2 + k_h^2] \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\mu_0 \mu \mathbf{J}(\mathbf{r}), \quad (4.10)$$

avec $k_h^2 = \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{c^2}$. Cette équation est valide pour chacune des composantes de \mathbf{A} . De plus on a la même pour le potentiel scalaire

$$[\nabla^2 + k_h^2]\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon}, \quad (4.11)$$

c'est à dire que l'on a quatre équations de la forme

$$[\nabla^2 + k_h^2]f(\mathbf{r}) = -g(\mathbf{r}). \quad (4.12)$$

On va alors chercher une fonction de Green scalaire G_0 en remplaçant le terme source par une source ponctuelle

$$[\nabla^2 + k_h^2]G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.13)$$

Nous verrons un peu plus loin quelle est la forme de G_0 et nous considérerons pour l'instant que cette fonction est connue. Cela permet de réécrire les potentiels comme

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mu \int_V G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{J}(\mathbf{r}') dV', \quad (4.14)$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \int_V G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') dV'. \quad (4.15)$$

En reprenant la définition de $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ par les potentiels et le gradient de $\Psi(\mathbf{r})$ on peut obtenir

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \left[\overleftrightarrow{\mathbf{I}} + \frac{\nabla \nabla}{k_h^2} \right] \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (4.16)$$

où $\overleftrightarrow{\mathbf{I}}$ et $\nabla \nabla$ sont des dyadiques. En utilisant le fait que $\nabla \cdot [G_0 \overleftrightarrow{\mathbf{I}}] = \nabla G_0$, on a

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \mu_0 \mu \int_V \left[\overleftrightarrow{\mathbf{I}} + \frac{\nabla \nabla}{k_h^2} \right] G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{J}(\mathbf{r}') dV', \quad (4.17)$$

et en posant

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left[\overleftrightarrow{\mathbf{I}} + \frac{\nabla \nabla}{k_h^2} \right] G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (4.18)$$

on a

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \mu_0 \mu \int_V \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{J}(\mathbf{r}') dV', \quad (4.19)$$

qui est une solution particulière de l'équation d'onde vectorielle

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_h^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \mu_0 \mu \mathbf{J}(\mathbf{r}). \quad (4.20)$$

Ici chaque colonne de $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ correspond au champ lié à une source ponctuelle dans une direction particulière (par exemple $i\omega \mu_0 \mu j_x \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\mathbf{x}}$) et vérifie l'équation dyadique

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k_h^2 \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.21)$$

Une équation dyadique est simplement une manière compacte d'écrire plusieurs équations vectorielles. En ajoutant une solution homogène à la solution particulière on obtient les équations intégrales de volume

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + i\omega \mu_0 \mu \int_V \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{J}(\mathbf{r}') dV', \quad (4.22)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) + \int_V [\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \mathbf{J}(\mathbf{r}') dV'. \quad (4.23)$$

Nous considérerons dans la suite qu'il n'existe aucun champ hormis ceux générés par la source. On prendra donc de manière générale $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) = 0$. Pour aller plus loin il nous faut maintenant préciser la forme de la fonction de Green scalaire.

4.1.3 Fonction de Green scalaire

Il existe plusieurs manières d'obtenir la fonction de Green scalaire $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. On peut faire un calcul long et complexe en partant d'une équation d'onde avant d'avoir supposé la forme harmonique des champs[118]. On peut également chercher une solution comme une superposition d'ondes sphérique[119, 128, 129], injecter cette dernière dans l'équation (4.13) pour ensuite intégrer sur une sphère de volume infiniment faible afin de vérifier la validité de la solution. Nous adopterons ici une troisième possibilité qui permet de faire le lien avec la suite du chapitre.

On commence par définir le vecteur $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et sa norme $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. On définit de plus $\widetilde{G_0(\mathbf{k})}$ la transformée de Fourier dans l'espace de $G_0(\mathbf{R})$. On a

$$G_0(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \widetilde{G_0(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d^3k, \quad (4.24)$$

$$\delta(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d^3k, \quad (4.25)$$

que l'on peut injecter dans l'équation (4.13) pour obtenir

$$\iiint [-k^2 + k_h^2] \widetilde{G_0(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d^3k = - \iiint e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d^3k, \quad (4.26)$$

et ainsi identifier $\widetilde{G_0(\mathbf{k})}$ comme

$$\widetilde{G_0(\mathbf{k})} = \frac{1}{k^2 - k_h^2}. \quad (4.27)$$

On a donc

$$G_0(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k^2 - k_h^2} d^3k. \quad (4.28)$$

Cette équation est le point de départ pour une représentation spectrale de la fonction, puis du dyadique de Green que nous verrons un peu plus loin. Nous sommes ici intéressés par une expression analytique de la fonction de Green scalaire. Pour résoudre (4.28) nous passons en coordonnées sphériques, avec l'axe polaire le long de \mathbf{R} de façon à avoir $\mathbf{k}\cdot\mathbf{R} = kR \cos(\theta)$ et $d^3k = k^2 \sin(\theta) dk d\theta d\phi$. L'équation (4.28) devient alors

$$G_0(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty \left(\frac{k^2}{k^2 - k_h^2} \int_0^\pi e^{ikR \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta \right) dk, \quad (4.29)$$

avec

$$\int_0^\pi e^{ikR \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta = \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{ikR}, \quad (4.30)$$

obtenue par changement de variable. Par un autre changement de variable on obtient

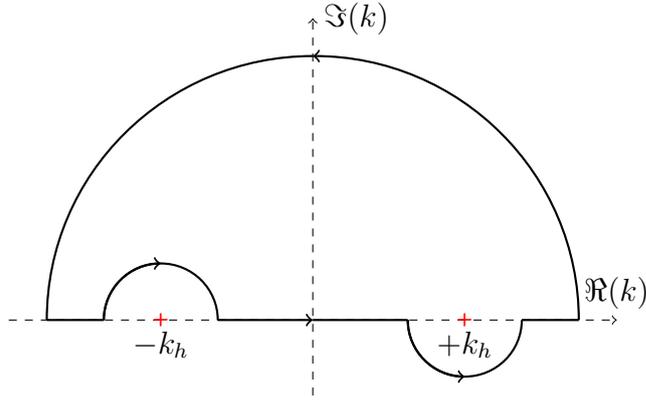


FIGURE 4.1 – Chemin d'intégration choisi pour la résolution de l'équation (4.32).

$$G_0(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^2 i R} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikR}}{k^2 - k_h^2} dk. \quad (4.31)$$

Cette nouvelle intégrale possède deux pôles sur le chemin d'intégration. Pour la résoudre il faut passer dans le plan complexe et transformer l'intégrale sur k réelle en une intégrale le long d'un chemin fermé C puis utiliser le théorème des résidus. Pour pouvoir appliquer les Lemmes de Jordan[119], il faut considérer que R est toujours positif et donc choisir un contour comprenant un demi cercle de rayon infini dans la partie supérieure du plan complexe. Cela impose dans toute la suite de considérer $\Im(k) > 0$. Pour obtenir une solution correspondant à une onde qui se propage de la source à l'infini, il faut éviter le pôle $-k_h$ par le dessus et inclure le pôle $+k_h$ dans C en déformant C par le dessous. On a donc

$$\oint_C \frac{k e^{ikR}}{k^2 - k_h^2} dk = 2i\pi \text{Res} \left(\frac{k e^{ikR}}{k^2 - k_h^2}, +k_h \right), \quad (4.32)$$

$$= i\pi e^{ik_h R}, \quad (4.33)$$

où C est montré sur la figure 4.1. Finalement on obtient

$$G_0(\mathbf{R}) = G_0(R) = \frac{e^{ik_h R}}{4\pi R}, \quad (4.34)$$

c'est à dire une onde sphérique divergente. Nous pouvons désormais calculer une expression analytique pour $\overleftrightarrow{G}(\mathbf{R}) = \overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

4.1.4 Dyadique de Green dans un milieu homogène

Si l'on considère un dipôle de moment $\mathbf{p}(t) = \Re(\mathbf{p}e^{-i\omega t})$ dans un milieu homogène sans frontières, ce dernier va créer une densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -i\omega \mathbf{p} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Hors de la source, située en \mathbf{r}' , on va donc avoir

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \mu_0 \mu \overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{p}, \quad (4.35)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -i\omega [\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \mathbf{p}. \quad (4.36)$$

Notre objectif est d'obtenir l'expression de $\overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. On va définir le vecteur unitaire correspondant à \mathbf{R} , $\hat{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{R}}{R}$. Avec cette définition, on va avoir $\nabla(R) = \hat{\mathbf{R}}$, $\nabla(\mathbf{R}) = \overleftrightarrow{I}$ et $\nabla(\hat{\mathbf{R}}) = (\overleftrightarrow{I} - \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{R}})\frac{1}{R}$.

On a donc le dyadique de Green

$$\overleftrightarrow{G}(\mathbf{R}) = [\overleftrightarrow{I} + \frac{\nabla\nabla}{k_h^2}] \frac{e^{ik_h R}}{4\pi R}. \quad (4.37)$$

On veut donc d'abord

$$\nabla(G_0(R)) = \frac{dG_0(R)}{dR} \nabla(R) = (ik_h - \frac{1}{R})G_0(R)\hat{\mathbf{R}}, \quad (4.38)$$

puis

$$\nabla(\nabla(G_0(R))) = ([\frac{ik_h}{R} - \frac{1}{R^2}]\hat{I} + [\frac{-3ik_h}{R} + \frac{3}{R^2} - k_h^2]\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{R}})G_0(R), \quad (4.39)$$

c'est à dire

$$\overleftrightarrow{G}(\mathbf{R}) = ([1 + \frac{i}{k_h R} - \frac{1}{k_h^2 R^2}]\overleftrightarrow{I} + [\frac{-3i}{k_h R} + \frac{3}{k_h^2 R^2} - 1]\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{R}})G_0(R). \quad (4.40)$$

Nous utiliserons cette fonction comme point de comparaison par la suite. On peut également noter qu'en repartant de (4.37) on peut obtenir

$$\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}(\mathbf{R}) = \nabla(G_0(R)) \wedge \overleftrightarrow{I}, \quad (4.41)$$

qui permet d'obtenir le champs \mathbf{H} dans un milieu homogène.

4.1.5 Décomposition spectrale

On va chercher à obtenir une décomposition spectrale de \overleftrightarrow{G} afin de pouvoir représenter les champs par des sommes d'ondes planes. Pour cela, on peut directement appliquer une transformée de Fourier à l'expression de \overleftrightarrow{G} pour un dipôle dans un milieu homogène ou bien revenir à l'équation (4.28) qui définit G_0 et intégrer le long de la direction $\hat{\mathbf{z}}$ avant le changement de coordonnées, ou bien utiliser directement la formule de Weyl[120](qui est en fait équivalente)

$$\frac{e^{ik_h \sqrt{x^2+y^2+z^2}}}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{i}{2\pi} \int \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik_x x + ik_y y + ik_{hz}|z|}}{k_{hz}} dk_x dk_y, \quad (4.42)$$

avec $k_{hz}^2 = k_h^2 - k_x^2 - k_y^2$ et $\Im(k_z) > 0$ pour la même raison que dans le paragraphe précédent (pour assurer la décroissance à l'infini). Les deuxième ou troisième possibilités ont l'avantage de faire sortir explicitement les termes liés à la singularité à la source lors du développement mathématique suivant. Une fois G_0 mis sous forme d'intégrale, on va chercher à obtenir \overleftrightarrow{G}

$$\overleftrightarrow{G}(\mathbf{R}) = [\overleftrightarrow{I} + \frac{\nabla\nabla}{k^2}]G_0(R) \quad (4.43)$$

$$= \frac{i}{8\pi^2} [\overleftrightarrow{I} + \frac{\nabla\nabla}{k_h^2}] \int \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik_x x + ik_y y + ik_{hz}|z|}}{k_{hz}} dk_x dk_y, \quad (4.44)$$

$$= \frac{i}{8\pi^2} \int \int_{-\infty}^{+\infty} [\overleftrightarrow{I} + \frac{\nabla\nabla}{k^2}] \frac{e^{ik_x x + ik_y y + ik_{hz}|z|}}{k_{hz}} dk_x dk_y, \quad (4.45)$$

c'est à dire à obtenir le résultat de $\nabla\nabla(e^{ik_x x + ik_y y + ik_{hz}|z|})$. En cherchant cette expression on a interchangé l'intégrale avec l'opérateur de différentiation ∇ , ce que l'on peut faire uniquement si l'on tient compte de la discontinuité de la dérivée de G_0 par rapport à la direction $\hat{\mathbf{z}}$ (à cause de la valeur absolue). On va avoir à cause du $\nabla\nabla$ des préfacteurs du type

$$\frac{\partial}{\partial i} \frac{\partial}{\partial j} e^{ik_x x + ik_y y + ik_{hz}|z|} = -k_i k_j e^{ik_x x + ik_y y + ik_{hz}|z|}, \quad (4.46)$$

avec $i, j = x, y$ et pour les dérivées premières en z

$$\frac{\partial}{\partial z} e^{ik_{hz}|z|} = \begin{cases} +ik_{hz} e^{ik_{hz}|z|} & \text{si } z > 0, \\ -ik_{hz} e^{ik_{hz}|z|} & \text{si } z < 0, \end{cases} \quad (4.47)$$

et les dérivées secondes

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} e^{ik_{hz}|z|} = -k_{hz}^2 e^{ik_{hz}|z|} + 2ik_{hz} \delta(z). \quad (4.48)$$

On voit ici apparaître la singularité de la fonction de Green à travers le terme de $\delta(z)$ qui deviens un $\delta(\mathbf{R})$ une fois intégré sur tout l'espace. Le dyadique de Green va donc s'écrire

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}) = -\frac{\hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}\delta(\mathbf{R})}{k_h^2} + \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \begin{cases} \left(\overleftrightarrow{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k_h^2} \right) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k_{hz}} dk_x dk_y & \text{si } z > 0, \\ \left(\overleftrightarrow{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{K}\mathbf{K}}{k_h^2} \right) \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}{k_{hz}} dk_x dk_y & \text{si } z < 0, \end{cases} \quad (4.49)$$

avec les vecteurs

$$\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}} + k_{hz} \hat{\mathbf{z}}, \quad (4.50)$$

$$\mathbf{K} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}} - k_{hz} \hat{\mathbf{z}}. \quad (4.51)$$

Ici, \mathbf{k} représente une onde se propageant selon $+\hat{\mathbf{z}}$ et \mathbf{K} selon $-\hat{\mathbf{z}}$. Nous allons maintenant réorganiser la fonction de Green dans l'idée de pouvoir ensuite l'adapter à un milieu multi-couche.

4.1.6 Décomposition TE/TM

On peut remarquer que $\frac{\mathbf{k}}{k}$ est un vecteur unitaire $\hat{\mathbf{k}}$. Il en est de même pour $\frac{\mathbf{K}}{k}$ qui donne $\hat{\mathbf{K}}$. Pour chaque vecteur d'onde \mathbf{k} on peut donc définir une base orthonormée représentant les polarisations TE et TM des champs. On va définir les vecteurs unitaires TE $\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})$ et TM $\hat{\mathbf{m}}(+k_{hz})$ dans la direction $+\hat{\mathbf{z}}$ comme

$$\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz}) = \frac{\mathbf{k} \wedge \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{k} \wedge \hat{\mathbf{z}}|} = \frac{1}{k_\rho} (k_y \hat{\mathbf{x}} - k_x \hat{\mathbf{y}}), \quad (4.52)$$

$$\hat{\mathbf{m}}(+k_{hz}) = \hat{\mathbf{e}}(+k_{hz}) \wedge \hat{\mathbf{k}} = \frac{-k_{hz}}{k k_\rho} (k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}) + \frac{k_\rho}{k} \hat{\mathbf{z}}, \quad (4.53)$$

et dans la direction $-\hat{\mathbf{z}}$ comme

$$\hat{\mathbf{e}}(-k_{hz}) = \frac{\mathbf{K} \wedge \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{K} \wedge \hat{\mathbf{z}}|} = \hat{\mathbf{e}}(+k_{hz}), \quad (4.54)$$

$$\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz}) = \hat{\mathbf{e}}(-k_{hz}) \wedge \hat{\mathbf{K}} = \frac{k_{hz}}{k k_\rho} (k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}) + \frac{k_\rho}{k} \hat{\mathbf{z}}, \quad (4.55)$$

avec $k_\rho = \sqrt{(k_x^2 + k_y^2)}$. Ce qui permet d'obtenir les égalités suivantes

$$\overleftrightarrow{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz}) + \hat{\mathbf{m}}(+k_{hz})\hat{\mathbf{m}}(+k_{hz}), \quad (4.56)$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{K}}\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{e}}(-k_{hz})\hat{\mathbf{e}}(-k_{hz}) + \hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz}). \quad (4.57)$$

On peut ensuite réécrire la fonction de Green d'une source dans un milieu homogène comme

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}) = & -\frac{\hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}\delta(\mathbf{R})}{k_h^2} \\ & + \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \begin{cases} (\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz}) + \hat{\mathbf{m}}(+k_{hz})\hat{\mathbf{m}}(+k_{hz})) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k_{hz}} dk_x dk_y \text{ si } z > 0, \\ (\hat{\mathbf{e}}(-k_{hz})\hat{\mathbf{e}}(-k_{hz}) + \hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})) \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}{k_{hz}} dk_x dk_y \text{ si } z < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.58)$$

En reprenant une notation faisant apparaître $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{R}$ et en séparant les coordonnées de \mathbf{r} et \mathbf{r}' on obtient alors

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & -\frac{\hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{k_h^2} \\ & + \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \begin{cases} ([\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})e^{ik_{hz}z}]\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})e^{-ik_{hz}z'} \\ + [\hat{\mathbf{m}}(+k_{hz})e^{ik_{hz}z}]\hat{\mathbf{m}}(+k_{hz})e^{-ik_{hz}z'}) \frac{e^{ik_x(x-x') + ik_y(y-y')}}{k_{hz}} dk_x dk_y, \quad z > z', \\ ([\hat{\mathbf{e}}(-k_{hz})e^{-ik_{hz}z}]\hat{\mathbf{e}}(-k_{hz})e^{+ik_{hz}z'} \\ + [\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})e^{-ik_{hz}z}]\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})e^{+ik_{hz}z'}) \frac{e^{ik_x(x-x') + ik_y(y-y')}}{k_{hz}} dk_x dk_y, \quad z < z'. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.59)$$

On voit que les différents produits (tensoriels) $\hat{\mathbf{e}}\hat{\mathbf{e}}$ et $\hat{\mathbf{m}}\hat{\mathbf{m}}$ donnent différents dyadiques que l'on va associer à différentes ondes. Ici le produit $\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})\hat{\mathbf{e}}(+k_{hz})$ représente la partie TE du champ créé en \mathbf{r} par une source localisée en \mathbf{r}' en dessous (en coordonnée $\hat{\mathbf{z}}$) du point d'observation. De plus on peut même voir qu'il s'agit d'une onde plane qui se propage dans la direction $+\hat{\mathbf{z}}$. Le produit $\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})\hat{\mathbf{m}}(-k_{hz})$ représente la partie TM descendante d'un champ créé en \mathbf{r} par une source localisée en \mathbf{r}' au dessus du point d'observation. Des ondes créées en \mathbf{r}' et observées en \mathbf{r} sont donc représentées par un produit (tensoriel) de deux vecteurs de base et deux facteurs de propagation caractérisant le point d'observation et la source (que l'on peut réduire à un seul en écriture compact). Cette forme particulière du dyadique de Green est particulièrement adaptée à l'étude d'un multi-couche.

4.2 Dyadique de Green pour un multi-couche

Ainsi, lorsque l'on va chercher la fonction de Green d'une structure multi-couche quelconque, on va simplement modifier la fonction de Green dans le vide pour l'adapter à la position de la source et du point d'observation. Si l'on considère une source dans un milieu 1, frontalier d'un milieu 2 sans source (donc une simple interface entre deux milieux homogènes) on aura

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_\infty + \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{\text{reflechi}}, \quad (4.60)$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{\text{transmis}}, \quad (4.61)$$

où $\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est le dyadique de Green correspondant aux champs dans un milieu i créés par une source placée dans un milieu j . La quantité $\overleftrightarrow{G}_{\infty}$ est la fonction de Green d'une source placée dans le milieu 1 mais infini (le dyadique de Green défini dans le paragraphe précédent) et $\overleftrightarrow{G}_{reflechi}$ et $\overleftrightarrow{G}_{transmis}$ sont les dyadiques de Green représentant les parties réfléchies et transmises des champs. Dans toute la suite on considère que le multi-couche est constitué d'un empilement dans la direction \hat{z} et que chacune des couches est infinie dans les directions \hat{x} et \hat{y} .

Pour chaque couche i d'un multi-couche comprenant une source dans la couche j , on va pouvoir décomposer $\overleftrightarrow{G}_{ij}$ grâce à des vecteurs unitaires et des coefficients de propagation. On a

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -\frac{\hat{z}\hat{z}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{k_j^2} \\ &+ \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \begin{cases} (\mathbf{C}^{TE}\hat{\mathbf{e}}(+k_{jz})e^{-ik_{jz}z'} + \mathbf{C}^{TM}\hat{\mathbf{m}}(+k_{jz})e^{-ik_{jz}z'})C^{rad}dk_xdk_y & \text{si } z > z', \\ (\mathbf{C}^{TE}\hat{\mathbf{e}}(-k_{jz})e^{+ik_{jz}z'} + \mathbf{C}^{TM}\hat{\mathbf{m}}(-k_{jz})e^{+ik_{jz}z'})C^{rad}dk_xdk_y & \text{si } z < z', \end{cases} \end{aligned} \quad (4.62)$$

avec

$$\mathbf{C}^{TE} = A_i^{TE}\hat{\mathbf{e}}(+k_{iz})e^{ik_{iz}z} + B_i^{TE}\hat{\mathbf{e}}(-k_{iz}z)e^{-ik_{iz}z}, \quad (4.63)$$

$$\mathbf{C}^{TM} = A_i^{TM}\hat{\mathbf{m}}(+k_{iz})e^{ik_{iz}z} + B_i^{TM}\hat{\mathbf{m}}(-k_{iz}z)e^{-ik_{iz}z}, \quad (4.64)$$

$$C^{rad} = \frac{e^{ik_x(x-x') + ik_y(y-y')}}{k_{jz}}. \quad (4.65)$$

On représente ici le fait que les champs dans une couche peuvent être écrits comme une somme d'ondes planes montantes et descendantes multipliée par une certaine partie radiale. Notre but va donc être d'obtenir une expression pour les produits de vecteurs unitaires $\hat{\mathbf{e}}$ et $\hat{\mathbf{m}}$. Comme $\hat{\mathbf{e}}$ ne dépend en fait pas de k_z on ne distinguera pas les $\hat{\mathbf{e}}$ selon les couches et on aura

$$\hat{\mathbf{e}}\hat{\mathbf{e}} = \frac{1}{k_\rho^2} \begin{pmatrix} k_y^2 & -k_yk_x & 0 \\ -k_yk_x & k_x^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.66)$$

et les deux matrices (ou dyadiques) correspondant aux champs TM montants (A^{TM}) et descendants (B^{TM})

$$\hat{\mathbf{m}}(+k_{iz})\hat{\mathbf{m}}(\pm k_{jz}) = \frac{1}{k_\rho^2 k_i k_j} \begin{pmatrix} \pm k_x^2 k_{iz} k_{jz} & \pm k_x k_y k_{iz} k_{jz} & -k_\rho^2 k_x k_{iz} \\ \pm k_x k_y k_{iz} k_{jz} & \pm k_y^2 k_{iz} k_{jz} & -k_\rho^2 k_y k_{iz} \\ \mp k_\rho^2 k_x k_{jz} & \mp k_\rho^2 k_y k_{jz} & +k_\rho^4 \end{pmatrix}, \quad (4.67)$$

$$\hat{\mathbf{m}}(-k_{iz})\hat{\mathbf{m}}(\pm k_{jz}) = \frac{1}{k_\rho^2 k_i k_j} \begin{pmatrix} \mp k_x^2 k_{iz} k_{jz} & \mp k_x k_y k_{iz} k_{jz} & +k_\rho^2 k_x k_{iz} \\ \mp k_x k_y k_{iz} k_{jz} & \mp k_y^2 k_{iz} k_{jz} & +k_\rho^2 k_y k_{iz} \\ \mp k_\rho^2 k_x k_{jz} & \mp k_\rho^2 k_y k_{jz} & +k_\rho^4 \end{pmatrix}, \quad (4.68)$$

où le signe supérieur de \pm et \mp est pour $z > z'$ et le signe inférieur pour $z < z'$. On peut réécrire les A_i et B_i pour inclure la dépendance en $e^{\pm ik_{jz}z'}$. Dans ce cas là le coeur de la fonction de Green va pouvoir s'écrire

$$(\mathbf{C}^{TE}\hat{\mathbf{e}}(+k_{jz}) + \mathbf{C}^{TM}\hat{\mathbf{m}}(+k_{jz})) \frac{e^{ik_x(x-x') + ik_y(y-y')}}{k_{jz}} \quad \text{si } z > z', \quad (4.69)$$

$$(\mathbf{C}^{TE}\hat{\mathbf{e}}(-k_{jz}) + \mathbf{C}^{TM}\hat{\mathbf{m}}(-k_{jz})) \frac{e^{ik_x(x-x') + ik_y(y-y')}}{k_{jz}} \quad \text{si } z < z'. \quad (4.70)$$

Les coefficients en amplitude A_i et B_i vont alors dépendre de z' , k_{jz} , et k_ρ et seront différents selon que $z > z'$ ou $z < z'$. De manière générale, on peut écrire

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{TE} + \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{TM}, \quad (4.71)$$

puis en omettant la singularité et les intégrales, on peut écrire pour la partie TE ou TM de la fonction de Green

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{\hat{\mathbf{u}}} \equiv (A_i \hat{\mathbf{u}}_i(+)) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + B_i \hat{\mathbf{u}}_i(-) e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}} \begin{cases} \frac{\hat{\mathbf{u}}_j(+)}{k_{jz}} e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}'} & \text{si } z > z', \\ \frac{\hat{\mathbf{u}}_j(-)}{k_{jz}} e^{-i\mathbf{K}_j \cdot \mathbf{r}'} & \text{si } z < z', \end{cases} \quad (4.72)$$

avec $\hat{\mathbf{u}}_{i,j}(\pm) = \hat{\mathbf{e}}_{i,j}(\pm)$, ou $\hat{\mathbf{m}}_{i,j}(\pm)$ selon la polarisation. Ou encore,

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{\hat{\mathbf{u}}} \equiv (A_i(z') \hat{\mathbf{u}}_i(+)) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + B_i(z') \hat{\mathbf{u}}_i(-) e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}} \frac{\hat{\mathbf{u}}_j(\pm) e^{-ik_x x'} e^{-ik_y y'}}{k_{jz}}, \quad (4.73)$$

si l'on inclut la dépendance en z' directement dans les amplitudes A_i et B_i , ce qui est le choix que nous feront dans toute la suite. Dans les deux cas, cela permet d'écrire le coeur du dyadique de Green comme un produit tensoriel de deux vecteurs de Green

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{\hat{\mathbf{u}}} \equiv \mathbf{G}_i^{\hat{\mathbf{u}}} \mathbf{G}_j^{\hat{\mathbf{u}}}, \quad (4.74)$$

avec

$$\mathbf{G}_i^{\hat{\mathbf{u}}} = A_i(z') \hat{\mathbf{u}}_i(+)) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + B_i(z') \hat{\mathbf{u}}_i(-) e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.75)$$

$$\mathbf{G}_j^{\hat{\mathbf{u}}} = \frac{\hat{\mathbf{u}}_j(\pm) e^{-ik_x x'} e^{-ik_y y'}}{k_{jz}}, \quad (4.76)$$

et bien évidemment

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \sum_{\hat{\mathbf{u}}} \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{\hat{\mathbf{u}}}, \quad (4.77)$$

ou encore en reprenant les intégrales et la singularité

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{k_j^2} + \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\hat{\mathbf{u}}} \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{\hat{\mathbf{u}}} dk_x dk_y. \quad (4.78)$$

Ces formes spécifiques du coeur du dyadique ont l'avantage de permettre l'application des conditions aux limites la plus simple possible.

4.2.1 Conditions aux limites

Si l'on considère un milieu homogène par morceaux on va pouvoir déterminer des dyadiques de Green basés sur le dyadique dans le vide pour chaque couche i . Il faudra ensuite relier ces différents dyadiques par les conditions aux interfaces. Afin de déterminer ces conditions aux limites sur les différents $\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ correspondant aux différents milieux i on va élever les équations de Maxwell au rang de dyadique[126].

On va considérer trois jeux de champs de même fréquence ω dans le même milieu (μ, ϵ) produits par trois distributions de courant distinctes \mathbf{J}_j ($j = x, y, z$ c'est à dire les trois directions d'un repère cartésien orthonormée). On a

$$\nabla \wedge \mathbf{E}_j = i\omega\mu_0\mu\mathbf{H}_j, \quad (4.79)$$

$$\nabla \wedge \mathbf{H}_j = \mathbf{J}_j - i\omega\epsilon_0\epsilon\mathbf{E}_j, \quad (4.80)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_j = i\omega\rho_j, \quad (4.81)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_0\epsilon\mathbf{E}_j) = \rho_j, \quad (4.82)$$

$$\nabla \cdot (\mu_0\mu\mathbf{H}_j) = 0. \quad (4.83)$$

Pour chaque direction (chaque j) on peut juxtaposer par la droite un vecteur unitaire ($\hat{\mathbf{x}}$ par exemple) et sommer ces 3 jeux d'équations. On élève alors les équations de Maxwell au rang d'équations dyadiques

$$\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{E}} = i\omega\mu_0\mu\overleftrightarrow{\mathbf{H}}, \quad (4.84)$$

$$\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{H}} = \overleftrightarrow{\mathbf{J}} - i\omega\epsilon_0\epsilon\overleftrightarrow{\mathbf{E}}, \quad (4.85)$$

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{J}} = i\omega\boldsymbol{\rho}, \quad (4.86)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_0\epsilon\overleftrightarrow{\mathbf{E}}) = \boldsymbol{\rho}, \quad (4.87)$$

$$\nabla \cdot (\mu_0\mu\overleftrightarrow{\mathbf{H}}) = 0, \quad (4.88)$$

où on a par exemple

$$\overleftrightarrow{\mathbf{E}} = \sum_j \mathbf{E}_j \hat{\mathbf{r}}_j, \quad (4.89)$$

avec $\hat{\mathbf{r}}_x = \hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{r}}_y = \hat{\mathbf{y}}, \dots$. Ce qui nous permet d'écrire non plus l'équation d'onde vectorielle mais dyadique, avec l'équation du dyadique de Green $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ correspondante

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{E}} - k^2 \overleftrightarrow{\mathbf{E}} = i\omega\mu_0\mu\overleftrightarrow{\mathbf{J}}, \quad (4.90)$$

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k^2 \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.91)$$

avec $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ qui correspond aux champs générés par une source ponctuelle $\overleftrightarrow{\mathbf{J}} = \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{i\omega\mu_0\mu}$.

Avec cette définition on peut alors écrire $\overleftrightarrow{\mathbf{E}} = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ ce qui nous permet de réécrire les différents dyadiques de Maxwell

$$\overleftrightarrow{\mathbf{H}} = \frac{\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}}{i\omega\mu_0\mu}, \quad (4.92)$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{D}} = \epsilon_0\epsilon\overleftrightarrow{\mathbf{G}}, \quad (4.93)$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{B}} = \mu_0\mu\overleftrightarrow{\mathbf{H}} = \frac{\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}}{i\omega}. \quad (4.94)$$

Comme conditions aux limites entre deux milieux 1 et 2 on considère la continuité des composantes tangentielles de $\overleftrightarrow{\mathbf{E}}$ et $\overleftrightarrow{\mathbf{H}}$. Avec la méthode que nous employons la continuités des composantes normales de $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$ et $\overleftrightarrow{\mathbf{D}}$ n'est en fait pas nécessaire mais nous expliquerons quand même la manière de la considérer. Avec les définitions précédentes on a donc les conditions aux limites entre deux dyadiques de Green $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}$ et $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{2j}$

$$\hat{\mathbf{n}} \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j} = \hat{\mathbf{n}} \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{2j}, \quad (4.95)$$

$$\hat{\mathbf{n}} \wedge \frac{\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}}{\mu_1} = \hat{\mathbf{n}} \wedge \frac{\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{2j}}{\mu_2}, \quad (4.96)$$

$$(4.97)$$

et

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \epsilon_1 \overleftrightarrow{G}_{1j} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \epsilon_2 \overleftrightarrow{G}_{2j}, \quad (4.98)$$

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \wedge \overleftrightarrow{G}_{1j} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \wedge \overleftrightarrow{G}_{2j}, \quad (4.99)$$

si l'on décide de considérer la continuité des composantes normales. Dans les deux cas on a $\hat{\mathbf{n}}$ un vecteur normal à l'interface entre les milieux 1 et 2. Notons qu'il est aussi possible d'obtenir ces conditions en partant des équations d'ondes et dyadiques sur \mathbf{E} et \mathbf{H} et en faisant appel aux identités de Green - une procédure un peu plus technique. Enfin si l'on cherchait à considérer des matériaux non locaux, il faudrait modifier l'équation (4.85) puis considérer la condition aux limites supplémentaire[130]. Nous sommes maintenant en position d'appliquer ces conditions aux limites pour obtenir les différentes amplitudes A_i et B_i impliquées dans le dyadique de Green.

4.2.2 Matrices S et dyadique de Green

Si on considère un système composé de N+1 couches (N interfaces) avec une source dans la couche j on va avoir

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_j \end{pmatrix} = S^{sup} \begin{pmatrix} B_1 \\ A_j \end{pmatrix}, \quad (4.100)$$

et

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = S^{inf} \begin{pmatrix} B_j \\ A_{N+1} \end{pmatrix}, \quad (4.101)$$

où S^{sup} et S^{inf} représentent la structure au dessus, respectivement en dessous de la couche j comprenant la source. Sans champs incidents autres que celui produit par la source on a

$$B_1 = A_{N+1} = 0, \quad (4.102)$$

et l'on a donc

$$r_t = \frac{B_j(z = z_{sup})}{A_j(z = z_{sup})} = S_{22}^{sup}, \quad (4.103)$$

$$r_b = \frac{A_j(z = z_{inf})}{B_j(z = z_{inf})} = S_{11}^{inf}, \quad (4.104)$$

avec r_b et r_t les coefficient de réflexion en amplitude de la structure au dessous (interface en z_{inf}), respectivement au dessus (interface en z_{sup}) de la source. Ils permettent de définir les coefficients R_\uparrow et R_\downarrow que l'on détaillera dans la partie suivante. Une fois ces coefficients calculés pour les structures au dessus et en dessous de la source, on peut calculer les amplitudes montantes et descendantes dans la couche source. Ceci permet de connaître les amplitudes sortantes au dessus et en dessous de la structure via le cascading des matrices de couches et d'interfaces. On définit les matrices de couche comme les matrices prenant en compte la propagation des champs d'une interface i à une autre interface $i + 1$ dans une couche i d'épaisseur h_i

$$\begin{pmatrix} A_i^+ \\ B_i^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{ik_{iz}h_i} \\ e^{ik_{iz}h_i} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_i^+ \\ A_i^- \end{pmatrix}, \quad (4.105)$$

où les amplitudes en Amp^+ sont les amplitudes à l'interface haute et en Amp^- celles à l'interface basse. La polarisation TE ou TM ne change pas cette matrice. On va également définir les matrices d'interface, différentes en TE et en TM.

Pour appliquer la continuité on peut mettre de côté tout ce qui est identique dans chaque couche (partie source) et considérer \overleftrightarrow{G} décrit par l'équation (4.74) pour ensuite utiliser les propriétés d'associativité du produit tensoriel par rapport au produit scalaire et au produit vectoriel. On a

$$\hat{\mathbf{z}} \cdot \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\mathbf{z}} \cdot (\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j) = (\hat{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j, \quad (4.106)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\mathbf{z}} \wedge (\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j) = (\hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j. \quad (4.107)$$

De plus, par rapport à $\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ on a

$$\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \nabla \wedge (\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j), \quad (4.108)$$

$$= (\nabla \wedge \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j - \mathbf{G}_i \wedge (\nabla \mathbf{G}_j) = (\nabla \wedge \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j, \quad (4.109)$$

$$(4.110)$$

et

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \nabla \cdot (\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j), \quad (4.111)$$

$$= (\nabla \cdot \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j + \mathbf{G}_i \cdot (\nabla \mathbf{G}_j) = (\nabla \cdot \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j. \quad (4.112)$$

$$(4.113)$$

Cela permet de décrire par exemple pour la continuité des composantes tangentielles de \overleftrightarrow{G} entre un milieu i et $i+1$

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge \overleftrightarrow{G}_{i,j} = \hat{\mathbf{z}} \wedge \overleftrightarrow{G}_{i+1,j}, \quad (4.114)$$

$$(\hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_i) \mathbf{G}_j = (\hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_{i+1}) \mathbf{G}_j, \quad (4.115)$$

$$[(\hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_i) - (\hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_{i+1})] \mathbf{G}_j = 0, \quad (4.116)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_i = \hat{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{G}_{i+1}. \quad (4.117)$$

Les quantités impliquées dans la continuité de \overleftrightarrow{G} sont donc du type

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{u}}(+), \quad (4.118)$$

$$e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{u}}(-), \quad (4.119)$$

et celles dans la continuité de $\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}$

$$\nabla \wedge (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{u}}(+)), \quad (4.120)$$

$$\nabla \wedge (e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{u}}(-)). \quad (4.121)$$

En considérant le fait que $\hat{\mathbf{e}}(+)$, $\hat{\mathbf{k}}$, $\hat{\mathbf{m}}(+)$ et $\hat{\mathbf{e}}(-)$, $\hat{\mathbf{K}}$, $\hat{\mathbf{m}}(-)$ sont des bases ortho-normées on a

$$\nabla \wedge (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(+)) = ike^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} (\hat{\mathbf{k}} \wedge \hat{\mathbf{e}}(+)) = -ike^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{m}}(+), \quad (4.122)$$

$$\nabla \wedge (e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(+)) = ike^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} (\hat{\mathbf{K}} \wedge \hat{\mathbf{e}}(+)) = -ike^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{m}}(+), \quad (4.123)$$

$$\nabla \wedge (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{m}}(+)) = ike^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(+), \quad (4.124)$$

$$\nabla \wedge (e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{m}}(-)) = ike^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-). \quad (4.125)$$

On va ensuite vouloir appliquer $\hat{\mathbf{z}} \wedge$

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge \hat{\mathbf{e}}(+)=\hat{\mathbf{z}} \wedge \hat{\mathbf{e}}(-)=\frac{1}{k_{\rho}}\begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.126)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge \hat{\mathbf{m}}(+)=\frac{k_z}{k k_{\rho}}\begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}=\frac{k_z}{k k_{\rho}}\hat{\mathbf{e}}(+), \quad (4.127)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge \hat{\mathbf{m}}(-)=\frac{k_z}{k k_{\rho}}\begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}=\frac{-k_z}{k k_{\rho}}\hat{\mathbf{e}}(-), \quad (4.128)$$

ou bien $\hat{\mathbf{z}}$.

$$\hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{e}}(\pm)=0, \quad (4.129)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{m}}(\pm)=\frac{k_{\rho}}{k}. \quad (4.130)$$

Toutes ces formules nous permettent d'écrire la continuité aux interfaces des composantes tangentielles de $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ sous la forme

$$\hat{\mathbf{z}} \wedge (A_i \hat{\mathbf{u}}_i(+)+B_i \hat{\mathbf{u}}_i(-)) e^{i \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}=\hat{\mathbf{z}} \wedge (A_{i+1} \hat{\mathbf{u}}_{i+1}(+)+B_{i+1} \hat{\mathbf{u}}_{i+1}(-)) e^{i \mathbf{K}_{i+1} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.131)$$

$$\frac{1}{\mu_i} \hat{\mathbf{z}} \wedge (\nabla \wedge (A_i \hat{\mathbf{u}}_i(+)+B_i \hat{\mathbf{u}}_i(-)) e^{i \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}})=\frac{1}{\mu_{i+1}} \hat{\mathbf{z}} \wedge (\nabla \wedge (A_{i+1} \hat{\mathbf{u}}_{i+1}(+)+B_{i+1} \hat{\mathbf{u}}_{i+1}(-)) e^{i \mathbf{K}_{i+1} \cdot \mathbf{r}}), \quad (4.132)$$

ce qui mène à

$$A_i^{TE}+B_i^{TE}=A_{i+1}^{TE}+B_{i+1}^{TE}, \quad (4.133)$$

$$\frac{k_{iz}}{\mu_i}(A_i^{TE}-B_i^{TE})=\frac{k_{i+1z}}{\mu_{i+1}}(A_{i+1}^{TE}-B_{i+1}^{TE}), \quad (4.134)$$

pour le cas TE. En TM on a

$$\frac{k_{iz}}{k_i}(A_i^{TM}-B_i^{TM})=\frac{k_{i+1z}}{k_{i+1}}(A_{i+1}^{TM}-B_{i+1}^{TM}), \quad (4.135)$$

$$\frac{k_i}{\mu_i}(A_i^{TM}+B_i^{TM})=\frac{k_{i+1}}{\mu_{i+1}}(A_{i+1}^{TM}+B_{i+1}^{TM}), \quad (4.136)$$

où on a fixé l'interface à $z=0$ à chaque fois et où l'on a supprimé la partie radiale $e^{ik_x x} e^{ik_y y}$ de chaque côté. Ce qui nous permet de définir des matrices d'interface TE et TM

$$S_{i \rightarrow i+1}^{TE}=\frac{1}{\frac{k_{iz}}{\mu_i}+\frac{k_{i+1z}}{\mu_{i+1}}}\begin{pmatrix} \frac{k_{iz}}{\mu_i}-\frac{k_{i+1z}}{\mu_{i+1}} & 2\frac{k_{i+1z}}{\mu_{i+1}} \\ 2\frac{k_{iz}}{\mu_i} & \frac{k_{i+1z}}{\mu_{i+1}}-\frac{k_{iz}}{\mu_i} \end{pmatrix}, \quad (4.137)$$

$$S_{i \rightarrow i+1}^{TM}=\frac{1}{\frac{k_{iz}}{\epsilon_i}+\frac{k_{i+1z}}{\epsilon_{i+1}}}\begin{pmatrix} \frac{k_{iz}}{\epsilon_i}-\frac{k_{i+1z}}{\epsilon_{i+1}} & 2\frac{k_{i+1z} n_i n_{i+1}}{\epsilon_i \epsilon_{i+1} \mu_{i+1}} \\ 2\frac{k_{iz} n_i n_{i+1}}{\epsilon_i \epsilon_{i+1} \mu_i} & \frac{k_{i+1z}}{\epsilon_{i+1}}-\frac{k_{iz}}{\epsilon_i} \end{pmatrix}. \quad (4.138)$$

Le cascading de ces matrices en partant de la couche source permet d'obtenir les coefficients de réflexion, et donc les amplitudes dans la couche source et à l'extérieur de la structure. Mais ces matrices permettent aussi d'avoir accès aux amplitudes dans les couches intermédiaires. Une fois les matrices S connues, on a donc accès à toutes les amplitudes dans tout le système. D'un point de vue pratique, on va donc devoir calculer un $k_{iz} = \sqrt{k_i^2 - k_\rho^2}$ pour chaque couche afin d'avoir toutes les matrices S du système. Lors de l'intégration sur k_ρ il va donc falloir recalculer les matrices S pour chaque k_ρ (en assurant $\Im(k_{iz}) > 0$) ce qui permettra d'avoir de nouveaux coefficients A_i et B_i pour chaque k_ρ . Notons que si l'on avait considéré la non-localité, il nous serait possible d'appliquer le modèle de cavité à 1 mode discuté dans le second chapitre mais pas directement. Comme on a considéré les A et B comme des amplitudes du champ \mathbf{E} pour chaque polarisation, les coefficients de la matrice S^{TM} ne sont pas tout à fait identiques à ceux dérivés dans le chapitre 2. Seuls les coefficients de réflexions S_{11} et S_{22} le sont. Pour considérer la non-localité il faudrait repartir des conditions aux limites pour inclure le facteur Ω dans ces matrices S [130]. Il nous faut maintenant définir les amplitudes dans la couche contenant la source.

4.2.3 Amplitudes dans la couche source

Dans la couche qui contient la source (dipôle ponctuel 3D) on va vouloir écrire les amplitudes directement émises par la source et réfléchies comme une somme d'amplitudes simplement montantes ou descendantes. On commence par écrire pour chaque composante $\alpha\beta$ du dyadique de Green avec $\alpha, \beta = x, y, z$, le coeur de la fonction de Green

$$P_{\alpha\beta} e^{ik_z|z-z'|} + R_{\alpha\beta\uparrow} e^{ik_z z} + R_{\alpha\beta\downarrow} e^{-ik_z z}, \quad (4.139)$$

avec $P_{\alpha\beta}$ l'amplitude directement émise par la source. Ce terme s'écrit comme le produit des vecteurs de bases TE/TM tel que

$$P_{\alpha\beta} = P_{\alpha\beta_{z>z'}} = u_\alpha(+)\mathcal{u}_\beta(+) \text{ si } z > z', \quad (4.140)$$

$$P_{\alpha\beta} = P_{\alpha\beta_{z<z'}} = u_\alpha(-)\mathcal{u}_\beta(-) \text{ si } z < z', \quad (4.141)$$

$$(4.142)$$

où u est équivalent à e ou m dans la couche source. Cette ré-écriture permet de mettre les amplitudes sous la forme

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta} e^{ik_z z} + \mathcal{B}_{\alpha\beta} e^{-ik_z z}, \quad (4.143)$$

où on a

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta} = A u_\alpha(+)\mathcal{u}_\beta(\pm), \quad (4.144)$$

$$\mathcal{B}_{\alpha\beta} = B u_\alpha(-)\mathcal{u}_\beta(\pm), \quad (4.145)$$

où les A et B sont ceux définis pour qu'ils contiennent déjà l'information sur la position de la source z' . Cela revient à écrire

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}e^{ik_z z} + \mathcal{B}_{\alpha\beta}e^{-ik_z z} = P_{\alpha\beta}e^{ik_z|z-z'|} + R_{\alpha\beta\uparrow}e^{ik_z z} + R_{\alpha\beta\downarrow}e^{-ik_z z}, \quad (4.146)$$

que l'on peut décomposer comme

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta} = H(z - z')P_{\alpha\beta z > z'}e^{-ik_z z'} + R_{\alpha\beta\uparrow}, \quad (4.147)$$

$$\mathcal{B}_{\alpha\beta} = H(z' - z)P_{\alpha\beta z < z'}e^{ik_z z'} + R_{\alpha\beta\downarrow}, \quad (4.148)$$

$$(4.149)$$

c'est à dire que l'on a

$$A_{\alpha\beta} = H(z - z')\frac{P_{\alpha\beta z > z'}}{u_{\alpha(+)}u_{\beta(\pm)}}e^{-ik_z z'} + \frac{R_{\alpha\beta\uparrow}}{u_{\alpha(+)}u_{\beta(\pm)}}, \quad (4.150)$$

$$B_{\alpha\beta} = H(z' - z)\frac{P_{\alpha\beta z < z'}}{u_{\alpha(-)}u_{\beta(\pm)}}e^{ik_z z'} + \frac{R_{\alpha\beta\downarrow}}{u_{\alpha(-)}u_{\beta(\pm)}}. \quad (4.151)$$

$$(4.152)$$

Ce sont ces deux expressions qui définissent les amplitudes montantes et descendantes dans la couche source. A partir de là, on va donc vouloir obtenir les expressions du types $\frac{P_{\alpha\beta z > z'}}{u_{\alpha(+)}u_{\beta(\pm)}}$ et $\frac{R_{\alpha\beta\uparrow}}{u_{\alpha(+)}u_{\beta(\pm)}}$. On va donc vouloir dans un premier temps définir les $R_{\alpha\beta\uparrow}$ et $R_{\alpha\beta\downarrow}$. On peut définir deux rapports

$$\left. \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}}{\mathcal{B}_{\alpha\beta}} \right)_{z < z'} = \frac{R_{\alpha\beta\uparrow}}{P_{\alpha\beta z < z'}e^{ik_z z'} + R_{\alpha\beta\downarrow}}, \quad (4.153)$$

$$\left. \frac{\mathcal{B}_{\alpha\beta}}{\mathcal{A}_{\alpha\beta}} \right)_{z > z'} = \frac{R_{\alpha\beta\downarrow}}{P_{\alpha\beta z > z'}e^{-ik_z z'} + R_{\alpha\beta\uparrow}}, \quad (4.154)$$

qui permettent d'obtenir des expressions pour les R telles que

$$R_{\alpha\beta\uparrow} = \frac{\left. \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}}{\mathcal{B}_{\alpha\beta}} \right)_{z < z'} \left(P_{\alpha\beta z < z'}e^{ik_z z'} + \left. \frac{\mathcal{B}_{\alpha\beta}}{\mathcal{A}_{\alpha\beta}} \right)_{z > z'} P_{\alpha\beta z > z'}e^{-ik_z z'} \right)}{1 - \left. \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}}{\mathcal{B}_{\alpha\beta}} \right)_{z < z'} \left. \frac{\mathcal{B}_{\alpha\beta}}{\mathcal{A}_{\alpha\beta}} \right)_{z > z'}}, \quad (4.155)$$

$$R_{\alpha\beta\downarrow} = \frac{\left. \frac{\mathcal{B}_{\alpha\beta}}{\mathcal{A}_{\alpha\beta}} \right)_{z > z'} \left(P_{\alpha\beta z > z'}e^{-ik_z z'} + \left. \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}}{\mathcal{B}_{\alpha\beta}} \right)_{z < z'} P_{\alpha\beta z < z'}e^{ik_z z'} \right)}{1 - \left. \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}}{\mathcal{B}_{\alpha\beta}} \right)_{z < z'} \left. \frac{\mathcal{B}_{\alpha\beta}}{\mathcal{A}_{\alpha\beta}} \right)_{z > z'}}. \quad (4.156)$$

Il faut maintenant que l'on lie ces coefficients R aux coefficients r définis via les matrices S . Par définition on a

$$\left. \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}}{\mathcal{B}_{\alpha\beta}} \right)_{z < z'} = \left. \frac{A}{B} \right)_{z < z'} \frac{u_{\alpha(+)}u_{\beta(-)}}{u_{\alpha(-)}u_{\beta(-)}}, \quad (4.157)$$

$$\left. \frac{\mathcal{B}_{\alpha\beta}}{\mathcal{A}_{\alpha\beta}} \right)_{z > z'} = \left. \frac{B}{A} \right)_{z > z'} \frac{u_{\alpha(-)}u_{\beta(+)}}{u_{\alpha(+)}u_{\beta(+)}} \quad (4.158)$$

que l'on va pouvoir relier aux r_b, r_t par le fait que

$$A(z = z_{inf}) = A_{z < z'} e^{ik_z z_{inf}}, \quad (4.159)$$

$$B(z = z_{inf}) = B_{z < z'} e^{-ik_z z_{inf}}, \quad (4.160)$$

$$A(z = z_{sup}) = A_{z > z'} e^{ik_z z_{sup}}, \quad (4.161)$$

$$B(z = z_{sup}) = B_{z > z'} e^{-ik_z z_{sup}}, \quad (4.162)$$

et

$$r_b = \frac{A(z = z_{inf})}{B(z = z_{inf})}, \quad (4.163)$$

$$r_t = \frac{B(z = z_{sup})}{A(z = z_{sup})}. \quad (4.164)$$

On a donc

$$\left. \frac{A}{B} \right)_{z < z'} = r_b e^{-2ik_z z_{inf}}, \quad (4.165)$$

$$\left. \frac{B}{A} \right)_{z > z'} = r_t e^{2ik_z z_{sup}}. \quad (4.166)$$

Cela permet de définir les R comme

$$R_{\alpha\beta\uparrow} = \frac{\frac{u_\alpha(+)-u_\beta(-)}{u_\alpha(-)-u_\beta(-)} r_b e^{2ik_z h} \left(P_{\alpha\beta z < z'} e^{ik_z z'} e^{-2ik_z z_{sup}} + \frac{u_\alpha(-)u_\beta(+)}{u_\alpha(+)-u_\beta(+)} r_t P_{\alpha\beta z > z'} e^{-ik_z z'} \right)}{1 - r_b r_t e^{2ik_z h}}, \quad (4.167)$$

$$R_{\alpha\beta\downarrow} = \frac{\frac{u_\alpha(-)u_\beta(+)}{u_\alpha(+)-u_\beta(+)} r_t e^{2ik_z h} \left(P_{\alpha\beta z > z'} e^{-ik_z z'} e^{2ik_z z_{inf}} + \frac{u_\alpha(+)-u_\beta(-)}{u_\alpha(-)-u_\beta(-)} r_b P_{\alpha\beta z < z'} e^{ik_z z'} \right)}{1 - r_b r_t e^{2ik_z h}}, \quad (4.168)$$

avec $h = z_{sup} - z_{inf}$ l'épaisseur de la couche contenant la source. Il ne reste alors plus qu'à éliminer les quotients de produit de $u(\pm)$. Au vu de la forme de ces derniers, ils ne vont ajouter au final qu'un signe en fonction de la position relative du point d'observation par rapport à la source. En définitive, on obtient un résultat identique à celui de Paulus[131]. À cause des $u(\pm)$, il faudra distinguer le cas TE et TM. En TE les amplitudes dans la couche source sont identiques quel que soit α ou β

$$A^{TE} = H(z - z') e^{-ik_z z'} + \frac{r_b^{TE} e^{2ik_z h} (r_t^{TE} e^{-ik_z z'} + e^{ik_z z'} e^{-2ik_z z_{sup}})}{1 - r_t^{TE} r_b^{TE} e^{2ik_z h}}, \quad (4.169)$$

$$B^{TE} = H(z' - z) e^{ik_z z'} + \frac{r_t^{TE} e^{2ik_z h} (r_b^{TE} e^{ik_z z'} + e^{-ik_z z'} e^{2ik_z z_{inf}})}{1 - r_t^{TE} r_b^{TE} e^{2ik_z h}}. \quad (4.170)$$

Alors qu'en TM les amplitudes s'écrivent sous forme dyadique

$$\overleftrightarrow{A}^{TM} = \begin{pmatrix} \pm & \pm & + \\ \pm & \pm & + \\ \pm & \pm & + \end{pmatrix} H(z - z') e^{-ik_z z'} \quad (4.171)$$

$$+ \frac{r_b^{TM} e^{2ik_z h} \left(\begin{pmatrix} \pm & \pm & + \\ \pm & \pm & + \\ \pm & \pm & + \end{pmatrix} r_t^{TM} e^{-ik_z z'} + \begin{pmatrix} \mp & \mp & + \\ \mp & \mp & + \\ \mp & \mp & + \end{pmatrix} e^{ik_z z'} e^{-2ik_z z_{sup}} \right)}{1 - r_t^{TM} r_b^{TM} e^{2ik_z h}}, \quad (4.172)$$

$$\overleftrightarrow{B}^{TM} = \begin{pmatrix} \mp & \mp & + \\ \mp & \mp & + \\ \mp & \mp & + \end{pmatrix} H(z' - z) e^{ik_z z'} \quad (4.173)$$

$$+ \frac{r_t^{TM} e^{2ik_z h} \left(\begin{pmatrix} \mp & \mp & + \\ \mp & \mp & + \\ \mp & \mp & + \end{pmatrix} r_b^{TM} e^{ik_z z'} + \begin{pmatrix} \pm & \pm & + \\ \pm & \pm & + \\ \pm & \pm & + \end{pmatrix} e^{-ik_z z'} e^{2ik_z z_{inf}} \right)}{1 - r_t^{TM} r_b^{TM} e^{2ik_z h}}, \quad (4.174)$$

c'est à dire que pour $\alpha = x, y, z$ et $\beta = x, y$ il faut distinguer deux jeux d'amplitudes différents en fonction de la position par rapport à la source. Pour les coordonnées $\alpha = x, y, z$ et $\beta = z$ cette distinction n'est pas nécessaire. Dans la suite, on fera la distinction en indiquant par $\alpha\beta$ les amplitudes TM.

4.2.4 Passage en coordonnées cylindriques

On pourrait calculer brutalement $\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ mais l'intégrale converge très lentement. Pour accélérer le calcul on passe en coordonnées cylindriques, ce qui permet de n'avoir plus qu'une intégrale sur k_ρ au lieu de deux sur k_x et k_y . Cela permet aussi d'appliquer une variété de techniques d'accélération. On va poser

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' = (\boldsymbol{\rho}, z - z'), \quad (4.175)$$

$$\boldsymbol{\rho} = (\rho \cos(\phi), \rho \sin(\phi)), \quad (4.176)$$

$$\mathbf{k} = (\mathbf{k}_\rho, k_z), \quad (4.177)$$

$$\mathbf{k}_\rho = (k_x, k_y) = (k_\rho \cos(k_\phi), k_\rho \sin(k_\phi)). \quad (4.178)$$

De cette manière on va pouvoir écrire

$$e^{ik_x(x-x') + ik_y(y-y')} = e^{ik_\rho \rho \cos(k_\phi - \phi)}, \quad (4.179)$$

$$dk_x dk_y = k_\rho dk_\rho dk_\phi. \quad (4.180)$$

Cela nous sert ensuite pour faire un développement de l'exponentielle en fonctions de Bessel de la forme

$$e^{i\beta \cos(\theta)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(\beta) e^{im\theta}, \quad (4.181)$$

que l'on peut ensuite intégrer sur k_ϕ (via un changement de variable) en utilisant le fait que

$$\int_{-\phi}^{2\pi-\phi} e^{im\theta} d\theta = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq 0, \\ 2\pi & \text{si } m = 0. \end{cases} \quad (4.182)$$

| $F(k_\phi)$ | I |
|-----------------------------|---|
| $\cos(k_\phi)$ | $2i\pi J_1(k_\rho\rho) \cos(\phi)$ |
| $\sin(k_\phi)$ | $2i\pi J_1(k_\rho\rho) \sin(\phi)$ |
| $\cos(k_\phi) \sin(k_\phi)$ | $2\pi \left[J_0(k_\rho\rho) - \frac{2}{k_\rho\rho} J_1(k_\rho\rho) \right] \cos(\phi) \sin(\phi)$ |
| $\cos^2(k_\phi)$ | $2\pi \left[J_0(k_\rho\rho) \cos^2(\phi) - \frac{1}{k_\rho\rho} J_1(k_\rho\rho) \cos(2\phi) \right]$ |
| $\sin^2(k_\phi)$ | $2\pi \left[J_0(k_\rho\rho) \sin^2(\phi) + \frac{1}{k_\rho\rho} J_1(k_\rho\rho) \cos(2\phi) \right]$ |
| 1 | $2\pi J_0(k_\rho\rho)$ |

TABLE 4.1 – Équivalence entre l'équation (4.186) et les différents développements en fonctions de Bessel.

et les différentes formules de récurrence associées aux fonctions de Bessel[26]

$$zJ_{\nu-1}(z) + zJ_{\nu+1}(z) = 2\nu J_\nu(z), \quad (4.183)$$

$$J_{\nu-1}(z) - J_{\nu+1}(z) = 2 \frac{d}{dz} J_\nu(z), \quad (4.184)$$

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z), \quad (4.185)$$

avec ν quelconque et n entier. Le tableau 4.1 résume les résultats de cette expansion pour I l'intégrale sur k_ϕ définie par

$$I = \int_0^{2\pi} F(k_\phi) e^{ik_\rho\rho \cos(k_\phi - \phi)} dk_\phi. \quad (4.186)$$

Ceci permet de redéfinir $\overleftrightarrow{G}_{ij}$ comme

$$\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\hat{z}\hat{z}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{k_j^2} + \frac{i}{4\pi} \int_0^{+\infty} \overleftrightarrow{f}^{TE} + \overleftrightarrow{f}^{TM} dk_\rho, \quad (4.187)$$

où encore une fois les dyadiques \overleftrightarrow{f} doivent être distingués selon que le point d'observation soit au dessus ou en dessous de la source. Si l'on écrit \overleftrightarrow{f} comme

$$\begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{yx} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{zx} & f_{zy} & f_{zz} \end{pmatrix}, \quad (4.188)$$

on va avoir pour $\overleftrightarrow{f}^{TE}$

$$f_{xx}^{TE} = \frac{1}{k_{jz}} [k_\rho J_0(k_\rho\rho) \sin(\phi)^2 + \frac{J_1(k_\rho\rho)}{\rho} \cos(2\phi)] (A_i^{TE} e^{ik_{iz}z} + B_i^{TE} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.189)$$

$$f_{xy}^{TE} = \frac{1}{k_{jz}} [-k_\rho J_0(k_\rho\rho) + \frac{2}{\rho} J_1(k_\rho\rho)] \sin(\phi) \cos(\phi) (A_i^{TE} e^{ik_{iz}z} + B_i^{TE} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.190)$$

$$f_{yy}^{TE} = \frac{1}{k_{jz}} [k_\rho J_0(k_\rho\rho) \cos(\phi)^2 - \frac{J_1(k_\rho\rho)}{\rho} \cos(2\phi)] (A_i^{TE} e^{ik_{iz}z} + B_i^{TE} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.191)$$

$$f_{yx}^{TE} = f_{xy}^{TE}, \quad (4.192)$$

$$f_{xz}^{TE} = f_{yz}^{TE} = f_{zz}^{TE} = f_{zy}^{TE} = f_{zx}^{TE} = 0. \quad (4.193)$$

Pour $\overleftrightarrow{f}^{TM}$ on a

$$f_{xx}^{TM} = \frac{\pm k_{iz}}{k_j k_i} [k_\rho J_0(k_\rho \rho) \cos^2(\phi) - \frac{J_1(k_\rho \rho)}{\rho} \cos(2\phi)] (A_{i,xx}^{TM} e^{ik_{iz}z} - B_{i,xx}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.194)$$

$$f_{xy}^{TM} = \frac{\pm k_{iz}}{k_j k_i} [k_\rho J_0(k_\rho \rho) - \frac{2}{\rho} J_1(k_\rho \rho)] \sin(\phi) \cos(\phi) (A_{i,xy}^{TM} e^{ik_{iz}z} - B_{i,xy}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.195)$$

$$f_{xz}^{TM} = \frac{-ik_\rho^2 k_{iz}}{k_j k_i k_{jz}} J_1(k_\rho \rho) \cos(\phi) (A_{i,xz}^{TM} e^{ik_{iz}z} - B_{i,xz}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.196)$$

$$f_{yx}^{TM} = f_{xy}^{TM} \quad (4.197)$$

$$f_{yy}^{TM} = \frac{\pm k_{iz}}{k_i k_j} [k_\rho J_0(k_\rho \rho) \sin^2(\phi) + \frac{J_1(k_\rho \rho)}{\rho} \cos(2\phi)] (A_{i,yy}^{TM} e^{ik_{iz}z} - B_{i,yy}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.198)$$

$$f_{yz}^{TM} = \frac{-ik_\rho^2 k_{iz}}{k_j k_i k_{jz}} J_1(k_\rho \rho) \sin(\phi) (A_{i,yz}^{TM} e^{ik_{iz}z} - B_{i,yz}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.199)$$

$$f_{zx}^{TM} = \frac{\mp ik_\rho^2}{k_i k_j} J_1(k_\rho \rho) \cos(\phi) (A_{i,zx}^{TM} e^{ik_{iz}z} + B_{i,zx}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.200)$$

$$f_{zy}^{TM} = \frac{\mp ik_\rho^2}{k_i k_j} J_1(k_\rho \rho) \sin(\phi) (A_{i,zy}^{TM} e^{ik_{iz}z} + B_{i,zy}^{TM} e^{-ik_{iz}z}), \quad (4.201)$$

$$f_{zz}^{TM} = \frac{k_\rho^3}{k_i k_j k_{jz}} J_0(k_\rho \rho) (A_{i,zz}^{TM} e^{ik_{iz}z} + B_{i,zz}^{TM} e^{-ik_{iz}z}). \quad (4.202)$$

où le signe supérieur des \pm et \mp est pour $z > z'$ et le signe inférieur pour $z < z'$. Dans le cas où ρ est nul, ces formules sont toujours valables à conditions d'utiliser[131]

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} J_1(k_\rho \rho) = \frac{1}{2} k_\rho, \quad (4.203)$$

et de fixer ϕ à zéro. On peut également remarquer que dans ce cas, les seules composantes non nulles sont sur la diagonale de $\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

D'un point de vue pratique on exploite les similitudes entre les amplitudes pour ne calculer en fait que sept intégrandes différentes pour chaque k_ρ et on les assemble ensuite après intégration. Le nombre d'intégrandes peut doubler lorsque l'on applique les méthodes d'accélération détaillées ci-après, mais le temps de calcul diminue alors grandement. Enfin notons qu'il serait possible de réduire le nombre de composantes à calculer en exploitant la symétrie du problème[132, 133]. De plus si l'on voulait paralléliser le code de calcul, il faudrait le faire à cette étape de façon à intégrer toutes les composantes de manière simultanée.

4.2.5 Intégration par quadrature et accélération du calcul

Nous aborderons ici la partie la plus complexe, l'intégration des intégrandes dans le plan complexe. Nous avons déjà bien réduit la complexité du problème en passant d'une double intégrale de $-\infty$ à $+\infty$ à une intégrale simple allant de 0 à $+\infty$. Le calcul numérique brutal de $\overleftrightarrow{G}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ n'est cependant pas encore possible, ou alors uniquement pour certains cas particuliers. Ceci est dû à la présence de deux types de singularités dans les intégrandes.

Le premier type est dû à l'utilisation de la racine carrée complexe lors du calcul de $k_{iz} = \sqrt{(k_i^2 - k_\rho^2)}$. Cette fonction est multivaluée et présente donc ce que l'on appelle une coupure dans le plan complexe. L'emplacement de la coupure dépend du choix que l'on fait pour la définition de la racine mais se termine ou commence toujours par un point de branchement en k_i . Ces singularités sont très gênantes puisque situées sur le chemin d'intégration. Il est nécessaire d'utiliser le théorème de Cauchy[118] pour les contourner en définissant un nouveau chemin d'intégration dans le plan complexe, mais ne faire que cela n'est pas suffisant. Il faut également changer la coupure elle-même, c'est à dire adapter la définition de la racine carrée. Pour le comprendre, prenons l'exemple simple d'un milieu sans pertes c'est à dire un cas où k est purement réel. Soit z un nombre complexe tel que

$$z = k_z^2 = a + ib, \quad (4.204)$$

$$\sqrt{z} = k_z = \Re(k_z) + i\Im(k_z), \quad (4.205)$$

et donc

$$a = \Re(k_z)^2 - \Im(k_z)^2 = k^2 - \Re(k_\rho)^2 + \Im(k_\rho)^2, \quad (4.206)$$

$$b = 2\Re(k_z)\Im(k_z) = -2\Re(k_\rho)\Im(k_\rho). \quad (4.207)$$

Faire un choix de coupure revient en fait à fixer une condition sur $\Re(k_z)$ ou bien $\Im(k_z)$. L'implémentation standard de la racine carré fait le choix $\Re(k_z) > 0$. Le signe de $\Im(k_z)$ découle alors de ce choix. On a alors

$$\text{sgn}(\Im(k_z)) = -\text{sgn}(\Im(k_\rho)). \quad (4.208)$$

La figure 4.2a montre alors où se situe la coupure dans le plan complexe. Pour intégrer, il faut nous assurer que $\Im(k_z) > 0$ pour assurer la décroissance de l'intégrale à l'infini. On pourrait alors commencer par utiliser un chemin dans la partie basse du plan complexe jusqu'au point de branchement en k , mais on serait alors terriblement gêné par la coupure présente le long de l'axe réel pour des valeurs telles que $\Re(k_\rho) > k$. La solution est de définir la racine telle que $\Im(k_z) > 0$ tout le temps. Il en découle alors

$$\text{sgn}(\Re(k_z)) = -\text{sgn}(\Re(k_\rho)), \quad (4.209)$$

et la coupure se retrouve alors le long de l'axe réel pour des $\Re(k_\rho) < k$ (cf. 4.2b). Au delà de ce point nous pourrions donc revenir sur l'axe réel pour calculer le reste de l'intégrale, voir même utiliser le reste du plan complexe puisque la décroissance de l'intégrale est alors systématiquement assurée. Ce choix est en fait doublement nécessaire puisqu'il assure aussi la stabilité de l'algorithme des matrices S[75]. C'est une chose que nous n'avons pas forcément eu à prendre en compte avant puisque la réécriture de k_z en $\kappa_z = \sqrt{(k_\rho^2 - k^2)}$ assure de ne pas avoir de problème de coupure lorsque l'on étudie les modes plasmoniques ($k_\rho > k$). On pourrait se dire qu'il existe des coupures et des points de branchement pour chaque couche i mais ces derniers ne sont en fait présent que pour les milieux extérieurs du multi-couche que l'on considère[131].

Le second type de singularité auquel on peut avoir à faire est lié à l'existence de résonances au sein du multi-couche - les modes guidés notamment. Ces derniers sont en fait les pôles de nos intégrales et tenter d'intégrer en passant directement sur

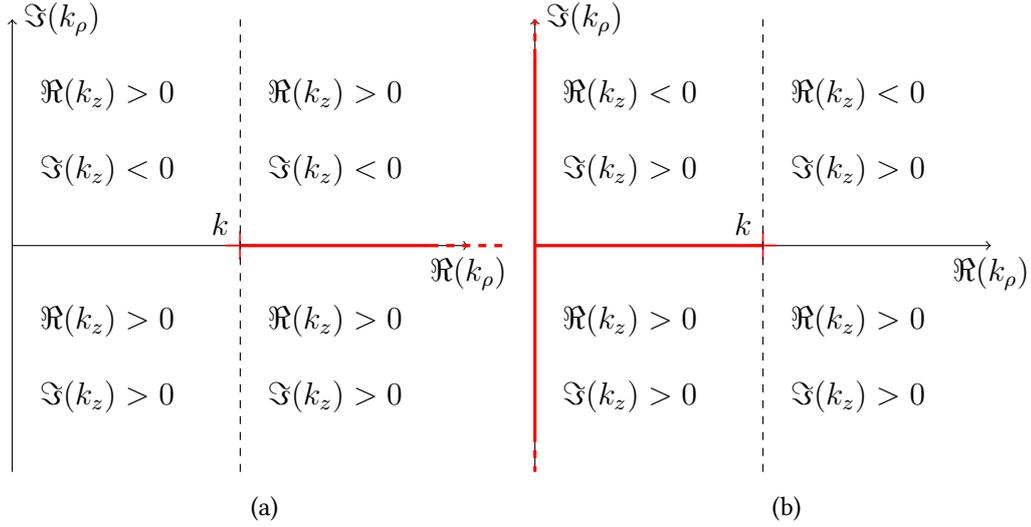


FIGURE 4.2 – Schéma du comportement de $k_z = \Re(k_z) + i\Im(k_z)$ dans le plan complexe. (a) montre la coupure (en rouge) pour l’implémentation standard de la racine carrée. (b) montre les coupures (en rouge) pour l’implémentation de la racine carrée que l’on choisit. Notons que le point 0 n’est pas singulier malgré les coupures qui l’entourent.

ces pôles causerait évidemment de gros problèmes numériques. Il faut donc aussi les contourner avant de rejoindre l’axe réel. Dans le cas où le multi-couche est entièrement composé de diélectriques non absorbants, ces pôles sont situés le long de l’axe réel pour $\Re(k_\rho) < k_{max}$ avec $k_{max} = \max(k_i)$ le nombre d’onde maximum d’un potentiel mode guidé. La figure 4.3 montre un exemple de ces pôles dus à des modes guidés classiques. La rapide variation de l’intégrande accompagnant une résonance est à l’origine des difficultés d’intégration. Il est intéressant de noter l’inversion rapide du signe de la partie imaginaire, caractéristique d’une résonance [134]. Dans le cas où les diélectriques sont à pertes, ces pôles acquièrent alors une petite partie imaginaire positive, ce qui les fait migrer dans la partie haute du plan complexe. Dans ce cas là, la branche et le point de coupure migrent également vers les imaginaires positifs et on pourrait intégrer sans aucune déformation du plan complexe - simplement le long de l’axe réel. Cela serait le cas si ces pôles et points de coupures migrent suffisamment haut, car faire passer le chemin d’intégration trop proche de ces singularités peut encore causer des problèmes numériques. La figure 4.4 montre un exemple d’intégrande calculé dans un diélectrique à pertes. Le déplacement de la branche de coupure nous suggère que quoi qu’il arrive il faut alors passer par la partie basse du plan complexe. De tout cela on tire la première partie du chemin d’intégration à suivre - une ellipse de 0 à k_{max} passant par $\Im(k_\rho) < 0$. Cette partie du chemin est donc une ellipse avec l la demi largeur latérale et h la demi largeur verticale telle que

$$l = \frac{k_{max} + c_l k_0}{2}, \quad (4.210)$$

$$h = c_h k_0, \quad (4.211)$$

pour $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ le nombre d’onde correspondant à l’émission du dipôle. Le coefficient c_l est là pour ajouter une marge de sécurité concernant les points de branchement [131]. Ces deux coefficients c_l et c_h sont choisis de manière empirique de façon à ne pas passer trop près des singularités tout en évitant de s’étendre trop loin du côté des imaginaires négatifs à cause du comportement des fonctions de Bessel qui divergent alors très rapi-

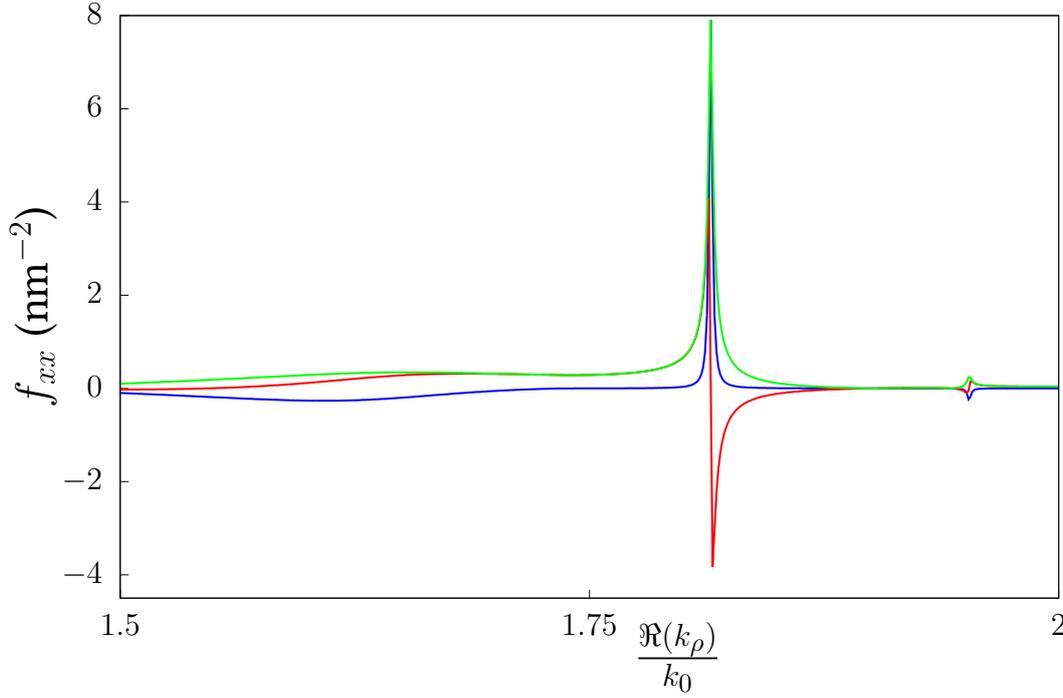


FIGURE 4.3 – Partie réelle (courbe bleu), imaginaire (courbe rouge) et valeur absolue (courbe verte) d'une partie de f_{xx} le long de l'axe réel moins une petite partie imaginaire ($10^{-3}k_0$ pour ne pas être sur la coupure). La structure se compose de haut en bas de trois diélectriques de permittivité $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 4$, $\epsilon_3 = 3$. Les indices correspondants sont de 1, 2 et 1.73 et la source se situe au centre de la structure dans le milieu 2. L'intégrande est calculée dans la couche indiquée 2. Les deux pics que l'on peut observer correspondent donc à 2 modes guidés excités par la source.

dement - ce qui est une autre source de problèmes numériques. Le coefficient c_l permet également de prolonger l'ellipse dans le plan complexe pour éventuellement prendre en compte un pôle de nature plasmonique - qui se situe forcément au delà des points de branchement. La figure 4.5 montre un exemple d'un tel pôle. Dans le cas où un mode guidé plasmonique possède une partie imaginaire très faible cela est nécessaire, sinon on peut simplement continuer l'intégrale le long de l'axe réel. C'est généralement le cas si l'on considère des métaux réalistes, donc avec beaucoup de pertes.

Nous sommes désormais en position de calculer les intégrales mais nous allons avoir un dernier problème à résoudre pour ce faire. Nos intégrandes sont composées de fonctions oscillant rapidement et dans le cas où l'on cherche à calculer $\overleftarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pour \mathbf{r} très proches de \mathbf{r}' l'intégration converge extrêmement lentement. La solution [131, 133] est d'utiliser l'identité suivante

$$2J_n(k_\rho\rho) = H_n^1(k_\rho\rho) + H_n^2(k_\rho\rho), \quad (4.212)$$

avec $H_n^1(k_\rho\rho)$ et $H_n^2(k_\rho\rho)$ les fonctions de Hankel de première et deuxième espèce [26]. Ces dernières ont l'avantage de présenter un comportement asymptotique pour de grands $k_\rho\rho$ à condition de déformer une fois encore le chemin d'intégration. On sépare donc chaque J_n en deux - on intègre alors le long d'un chemin parallèle à l'axe imaginaire, dans la direction des imaginaires positifs pour les termes en H_n^1 et négatifs pour les termes en H_n^2 . Il faut cependant faire attention en utilisant cette méthode puisqu'il faut s'assurer d'avoir dépassé tous les pôles présents dans le plan complexe avant de faire la séparation en fonctions de Hankel. Dans le cas contraire on perdrait la contribution à l'intégrale des pôles plasmoniques situés au delà. La figure 4.6 montre une

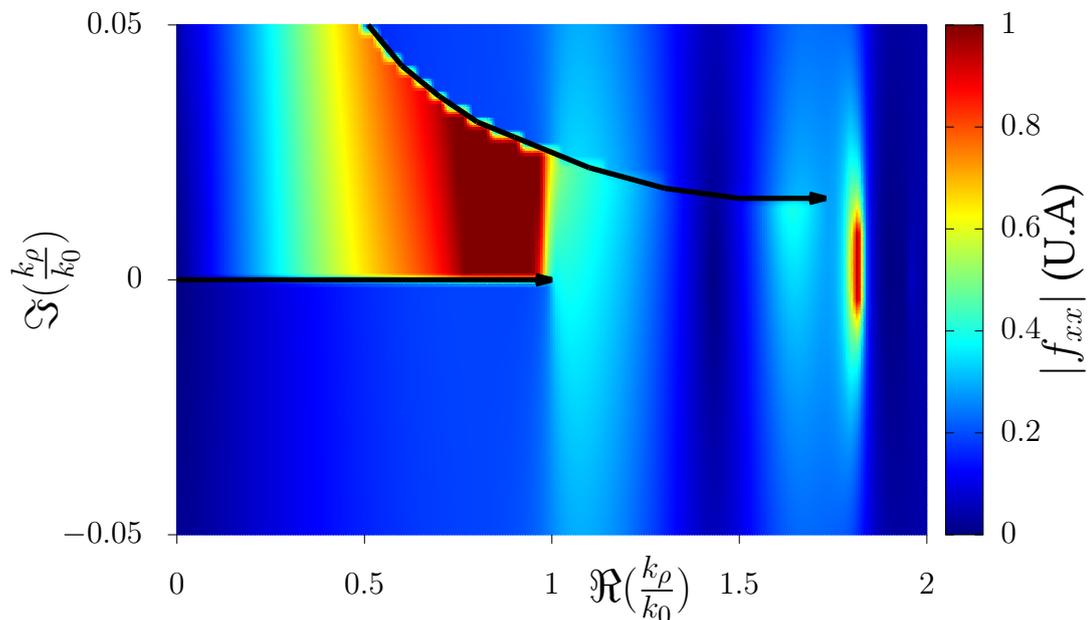


FIGURE 4.4 – Une partie de la composante f_{xx} de l'intégrande dans le plan complexe. Les flèches indiquent les deux branches de coupure. Les têtes de flèches indiquent les points de branchement. Le milieu supérieur est de l'air et le point de branchement de la coupure est donc sur l'axe réel. Le milieu inférieur est un diélectrique légèrement à pertes et la branche de coupure correspondante est donc relevée par rapport à l'axe réel. La tache rouge à droite est le mode guidé montré sur la figure 4.3. Il est légèrement remonté dans le plan complexe par rapport au cas sans pertes. La grande tache rouge à gauche est un pôle de l'autre côté du plan complexe. On ne la verrait pas si le milieu inférieur ne comportait pas de pertes.

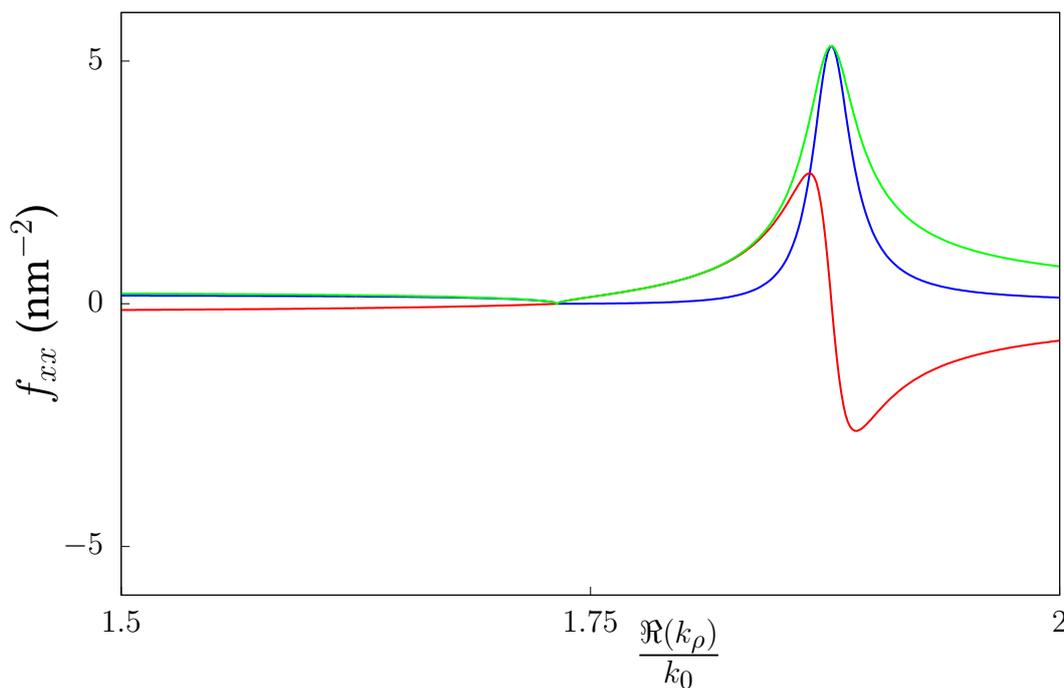


FIGURE 4.5 – Partie réelle (courbe bleu), imaginaire (courbe rouge) et valeur absolue (courbe verte) d'une partie de f_{xx} le long de l'axe réel. La structure est composée d'une couche de diélectrique de permittivité $\epsilon_1 = 3$ et d'un métal de permittivité $\epsilon_2 = -20 + 1.5i$. La source est dans la couche supérieure. L'intégrande est calculée dans cette même couche. Le domaine des modes guidés classiques s'arrête à partir de $\frac{k_\rho}{k_0} = 1.73$. La résonance que l'on observe est donc d'origine plasmonique. Notons que l'introduction de pertes rend la résonance beaucoup plus lisse que celle montrée sur la figure 4.3. C'est bien évidemment dû à la migration de cette dernière vers le haut du plan complexe.

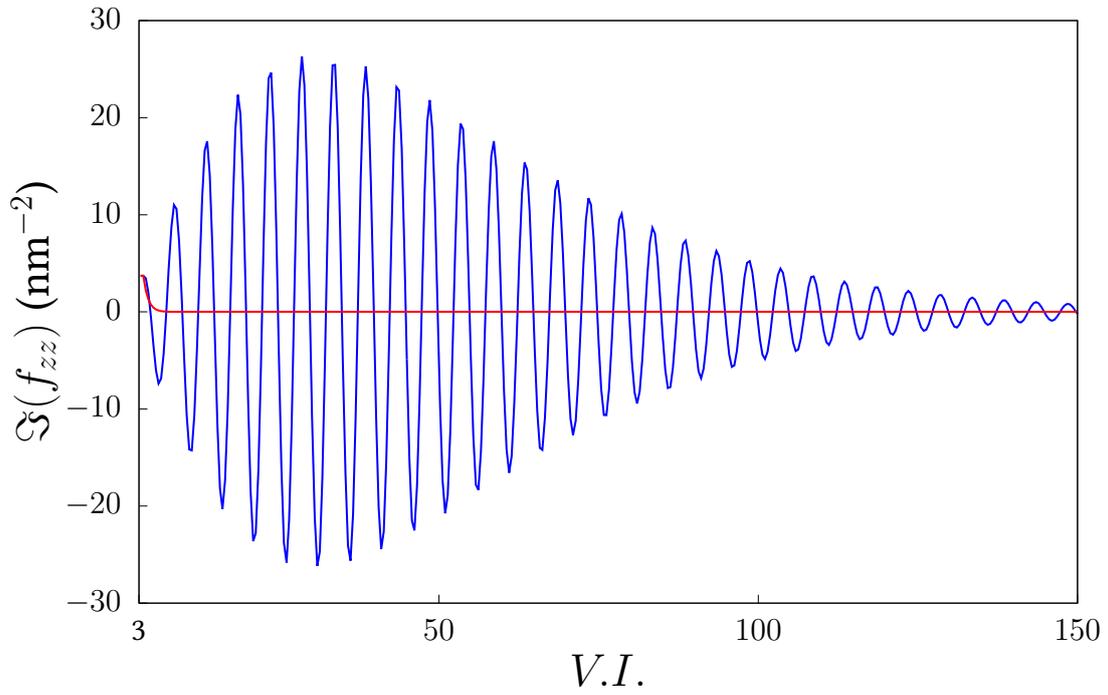


FIGURE 4.6 – Partie imaginaire de l’intégrande f_{zz} en fonction de la variable d’intégration normalisée (V.I). La courbe bleue est obtenue en prenant une variable d’intégration le long de l’axe réel et une formulation de f_{zz} en terme de la fonction de Bessel J_0 . La courbe rouge est obtenue en prenant une variable d’intégration le long d’un axe parallèle à l’axe imaginaire et une formulation de f_{zz} comme une somme de fonctions de Hankel $H_0^1 + H_0^2$. Le point d’observation est à une distance $z = z' + 5$ nm et $\rho = \lambda/5$ nm pour $\lambda = 633$ nm et z' la position de la source. Plus le point d’observation se rapproche de la source et plus les oscillations dues aux fonctions de Bessel peuvent être longues et s’étendre en terme de variable d’intégration.

comparaison des intégrandes selon que l’on utilise les fonctions de Bessel ou bien de Hankel. La convergence est évidemment bien plus rapide en utilisant les fonctions de Hankel.

Le chemin d’intégration suivi est montré sur la figure 4.7. L’intégration le long de l’axe réel (ou imaginaire si on accélère) est réalisée par pas de k_0 . Une fois que la valeur de l’intégrale par pas passe en dessous de 10^{-12} on arrête l’intégration. Ce critère est basé sur des observations purement empiriques et pourrait probablement être amélioré.

Finalement, concernant l’intégration elle-même on utilise une méthode de quadrature Gaussienne et plus précisément la méthode de Gauss-Kronrod[135, 136]. Selon Paulus[131] c’est la méthode de choix pour traiter des fonctions rapidement oscillantes - sur lesquelles échoueraient des méthodes moins adaptées comme celle des trapèzes. La méthode se résume (très brièvement) à calculer l’intégrale d’une fonction f en l’approximant par

$$I_{Kronrod} = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^N w_i g(x_i), \quad (4.213)$$

avec

$$g(x) = f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}\right), \quad (4.214)$$

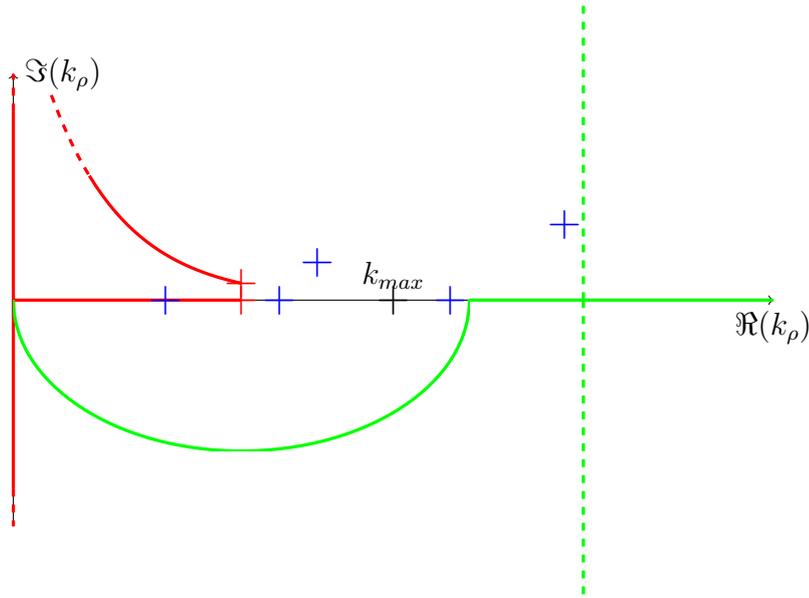


FIGURE 4.7 – Représentation schématique du chemin d’intégration adopté dans un cadre général. Le chemin est en vert. Les éventuelles coupures et points de branchements en rouge. Les croix bleues représentent d’éventuelles modes guidés classiques (à gauche de k_{max}) ou plasmoniques (à droite de k_{max}). Le chemin au delà de l’ellipse peut se faire avec les fonctions de Bessel (vert plein) ou Hankel (vert pointillé).

où w_i sont les poids d’intégrations et x_i les points choisis. D’un point de vue pratique on utilise un algorithme de N. Schomer[137] (distribué sous licence MIT) légèrement modifié pour être capable de prendre en compte la déformation du chemin d’intégration. Cet algorithme a l’avantage de réaliser les normalisations nécessaires ainsi que le calcul des poids d’intégration w_i et la sélection des points d’intégration associés x_i . On peut de plus contrôler l’ordre de quadrature. L’algorithme est en plus capable d’intégrer directement une fonction complexe et il n’est donc pas nécessaire de séparer chaque intégrande en une somme d’une partie réelle et imaginaire (même si on peut penser que cela améliorerait peut être la précision et la vitesse d’exécution). De plus, contrairement aux fonctions d’intégration natives (des modules numpy et scipy) cet algorithme permet d’obtenir une erreur que l’on peut contrôler. En fait, l’algorithme réalise deux fois l’intégration. Une première fois avec une quadrature dites de Gauss-Laguerre à n points et une seconde fois par la méthode de Gauss-Kronrod à $N = 2n + 1$ points. Les points et poids de la première sont contenus dans la seconde. Une estimation de l’erreur est alors calculée en utilisant une formule donnée par Gonnet dans un article sur l’erreur lors d’une intégration par quadrature[138]

$$err = \widetilde{I}_{Kronrod} \left(200 \frac{|I_{Kronrod} - I_{Laguerre}|}{\widetilde{I}_{Kronrod}} \right)^E, \quad (4.215)$$

avec

$$\widetilde{I}_{Kronrod} = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^N w_i \left| g(x_i) - \frac{I_{kronrod}}{b-a} \right|, \quad (4.216)$$

et

$$E = \frac{\ln(\varepsilon)}{\ln(200\varepsilon)}, \quad (4.217)$$

pour ε la précision machine (de l'ordre de 2.22×10^{-16}). On peut évidemment adapter cette formule selon la définition que l'on souhaite de l'erreur. J'ai remarqué que l'erreur donnée par (4.215) est toujours supérieure à une erreur calculée plus simplement par

$$err = |I_{Kronrod} - I_{Laguerre}|. \quad (4.218)$$

La différence peut aller jusqu'à trois ordres de grandeurs, ce qui fait de (4.215) un indicateur très pessimiste de la précision des résultats. De manière générale on diminuera l'erreur en augmentant l'ordre de quadrature n et donc N ou bien en subdivisant l'intégrale le long de l'ellipse en plusieurs intégrales que l'on somme ensuite ou encore en ajustant la taille du pas d'intégration le long de l'axe réel. Cette subdivision de l'ellipse est même nécessaire pour obtenir une erreur plus faible que la valeur de l'intégrale dans la plupart des cas. De plus j'ai remarqué que l'erreur dépend également beaucoup de la déformation du chemin, c'est à dire des paramètres de l'ellipse. Il faut donc choisir (empiriquement) ces derniers avec soin. Enfin notons que le chemin d'intégration que l'on a défini n'est pas unique et il serait possible d'en utiliser d'autres [139, 140, 141, 142, 143, 132]. Nous avons désormais tout le nécessaire pour obtenir le dyadique de Green et vérifier la validité de l'implémentation que l'on en a faite.

4.2.6 Vérifications numériques

La première vérification que l'on peut faire du bon fonctionnement de l'intégrale est de comparer cette dernière avec l'expression analytique du dyadique de Green pour un milieu homogène (4.40). La figure 4.8 montre une telle comparaison pour un diélectrique de permittivité $\epsilon = 5$ pour une des composantes du dyadique de Green. L'accord entre le calcul analytique et le calcul numérique est évidemment très bon et même pratiquement parfait. La figure 4.9 montre la différence absolue entre le calcul numérique et analytique ainsi que l'erreur telle que définie précédemment pour un ordre de quadrature de $n = 15$. On voit ici que l'erreur numérique n'est qu'un indicateur et que cette dernière est plus élevée que la différence absolue. En prenant un ordre plus élevé comme $n = 30$ on aurait eu une erreur de l'ordre de 10^{-16} à 10^{-18} selon les composantes du dyadique. La différence absolue serait resté dans ce cas de l'ordre de 10^{-16} pour toutes les composantes. Cela nous indique qu'il serait peut être mieux de définir une erreur en comparant non pas deux types de quadrature mais plutôt une seule pour deux ordres de quadrature différents. Mais ce serait au détriment de la vitesse de calcul.

La seconde comparaison que l'on peut faire est avec des résultats de la littérature. La figure 4.10 montre nos résultats et ceux de Paulus et. al [131] pour un multicouche comprenant trois permittivités différentes et un dipôle au milieu de la couche supérieure. Ce résultat est obtenu avec une erreur de l'ordre de 10^{-15} pour un ordre de quadrature $n = 30$. Utiliser $n = 15$ aurait été suffisant et on aurait eu une erreur de l'ordre de 10^{-9} . On ne peut comparer ces deux figures que visuellement mais le résultat que l'on obtient semble en excellent accord avec celui de Paulus ce qui nous permet de conclure que notre code de calcul fonctionne correctement - au moins lorsque l'on considère une structure entièrement diélectrique sans pertes.

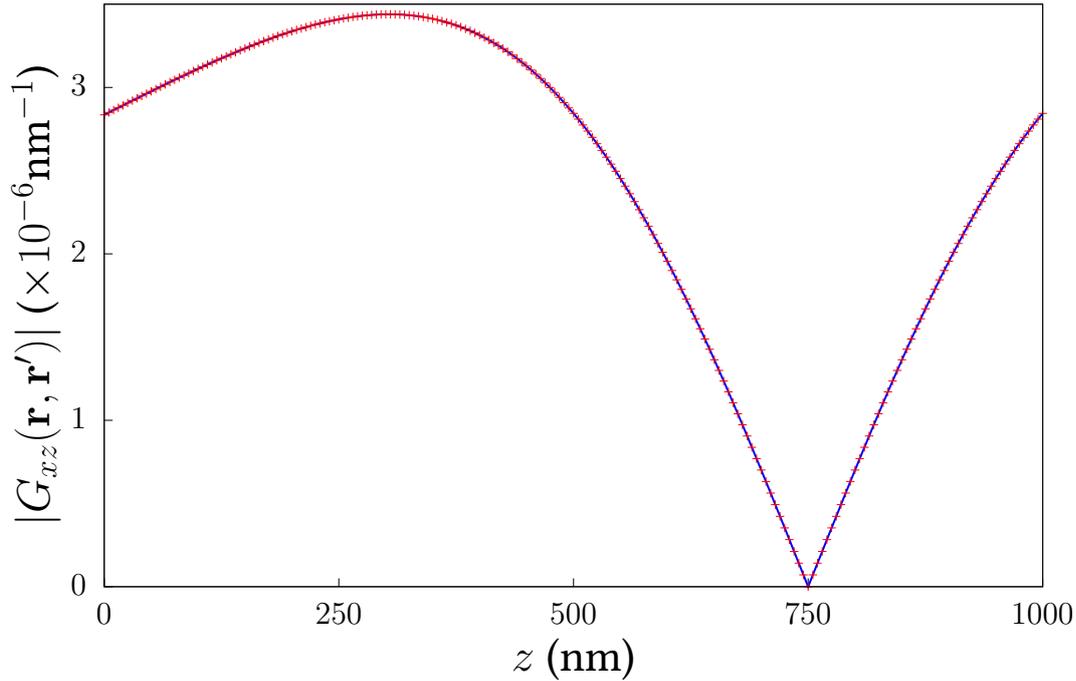


FIGURE 4.8 – Composante G_{xz} du dyadique calculée par intégration (trait bleu plein) et analytiquement (croix rouges). Cette composante correspond au champ E_x généré par un dipôle orienté selon \hat{z} . Le dipôle se situe à une hauteur $z' = 750$ nm et émet avec $\lambda = 633$ nm. Les coordonnées $\rho = \lambda$, $\phi = \frac{\pi}{4}$ sont constantes.

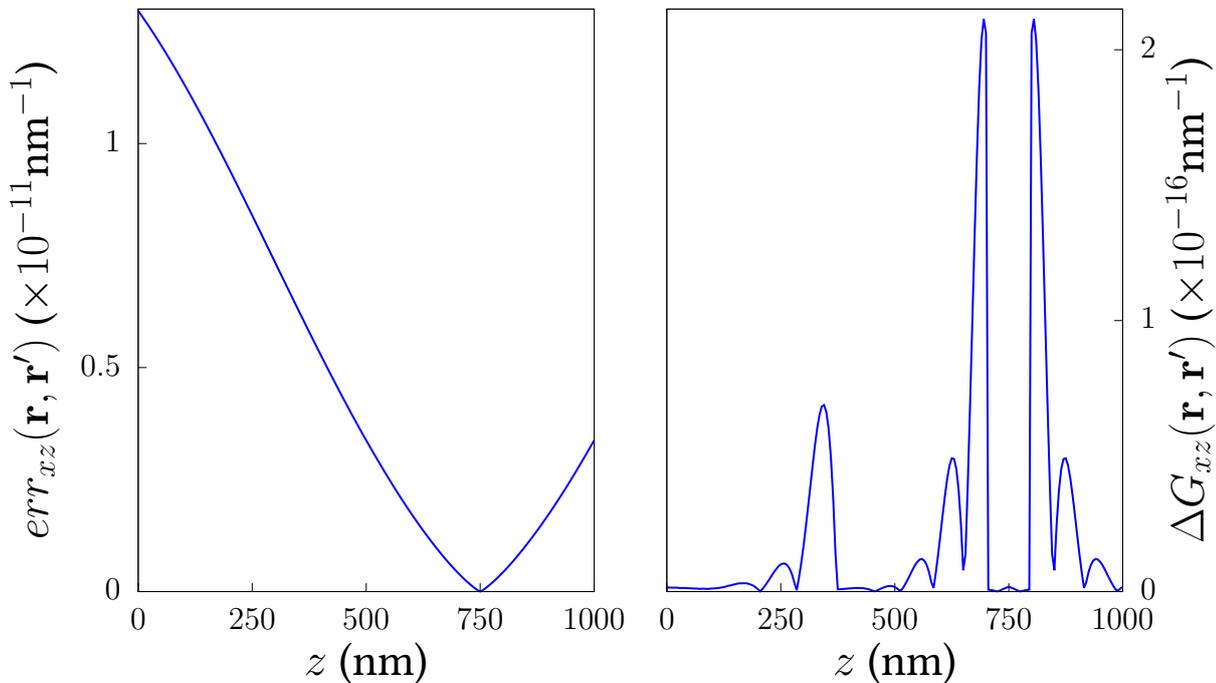


FIGURE 4.9 – Erreur numérique (à gauche) donnée par l'équation (4.215) et différence absolue (à droite) correspondant à la figure 4.8. Cette différence est prise comme $|G_{xz} - G_{h,xz}|$ avec G_{xz} numérique et $G_{h,xz}$ analytique.

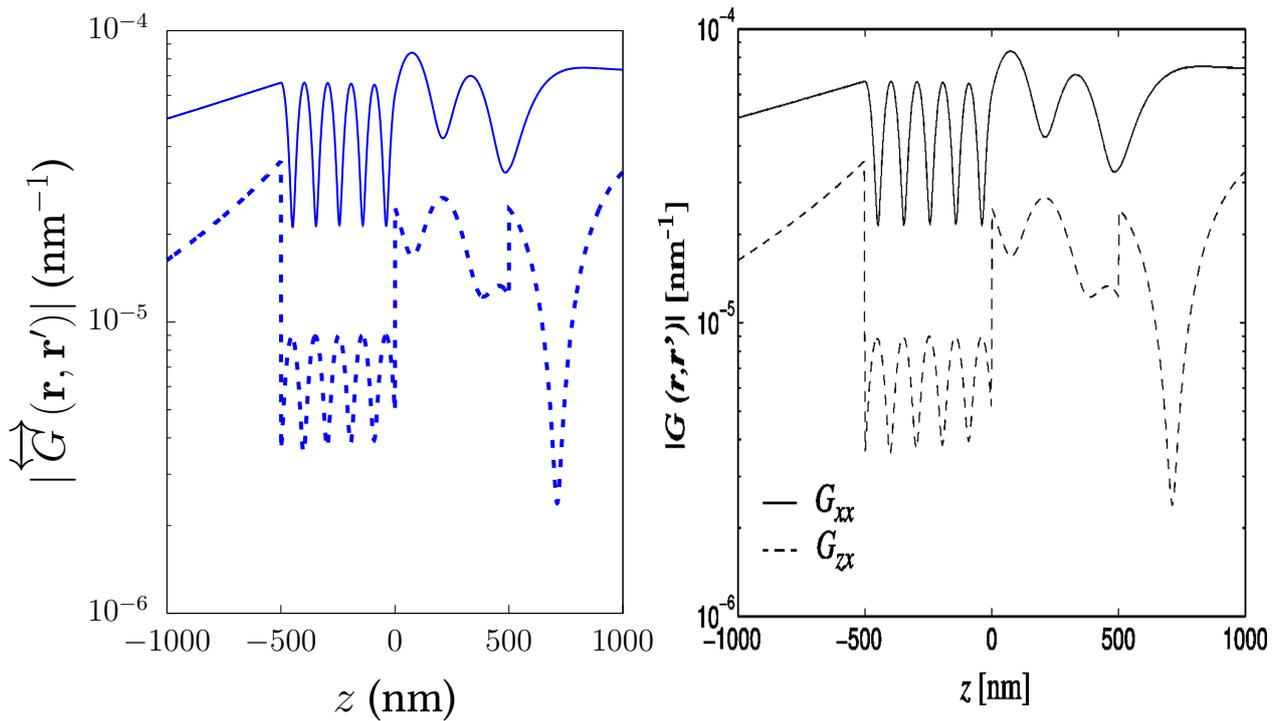


FIGURE 4.10 – Composantes G_{xx} (traits pleins) et G_{zx} (traits pointillés) du dyadique de Green. À gauche notre résultat et à droite celui de Paulus[131]. La structure se compose de haut en bas de quatre couches de permittivité $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 2$, $\epsilon_3 = 10$, $\epsilon_4 = 1$. Chacune des couches fait 500 nm d'épaisseur. Le dipôle se situe dans la couche indiquée 1 à une hauteur $z' = 750$ nm et émet avec $\lambda = 633$ nm. Les coordonnées $\rho = \lambda$, $\phi = \frac{\pi}{4}$ sont constantes. Les composantes montrées correspondent aux champs E_x et E_z d'un dipôle orienté selon \hat{x} .

4.3 Intérêt du dyadique de Green

Jusqu'ici, on a cherché à écrire \overleftrightarrow{G} sous la forme la plus avantageuse pour pouvoir le calculer directement en intégrant. La fonction \overleftrightarrow{G} permet alors d'obtenir \mathbf{E} . Si l'on veut \mathbf{H} , il faudrait reprendre $\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}$ avant d'intégrer. L'usage des formules de la partie 4.2.2 et du tableau 4.1 permet d'obtenir des intégrandes très similaires à celles composant \overleftrightarrow{G} . Cependant lorsque l'on va chercher des quantités impliquant un produit des deux comme le vecteur de Poynting, il est parfois plus avantageux de revenir à la forme intégrale de \overleftrightarrow{G} pour appliquer l'opérateur $\nabla \wedge$. C'est typiquement le cas lorsque l'on va chercher à obtenir par exemple le diagramme de rayonnement au dessus d'un multicouche contenant une source.

4.3.1 Diagramme de rayonnement

Ce que l'on appelle diagramme de rayonnement est en fait une mesure de la densité de puissance qui sort du multi-couche par unité d'angle. Soit

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} \Re(\mathbf{E}(\mathbf{r}) \wedge \mathbf{H}(\mathbf{r})^*), \quad (4.219)$$

la moyenne temporelle de la densité d'énergie ($\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$) en un point \mathbf{r} . La puissance totale (en W) rayonnée à travers une surface est donnée de manière générale par

$$P = \int_{\partial V} \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.220)$$

Littéralement, la puissance rayonnée par le dipôle est égale au flux du vecteur de Poynting à travers une surface entourant le dipôle. Cette puissance comprend toute la puissance rayonnée par le dipôle, c'est à dire les parties absorbée par le milieu, transmise à des modes guidés, ou bien rayonnée au loin. On peut définir la puissance rayonnée au dessus d'un multicouche comme

$$P_{\uparrow} = \int_{\partial V} \frac{\partial P_{\uparrow}}{\partial S} dS, \quad (4.221)$$

où la surface d'intégration est un plan infini situé dans la couche supérieure et caractérisé par une valeur de z constante. La densité de puissance $\frac{\partial P_{\uparrow}}{\partial S}$ est évidemment équivalente à la moyenne temporelle du vecteur de Poynting. Littéralement, la puissance rayonnée au dessus du multicouche est égale au flux du vecteur de Poynting à travers cette surface. Nous allons chercher à partir d'ici à réécrire $\langle \mathbf{S} \rangle$ afin d'obtenir une certaine densité - non pas par unité de surface mais par unité d'angle. C'est à dire que l'on veut $\frac{\partial P_{\uparrow}}{\partial \Omega}$ avec Ω l'angle solide. On pourrait obtenir ce résultat en calculant brutalement \mathbf{E} (4.35) et \mathbf{H} (4.36). Cependant, dans le cas qui nous intéresse ici, il est possible d'éviter de devoir calculer ces derniers directement - et donc d'éviter l'intégration numérique nécessaire à l'obtention de $\overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. En reprenant les équations qui définissent \mathbf{E} et \mathbf{H} pour un dipôle ponctuel on a

$$P_{\uparrow} = \frac{1}{2} \Re \left(\left(-i\omega^3 \mu_0 \mu \int_{\partial V} \left[\overleftrightarrow{G}_{1j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p} \right] \wedge \left[\nabla \wedge \overleftrightarrow{G}_{1j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p} \right]^* \cdot d\mathbf{S} \right) \right), \quad (4.222)$$

avec $d\mathbf{S} = \hat{\mathbf{z}}dx dy$ et où on a considéré la couche supérieure, indiquée $i = 1$. En développant $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sous sa forme intégrale nous avons donc affaire à deux intégrales dans l'espace de Fourier comprises dans une intégrale dans l'espace réel. Dans l'idée de l'équation (4.78) le premier terme sous l'intégrale peut se réécrire sous la forme

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p} = \frac{i}{8\pi^2} \iint_{k_x^E, k_y^E} (\mathbf{G}_1 \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{p} dk_x^E dk_y^E, \quad (4.223)$$

avec - puisque nous sommes dans la couche supérieure -

$$(\mathbf{G}_1 \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{p} = \sum_{\hat{\mathbf{u}}} (A_i^{\hat{\mathbf{u}}} \hat{\mathbf{u}}_1 \hat{\mathbf{u}}_j) \cdot \mathbf{p} \frac{e^{ik_{1z}^E}}{k_{jz}^E} e^{ik_x^E(x-x')} e^{ik_y^E(y-y')}, \quad (4.224)$$

$$= \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(k_x^E, k_y^E, z') \cdot \mathbf{p} e^{ik_{1z}^E} e^{ik_x^E(x-x')} e^{ik_y^E(y-y')}, \quad (4.225)$$

pour

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(k_x^E, k_y^E, z') \cdot \mathbf{p} = \sum_{\hat{\mathbf{u}}} \left(\frac{A_i^{\hat{\mathbf{u}}} \hat{\mathbf{u}}_1 \hat{\mathbf{u}}_j}{k_{jz}^E} \right) \cdot \mathbf{p}, \quad (4.226)$$

$$= \overline{\mathbf{G}_1 \mathbf{G}_j} \cdot \mathbf{p}, \quad (4.227)$$

$$= \overline{\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}} \cdot \mathbf{p}, \quad (4.228)$$

qui peut évidemment être vue comme une transformée de Fourier à deux dimensions. On peut faire de même pour le second terme sous l'intégrale dans (4.222) pour avoir

$$\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(k_x^E, k_y^E, z') \cdot \mathbf{p} = \nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(k_x^H, k_y^H, z') \cdot \mathbf{p} e^{ik_{1z}^H} e^{ik_x^H(x-x')} e^{ik_y^H(y-y')} \quad (4.229)$$

avec

$$\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(k_x^H, k_y^H, z') \cdot \mathbf{p} = ik_1 \hat{\mathbf{k}}_1 \wedge \sum_{\hat{\mathbf{u}}} \left(\frac{A_i^{\hat{\mathbf{u}}} \hat{\mathbf{u}}_1 \hat{\mathbf{u}}_j}{k_{jz}^H} \right) \cdot \mathbf{p}. \quad (4.230)$$

Les intégrales dans le plan de Fourier peuvent être interchangées avec l'intégrale dans l'espace réel et l'utilisation de la relation

$$\iint_{x,y} e^{-i(k_x^H - k_x^E)(x-x')} e^{-i(k_y^H - k_y^E)(y-y')} dx dy = 4\pi^2 \delta(k_x^H - k_x^E) \delta(k_y^H - k_y^E), \quad (4.231)$$

permet d'obtenir

$$\int_{\partial V} \left[\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p} \right] \wedge \left[\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p} \right]^* d\mathbf{S} = \frac{1}{16\pi^2} \iint_{k_x, k_y} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j} \cdot \mathbf{p} \wedge \left[\nabla \wedge \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j} \cdot \mathbf{p} \right]^* \cdot \hat{\mathbf{z}} dk_x dk_y, \quad (4.232)$$

à la manière d'une formule de Parseval-Plancherel. La quantité sous l'intégrale dans le plan de Fourier peut ensuite être transformée de la manière suivante

$$\overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \wedge \left[\overline{\nabla \wedge \mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right]^* = -ik_1^* \left[\left(\overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right) \wedge \left(\hat{\mathbf{k}}_1 \wedge \overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right)^* \right], \quad (4.233)$$

$$= -ik_1^* \left(\left| \overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right|^2 \hat{\mathbf{k}}_1 - \left(\left[\overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right] \cdot \hat{\mathbf{k}}_1^* \right) \left[\overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right]^* \right). \quad (4.234)$$

Puis en utilisant la relation générale $\overleftarrow{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \overleftarrow{\mathbf{G}}^t$ on montre que

$$\left[\overleftarrow{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right] \cdot \hat{\mathbf{k}}_1^* = (\mathbf{p} \cdot \overline{\mathbf{G}}_j) (\overline{\mathbf{G}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}_1^*). \quad (4.235)$$

Dans le cas où l'on considère un milieu sans pertes où $\hat{\mathbf{k}}_1 = \hat{\mathbf{k}}_1^*$ l'orthogonalité permet d'affirmer la nullité de $\overline{\mathbf{G}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}_1^*$ c'est à dire

$$\overline{\mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \wedge \left[\overline{\nabla \wedge \mathbf{G}}_{1j \cdot \mathbf{p}} \right]^* = -ik_1 |\mathbf{p}|^2 \left| \overleftarrow{\mathbf{G}}_{1j \cdot \hat{\mathbf{p}}} \right|^2 \hat{\mathbf{k}}_1. \quad (4.236)$$

Nous pouvons désormais réécrire la puissance totale rayonnée au dessus du multicouche comme

$$P_{\uparrow} = \iint_{k_x, k_y} \frac{\omega^3 \mu_0 \mu_1 |\mathbf{p}|^2 k_1^2}{32\pi^2} \left| \overleftarrow{\mathbf{G}}_{1j \cdot \hat{\mathbf{p}}} \right|^2 \hat{\mathbf{k}}_1 \cdot \hat{\mathbf{z}} dk_x dk_y, \quad (4.237)$$

et il ne reste plus qu'à changer de système de coordonnées pour obtenir le résultat désiré. En posant l'origine de nos axes dans la couche supérieure, on peut alors introduire les angles θ et ϕ tel que $\hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{k}} = \cos(\theta)$ et $\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{k}}_\rho = \cos(\phi)$ pour arriver à

$$P_{\uparrow} = \int_{\Omega} \frac{\omega^3 \mu_0 \mu_1 |\mathbf{p}|^2 k_1^3 \cos^2(\theta)}{32\pi^2} \left| \overleftarrow{\mathbf{G}}_{1j \cdot \hat{\mathbf{p}}} \right|^2 d\Omega, \quad (4.238)$$

avec $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\phi$ l'angle solide élémentaire. On tire alors de l'équation (4.238)

$$\frac{\partial P_{\uparrow}(\theta, \phi)}{\partial \Omega} = \frac{\omega^3 \mu_0 \mu_1 |\mathbf{p}|^2 k_1^3 \cos^2(\theta)}{32\pi^2} \left| \overleftarrow{\mathbf{G}}_{1j \cdot \hat{\mathbf{p}}} \right|^2, \quad (4.239)$$

la densité d'énergie rayonnée au dessus du multicouche par unité d'angle solide (en $\text{W} \cdot \text{rad}^{-2}$). Classiquement, on normalise cette dernière par la puissance totale émise par le dipôle dans un milieu homogène afin d'éliminer la dépendance par rapport au moment dipolaire \mathbf{p} . En fixant l'orientation du dipôle tel que $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{z}}$, il est possible de montrer

$$\left| \overleftarrow{\mathbf{G}}_{h \cdot \hat{\mathbf{p}}} \right|^2 = \frac{\sin^2(\theta)}{k_j^2 \cos^2(\theta)}, \quad (4.240)$$

puis en injectant ce dernier dans (4.239) et en intégrant sur tout l'espace et pas seulement la partie supérieur on a la puissance totale émise par le dipôle

$$P_0 = \frac{|\mathbf{p}|^2 \omega k_j^3}{12\pi \epsilon_0 \epsilon_j}, \quad (4.241)$$

un résultat que l'on peut retrouver dans la littérature[120]. Notons que l'intégration pour obtenir P_0 n'est possible que dans un milieu homogène grâce à la symétrie du problème. La densité d'énergie normalisée est

$$\frac{\partial P_{\uparrow}(\theta, \phi)}{\partial \Omega} \frac{1}{P_0} = \frac{3\omega^2 \mu_1 \epsilon_j n_1^3 \cos^2(\theta)}{8\pi c^2 n_j^3} \left| \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{1j} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right|^2. \quad (4.242)$$

Dans le cas où le dipôle se situe dans la couche supérieur du multicouche on peut réduire l'équation (4.242) à

$$\frac{\partial P_{\uparrow}(\theta, \phi)}{\partial \Omega} \frac{1}{P_0} = \frac{3}{8\pi} k_1^2 \cos^2(\theta) \left| \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_{11} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right|^2, \quad (4.243)$$

qui permet de vérifier que pour un dipôle situé dans un milieu homogène tel que $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{z}}$ on retrouve bien un autre résultat de la littérature [120, 144]

$$\frac{\partial P_{\uparrow}(\theta, \phi)}{\partial \Omega} \frac{1}{P_0} = \frac{3}{8\pi} \sin^2(\theta). \quad (4.244)$$

Sur les figures 4.11, 4.12 et 4.13 on a tracé le diagramme de rayonnement d'un dipôle au dessus d'un multi-couche en utilisant l'équation (4.242) que l'on a mis, pour comparaison, en face de résultats de la littérature[120]. À chaque fois la source se situe à une distance h de la première interface. Ce n'est, là encore, qu'une comparaison visuelle mais l'accord semble excellent.

Notons toutefois que ces figures sont tracées pour un dipôle émettant dans l'air, qui est la couche supérieure du multi-couche. La validité de l'équation n'est donc pas encore tout à fait certaine. Il faudrait pour cela trouver dans la littérature le diagramme de rayonnement d'un dipôle enfoui dans une des couches intérieures[145], ou bien en dessous du multicouche. Une comparaison avec l'expérience serait une autre chose à faire. On peut par exemple penser à un émetteur dans une cavité, entre deux miroirs de Bragg, une situation qui a attiré une grande attention pour la réalisation de lasers à polaritons – et dans laquelle on vient de montrer que la lumière est plus efficacement couplée aux modes guidés de la structure. C'est le genre de situation idéale à étudier avec le code décrit ici. Dans tout les cas le fait que l'on puisse retrouver la puissance totale P_0 est déjà un très bon signe concernant la validité du calcul. Nous allons réutiliser ce résultat dans la partie suivante.

4.3.2 Puissance, taux d'émission et temps de vie

Outre les champs, la puissance, ou la densité de puissance, la connaissance du dyadique de Green permet également d'accéder au taux d'émission spontanée d'un émetteur, et surtout à la modification de ce dernier par l'environnement entourant l'émetteur. Ce phénomène - pouvant conduire à l'exaltation du taux d'émission - est d'abord prédit théoriquement par Purcell[121] dans les années 40. Puis Drexhage et.al[146, 147] le mesurent expérimentalement en étudiant la modification du taux d'émission

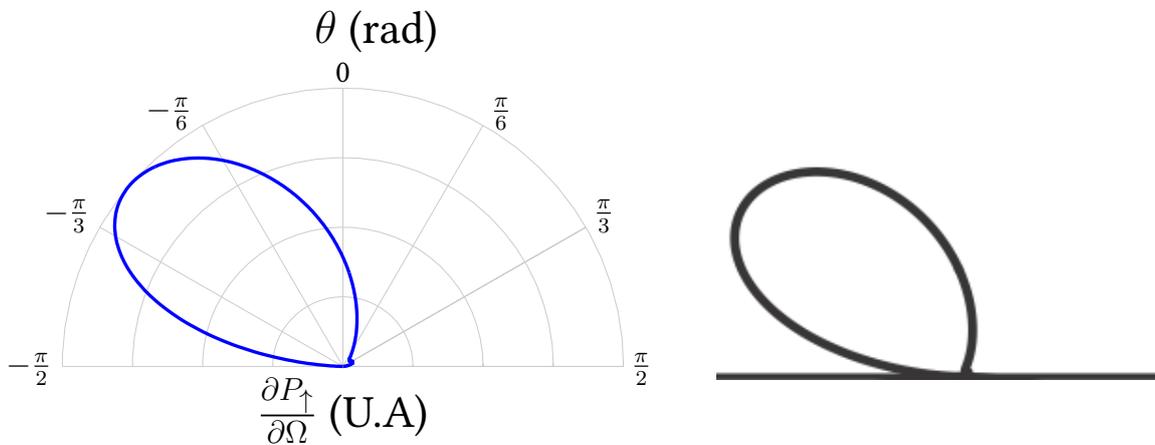


FIGURE 4.11 – Diagramme de rayonnement d’une source au dessus d’un multi-couche dans le plan du dipôle. À gauche notre résultat et à droite celui de la littérature[120]. La structure se compose de haut en bas de trois diélectriques de permittivité $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 5$, $\epsilon_3 = 2.25$ respectivement. La source se situe dans la couche supérieure. Elle émet à une longueur d’onde de 488 nm et se situe à une distance $h = \frac{\lambda}{100}$ de l’interface entre le milieu 1 et 2. Le dipôle est incliné de $\frac{\pi}{3}$ par rapport à l’axe \hat{z} qui définit θ .

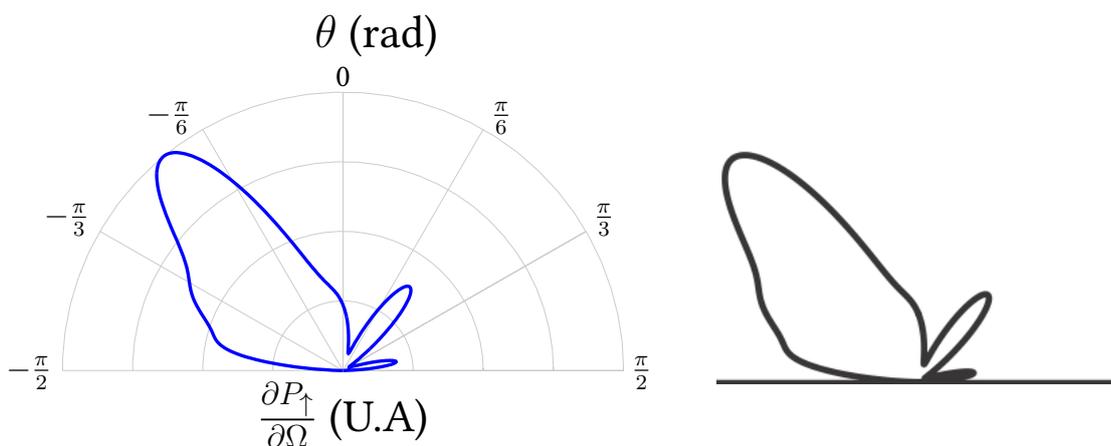


FIGURE 4.12 – Diagramme de rayonnement d’une source au dessus d’un multi-couche. À gauche notre résultat et à droite celui de la littérature[120]. La structure est identique à la figure 4.11 à l’exception de $h = \lambda$.

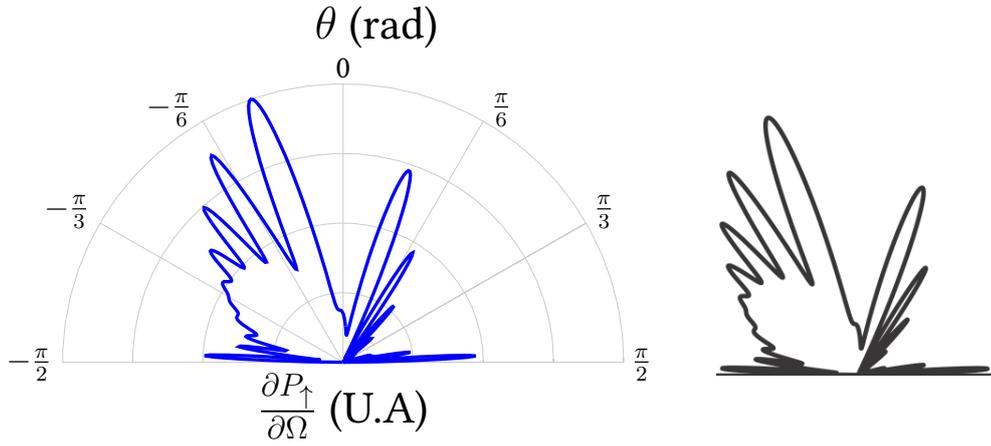


FIGURE 4.13 – Diagramme de rayonnement d’une source au dessus d’un multi-couche. À gauche notre résultat et à droite celui de la littérature[120]. La structure est identique à la figure 4.11 à l’exception de $h = 5\lambda$.

d’un émetteur en fonction de sa distance avec une surface métallique. C’est un domaine d’étude très conséquent[148] et nous n’allons pas approfondir tous les détails mais nous donnerons le nécessaire pour mettre en valeur l’intérêt du calcul du dyadique de Green dans ce cadre.

La première chose à mentionner concernant le calcul que nous allons mener est que ce dernier n’est valable que dans le cas où l’émetteur que l’on considère n’est que faiblement couplé aux champs diffusés par l’environnement. Nous considérons qu’un émetteur est un dipôle classique, ou bien un atome à deux niveaux. Dans le cas de l’atome à deux niveaux - supposé dans un état excité - on considère que la population de l’état excité décroît de manière exponentielle avec le temps, c’est à dire en $e^{-\frac{t}{\tau}}$ avec $\tau = \frac{1}{\Gamma}$ le temps de vie de l’état excité et Γ le taux d’émission spontanée. Dans le cas du dipôle classique, on considère que ce dernier peut être traité comme un oscillateur harmonique à pertes - entraîné par le champ du dipôle diffusé et renvoyé sur le dipôle - dont la fréquence d’oscillation est très grande devant l’inverse du temps typique de dissipation de son énergie par radiation[120]. Dans ce cadre là, les résultats de la physique classique et quantique sont identiques et il est alors possible de calculer le taux d’émission d’un émetteur grâce à la relation suivante[120, 149, 150]

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{P}{P_0}. \quad (4.245)$$

avec Γ_0 et P_0 un taux d’émission et une puissance dans un milieu homogène de référence. Plus haut, nous avons déjà obtenu P_0 grâce au dyadique de Green. Dans un milieu linéaire et non dispersif, le théorème de Poynting nous permet de dire que la puissance totale transférée par une source décrite par une densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ harmonique en temps est

$$P = -\frac{1}{2} \Re \left(\int_V \mathbf{J}(\mathbf{r})^* \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) dV \right), \quad (4.246)$$

où l’intégration est faite sur tout l’espace. Si l’on considère une source ponctuelle telle que $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -i\omega \mathbf{p} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ alors on obtient

$$P = \frac{\omega}{2} \Im(\mathbf{p}^* \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}')), \quad (4.247)$$

ce qui peut se réécrire en utilisant le dyadique de Green pour remplacer \mathbf{E} et en normalisant par P_0

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{3\lambda}{n_j} \mathfrak{S} \left(\hat{\mathbf{p}} \cdot \overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}', \mathbf{r}', \omega) \cdot \hat{\mathbf{p}} \right). \quad (4.248)$$

Pour que (4.245) soit valide il faut également que la source que l'on considère se désexcite uniquement par l'émission d'un champ EM - propagatif ou non. C'est le cas pour un atome à deux niveaux loin de la saturation[151]. Dans le cas d'un dipôle classique, on peut trouver une expression pour le taux d'émission normalisé un peu différente[120]

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = 1 + q_i \frac{6\pi\epsilon_0\epsilon_j}{|\mathbf{p}|^2 k_j^3} \mathfrak{S}(\mathbf{p}^* \cdot \mathbf{E}_s(\mathbf{r}')), \quad (4.249)$$

où \mathbf{E}_s est le champ émis par le dipôle puis diffusé par l'environnement. On a $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_s$ avec \mathbf{E}_0 le champ directement émis par le dipôle. Dans cette définition on peut en plus trouver le paramètre q_i , l'efficacité quantique intrinsèque, qui est un paramètre phénoménologique introduit pour tenir compte du fait que le dipôle peut aussi se désexciter autrement que par un rayonnement (chaleur, phonon...). Si l'on veut pouvoir tenir compte de ce paramètre dans nos calcul on peut simplement remarquer que $\mathbf{E}_s = \mathbf{E} - \mathbf{E}_0$, ce qui revient finalement à remplacer \overleftrightarrow{G} par $\overleftrightarrow{G} - \overleftrightarrow{G}_h$ pour calculer $\mathbf{p}^* \cdot \mathbf{E}_s(\mathbf{r}')$ et à utiliser (4.249) au lieu de (4.248). Au delà de ce paramètre, C'est sous la forme de l'équation (4.249) qu'une part de la littérature[152, 148, 153] exprime le taux d'émission car $\mathbf{E}_s(\mathbf{r}')$ n'est pas singulier à la position de la source. Dans notre cas nous avons désormais affaire à la partie singulière du dyadique de Green.

Il se trouve que bien que le dyadique en lui même soit singulier en \mathbf{r}' , sa partie imaginaire ne l'est pas[120, 150]. Dans un milieu infini, homogène et non absorbant on a[154]

$$\mathfrak{S} \left(\hat{\mathbf{p}} \cdot \overleftrightarrow{G}_h(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) = \frac{\omega n}{6\pi c}. \quad (4.250)$$

Dans le cas où la source se situe dans un milieu sans pertes - à proximité d'un milieu quelconque - $\mathfrak{S}(\overleftrightarrow{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))$ correspond à l'équation (4.78) sans qu'aucune correction ne soit nécessaire[154] et il nous est donc toujours possible de calculer un taux d'émission normalisé. Si l'on souhaite un taux absolu, il suffirait alors de multiplier par le taux d'émission dans un milieu infini[153]

$$\Gamma_0 = \frac{nq^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3 q_i}, \quad (4.251)$$

avec m et q la masse et charge effective du dipôle. Notons enfin qu'exprimer le taux d'émission en fonction de \mathbf{E}_s au lieu de \mathbf{E} présente l'avantage de pouvoir obtenir une partie réelle qui est associée au décalage en fréquence subi par l'émetteur. Avec notre formulation compacte du dyadique de Green cela n'est pas possible.

Quoi qu'il en soit nous sommes désormais en position de vérifier à nouveau la validité de notre code de calcul. Nous allons utiliser l'équation (4.248) pour calculer le taux d'émission ou bien le temps de vie d'un dipôle - obtenu comme l'inverse du taux. La première vérification que l'on peut faire concerne un dipôle au dessus d'un plan

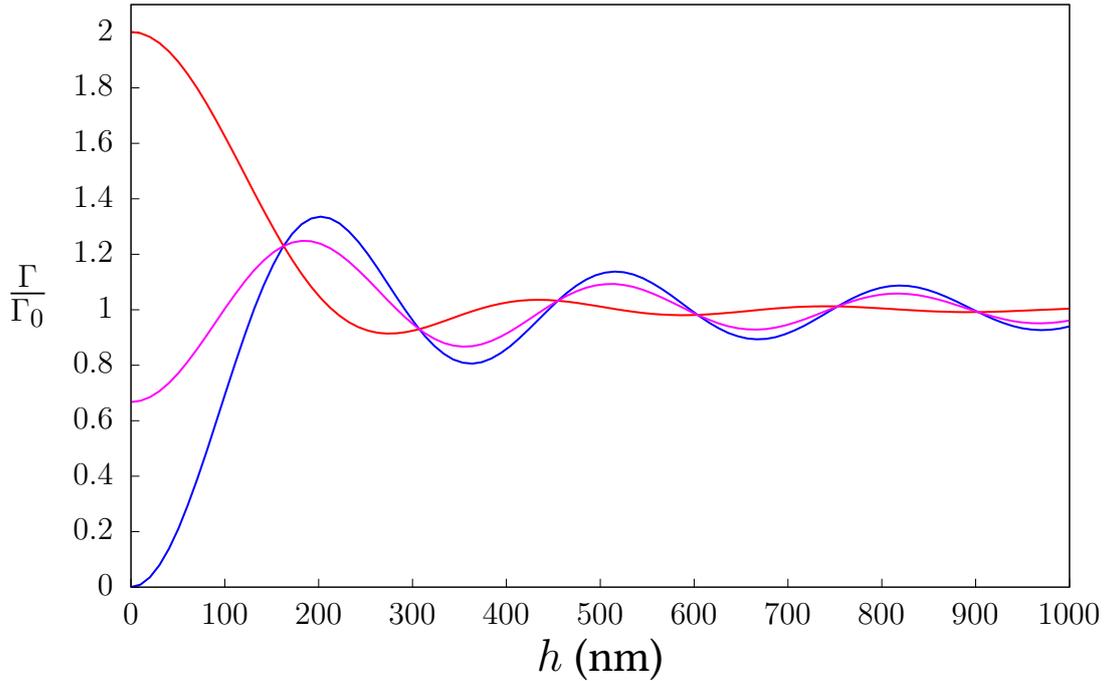


FIGURE 4.14 – Taux d’émission normalisé pour un dipôle au dessus d’un plan métallique parfait pour différentes orientations du dipôle. La courbe rouge correspond à un dipôle perpendiculaire à l’interface, la bleu à un dipôle parallèle à l’interface et la magenta à une orientation isotropique.

composé d’un métal parfait ($\epsilon_m \equiv -\infty$). Soit h la distance entre le dipôle et le plan métallique. Si le dipôle est orienté parallèlement à l’interface, on s’attend à ce que le taux d’émission soit diminué pour des petits h puisque les champs émis et réfléchis par son image dans le miroir métallique se compensent[148]. Au contraire, si le dipôle est orienté perpendiculairement à l’interface, on s’attend à ce que le taux d’émission soit augmenté. La figure 4.14 montre le taux d’émission du dipôle en fonction de la séparation avec l’interface h pour différentes orientations. Le comportement observé est exactement celui attendu.

Comme le métal est considéré comme parfait avec une permittivité réelle, négative et infinie, aucun mode de surface ne peut venir influencer le taux d’émission.

Pour la prochaine vérification nous nous tournons vers un cas beaucoup plus réaliste. En 1997 Amos et Barnes[152] s’intéressent au temps de vie d’un émetteur proche d’une interface métallique et plus particulièrement au *quenching* subi par ce dernier lorsqu’il est à porté d’un plasmon de surface. Ils obtiennent les temps de vie en fonction de la séparation avec le métal et pour différentes épaisseurs de métal. Pour des épaisseurs suffisamment fines, ils voient même l’influence de ce qu’ils interprètent comme deux plasmons de surface différents et qui pourrait également être vue comme un couple LRSP/SRSP bien que l’asymétrie autour du métal empêche de leur donner ces noms *stricto sensu*. Quoi qu’il en soit leurs études présentent des résultats expérimentaux ainsi que théoriques que nous allons utiliser comme points de comparaison. La théorie qu’ils utilisent n’est pas basée sur le dyadique de Green. Les auteurs donnent pratiquement tous leurs paramètres et nous reprendrons donc exactement les mêmes[152]. Notons que nous considérerons une efficacité quantique intrinsèque $q_i = 0.7$. Les seules inconnues sont l’indice du substrat diélectrique qu’ils utilisent et le temps de vie d’un émetteur dans l’espace libre. Le dispositif expérimental est constitué, de bas en haut, de : un substrat de silice, une couche de métal d’épaisseur h_m , une couche de diélectrique d’épaisseur h , une couche d’ions qui sont les émetteurs (d’épaisseur

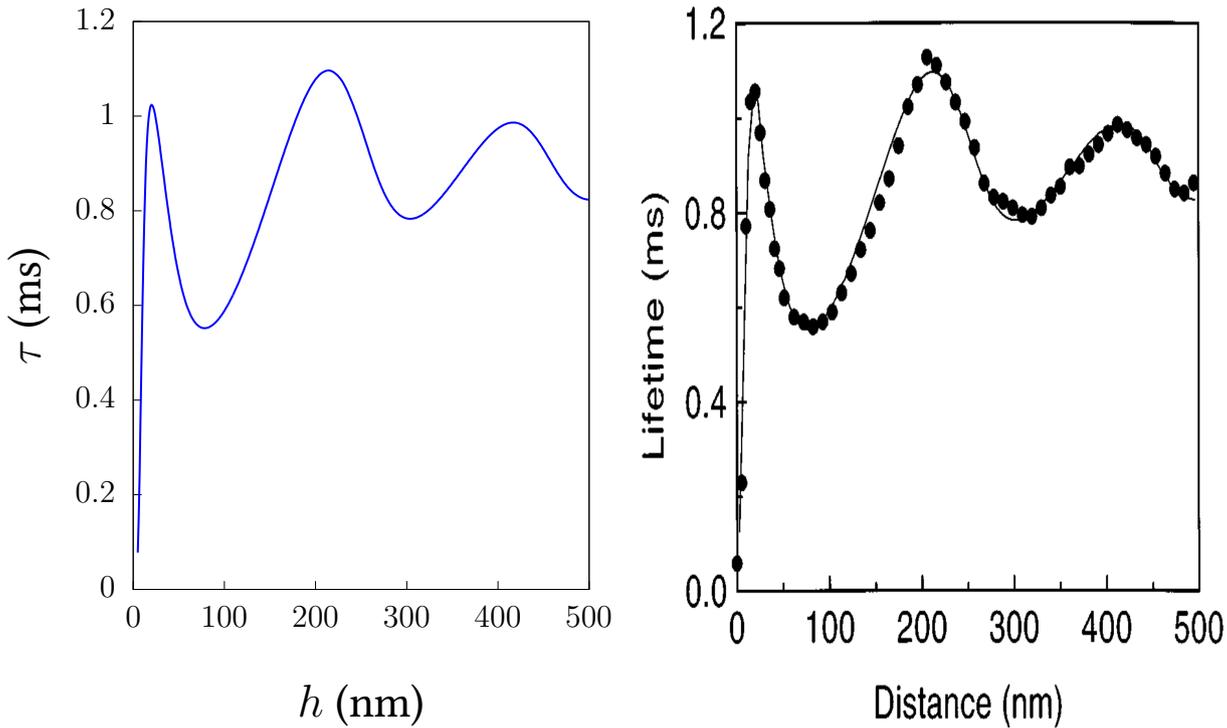


FIGURE 4.15 – Temps de vie d’un émetteur en fonction de la distance à la surface métallique. À gauche notre résultat et à droite celui d’Amos et Barnes[152]. Sur les résultats d’Amos et Barnes les points sont des résultats expérimentaux et la courbe un résultat théorique. L’épaisseur métallique est de 200 nm et la longueur d’onde d’émission de 614 nm.

nulle) puis 1.3 nm de diélectrique par dessus. On trouve de l’air au dessus et le substrat est considéré comme infini. Les ions constituent des dipôles orientés de manière aléatoire et on considère leur distribution comme isotrope. Pour nous, cela implique que l’on modélisera le temps de vie de la couche ionique en considérant la contribution de trois dipôles alignés chacun dans une direction de l’espace (on utilise $\hat{p} = (1, 1, 1)/3$ ce qui revient à prendre la trace du dyadique de Green). Finalement on obtient le temps de vie en prenant l’inverse de l’équation (4.249) et en considérant un temps de vie initial $\tau_0 = 0.70$ ms (obtenu empiriquement par comparaison). La figure 4.15 montre les résultats pour une épaisseur métallique de $h_m = 200$ nm. On peut noter de très légères différences mais la comparaison visuelle semble excellente. Ces légères différences peuvent s’expliquer par la présence des deux inconnues dans le problème – en tous les cas, le comportement du temps de vie est bien reproduit.

On peut voir que pour de faibles séparations h , le temps de vie chute brutalement. L’énergie de l’émetteur est alors transmise à un plasmon de surface. La présence de ce mode guidé, ou plutôt la forte densité énergétique associée, augmente brutalement le taux d’émission. La figure 4.15 confirme la validité de notre implémentation pour un multi-couche comportant un métal, et donc la validité de l’intégration pour obtenir le dyadique de Green dans le cas où la structure peut supporter des modes plasmoniques.

Notre dernière vérification est montrée sur la figure 4.16. La structure étudiée est identique à la précédente sauf que cette fois l’épaisseur de métal n’est que de 13.3 nm. Le slab de métal est donc capable de supporter des modes plasmoniques de grand vecteur d’onde. Encore une fois, malgré de très légères différences l’accord entre nos simulations et les résultats de Amos et Barnes est excellent et le comportement du

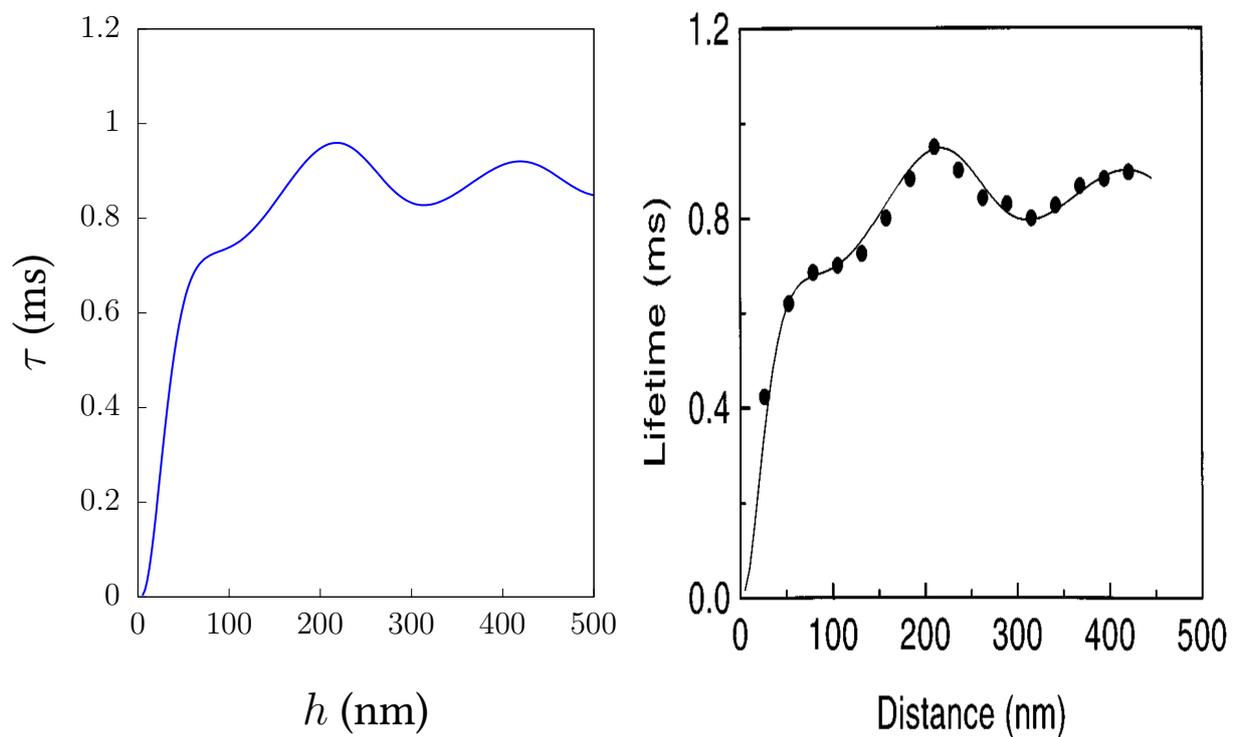


FIGURE 4.16 – Temps de vie d'un émetteur en fonction de la distance à la surface métallique. À gauche notre résultat et à droite celui d'Amos et Barnes[152]. Sur les résultats d'Amos et Barnes les points sont des résultats expérimentaux et la courbe un résultat théorique. L'épaisseur métallique est de 13.3 nm et la longueur d'onde d'émission de 614 nm.

temps de vie et bien reproduit. Bien que l'intégration dans le plan complexe soit plus difficile à faire correctement à cause des modes plasmoniques, notre code est capable de mener le calcul à bien.

4.3.3 Autres applications du dyadique de Green

Nous n'avons jusqu'à présent fait qu'effleurer les applications du dyadique de Green. Avec ce dernier on pourrait bien sûr calculer $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle$. Intégrer numériquement le vecteur de Poynting permet par exemple d'obtenir la puissance totale rayonnée au dessus du multi-couche ou encore en dessous, ou bien partant dans les directions latérales. On pourrait alors définir une puissance radiative, puis grâce à l'équation (4.247) qui donne la puissance totale on pourrait déduire la puissance non radiative c'est à dire quantifier la puissance transmise aux modes plasmoniques ou directement absorbée par le métal. Cela permettrait de définir l'efficacité radiative[149]. Nous ne l'avons pas évoqué mais le dyadique de Green permet également de définir la densité locale d'état[155, 156, 150, 157, 158, 159], une quantité qui se cache derrière la formule 4.245 et qui peut aussi être utile dans des calculs d'absorption ou de chaleur. Mais la véritable puissance du dyadique de Green réside dans son utilisation pour effectuer des calculs de diffraction complexes[160, 113, 161]. Les méthodes faisant appel au dyadique se basent sur une formulation intégrale du problème de diffraction et ont l'avantage de ne demander que la discrétisation des inhomogénéités présentes dans un milieu de référence décrit par le dyadique de Green.

Considérons un milieu de référence, multi-couche, comprenant une source en \mathbf{r}_0 , décrit par un dyadique de Green $\overleftrightarrow{G}_{ref}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$. Pour la simplicité nous considérons des milieux non magnétiques exclusivement ($\mu = 1$ partout). La source émet dans ce milieu de référence décrit par $\epsilon_{ref}(\mathbf{r})$ un champ $\mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r})$. Considérons maintenant ce même milieu de référence, mais avec de possible inhomogénéités à certain endroits. La propagation dans ce second milieu est décrite par la donnée de $\epsilon(\mathbf{r})$ et d'un champ $\mathbf{E}_{tot}(\mathbf{r})$. Ces deux champs satisfont aux équations d'onde

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r}) - k_0^2 \epsilon_{ref}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r}) = i\omega\mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}), \quad (4.252)$$

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{E}_{tot}(\mathbf{r}) - k_0^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}_{tot}(\mathbf{r}) = i\omega\mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}). \quad (4.253)$$

$$(4.254)$$

En soustrayant la première équation à la seconde et en notant que le champ diffracté par les inhomogénéités est $\mathbf{E}_s = \mathbf{E}_{tot} - \mathbf{E}_{ref}$ on a l'équation d'onde pour cette partie du champ, à savoir

$$\nabla \wedge \nabla \wedge \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) - k_0^2 \epsilon_{ref}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) = k_0^2 \Delta\epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}_{tot}, \quad (4.255)$$

avec $\Delta\epsilon(\mathbf{r})$ le contraste diélectrique. On voit que le terme à droite peut être interprété comme un terme de source, et on peut donc lier \mathbf{E}_s au dyadique de Green du milieu de référence. Cela permet de définir le champ total comme

$$\mathbf{E}_{tot}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r}) + k_0^2 \int_V \overleftrightarrow{G}_{ref}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta\epsilon(\mathbf{r}') \mathbf{E}_{tot}(\mathbf{r}') dV' \quad (4.256)$$

qui est parfois appelée l'équation de Lippmann–Schwinger[120, 150]. Dans l'esprit, c'est une formulation du principe de Huygens qui considère qu'un objet diffusant est lui même une source de rayonnement. Le champ \mathbf{E}_{ref} peut être celui créé par une

source, ou une quelconque onde incidente sur la structure. L'intégration se fait sur le volume de l'inhomogénéité. Dans le cas où l'on cherche les champs à l'intérieur de cette dernière, nous nous retrouvons dans une situation où le dyadique est singulier. Il faut alors prendre la valeur principale de l'intégrale en excluant un volume et des termes viennent s'ajouter à l'équation (4.256). Ces termes dépendent de la forme du volume d'exclusion que l'on invoque pour éviter la singularité et sont donnés par Yaghjian[125]. Il existe même des méthodes générales pour obtenir une expression du dyadique sans avoir à exclure un quelconque volume[162]. Dans la pratique l'équation (4.256) se résout en discrétisant le volume des inhomogénéités, et donc les champs, constantes diélectriques et dyadiques. La manière de le faire dépend de la méthode employée, en générale la "méthode des moments"[163, 116] ou bien la *coupled dipole approximation*[164, 165]. Dans les deux cas cela mène à un système linéaire d'équations à résoudre qui permet l'obtention du champ total. On peut aussi calculer un dyadique de Green total qui permet d'écrire \mathbf{E} en fonction de \mathbf{E}_{ref} directement. Ce dyadique satisfait à l'équation de Dyson[120, 166, 165]. L'intérêt de ce dyadique total est évident puisqu'il permettrait d'obtenir des puissances, donc des temps de vie et des taux d'émission tout en prenant en compte les inhomogénéités. Il est également possible d'utiliser un dyadique de Green périodique qui permet de traiter des problèmes comportant des inhomogénéités périodiques[167]. Enfin, il est parfois plus avantageux numériquement parlant de transformer la formulation de \mathbf{E} en intégrale de surface et non plus de volume[163, 115, 113, 117].

Dans tout les cas l'intérêt de telles méthodes est évident. Elle permettent par exemple l'étude de l'émission d'un dipôle sous un patch, une sphère métallique ou n'importe quelle particule de forme arbitraire. Pour peu que ces dernières soient métalliques on pourrait étudier le couplage d'une source à des gap-plasmons. Des travaux menés au laboratoire ont par exemple montré que les "lasers à polaritons", dans lesquels des sources coincées entre deux miroirs diélectriques (la couche active), fonctionnaient mieux parallèlement aux miroirs que perpendiculairement, comme on les attendait. C'est le genre de système pour lequel les méthodes mises en place dans ce chapitre auraient toute leur pertinence[168, 169].

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons développé le formalisme nécessaire à l'étude du rayonnement d'un émetteur dans une structure multi-couche. Nous avons détaillé toutes les étapes du calcul permettant d'obtenir un dyadique de Green sous la forme d'une intégrale dans le plan de Fourier. Nous avons montré comment intégrer les matrices S pour le calcul de ce dyadique - un travail qui pourrait être étendu afin de prendre en compte la nature non locale des métaux. Nous avons ensuite discuté de la bonne manière d'intégrer numériquement les différentes intégrandes dans le plan complexe en utilisant plusieurs déformations du chemin d'intégration. Nous avons montré comment accélérer le calcul et avons introduit un moyen d'obtenir une erreur numérique sur ce dernier. Nous avons ensuite vérifié numériquement nos résultats en comparant notre intégration numérique à des résultats de la littérature. Puis, nous avons montré comment il était possible d'obtenir le diagramme de rayonnement d'un émetteur au dessus du multi-couche. Nous avons également confronté nos résultats à la littérature pour vérification. Enfin nous avons montré comment le calcul du dyadique de Green permettait d'obtenir les taux d'émission et temps de vie de l'émetteur en fonction de son environnement. Une nouvelle confrontation avec la littérature nous a finalement permis de valider notre code de calcul sur un cas où le multi-couche est capable de

supporter à la fois des modes guidés classiques et plasmoniques. Et enfin, nous avons discuté de l'intérêt plus général du dyadique de Green et avons introduit l'équation centrale et la littérature minimale permettant de faire face à des problèmes de diffraction plus généraux qu'une source dans un multi-couche homogène par morceaux.

Conclusion

Au fil de ce manuscrit nous nous sommes penchés avec attention sur les limites des modèles de matériau locaux dans le cadre de la plasmonique. Ces modèles, largement employés par la communauté, se sont montrés étonnamment robustes malgré leur simplicité. Cependant les progrès technologiques en matière de miniaturisation de systèmes optiques sont désormais suffisants pour pousser les modèles classiques dans leurs retranchements. Notre travail a consisté à définir les limites de ces modèles tout en restant dans un cadre qu'on peut qualifier de classique. L'avantage de cette approche est de permettre une interprétation intuitive de la physique considérée.

Nous avons commencé par définir plasmon et plasmon de surface à l'aide des équations de Maxwell que nous avons formulées de manière à pouvoir considérer des métaux comme des diélectriques. Nous avons utilisé le modèle de Drude et plusieurs de ses améliorations pour discuter des caractéristiques principales du plasmon de surface - notamment à travers sa courbe de dispersion. Nous avons étudié l'influence des pertes optiques, intrinsèques au gaz d'électrons, ou bien du réseau d'ions. Ces pertes posent une première limite au confinement de l'énergie le long d'une interface, liée à l'augmentation du vecteur d'onde. Puis, nous nous sommes employés à mettre ces modèles en défaut en prenant en compte le caractère non local des métaux - qui lui aussi limite le confinement des champs propre aux modes plasmoniques.

A l'aide d'un modèle hydrodynamique, nous avons montré que la nature non locale des métaux est difficile à mettre en évidence sur le plasmon de surface et qu'un modèle local est dans la plupart des cas suffisant pour décrire la réponse optique d'un métal. Cependant nous avons montré que l'utilisation de diélectriques de permittivité élevée permet d'augmenter suffisamment le confinement des champs pour que le plasmon de surface devienne sensible à la réponse non locale des métaux. Nous avons montré que cela engendre également une légère modification des différentes distances de propagation associées au plasmon de surface - pouvant alors augmenter ou diminuer ces dernières selon la longueur d'onde considérée. L'étude de l'impact de la non-localité sur le plasmon de surface nous a permis de mettre en place le formalisme nécessaire pour pouvoir ensuite étudier d'autres modes plasmoniques. Dans ce cadre, nous avons vu qu'un gap plasmon - pouvant se propager entre deux métaux - peut devenir sensible à la non localité pour des épaisseurs de diélectrique nanométriques. Nous avons également montré que les modes de slab fin peuvent également être affectés par la nature non locale des métaux. Nos travaux nous ont ensuite amené à étendre notre formalisme pour l'étude d'un multi-couche métallo-diélectrique arbitraire. Nous avons montré que ce formalisme peut être considérablement simplifié dans la majorité des cas[85]. Au cours de notre étude des modes plasmoniques, nous avons montré que la combinaison d'interstices de petite taille et de diélectriques de permittivité élevée conduit systématiquement à un fort impact de la non-localité - c'est à dire à un confinement plus faible que ce qui peut se prédire avec un modèle de Drude.

Cette idée fondamentale nous a servi de base pour proposer deux classes d'expériences optiques qui permettraient la mesure, s'il on peut dire, de l'influence de la non-localité.

Bien que la nature non locale des métaux soit largement reconnue, il n'existe aujourd'hui qu'une seule classe d'expérience optique capable de la mesurer quantitativement[9, 10]. De plus un doute plane sur les résultats de ces expériences à cause de la taille quasi subnanométrique des gaps étudiés.

Nous avons dans un premier temps montré qu'un simple coupleur à prisme peut permettre de mettre en évidence la non-localité comme une différence angulaire de l'ordre de 1 pour cent. Nous avons aussi montré qu'il est en théorie possible de voir la non-localité s'exprimer dans une différence de réflectivité de plus de dix pour cent. Nous avons de plus proposé d'utiliser les modes de slab fin pour étudier la non-localité. Dans tous les cas, les épaisseurs que nous avons envisagées sont bien plus grandes qu'un nanomètre. Nous avons même montré que des interstices de près de soixante nanomètres peuvent être utilisés pour mettre en évidence la non-localité[108].

Au delà de la simple proposition expérimentale, ces résultats suggèrent que l'influence de la non-localité est loin d'être négligeable aussi souvent que ce que la communauté pense en général - au moins dans la gamme du visible. Toute expérience impliquant des gaps métalliques ou diélectriques d'épaisseurs nanométriques et/ou des matériaux présentant de grandes permittivités est susceptible d'être influencée par la non-localité. Il est fort probable qu'un certain nombre de résultats de la littérature soient biaisés par cette dernière[170, 96, 94, 171, 172, 173, 62]. L'effet de la non-localité étant malgré tout relativement faible, elle pourrait être noyée par une détermination approximative des paramètres matériaux ou géométriques.

La seconde classe d'expérience que nous avons suggérée repose sur un coupleur à réseau. Nous avons montré qu'un bon choix de paramètres permet d'utiliser le simple plasmon de surface pour l'étude de la non-localité. Cette dernière cause alors un *blue-shift* de l'ordre du pourcent dans la longueur d'onde de couplage. Cette classe de coupleur pourrait être utilisé pour étudier des modes présentant un plus grand confinement - et donc plus sensibles à la non-localité - mais nous avons vu que l'interprétation des résultats est loin d'être aussi évidente que pour les coupleurs à prisme. En concevant notre réseau de diffraction nous avons vu une physique riche impliquant des cavités pour les plasmons de surface. Nous avons ensuite utilisé ce système pour proposer une méthode télémétrique afin d'extraire correctement les paramètres géométriques de la structure - et ceci indépendamment de l'influence de la non-localité. Cette méthode repose sur des outils mathématiques très avancés et pourrait être facilement remplacée par une image AFM. Mais son intérêt réside dans la possibilité de pouvoir faire une expérience exclusivement optique, et donc ne nécessitant pas l'utilisation des techniques de caractérisation les plus lourdes. Enfin, nous avons appliqué des méthodes mathématiques d'*Uncertainty Quantification* pour donner une estimation de la précision de fabrication nécessaire pour pouvoir distinguer l'influence de la non-localité d'une éventuelle erreur sur les paramètres géométriques. Il est en définitive assez drôle de voir que c'est avec un dispositif somme toute très proche de celui qui a permis d'exciter des plasmons de surface pour la toute première fois que l'on arrive à tester la validité d'un modèle élaboré lui aussi au tout début du vingtième siècle.

Une fois cette étude poussée de la non-localité menée, nous nous sommes intéressés à un problème de photonique dont l'intérêt ne se limite pas à la plasmonique. Nous avons mis en place, conformément à la littérature abondante sur le sujet, tout l'édifice théorique et numérique nécessaire pour l'étude de l'émission d'un dipôle dans une structure multi-couche. A travers le calcul du dyadique de Green, le formalisme nous a permis d'obtenir le diagramme de rayonnement du dipôle ainsi que son temps de vie en fonction de son environnement. Ce dyadique donne également les champs électromagnétiques. Le multi-couche en question peut comporter des métaux, et peut donc supporter des

modes guidés plasmoniques. Actuellement, le code de calcul écrit pour l'occasion n'est pas capable de prendre en compte la non-localité mais le formalisme est suffisamment développé pour que cela soit possible assez facilement. Le code que j'ai réalisé devrait être libéré par l'équipe, puisque c'est dans cet esprit qu'il a été réalisé. On peut espérer s'en servir pour explorer un certain nombre de situations comme les problèmes d'extraction de lumière, les lasers à polaritons, l'effet Purcell dans des métamatériaux hyperboliques et bien plus encore si l'on prend la peine d'inclure des inhomogénéités dans le multi-couche.

Il reste à espérer que ces travaux susciteront l'intérêt de la communauté – et que, peut-être, la réalisation des expériences que nous avons imaginées lui permette d'explorer les limites des modèles actuels de matériaux. On sait bien qu'il faut probablement aller encore plus loin pour décrire pleinement des situations aussi complexes que celle de l'émission due à des molécules parfois très étendues placées dans un environnement plasmonique nanométrique - c'est le domaine naissant de la plasmonique quantique. Mais au moins les résultats exposés ici indiqueront la voie à emprunter et montrent que quand les modèles utilisés sont suffisamment simples pour permettre la modélisation et la discussion, on peut les utiliser pour faire de la véritable physique.

Bibliographie

- [1] P. Drude. Zur elektronentheorie der metalle. *Annalen der Physik*, 306(3) :566–613.
- [2] R W Wood. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *Proceedings of the Physical Society of London*, 18(1) :269, 1902.
- [3] Resonance shifts and spill-out effects in self-consistent hydrodynamic nanoplasmonics.
- [4] Mario Rocca. Low-energy eels investigation of surface electronic excitations on metals. *Surface science reports*, 22(1-2) :1–71, 1995.
- [5] Christin David and F. Javier García de Abajo. Spatial nonlocality in the optical response of metal nanoparticles. *The Journal of Physical Chemistry C*, 115(40) :19470–19475, 2011.
- [6] Aeneas Wiener, Antonio I. Fernández-Domínguez, Andrew P. Horsfield, John B. Pendry, and Stefan A. Maier. Nonlocal effects in the nanofocusing performance of plasmonic tips. *Nano Letters*, 12(6) :3308–3314, 2012.
- [7] J. A. Scholl, A. L. Koh, and J. A. Dionne. Quantum plasmon resonances of individual metallic nanoparticles. *Nature*, 483(7390) :421–427, 2012.
- [8] Kosmas L. Tsakmakidis, Robert W. Boyd, Eli Yablonovitch, and Xiang Zhang. Large spontaneous-emission enhancements in metallic nanostructures : towards leds faster than lasers. *Opt. Express*, 24(16) :17916–17927, Aug 2016.
- [9] C. Ciraci, RT Hill, JJ Mock, Y. Urzhumov, AI Fernández-Domínguez, SA Maier, JB Pendry, A. Chilkoti, and DR Smith. Probing the ultimate limits of plasmonic enhancement. *Science*, 337(6098) :1072–1074, 2012.
- [10] Cristian Ciraci, Xiaoshu Chen, Jack J. Mock, Felicia McGuire, Xiaojun Liu, Sang-Hyun Oh, and David R. Smith. Film-coupled nanoparticles by atomic layer deposition : Comparison with organic spacing layers. *Applied Physics Letters*, 104(2) :-, 2014.
- [11] David Pines. Collective energy losses in solids. *Rev. Mod. Phys.*, 28 :184–198, Jul 1956.
- [12] David Bohm and David Pines. A collective description of electron interactions. i. magnetic interactions. *Phys. Rev.*, 82 :625–634, Jun 1951.
- [13] David Pines and David Bohm. A collective description of electron interactions : Ii. collective vs individual particle aspects of the interactions. *Phys. Rev.*, 85 :338–353, Jan 1952.
- [14] David Bohm and David Pines. A collective description of electron interactions : Iii. coulomb interactions in a degenerate electron gas. *Phys. Rev.*, 92 :609–625, Nov 1953.
- [15] Lewi Tonks and Irving Langmuir. Oscillations in ionized gases. *Phys. Rev.*, 33 :195–210, Feb 1929.

- [16] L Solymar and E Shamonina. *Waves in Metamaterials*. Oxford University Press, 2009.
- [17] Stefan Enoch and Nicolas Bonod, editors. *Plasmonics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.
- [18] Duong Thi Ha, Dinh Thi Thuy, Vo Thi Hoa, Tran Thi Thanh Van, and Nguyen Ai Viet. On the theory of three types of polaritons (phonon, exciton and plasmon polaritons). *Journal of Physics : Conference Series*, 865(1) :012007, 2017.
- [19] Eudenilson Albuquerque and Michael Cottam. *Polaritons in Periodic and Quasi-periodic Structures*. Elsevier Science, 2004.
- [20] Vasily Klimov. *Nanoplasmonics*. Pan Stanford, 2014.
- [21] Y. Wang, E. W. Plummer, and K. Kempa. Foundations of plasmonics. *Advances in Physics*, 60(5) :799–898, 2011.
- [22] Stefan Alexander Maier. *Plasmonics : Fundamentals and Applications*. Springer Science, 2007.
- [23] Neil W. Ashcroft and David N. Mermin. *Physique des solides*.
- [24] 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(22) :5271–5283, Aug 1998.
- [25] R. Brendel and D. Bormann. An infrared dielectric function model for amorphous solids. *Journal of Applied Physics*, 71(1) :1–6, 1992.
- [26] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, ninth dover printing, tenth gpo printing edition, 1964.
- [27] J. A. C. Weideman. Computation of the complex error function. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(5) :1497–1518, 1994.
- [28] S Lanteri, C Scheid, and J Viquerat. Analysis of a generalized dispersive model coupled to a dgtd method with application to nanophotonics. *SIAM J. Sci. Comput.*, 39(3) :A931–A859, 2017.
- [29] Heinz Raether. *Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons*. 1980.
- [30] Heinz Raether. *Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings*. 1988.
- [31] William L Barnes. Surface plasmon–polariton length scales : a route to sub-wavelength optics. *Journal of Optics A : Pure and Applied Optics*, 8(4) :S87, 2006.
- [32] E. A. Stern and R. A. Ferrell. Surface plasma oscillations of a degenerate electron gas. *Phys. Rev.*, 120 :130–136, Oct 1960.
- [33] Bo E Sernilius. *Surface Modes in Physics*. Wiley-VCH Verlag Berlin GmbH, 2005.
- [34] T. K. Sarkar, M. N. Abdallah, M. Salazar-Palma, and W. M. Dyab. Surface plasmons-polaritons, surface waves, and zenneck waves : Clarification of the terms and a description of the concepts and their evolution. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 59(3) :77–93, June 2017.
- [35] J. J. Hopfield. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals. *Phys. Rev.*, 112 :1555–1567, Dec 1958.
- [36] V.V Rumyantsev and K.V. Gumennyk. Towards a history of concepts of light-matter coupling. *Journal of Photonic Material and Technology*, 1(1) :1–9, 2015.

- [37] On the interaction between the radiation field and ionic crystals. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 208(1094) :352–365, 1951.
- [38] Tolpygo. Physical properties of a rock lattice made up of deformable ions. *J. Exp. Thor. Phys*, 20(6) :497–509, 1950.
- [39] J. J. Hopfield. *Aspects of Polaritons*, pages 771–782. Springer US, Boston, MA, 1995.
- [40] P Loudon. *Polaritons*, pages 479–499. Plenum Press, New York, 1983.
- [41] D L Mills and E Burstein. Polaritons : the electromagnetic modes of media. *Reports on Progress in Physics*, 37(7) :817, 1974.
- [42] *Surfaces Polaritons*. North-Holland Publishing Company, 1982.
- [43] A. D. Boardman. *Electromagnetic surface modes*. Wiley, 1982.
- [44] F. Frostmann and R. R. Gerhardt. *Metal optics near the plasma frequency*, volume 109. Springer-Verlag, 1986.
- [45] Daniel Gall. Electron mean free path in elemental metals. *Journal of Applied Physics*, 119(8) :085101, 2016.
- [46] Felix Bloch. Inkohärente röntgenstreuung und dichteschwankungen eines entarteten fermigases. *Helv. Phys. Acta*, 7 :385–405, 1934.
- [47] Hideo Kanazawa. On the plasma oscillations in metal foils. *Progress of Theoretical Physics*, 26(6) :851–860, 1961.
- [48] RH Ritchie. On surface plasma oscillations in metal foils. *Progr. Theoret. Phys.(Kyoto)*, 29, 1963.
- [49] A Liebsch. Surface plasmon dispersion of ag. *Physical review letters*, 71(1) :145, 1993.
- [50] Sung Jin Park and Richard E Palmer. Plasmon dispersion of the au (111) surface with and without self-assembled monolayers. *Physical review letters*, 102(21) :216805, 2009.
- [51] Railing Chang, H.-P. Chiang, P.T. Leung, and W.S. Tse. Nonlocal electrodynamic effects in the optical excitation of the surface plasmon resonance. *Optics Communications*, 225(4) :353 – 361, 2003.
- [52] N. Crouseilles, P. A. Hervieux, and G. Manfredi. Quantum hydrodynamic model for the nonlinear electron dynamics in thin metal films. *Phys. Rev. B*, 78 :155412, 2008.
- [53] Aenas Wiener. *Nonlocal effects in plasmonic nanostructures*. PhD thesis, Imperial College London, 2014.
- [54] Giuseppe Toscano. *Semiclassical theory of nonlocal plasmonic excitation in metallic nanostructures*. Theses, Technical University of Denmark, 2013.
- [55] Antoine Moreau, Cristian Ciraci, and David R Smith. Impact of nonlocal response on metallodielectric multilayers and optical patch antennas. *Physical Review B*, 87(4) :045401, 2013.
- [56] Soren Raza, Thomas Christensen, Martijn Wubs, Sergey I. Bozhevolnyi, and N. Asger Mortensen. Nonlocal response in thin-film waveguides : Loss versus nonlocality and breaking of complementarity. *Physical Review B*, 88(11) :115401, 2013.
- [57] J. R. DeVore. Refractive indices of rutile and sphalerite. *J. Opt. Soc. Am.*, 41(6) :416–419, Jun 1951.

- [58] Antoine Moreau, Cristian Ciraci, Jack J Mock, Ryan T Hill, Qiang Wang, Benjamin J Wiley, Ashutosh Chilkoti, and David R Smith. Controlled-reflectance surfaces with film-coupled colloidal nanoantennas. *Nature*, 492(7427) :86–89, 2012.
- [59] J. Jung, T. Søndergaard, and S I Bozhevolnyi. Gap plasmon-polariton nanoresonators : Scattering enhancement and launching of surface plasmon polaritons. *Physical Review B*, 79(3) :035401, 2009.
- [60] T. Søndergaard, J. Beermann, A. Boltasseva, and S I Bozhevolnyi. Slow-plasmon resonant-nanostrip antennas : Analysis and demonstration. *Physical Review B*, 77(11) :115420, 2008.
- [61] S I Bozhevolnyi and T. Søndergaard. General properties of slow-plasmon resonant nanostructures : nano-antennas and resonators. *Optics Express*, 15(17) :10869–10877, 2007.
- [62] Michael G. Nielsen, Dmitri K. Gramotnev, Anders Pors, Ole Albrektsen, and Sergey I. Bozhevolnyi. Continuous layer gap plasmon resonators. *Opt. Express*, 19(20) :19310–19322, Sep 2011.
- [63] Mathieu Dechaux, Paul-Henri Tichit, Cristian Ciraci, Jessica Benedicto, Rémi Pollès, Emmanuel Centeno, David R Smith, and Antoine Moreau. Influence of spatial dispersion in metals on the optical response of deeply subwavelength slit arrays. *Physical Review B*, 93(4) :045413, 2016.
- [64] C. L. C. Smith, N. Stenger, A. Kristensen, N. A. Mortensen, and S. I. Bozhevolnyi. Gap and channeled plasmons in tapered grooves : a review. *Nanoscale*, 7 :9355–9386, 2015.
- [65] J. J. Burke, G. I. Stegeman, and T. Tamir. Surface-polariton-like waves guided by thin, lossy metal films. *Phys. Rev. B*, 33 :5186–5201, Apr 1986.
- [66] Fuzi Yang, J. R. Sambles, and G. W. Bradberry. Long-range surface modes supported by thin films. *Phys. Rev. B*, 44 :5855–5872, Sep 1991.
- [67] E. N. Economou. Surface plasmons in thin films. *Phys. Rev.*, 182 :539–554, Jun 1969.
- [68] Pierre Berini. Long-range surface plasmon polaritons. *Adv. Opt. Photon.*, 1(3) :484–588, Nov 2009.
- [69] R. H. Ritchie. Plasma losses by fast electrons in thin films. *Phys. Rev.*, 106 :874–881, Jun 1957.
- [70] R. Ruppin. Non-local optics of the near field lens. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 17 :1803, 2005.
- [71] Jeffrey N Anker, W Paige Hall, Olga Lyandres, Nilam C Shah, Jing Zhao, and Richard P Van Duyne. Biosensing with plasmonic nanosensors. *Nature materials*, 7(6) :442–453, 2008.
- [72] Junxi Zhang, Lide Zhang, and Wei Xu. Surface plasmon polaritons : Physics and applications. *Journal of Physics D-applied Physics - J PHYS-D-APPL PHYS*, 45, 03 2012.
- [73] Josselin Defrance, Caroline Lemaître, Rabih Ajib, Jessica Benedicto, Emilien Mallet, Rémi Pollès, Jean-Pierre Plumey, Martine Mihailovic, Emmanuel Centeno, Cristian Ciraci, et al. Moosh : A numerical swiss army knife for the optics of multilayers in octave/matlab. *Journal of Open Research Software*, 4(1), 2016.

- [74] Jessica Benedicto, Rémi Pollès, Cristian Ciraci, Emmanuel Centeno, David R Smith, and Antoine Moreau. Numerical tool to take nonlocal effects into account in metallo-dielectric multilayers. *JOSA A*, 32(8) :1581–1588, 2015.
- [75] Antoine Moreau. *Études théoriques et numériques en Nanophotonique*. Habilitation à diriger des recherches, Université Blaise Pascal.
- [76] Yu Luo, AI Fernandez-Dominguez, Aeneas Wiener, Stefan A Maier, and JB Pendry. Surface plasmons and nonlocality : A simple model. *Physical review letters*, 111(9) :093901, 2013.
- [77] C Sauvan, G Lecamp, P Lalanne, and JP Hugonin. Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in photonic crystal microcavities. *Optics Express*, 13(1) :245–255, 2005.
- [78] TV Teperik, P Nordlander, J Aizpurua, and AG Borisov. Robust subnanometric plasmon ruler by rescaling of the nonlocal optical response. *Physical review letters*, 110(26) :263901, 2013.
- [79] AI Fernandez-Dominguez, A Wiener, FJ Garcia-Vidal, S A Maier, and JB Pendry. Transformation-optics description of nonlocal effects in plasmonic nanostructures. *Physical Review Letters*, 108(10) :106802, 2012.
- [80] A. J. Ward and J. B. Pendry. Refraction and geometry in maxwell’s equations. *Journal of Modern Optics*, 43(4) :773–793, 1996.
- [81] J. B. Pendry, D. Schurig, and D. R. Smith. Controlling electromagnetic fields. *Science*, 312(5781) :1780–1782, 2006.
- [82] Yu Luo, J. B. Pendry, and Alexandre Aubry. Surface plasmons and singularities. *Nano Letters*, 10(10) :4186–4191, 2010. PMID : 20839832.
- [83] Yu Luo, Alexandre Aubry, and J. B. Pendry. Electromagnetic contribution to surface-enhanced raman scattering from rough metal surfaces : A transformation optics approach. *Phys. Rev. B*, 83 :155422, Apr 2011.
- [84] JB Pendry, A. Aubry, DR Smith, and SA Maier. Transformation optics and sub-wavelength control of light. *Science*, 337(6094) :549–552, 2012.
- [85] Armel Pitelet, Émilien Mallet, Emmanuel Centeno, and Antoine Moreau. Fresnel coefficients and fabry-perot formula for spatially dispersive metallic layers. *Phys. Rev. B*, 96 :041406, Jul 2017.
- [86] Andreas Otto. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik*, 216(4) :398–410, 1968.
- [87] E. Kretschmann and H. Raether. Radiative decay of nonradiative surface plasmons excited by light. *Z. Naturforsch. A*, 23 :2135, 1968.
- [88] Refractive index database. <https://refractiveindex.info/?shelf=glass&book=LASF9&page=SCHOTT>.
- [89] P. Lalanne and G. M. Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for tm polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13 :779, 1996.
- [90] G. Granet and B. Guizal. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in tm polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13 :1019, 1996.
- [91] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction— e-mode polarization and losses. *J. Opt. Soc. Am.*, 73(4) :451–455, Apr 1983.

- [92] Nikolai Schmitt, Claire Scheid, Stéphane Lanteri, Antoine Moreau, and Jonathan Viquerat. A dgtd method for the numerical modeling of the interaction of light with nanometer scale metallic structures taking into account non-local dispersion effects. *Journal of Computational Physics*, 316 :396–415, 2016.
- [93] Lifeng Li and Gérard Granet. Field singularities at lossless metal-dielectric right-angle edges and their ramifications to the numerical modeling of gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 28(5) :738–746, May 2011.
- [94] Yan Wang, Rubaiyat Islam, and George V. Eleftheriades. An ultra-short contra-directional coupler utilizing surface plasmon-polaritons at optical frequencies. *Opt. Express*, 14(16) :7279–7290, Aug 2006.
- [95] Ivan Avrutsky, Ildar Salakhutdinov, Justin Elser, and Viktor Podolskiy. Highly confined optical modes in nanoscale metal-dielectric multilayers. *Phys. Rev. B*, 75 :241402, Jun 2007.
- [96] KV. Sreekanth, Antonio De Luca, and G Strangi. Experimental demonstration of surface and bulk plasmon polaritons in hypergratings. *Scientific Reports*, (3), 2013.
- [97] R. Smaali, F. Omeis, A. Moreau, and E. Centeno. Miniaturizing optical antennas usinh hyperbolic metamaterial wires. *submitted*.
- [98] Thomas Siefke, Stefanie Kroker, Kristin Pfeiffer, Oliver Puffky, Kay Dietrich, Daniel Franta, Ivan Ohlídal, Adriana Szeghalmi, Ernst-Bernhard Kley, and Andreas Tünnermann. Materials pushing the application limits of wire grid polarizers further into the deep ultraviolet spectral range. *Advanced Optical Materials*, 4(11) :1780–1786.
- [99] Yifang Chen. Nanofabrication by electron beam lithography and its applications : A review. *Microelectronic Engineering*, 135 :57–72, 2015.
- [100] E Langereis, S B S Heil, H C M Knoop, W Keuning, M C M van de Sanden, and W M M Kessels. In situ spectroscopic ellipsometry as a versatile tool for studying atomic layer deposition. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 42(7) :073001, 2009.
- [101] Nikolai Schmitt, Claire Scheid, Jonathan Viquerat, and Stéphane Lanteri. Simulation of three-dimensional nanoscale light interaction with spatially dispersive metals using a high order curvilinear dgtd method. *Journal of Computational Physics*, 373 :210 – 229, 2018.
- [102] Jonathan Viquerat. Fitting experimental dispersion data with a simulated annealing method for nano-optics applications. *Journal of Nanophotonics*, 12 :12 – 12 – 18, 2018.
- [103] Dimitrios Loukrezis, Ulrich Römer, Thorben Casper, Sebastian Schöps, and Herbert De Gerssem. High dimensional uncertainty quantification for an electro-thermal field problem using stochastic collocation on sparse grids and tensor train decomposition. *CoRR*, abs/1610.03863, 2016.
- [104] Dimitrios Loukrezis, Ulrich Römer, and Herbert De Gerssem. Numerical comparison of leja and clenshaw-curtis dimension-adaptive collocation for stochastic parametric electromagnetic field problems. *CoRR*, abs/1712.07223, 2017.
- [105] Niklas Georg, Dimitrios Loukrezis, Ulrich Römer, and Sebastian Schöps. Uncertainty quantification for an optical grating coupler with an adjoint-based leja adaptive collocation method. *CoRR*, abs/1807.07485, 2018.

- [106] Kirankumar R. Hiremath, Lin Zschiedrich, and Frank Schmidt. Numerical solution of nonlocal hydrodynamic Drude model for arbitrary shaped nanoplasmonic structures using Nédélec finite elements. *Journal of Computational Physics*, 231(17) :5890–5896, 2012.
- [107] S. Raza, G. Toscano, A. P. Jauho, M. Wubs, and N A Mortensen. Unusual resonances in nanoplasmonic structures due to nonlocal response. *Physical Review B*, 84(12) :121412, 2011.
- [108] Armel Pitelet, Emilien Mallet, Rabih Ajib, Caroline Lemaître, Emmanuel Centeno, and Antoine Moreau. Plasmonic enhancement of spatial dispersion effects in prism coupler experiments. *Phys. Rev. B*, 98 :125418, Sep 2018.
- [109] G. P. d. S. Cavalcante, D. A. Rogers, and A. J. Giarola. Analysis of electromagnetic wave propagation in multilayered media using dyadic green’s functions. *Radio Science*, 17(03) :503–508, May 1982.
- [110] K.F. Warnick and D.V. Arnold. Electromagnetic green functions using differential forms. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 10(3) :427–438, 1996.
- [111] E.L. Tan and S.Y. Tan. On the eigenfunction expansions of the dyadic green’s functions for bianisotropic media. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 12(12) :1577–1578, 1998.
- [112] W. C. Chew, J. L. Xiong, and M. A. Saville. A matrix-friendly formulation of layered medium green’s function. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 5 :490–494, 2006.
- [113] T. Søndergaard. Modeling of plasmonic nanostructures : Green’s function integral equation methods. *physica status solidi (b)*, 244(10) :3448–3462, 2007.
- [114] J. P. Plumey, K. Edee, and G Granet. Modal expansion for the 2d green’s function in a non-orthogonal coordinates system. *Progress in Inlectromagnetics Research*, 59 :101–112, 2006.
- [115] Y. P. Chen, W. C. Chew, and L. Jiang. A new green’s function formulation for modeling homogeneous objects in layered medium. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 60(10) :4766–4776, Oct 2012.
- [116] Weng Cho Chew, Mei Song Tong, and Bin Hu. *Integral Equation Methods for Electromagnetic and Elastic Waves*. Morgan & Claypool, 2009.
- [117] Weng Cho Chew. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*. IEEE Press, 1994.
- [118] Kazumi Watanabe. *Integral Transform Techniques for Green’s Function*. Springer, 2014.
- [119] Dean G. Duffy. *Green’s functions with applications*. CRC Press, second edition, 2015.
- [120] Lukas Novotny. *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press, second edition, 2012.
- [121] E.M. Prucell. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies. *Phys. Rev.*, 69 :681, 1946.
- [122] Gleb M Akselrod, Christos Argyropoulos, Thang B Hoang, Cristian Ciraci, Chao Fang, Jiani Huang, David R Smith, and Maiken H Mikkelsen. Probing the mechanisms of large purcell enhancement in plasmonic nanoantennas. *Nature Photonics*, 2014.
- [123] J. Barthes, G. Colas des Francs, A. Bouhelier, J.-C. Weeber, and A. Dereux. Purcell factor for a point-like dipolar emitter coupled to a two-dimensional plasmonic waveguide. *Phys. Rev. B*, 84 :073403, Aug 2011.

- [124] Hideo Iwase, Dirk Englund, and Jelena Vučković. Analysis of the purcell effect in photonic and plasmonic crystals with losses. *Opt. Express*, 18(16) :16546–16560, Aug 2010.
- [125] A. D. Yaghjian. Electric dyadic green’s functions in the source region. *Proceedings of the IEEE*, 68(2) :248–263, Feb 1980.
- [126] Chen-To Tai. *Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory*. I.E.E.E. Press, second edition, 1994.
- [127] Julius Asam Stratton. *Electromagnetic Theory*. Mc Graw-Hill Book Company, 1941.
- [128] Huang Jing. *Green Function (Perturbation Theory chapter 3)*.
- [129] Jin Au Kong. *Electromagnetic Wave Theory*. Wiley Interscience, second edition, 1990.
- [130] Tianyu Dong, Yi Shi, Lizhen Lu, Feng Chen, Xikui Ma, and Raj Mittra. Optical response of cylindrical multilayers in the context of hydrodynamic convection-diffusion model. *Journal of Applied Physics*, 120(12) :123102, 2016.
- [131] P. Gay-Balmaz, O. J. F. Martin, and M. Paulus. Accurate and efficient computation of the green’s tensor for stratified media. *Physical Review E*, 62 :5797–5807, 2000.
- [132] Peter Johansson. Electromagnetic green’s function for layered systems : Applications to nanohole interactions in thin metal films. *Phys. Rev. B*, 83 :195408, May 2011.
- [133] A. Y. Nikitin, F. J. Garcia-Vidal, and L. Martin-Moreno. Analytical expressions for the Electromagnetic Dyadic Green’s Function in Graphene and thin layers. *ArXiv e-prints*, August 2012.
- [134] F. Krayzel, R. Pollès, A. Moreau, M. Mihailovic, and G. Granet. Simulation and analysis of exotic non-specular phenomena. *Journal of the European Optical Society - Rapid publications*, 5(0), 2010.
- [135] Dirk P. Laurie. Calculation of gauss–kronrod quadrature rules. *Mathematics of Computation*, pages 1133–1145, 1997.
- [136] D. Calvetti, G.H. Golub, Gragg W.B, and L Reichel. Computation of gauss-kronrod quadrature rules. *Math. Comp.*, 69, 2000.
- [137] Numerical integration (quadrature, cubature) in python. <https://github.com/nschloe/quadpy>.
- [138] Pedro Gonnet. A review of error estimation in adaptive quadrature. *ACM Comput. Surv.*, 44(4) :22 :1–22 :36, September 2012.
- [139] Tie Jun Cui and Weng Cho Chew. Fast evaluation of sommerfeld integrals for em scattering and radiation by three-dimensional buried objects. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 37(2) :887–900, March 1999.
- [140] Chengkun Chen, Pierre Berini, Dazeng Feng, Stoyan Tanev, and Velko P. Tzolov. Efficient and accurate numerical analysis of multilayer planar optical waveguides in lossy anisotropic media. *Opt. Express*, 7(8) :260–272, Oct 2000.
- [141] Wei Cai and Tiejun Yu. Fast calculations of dyadic green’s functions for electromagnetic scattering in a multilayered medium. *Journal of Computational Physics*, 165(1) :1 – 21, 2000.
- [142] Leung Tsang and Boping Wu. Electromagnetic fields of hertzian dipoles in layered media of moderate thickness including the effects of all modes. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 6 :316–319, 2007.

- [143] B. Wu and L. Tsang. Fast computation of layered medium green's functions of multilayers and lossy media using fast all-modes method and numerical modified steepest descent path method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 56(6) :1446–1454, June 2008.
- [144] Kristiaan A. Neyts. Simulation of light emission from thin-film microcavities. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(4) :962–971, Apr 1998.
- [145] S. R. J. Brueck, V. A. Smagley, and P. G. Eliseev. Radiation from a dipole embedded in a multilayer slab. *Phys. Rev. E*, 68 :036608, Sep 2003.
- [146] K. H. Drexhage, H. Kuhn, and F. P. Schäfer. Variation of the fluorescence decay time of a molecule in front of a mirror. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 72(2) :329–329, 1968.
- [147] K.H. Drexhage. Influence of a dielectric interface on fluorescence decay time. *Journal of Luminescence*, 1-2 :693 – 701, 1970.
- [148] W. L. Barnes. Fluorescence near interfaces : The role of photonic mode density. *Journal of Modern Optics*, 45(4) :661–699, 1998.
- [149] R. Carminati, J.-J. Greffet, C. Henkel, and J.M. Vigoureux. Radiative and non-radiative decay of a single molecule close to a metallic nanoparticle. *Optics Communications*, 261(2) :368 – 375, 2006.
- [150] R. Carminati, A. Cazé, D. Cao, F. Peragut, V. Krachmalnicoff, R. Pierrat, and Y. De Wilde. Electromagnetic density of states in complex plasmonic systems. *Surface Science Reports*, 70(1) :1 – 41, 2015.
- [151] A. Cazé, R. Pierrat, and R. Carminati. Strong coupling to two-dimensional anderson localized modes. *Phys. Rev. Lett.*, 111 :053901, Jul 2013.
- [152] R. M. Amos and W. L. Barnes. Modification of the spontaneous emission rate of eu^{3+} ions close to a thin metal mirror. *Phys. Rev. B*, 55 :7249–7254, Mar 1997.
- [153] Kevin G. Sullivan and Dennis G. Hall. Enhancement and inhibition of electromagnetic radiation in plane-layered media. i. plane-wave spectrum approach to modeling classical effects. *J. Opt. Soc. Am. B*, 14(5) :1149–1159, May 1997.
- [154] Charles-Antoine Guérin, Boris Gralak, and Adriaan Tip. Singularity of the dyadic green's function for heterogeneous dielectrics. *Phys. Rev. E*, 75 :056601, May 2007.
- [155] C. Sauvan, J. P. Hugonin, I. S. Maksymov, and P. Lalanne. Theory of the spontaneous optical emission of nanosize photonic and plasmon resonators. *Phys. Rev. Lett.*, 110 :237401, Jun 2013.
- [156] C. Sauvan, J. P. Hugonin, R. Carminati, and P. Lalanne. Modal representation of spatial coherence in dissipative and resonant photonic systems. *Phys. Rev. A*, 89 :043825, Apr 2014.
- [157] Karl Joulain, Rémi Carminati, Jean-Philippe Mulet, and Jean-Jacques Greffet. Definition and measurement of the local density of electromagnetic states close to an interface. *Phys. Rev. B*, 68 :245405, Dec 2003.
- [158] A. Narayanaswamy and G. Chen. Dyadic green's functions and electromagnetic local density of states. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(12) :1877 – 1884, 2010.
- [159] Tigran V. Shahbazyan. Local density of states for nanoplasmonics. *Phys. Rev. Lett.*, 117 :207401, Nov 2016.

- [160] Olivier J. F. Martin Horst Greiner. Numerical modeling of light emission and propagation in organic leds using the green's tensor. *Proc.SPIE*, 5214 :5214 – 5214 – 12, 2004.
- [161] Michael Paulus and Olivier J.F. Martin. A fully vectorial technique for scattering and propagation in three-dimensional stratified photonic structures. *Optical and Quantum Electronics*, 33(4) :315–325, Apr 2001.
- [162] G. Gao and C. Torres-Verdin. Analytical techniques to evaluate the integrals of 3d and 2d spatial dyadic green's functions. *Progress in Electromagnetics Research*, 52 :47–80, 2005.
- [163] Andreas M. Kern and Olivier J. F. Martin. Surface integral formulation for 3d simulations of plasmonic and high permittivity nanostructures. *J. Opt. Soc. Am. A*, 26(4) :732–740, Apr 2009.
- [164] Michael Paulus and Oliver J. F. Martin. Light propagation and scattering in stratified media : a green's tensor approach. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18(4) :854–861, Apr 2001.
- [165] Olivier J. F. Martin and Nicolas B. Piller. Electromagnetic scattering in polarizable backgrounds. *Phys. Rev. E*, 58 :3909–3915, Sep 1998.
- [166] Olivier J. F. Martin, Christian Girard, and Alain Dereux. Generalized field propagator for electromagnetic scattering and light confinement. *Phys. Rev. Lett.*, 74 :526–529, Jan 1995.
- [167] Benjamin Gallinet, Andreas M. Kern, and Olivier J. F. Martin. Accurate and versatile modeling of electromagnetic scattering on periodic nanostructures with a surface integral approach. *J. Opt. Soc. Am. A*, 27(10) :2261–2271, Oct 2010.
- [168] O. Jamadi, F. Reveret, P. Disseix, F. Medard, J. Leymarie, A. Moreau, D. Solnyshkov, C. Deparis, M. Leroux, E. Cambriil, S. Bouchoule, J Zuniga-Perez, and G Malpuech. Edge-emitting polariton laser and amplifier based on a zno waveguide. *Light : Science & Applications*, 7(82) :2047–7538, 2018.
- [169] O. Jamadi, F. Reveret, D. Solnyshkov, P. Disseix, J. Leymarie, L. Mallet-Dida, C. Birmont, T. Guillet, X. Lafosse, S. Bouchoule, M. Semond, M. Leroux, Zuniga-Perez J., and Malpuech G. Competition between horizontal and vertical polariton lasing in planar microcavities. *arXiv :1810.05508*, 2018.
- [170] Xiaoshu Chen, Cristian Ciraci, David R. Smith, and Sang-Hyun Oh. Nanogap-enhanced infrared spectroscopy with template-stripped wafer-scale arrays of buried plasmonic cavities. *Nano Letters*, 0(0) :null, 0. PMID : 25423481.
- [171] Tengfei Li and Jacob B. Khurgin. Hyperbolic metamaterials : beyond the effective medium theory. *Optica*, 3(12) :1388–1396, Dec 2016.
- [172] Thomas Siegfried, Yasin Ekinci, Olivier JF Martin, and Hans Sigg. Gap plasmons and near-field enhancement in closely packed sub-10 nm gap resonators. *Nano letters*, 13(11) :5449–5453, 2013.
- [173] J. Yang, C. Sauvan, A. Jouanin, S. Collin, J.L. Pelouard, and P. Lalanne. Ultras-small metal-insulator-metal nanoresonators : impact of slow-wave effects on the quality factor. *Optics Express*, 20(15) :16880–16891, 2012.