



**HAL**  
open science

# Vers des métamatériaux intégrés à pertes compensées : modélisation

Loïc Le Cunff

► **To cite this version:**

Loïc Le Cunff. Vers des métamatériaux intégrés à pertes compensées : modélisation. Matériaux. Université de Technologie de Troyes, 2014. Français. NNT : 2014TROY0033 . tel-03358772

**HAL Id: tel-03358772**

**<https://theses.hal.science/tel-03358772>**

Submitted on 29 Sep 2021

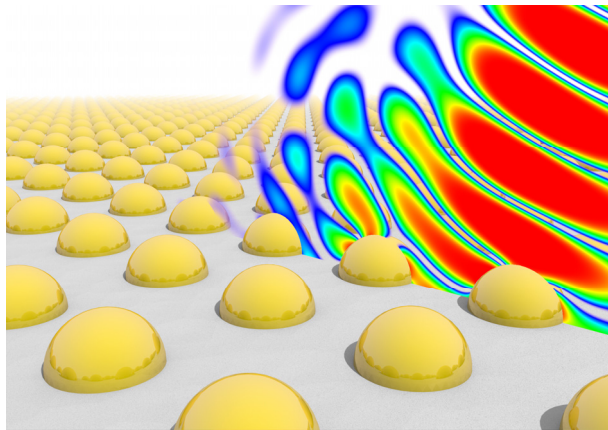
**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

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

Thèse  
de doctorat  
de l'UTT

**Loïc LE CUNFF**

# Vers des métamatériaux intégrés à pertes compensées : modélisation



**Spécialité :**  
Optique et Nanotechnologies

2014TROY0033

Année 2014

---

---

# THESE

*pour l'obtention du grade de*

## DOCTEUR de l'UNIVERSITE DE TECHNOLOGIE DE TROYES Spécialité : OPTIQUE ET NANOTECHNOLOGIES

*présentée et soutenue par*

**Loïc LE CUNFF**

*le 24 novembre 2014*

---

---

### **Vers des métamatériaux intégrés à pertes compensées : modélisation**

---

---

#### JURY

M. A. DE LUSTRAC	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Président
M. F. BAIDA	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Rapporteur
M. S. COLLIN	CHARGE DE RECHERCHE CNRS	Examineur
M. G. LÉRONDEL	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Directeur de thèse
M. O. VANBÉSIEN	PROFESSEUR DES UNIVERSITES	Rapporteur
M. A. VIAL	PROFESSEUR UTT	Directeur de thèse

#### Personnalités invitées

M. L. DIVAY	INGENIEUR RECHECHE THALES TRT
M. A. LUPU	CHARGE DE RECHERCHE CNRS





# Remerciements

Ainsi, les premières lignes de ce manuscrit sont les dernières qu'il me faut écrire, et le temps étant venu d'achever ce travail je voudrais adresser un certain nombre de remerciements.

A mes directeurs de thèse tout d'abord, Gilles Léron del et Alexandre Vial, qui m'ont guidé et soutenu tout au long de ma thèse. Un soutien sans faille dans les moments les plus difficiles, dépassant, je pense, leurs simples obligations professionnelles, et c'est en grande partie pour ne pas les décevoir que j'ai été jusqu'au bout de ce travail.

Aux membres du jury qui ont accepté de consacrer de leur temps à la lecture de ce manuscrit et à mon évaluation, et qui m'ont, au final, permis d'atteindre mon but.

A l'ensemble des membres du laboratoire que j'ai pu croiser au cours des années, et parmi lesquels j'ai un certain nombre d'amis maintenant, qui ont toujours généré une excellente ambiance de travail, et avec qui il a toujours été agréable d'échanger.

Aux collègues du projet Métaphotonique, toujours de bon conseil et que j'ai toujours eu plaisir à rencontrer lors des réunions de projet.

Aux membres de l'école doctorale, qui ont été plus qu'accommodant si l'on considère que mon dossier n'a probablement pas été des plus simples à traiter.

A tous ceux qui ont participé à mon éducation au cours de ces vingt-huit dernières années, et qui ont tous, quelque part, contribué à ce manuscrit.

Enfin, à mes parents, ma famille et mes amis, sans qui rien aurait été possible, et qui ont toujours été là quand il le fallait.



# Introduction

Le présent manuscrit concerne une thèse effectuée au Laboratoire de Nanotechnologies et d'Instrumentation Optique entre 2010 et 2014, à l'Université de Technologie de Troyes. Elle s'inscrit dans le cadre du projet ANR Métaphotonique et y est entièrement dédiée.

L'objectif du projet était d'étudier la possibilité d'utiliser des métamatériaux opérant à la longueur d'onde de 1.55 microns, communément utilisée dans l'industrie des télécommunications. L'espoir était de parvenir à concevoir des composants pour l'optique guidée, qui serviraient de brique de base pour des applications futures.

Avant le début de cette thèse, des études préliminaires avaient déjà été effectuées, et portaient notamment sur un composant potentiel, un "taper", qui avait été défini grâce à une série de transformations conformes. Celles-ci firent apparaître le besoin d'utiliser des matériaux d'indices optiques variés et inhabituels. Pour suivre cette direction, il fallait cependant être capable de faire le lien entre de tels indices et des structures réelles. C'est pourquoi le problème de l'indice effectif d'un métamatériau a été l'un des coeurs de cette thèse, le chapitre 2 lui étant dédié, la voie que nous avons choisie étant de tenter de remonter numériquement aux paramètres effectifs de structures simulées par FDTD.

Cependant, il s'est avéré que l'étude des propriétés effectives à partir de simulations nécessitait de savoir calculer la réponse optique de métamatériaux sous incidence oblique. Ceci n'étant pas trivial dans le cas de structures périodiques, il a donc été nécessaire de s'intéresser aux méthodes actuellement utilisées. Mais ce champ de recherche étant encore en développement, nous avons dû essayer deux méthodes de simulations différentes présentées au chapitre 3.

Au gré des divers essais et simulations, un phénomène inattendu est survenu. En effet, certaines simulations en optique guidée montraient la capacité de certaines structures à convertir



une polarisation en une autre. Même si cet effet était alors relativement faible, il a été jugé bon d'explorer cette piste. Le résultat de cette étude est contenu dans le chapitre 4, dédié à un véritable composant potentiel pour l'optique guidée, et permettant théoriquement de convertir 50% de l'énergie sur une distance plus courte que la longueur d'onde, et ce à la fréquence d'intérêt du projet.

Enfin, un des obstacles principaux que nous étions amenés à rencontrer dans le projet, et qui avait été identifié relativement tôt, était les pertes énergétiques importantes qu'un métamatériau à base de métaux risquait d'engendrer. Ceci pouvait potentiellement compromettre leur utilisation, et une des solutions envisagées était l'intégration de matériaux actifs autour des structures. Ces matériaux devaient théoriquement présenter un gain permettant de compenser ces pertes, mais restait encore à pouvoir caractériser leur comportement une fois intégrés au métamatériau, à géométrie potentiellement complexe. Encore une fois les simulations FDTD semblaient capable de répondre à ce besoin, mais cela impliquait de savoir simuler de tels matériaux. Ceci a été exploré, et de premiers résultats sont présentés au chapitre 5.

## Conventions utilisées

- La propagation en incidence normale se fait suivant la direction  $-\vec{z}$ . Pour toute structure comportant un substrat, celui-ci est considéré comme de normale  $\vec{z}$ .
- Le plan d'incidence standard est le plan  $(\vec{x}, \vec{z})$ . Ceci implique que dans le cas TE, le champ électromagnétique a pour composantes  $H_x$ ,  $E_y$  et  $H_z$ . De manière similaire, dans le cas TM il aura pour composantes  $E_x$ ,  $H_y$  et  $E_z$ .
- Dans le cas d'un mode guidé, la propagation se fait dans la direction  $\vec{x}$ .
- L'indice d'un milieu est écrit sous forme complexe comme  $n = n' + in''$ . Pareillement, on écrira  $\varepsilon = \varepsilon_0(\varepsilon' + i\varepsilon'')$ . La même convention s'applique à  $\mu$ .
- La transformée de Fourier est définie par

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{i\omega t} dt$$

la transformée de Fourier inverse est alors définie par

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{-i\omega t} d\omega$$

Une conséquence est que l'onde plane s'écrit de la forme

$$\varphi(\vec{r}, t) = \varphi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

et ceci implique que dans le cas d'un matériau dispersif la partie imaginaire de l'indice est positive.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Etat de l'art et outils numériques fondamentaux</b>	<b>1</b>
1.1	Etat de l'art . . . . .	1
1.1.1	Métamatériaux et paramètres effectifs . . . . .	1
1.1.2	Structures périodiques et incidence oblique en FDTD . . . . .	4
1.1.3	FDTD et matériaux actifs . . . . .	6
1.2	FDTD . . . . .	8
1.2.1	Principes de base . . . . .	8
1.2.2	Injection de champ par TFSSF . . . . .	13
1.2.3	La convolution récursive . . . . .	14
1.2.4	Les PML . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Métamatériaux et indice effectif</b>	<b>23</b>
2.1	Indice effectif . . . . .	23
2.2	Extraction des paramètres effectifs . . . . .	24
2.2.1	Optimisation . . . . .	24
2.2.2	Approche . . . . .	26
2.2.3	Continuité . . . . .	27
2.2.4	Algorithme de recherche . . . . .	28
2.2.5	Modèle direct . . . . .	29
2.3	Exemple numérique . . . . .	30
2.3.1	Incidence normale : $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \mu_x, \mu_y$ . . . . .	32
2.3.2	Incidence oblique : $\varepsilon_z$ . . . . .	34

2.3.3	Incidence oblique : $\mu_z$	36
2.3.4	Discussion	37
2.4	Limites et critique du modèle	39
2.4.1	Unicité et existence de la solution	39
2.4.2	L'environnement du métamatériau	41
2.4.3	Réponse asymétrique	43
2.5	Conclusion	46
<b>3</b>	<b>Incidence oblique en FDTD</b>	<b>49</b>
3.1	Méthode itérative	50
3.1.1	Méthode et implémentation	50
3.1.2	Limites	53
3.2	Méthode d'Aminian et Rahmat-Samii	59
3.2.1	Principe	59
3.2.2	Contraintes	62
3.3	Conclusion	64
<b>4</b>	<b>Rotateur de polarisation</b>	<b>67</b>
4.1	Premiers résultats	67
4.2	Structures étudiées	69
4.3	Méthode d'analyse	70
4.4	Cas des structures en L	71
4.5	Cas des nanorods	72
4.6	Cas des nanotriangles	74
4.7	Considérations générales aux structures	78
4.7.1	Origine de la conversion de polarisation	78
4.7.2	Symétries	78
4.7.3	Nombre de cellules élémentaires	79
4.8	Dissymétrie des nanotriangles : propriété secondaire	80
4.9	Conclusion	81

<b>5 Matériaux à gain en FDTD</b>	<b>83</b>
5.1 Modèle	83
5.1.1 Fondamentaux	83
5.1.2 Approximation du champ faible	85
5.1.3 Implémentation	87
5.1.4 Critique du modèle	91
5.2 Essais numériques	92
5.2.1 Matériaux	92
5.2.2 Cavité laser	94
5.2.3 Microdisque	96
5.3 Conclusion	97
<b>Conclusion</b>	<b>99</b>
<b>A Figures supplémentaires et clarifications</b>	<b>111</b>
A.2 Métamatériaux et indice effectif	111
A.2.2 Extraction des paramètres effectifs	111
A.2.3 Exemple numérique	112
A.2.4 Limites et critique du modèle	113
A.4 Rotateur de polarisation	115
A.4.3 Méthode d'analyse	115
A.4.4 Cas des structures en L	115
A.4.6 Cas des nanotriangles	115



# Table des figures

1.1	Grille conventionnellement utilisée en FDTD, une arête du cube définit un pas spatial suivant une des trois directions. . . . .	11
1.2	Représentation graphique des équations de la FDTD . . . . .	12
1.3	Grille FDTD à une dimension utilisée pour illustrer la TFSSF. . . . .	13
2.1	Paramètres de la grille de bâtonnets utilisée comme structure test pour l'algorithme d'extraction des propriétés effectives. . . . .	30
2.2	Spectres de transmission et de réflexion en amplitude dans les cas TE et TM d'une grille de bâtonnets, pour des angles de $0^\circ$ et de $60^\circ$ . . . . .	31
2.3	Composantes du tenseur de permittivité effectif extraites à partir des données en incidence normale de la grille de bâtonnets. . . . .	32
2.4	Composantes du tenseur de perméabilité effectif extraites à partir des données en incidence normale de la grille de bâtonnets. . . . .	33
2.5	Valeur de la fonction objectif pour l'extraction des paramètres effectifs de la grille de bâtonnets dans le cas de l'incidence normale . . . . .	33
2.6	Valeurs de la composante $\varepsilon_z$ des tenseurs effectifs de la grille de nanobâtonnets. . . . .	34
2.7	Valeurs de la fonction objective liée à l'extraction de $\varepsilon_z$ pour la grille de nanobâtonnets. . . . .	35
2.8	Valeurs de la composante $\mu_z$ des tenseurs effectifs de la grille de nanobâtonnets. . . . .	36
2.9	Valeurs de la fonction objective liée à l'extraction de $\mu_z$ pour la grille de nanobâtonnets. . . . .	37



2.10	Comparaison entre les spectres théoriques (obtenus grâce à un indice effectif) et simulés de la réponse optique d'un métamatériau placé sur un substrat d'épaisseur finie. Chaque courbe est obtenue par analyse statistique des erreurs relatives pour chaque point des spectres. Les calculs ont été réalisés pour des épaisseurs de substrat de 200, 100, 70 et 50nm. . . . .	42
2.11	Comparaison entre les spectres théoriques d'absorption de barreaux d'or triangulaires avec la base orientée face ou à l'opposée du champ incident. La différence de comportement entre les deux structures démontre l'importance de la géométrie locale dans la réponse du métamatériau. . . . .	44
2.12	Comparaison similaire à celle de la figure 2.11, mais avec un indice optique différent révélant des différences de comportement encore plus spectaculaires. . . . .	45
3.1	Conditions périodiques appliquées à un pulse gaussien, dans le cas de l'incidence normale et avec un angle d'incidence de 20° . . . . .	50
3.2	Configuration de la fenêtre de calcul pour l'algorithme de Valuev . . . . .	51
3.3	Résumé de l'opération sur les champs . . . . .	52
3.4	Calcul du coefficient de transmission d'une lame l'air avec un angle d'incidence de 45° par la méthode de Valuev. . . . .	54
3.5	Instantanés du champ aux itérations 1800 pour les passes 1 et 15, et à l'itération 2800 pour la passe 15. On peut clairement voir que si la solution cherchée est bien présente, des erreurs le sont aussi et se propagent parallèlement aux PMLs, empêchant de fait leur dispersion. . . . .	54
3.6	Observation de l'amplitude du champ électrique en un point à droite du plan d'injection B, lorsque la fenêtre de calcul comporte ou pas une structure diffuse. Sans cette structure les erreurs de la méthode ont tendance à ne plus disparaître lors des itérations successives. Les différentes passes de l'algorithme sont représentées les unes à la suite des autres, chaque passe comportant 20000 itérations. . . . .	55
3.7	Exemple de bruit numérique apparaissant après un nombre important de passes de l'algorithme . . . . .	57

3.8	Observation de l'amplitude du champ électrique en un point à droite du plan d'injection B, pour trois épaisseurs de PML différentes. Les différentes passes de l'algorithme sont représentées les unes à la suite des autres, chaque passe comportant 20000 itérations. . . . .	58
3.9	Configuration de la fenêtre de calcul pour des conditions périodes basées sur des conditions de Bloch . . . . .	59
3.10	Exemple de résultat calculable grâce à la méthode d'Aminian et Rahmat-Samii. La position en $z$ est arbitraire pour des raisons de centrage, le champ se propageant suivant $-\vec{z}$ . . . . .	62
3.11	Illustration de la contrainte sur l'angle d'incidence. Chaque courbe correspond à une valeur de $k_x$ donnée. . . . .	62
3.12	Exemple de résultat calculable grâce à la méthode d'Aminian et Rahmat-Samii : coefficients de transmission et de réflexion d'une interface air-verre ( $n=1.5$ ) dans le cas TM. . . . .	64
3.13	Coefficients de transmission et de réflexion pour une grille de nanorods dans le cas TM, calculés par la méthode de Aminian et Rahmat-Samii . . . . .	65
4.1	Schéma des structures initialement simulées pour lesquelles la rotation de polarisation a été mise en évidence et rendu des mêmes structures sur une tranche d'un guide 300 nm d'épaisseur. La propagation se fait suivant la direction $\vec{x}$ . . . . .	68
4.2	Spectres de transmission rudimentaires pour les structures définies par la figure 4.1. . . . .	68
4.3	Schéma des cellules élémentaires pour a) les structures en L, b) à base bâtonnets ou c) à base de nanotriangles. Toutes ont une épaisseur de 25 nm. Toutes les mesures sont en nanomètres. . . . .	69
4.4	Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de L dans le cas TE . . . . .	72
4.5	Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de L dans le cas TM . . . . .	72

4.6	Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de nanorods dans le cas TE . . . . .	73
4.7	Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de nanorods dans le cas TM . . . . .	73
4.8	Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base nanotriangles dans le cas TE . . . . .	74
4.9	Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base nanotriangles dans le cas TM . . . . .	74
4.10	Instantanés d'une simulation dans le cas de l'injection TE, pour un guide de 250 nm d'épaisseur et une structure constituée de 5 nanotriangles de long, pour les itérations 120, 200 et 550 . . . . .	76
4.11	Instantanés d'une simulation dans le cas de l'injection TM, pour un guide de 250 nm d'épaisseur et une structure constituée de 5 nanotriangles de long, pour les itérations 220, 300 et 650 . . . . .	77
4.12	Carte de champ autour d'un nanorod sous incidence normale, et diagramme équivalent. . . . .	78
4.13	Efficacité de conversion pour les nanotriangles en fonction du nombre de cellules élémentaires constituant la structure . . . . .	79
4.14	Spectres de transmission pour les nanotriangles (en trait plein) ainsi que leur symétrie par rapport au plan $(\vec{y}, \vec{z})$ (en pointillés) dans les cas TE et TM . . . .	80
5.1	Schéma d'un système à quatre niveaux simplifié . . . . .	85
5.2	Résumé graphique de l'ordre de mise à jour des différentes variables du modèle . .	90
5.3	Exemple de la signature de l'oscillation laser. A gauche, l'amplitude du champ électrique dans la cavité en fonction du temps, avec une puissance de pompe $W_p = 10^{38}$ . A droite, l'évolution des populations des niveaux $N_1$ et $N_2$ en fonction du temps, pour la même simulation. . . . .	94
5.4	Amplitude du vecteur de Poynting à la sortie de la cavité en fonction de la puissance de pompe . . . . .	95

5.5	Exemple de champ électrique dans un microdisque présentant une émission laser. Chaque image est normalisée indépendamment des autres. . . . .	96
5.6	Figure réalisée au début du projet Métaphotonique illustrant son idée et objectif initiaux. . . . .	99
A.1	Schéma des structures utilisés dans le cadre de la section 2.4.3 . . . . .	113
A.2	Schéma de l'expérience de pensée de la section 2.4.3 . . . . .	114



# Liste des tableaux

- 2.1 Influence des composantes des tenseurs sur la réponse optique d'une couche mince anisotrope entre deux milieux isotropes. Le symbole  $\circ$  indique les composantes dont l'effet peut être vu à incidence normale, tandis que  $\times$  est lié aux composantes dont l'effet n'est perceptible qu'à incidence oblique. Les composantes partageant le même symbole doivent être extraites simultanément. . . . . 27



# Chapitre 1

## Etat de l'art et outils numériques fondamentaux

### 1.1 Etat de l'art

#### 1.1.1 Métamatériaux et paramètres effectifs

Depuis deux décennies les métamatériaux ont suscité un intérêt grandissant compte tenu des possibilités spectaculaires qu'ils semblent promettre. Une de ces propriétés les plus marquantes est la possibilité d'obtenir des matériaux à indice optique négatif, dont la vérification expérimentale n'a eue lieu qu'il y a un peu plus de 10 ans [1]. Leurs propriétés étant aisément altérables localement[2], ils sont particulièrement étudiés pour l'optique transformationnelle [3] dont un des exemples iconiques est la fameuse cape d'invisibilité [4], ou à l'opposé des trous noirs électromagnétiques artificiels [5].

Une des grandes problématiques est l'indice effectif d'un métamatériau. L'espoir est que ces paramètres effectifs peuvent nous renseigner sur la physique à l'oeuvre dans ces matériaux, ainsi que nous guider dans leurs applications possibles.

L'approche la plus évidente est de tenter d'obtenir ces paramètres effectifs depuis les données en champ lointain, en inversant les équations de Fresnel, comme pratiqué en ellipsométrie. De nombreuses méthodes analytiques ont donc alors été développées et appliquées, les premiers succès remontant à il y a une dizaine d'années [6, 7, 8] avec l'extraction de perméabilité et



de permittivité effectives de split-rings. Il n'était pas alors encore question de tenseurs effectifs mais des considérations d'impédance étaient utilisées.

Le cas des structures asymétriques (c.f. chapitre 2) a été étudié par Smith et al[9], et ils ont pu constater que les méthodes usuelles de récupération des paramètres effectifs étaient inefficaces. Une version modifiée de leur méthode a alors été définie pour résoudre le problème, et ils arrivent alors à déterminer un indice effectif unique pour la structure au prix d'impédances différentes suivant son orientation.

Menzel et al[10] ont étendu les méthodes d'extraction au cas de l'incidence oblique. Ils ont pu constater l'impact de l'anisotropie sur les paramètres effectifs, qui variaient alors en fonction de l'angle d'incidence. Ceci a été attribué à l'anisotropie du métamatériau considéré, ouvrant la voie à l'extraction de tenseurs. Il s'est avéré possible de trouver une manière analytique d'extraire les composantes de tenseurs effectifs diagonaux, comme présenté par Jiang et al[11]. Ils se sont servis ensuite de cette méthode pour définir par optimisation une structure répondant à certaines contraintes sur les paramètres effectifs.

En 2006 Smith et Pendry ont publié une méthode intéressante principalement destinée aux simulations [12]. Leur idée est de moyenner le champ en intégrant les équations de Maxwell tout autour d'une cellule élémentaire de la structure considérée, par des intégrales de surface pour  $\vec{D}$  et  $\vec{B}$ , et des intégrales de contour pour  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$ . Les composantes des tenseurs moyennés sont alors obtenus par des ratios entre les diverses intégrales. Ils montrent notamment que des tenseurs de couplage entre  $\vec{D}$  et  $\vec{H}$ , et  $\vec{B}$  et  $\vec{E}$  sont à attendre dans le cas de structures comme des split-rings. Leur méthode pose aussi problème dans le cas où le métal de la structure est continu à travers les conditions périodiques, leur solution étant de forcer la discontinuité et compter sur le couplage entre deux cellules pour l'approximer. Lerat et al[13] présentent une idée similaire, mais utilisant des intégrales de volume et de surface.

Chen et al se sont attelés à tenter d'extraire les tenseurs effectifs en inversant les équations de Fresnel par optimisation [14, 15], et ce aussi bien pour les tenseurs de perméabilité et de permittivité usuels que les tenseurs de couplage entre  $\vec{D} \leftrightarrow \vec{H}$  et  $\vec{B} \leftrightarrow \vec{E}$ . Cependant malgré des cas théoriques peu compliqués les résultats obtenus montrent une efficacité toute relative de leur méthode, avec des divergences significatives entre les composantes obtenues et les composantes

théoriques.

### Rotateur de polarisation

L'idée de fabriquer un rotateur de polarisation pour l'optique guidée n'est pas nouvelle, un tel composant comporte après tout une fonction élémentaire très utilisée en optique standard. Il y a deux approches privilégiées, celles utilisant des matériaux diélectriques et celles faisant appel aux effets observés en plasmonique, l'approche plasmonique permettant a priori d'obtenir des structures plus petites, au prix de pertes cependant plus importantes liées à l'utilisation de métal.

Wang et Dai [16] ont montré les résultats théoriques d'un rotateur en silicium opérant à 1.55  $\mu\text{m}$ . Leur idée est simplement de faire une encoche sur le bord du guide pour le rendre asymétrique. Ils obtiennent de bonnes efficacités de conversion grâce aux faibles pertes du silicium par rapport à des structures métalliques, mais leur structure globale a une longueur totale de 7  $\mu\text{m}$  pour 1 de large et d'épaisseur. Dans la même veine, Fukuda et al [17, 18] ont montré l'existence théorique et expérimentale d'une conversion de polarisation en utilisant un guide asymétrique, qui n'est d'autre qu'un guide en silicium normal élargi de manière non symétrique. Les longueurs du guide sont cependant de plusieurs dizaines de  $\mu\text{m}$ .

Du côté de la plasmonique, des études reposant sur l'idée similaire de coupler un guide en silicium à un guide asymétrique en aluminium ont été publiées en 2012. Le principe est le couplage entre les deux guides a tendance à orienter la polarisation suivant un axe traversant chacun des guides. Grâce à l'asymétrie du guide en aluminium, la direction de cet axe varie suivant la position le long du guide. Komatsu et al[19], d'abord, ont montré théoriquement cet effet grâce à un triangle d'aluminium placé au dessus d'un guide de silicium de 400 nm de large pour 220 d'épaisseur. La longueur du triangle a des dimensions du même ordre de grandeur, mais une longueur de l'ordre de 5  $\mu\text{m}$ . Dans le cas de Casper et al[20], le guide en silicium est similaire au cas précédent, mais la structure d'aluminium est une bande tracée en travers du guide, avec une longueur également de 5  $\mu\text{m}$ . Ils ont par la suite publié une démonstration expérimentale [21] de l'effet avec une structure plus raffinée ressemblant alors plus à un triangle. Gao et al[22] ont pris une approche théorique similaire, mais cette fois avec une bande d'argent

posée sur le guide en silicium, mais légèrement désaxée de sorte à rendre l'ensemble asymétrique.

### 1.1.2 Structures périodiques et incidence oblique en FDTD

Calculer la réponse optique de structures périodiques en FDTD sous incidence oblique est un problème qui est toujours un sujet actif de recherche. Fondamentalement, il est lié au fait que bien que les structures soient périodiques, et donc qu'il est raisonnable de les décrire grâce à des conditions périodiques, le champ lui-même ne l'est pas. Ainsi, l'application de conditions périodiques a en général pour effet de rompre la continuité du champ (voir le chapitre 3), introduisant alors nombre d'erreurs dans les simulations.

#### Conditions de Bloch

Très naturellement, les premières méthodes se sont basées sur les résultats de l'électrodynamique classique, à savoir que s'il y a un déphasage dans le champ, alors celui-ci doit être "corrigeable". C'est de ce principe que sont partis Harms et al [23], qui ont choisi de déphaser volontairement le champ incident au niveau des conditions périodiques pour rétablir une continuité effective. Ceci nécessite cependant de décrire le champ de manière complexe, ce qui est fait en utilisant deux simulations parallèles déphasées dans le temps. Cette approche limite cependant les simulations à une longueur d'onde et un seul angle à la fois.

Reprenant l'idée d'utiliser des conditions de Bloch, la méthode d'Aminian et Rahmat-Samii [24] va plus loin en tentant d'y introduire le caractère multifréquentiel. Ceci est accompli en définissant le champ incident sous forme intégrale, en acceptant qu'il puisse contenir une large variété d'angles d'incidence différents. La méthode est pour ainsi dire celle de Harms, mais avec un champ incident particulier.

#### Altération du temps

Un second groupe de méthodes tente d'éliminer le problème des discontinuités en agissant directement ou indirectement sur le temps lui-même. En effet, si l'on arrive à fournir à la simulations des informations concernant son propre futur, il est alors possible de rétablir la continuité du champ.

Les travaux de Holter et Steyskal tout d'abord présentent une idée originale, quoique peu naturelle, qui consiste à transformer le problème temporel en problème spatial [25, 26, 27]. Le principe est de “cacher” la frontière de la fenêtre de calcul qui aurait besoin d'informations venant du futur. Pour ce faire, ils ont choisi de translater les structures, à la vitesse de la lumière, à l'intérieur de la grille et dans un sens opposé à la propagation du champ. Ceci a pour effet d'éloigner de la simulation la frontière qui pose problème et les erreurs associées.

Les travaux de Lee[28, 29] sont une variante de ceci. Ils s'appuient sur le fait qu'il y a un certain délai entre le temps que prend le champ incident pour passer d'une frontière des conditions périodiques à une autre, et le temps que met le front des erreurs (lié à la discontinuité) pour parcourir la même distance. Ainsi, pendant un temps  $\tau = L(\sin \vartheta - 1)/c$ , avec  $\vartheta$  l'angle d'incidence et  $L$  la largeur d'une cellule élémentaire, la simulation crée une information non erronée. Il faut ensuite rétablir la simulation dans un état antérieur et lui fournir cette information, la simulation totale s'effectuant au final par “sauts de puce” d'avant en arrière pour finir par décaler l'apparition du front des erreurs hors de la simulation. L'ordre de grandeur du décalage temporel est cependant typiquement de quelques dizaines de  $\Delta t$ , et un grand nombre d'opérations peut alors être nécessaire.

Valuev[30] adopte une approche différente. Il choisit lui aussi de faire des retours dans le temps, mais uniquement à la fin de la simulation complète. Le champ est enregistré continuellement aux interfaces d'une cellule élémentaire, puis est réinjecté dans la simulation suivante. Par itérations successives les erreurs finissent alors par disparaître et la continuité aux bords de la fenêtre de calcul est rétablie. Mais ceci repose sur l'hypothèse implicite que la structure étudiée permet de diffuser suffisamment ces erreurs, sans quoi elles risquent de se propager presque intactes à l'itération suivante (c.f. chapitre 3).

## Transformation du champ

Les transformations de champ ont pour but de rendre implicite l'application des conditions de Bloch aux frontières de la fenêtre de calcul. Pour ce faire, de nouvelles variables sont définies,

du type :

$$\vec{P} = \vec{E}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\vec{Q} = \vec{H}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Ces variables sont continues avec de simple conditions périodiques, que ce soit en incidence normale ou en incidence oblique, et le fait de les insérer dans les équations de Maxwell fait alors porter les conditions de Bloch par celles-ci. Cette idée a été introduite par Veysoglu [31], mais a pour conséquence d'introduire une dépendance fréquentielle dans les équations.

Il est possible de retransformer cette dépendance fréquentielle en dérivées temporelles, mais cette opération couple alors directement dans les mêmes équations les dérivées temporelles de  $P$  et  $Q$ . Un nouveau type de discrétisation est alors nécessaire, et il a été montré par Kao et Atkins[32] que quatre grilles imbriquées pouvaient être utilisées.

Une autre manière efficace de traiter le problème est celle exposée par Roden et al[33], qui consiste à cliver les équations en introduisant de nouvelles variables, c'est-à-dire  $P = P_a + P_b$  et  $Q = Q_a + Q_b$ . Ceci a pour effet de multiplier le nombre d'équations et de variables à mettre à jour, soit  $P$ ,  $P_a$ ,  $Q$ ,  $Q_a$  et  $Q_b$ , mais permet alors d'éliminer la dépendance fréquentielle des équations. La possibilité d'étendre cette méthode aux matériaux dispersifs a plus tard été démontrée par Baida et Belkhir[34] en utilisant une équation auxiliaire, mais nécessite encore une fois d'introduire de nouvelles variables dont le nombre varie d'un facteur trois à six par rapport à ce qui serait nécessaire pour décrire le matériau dans le cas de l'incidence normale.

### 1.1.3 FDTD et matériaux actifs

La volonté d'étudier les matériaux actifs en FDTD n'est arrivée que relativement tard. En effet, il aura d'abord été nécessaire de voir passer les avancées sur les matériaux dispersifs "habituels". Les premiers essais de matériau à gain reposaient sur des modèles analytiques, tels que dans l'étude de Hagness[35] où le gain était assuré par une fonction donnant une conductivité négative au matériau. Les effets de saturation étaient alors ajoutés de manière "artificielle" sur le modèle. Quoi que simple, celui-ci permettait néanmoins de simuler une cavité laser.

Les premières études sur des systèmes à niveau étaient apparues il y a 20 ans, tels que

dans les travaux de Ziolkowski et al[36], mais ce sont les travaux de Nagra et York [37] qui ont réellement constitué le point de départ des simulations de matériaux à gain basés sur des équations de populations. S'appuyant principalement sur un modèle semi-classique exposé par Siegman [38], la grande avancée de ce type de méthode est de pouvoir faire simplement émerger des équations des phénomènes tels que la saturation ou le pompage optique local. Ils ont réussi à démontrer la présence non seulement de gain dans leurs simulations, mais aussi d'émission laser.

Basés sur ceci, les travaux de Chang et Taflove [39] se sont attelés à décrire les atomes de manière plus rigoureuse, apportant notamment dans le modèle le principe d'exclusion de Pauli. Contemporainement à cela, un important travail a été effectué par Huang. D'abord dans une thèse de Master [40], qui a été suivie par une série d'articles [41, 42]. Son modèle final est plus détaillé encore que celui de Chang et Taflove, et est destiné à simuler rigoureusement les semi-conducteurs.

## 1.2 FDTD

### 1.2.1 Principes de base

Les mathématiques ayant leurs limites, il est très difficile voire impossible de trouver une solution exacte à la grande majorité des problèmes physiques concrets. C'est pourquoi depuis leur apparition les ordinateurs ont été mis à profit pour résoudre numériquement ces problèmes par l'intermédiaire de simulations. Aussi, de nombreux algorithmes ont été mis au point, chacun adapté à un ou plusieurs domaines de la physique.

L'étude de l'interaction du champ électromagnétique avec la matière, en particulier, utile aussi bien en recherche fondamentale que dans l'industrie ou les applications militaires, a vu apparaître en 1966 une méthode particulière qui est depuis restée extrêmement efficace et très utilisée. C'est la FDTD (Finite-Difference Time-Domain), développée à l'origine par Yee [43].

La méthode consiste à résoudre numériquement deux des quatre équations de Maxwell

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad ; \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \quad (1.1)$$

Avec

$$\vec{D} = \hat{\epsilon} \vec{E} \quad ; \quad \vec{B} = \hat{\mu} \vec{H} \quad (1.2)$$

$\hat{\epsilon}$  et  $\hat{\mu}$  étant les tenseurs de permittivité et de perméabilité du milieu.

Ces équations sont ensuite discrétisées par l'intermédiaire de différences centrées. Si on prend les développements de Taylor :

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (1.3)$$

et

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (1.4)$$

On obtient :

$$f(x+h) - f(x-h) \approx 2hf'(x) \Rightarrow f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (1.5)$$

Ceci implique qu'en prenant un pas réduit de moitié :

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \frac{h}{2}) - f(x - \frac{h}{2})}{h} \quad (1.6)$$

Le passage à la version discrète nécessite la création d'un système de repérage discret. Si on définit une ligne sur laquelle sont repérés les points  $i, i+1, \dots$ , séparés entre eux par une distance fixe  $\Delta x$ , alors on peut dire que la dérivée d'une fonction en un point intermédiaire  $i + \frac{1}{2}$  peut être approximée par :

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2}} \approx \frac{F_{i+1} - F_i}{\Delta x} \quad (1.7)$$

C'est ce type de discrétisation s'appuyant sur ces points intermédiaires qui est appliqué aux équations de Maxwell précédentes. Ici les trois directions spatiales  $x, y, z$  sont représentées par les trois indices  $i, j, k$ , et la coordonnée temporelle  $t$  est repérée par l'indice  $n$ . Dans la notation conventionnelle l'indice temporel est placé en haut alors que les indices spatiaux sont placés en bas, de la forme :

$$E_z|_{i,j,k}^n$$

Appliquons ceci à l'équation :

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} + J_z \quad (1.8)$$

En se plaçant au temps  $t + \frac{1}{2}$ , soit au point  $n + \frac{1}{2}$ , elle devient :

$$\frac{\partial H_y|^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} - \frac{\partial H_x|^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} = \epsilon \left. \frac{\partial E_z}{\partial t} \right|^{n+\frac{1}{2}} + J_z|^{n+\frac{1}{2}} \quad (1.9)$$



Si on discrétise la dérivée temporelle on obtient alors :

$$\frac{\partial H_y|^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} - \frac{\partial H_x|^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} = \epsilon \frac{E_z|^{n+\frac{1}{2}} - E_z|^n}{\Delta t} + J_z|^{n+\frac{1}{2}} \quad (1.10)$$

En se plaçant ensuite par exemple au point de l'espace discret  $i, j, k$  :

$$\left. \frac{\partial H_y|^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} \right|_{i,j,k} - \left. \frac{\partial H_x|^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} \right|_{i,j,k} = \epsilon_{i,j,k} \frac{E_z|_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - E_z|_{i,j,k}^n}{\Delta t} + J_z|_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} \quad (1.11)$$

La discrétisation des dérivées spatiales donne alors :

$$\frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} = \epsilon_{i,j,k} \frac{E_z|_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - E_z|_{i,j,k}^n}{\Delta t} + J_z|_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} \quad (1.12)$$

On obtient par conséquent une équation de mise à jour pour la composante  $z$  du champ électrique :

$$E_z|_{i,j,k}^{n+1} = E_z|_{i,j,k}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon_{i,j,k}} \left( \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - J_z|_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (1.13)$$

On peut constater ici l'apparition d'indices demi-entiers, aussi bien dans le temps que dans l'espace, ce qui amène deux spécificités de la FDTD :

1. Les solutions des équations de mise à jour des champs  $E$  et  $H$  sont décalées dans le temps, ce qui implique que d'un point de vue numérique les champs  $E$  et  $H$  doivent être calculés l'un après l'autre. D'autre part, ceci peut poser certains problèmes. Par exemple  $J_z$  est habituellement défini par  $J_z = \sigma E_z$ , ce qui impliquerait que  $J_z$  au temps  $n + \frac{1}{2}$  nécessiterait que  $E_z$  soit aussi calculé au même temps. Ce problème est généralement résolu en utilisant des interpolations du type :

$$E_z|^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(E_z|^{n+1} + E_z|^n)$$

2. Les indices spatiaux demi-entiers nécessitent une "grille" particulière, qui est en fait constituée de six grilles tridimensionnelles, une pour chaque composante des champs  $E$

et  $H$ , décalées les unes par rapport aux autres de demi pas spatiaux. Cette grille est représentée par la figure 1.1 et a été définie par Yee lors de son premier article sur la FDTD.

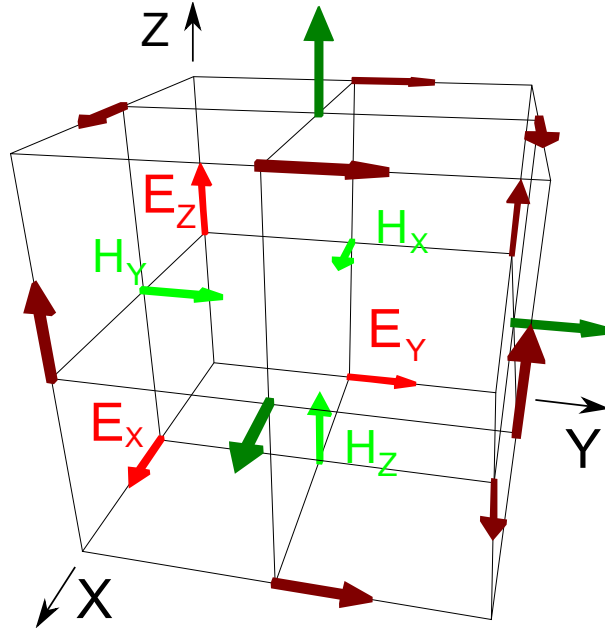


FIGURE 1.1 – Grille conventionnellement utilisée en FDTD, une arête du cube définit un pas spatial suivant une des trois directions.

Les équations de la FDTD sont des équations explicites, c'est-à-dire que les équations de mise à jour ne possèdent qu'un seul terme inconnu, qui est celui que l'on cherche à calculer.

### Exemple unidimensionnel

Pour illustrer ceci, prenons par exemple le cas unidimensionnel, avec une réduction des équations de la FDTD à une forme simplifiée correspondant à la propagation d'une onde plane se déplaçant suivant  $\vec{x}$ , et dont le champ électrique est polarisé suivant  $z$ . Ces équations s'écrivent de la manière suivante :

$$E_z|_i^{n+1} = E_z|_i^n + \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} \left( H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (1.14)$$

$$H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\mu\Delta x} (E_z|_{i+1}^{n+1} - E_z|_i^{n+1}) \quad (1.15)$$

Graphiquement, ces équations peuvent se représenter sous la forme de la figure 1.2

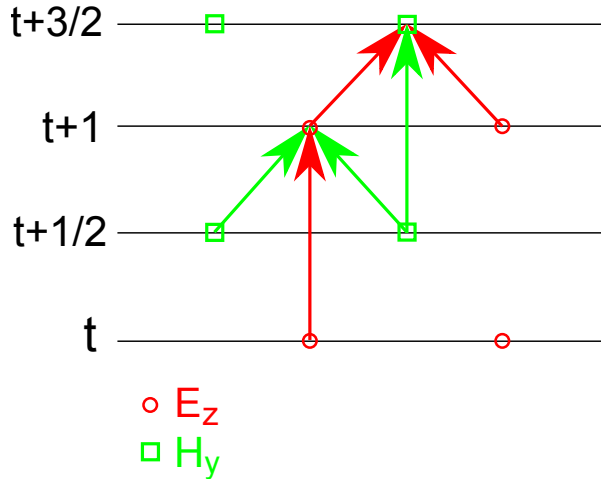


FIGURE 1.2 – Représentation graphique des équations de la FDTD

### Stabilité

Les équations de la FDTD sont les versions discrétisées des équations de Maxwell, qui utilisent des variables continues. Par conséquent, les équations de la FDTD sont des approximations des vraies équations, et sont donc sujettes à des erreurs liées à leur caractère discret. Ces erreurs ne sont malheureusement pas toujours négligeables et amènent à ce qu'on appelle la condition de stabilité des équations de la FDTD, dite condition de Courant-Friedrich-Lewy [44]. Elle s'exprime par :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{c\sqrt{N}} \quad (1.16)$$

Dans le cas où  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ ,  $c$  représente la vitesse de la lumière et  $N$  la dimensionnalité du problème.

Dans l'hypothèse où cette condition ne serait pas respectée, la simulation serait corrompue par une divergence numérique, liée à une croissance exponentielle des erreurs de calcul. Ceci a

pour effet de fortement contraindre le pas temporel en fonction du pas spatial. Autrement dit, une bonne précision spatiale impose d'augmenter la précision temporelle, même si cette précision supplémentaire n'est pas requise pour décrire le champ qui nous intéresse. Cette contrainte amène à une augmentation non négligeable des temps de calculs, et reste un obstacle à certains types de simulations.

### 1.2.2 Injection de champ par TFSF

L'ensemble des simulations nécessitent un champ incident pour qu'il y ait une quelconque propagation. Une méthode relativement efficace en FDTD pour introduire un champ dans la fenêtre de calcul est d'utiliser la formulation TFSF (Total Field/Scattered Field) [45]. L'intérêt

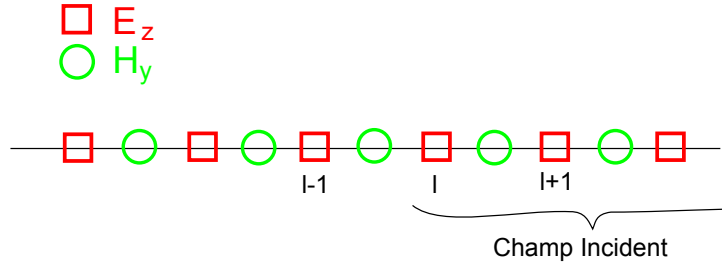


FIGURE 1.3 – Grille FDTD à une dimension utilisée pour illustrer la TFSF.

principal de la méthode est d'introduire le champ au niveau d'une interface fictive, que l'on peut alors placer au plus près des structures à étudier. Prenons l'exemple de la FDTD classique dans le cas unidimensionnel (1.14) (1.15), et plaçons cette frontière au point  $l$ , comme sur la figure 1.3, de telle sorte à ce que le champ sera introduit pour les points d'indices supérieurs ou égaux à  $l$ . Le champ incident étant inexistant dans l'autre partie de la grille, il faut donc que le champ  $E$  calculé en  $l$  reçoive une contribution supplémentaire, correspondant au champ incident, et qui n'est pas fournie par le champ  $H$  en  $l - \frac{1}{2}$ . Ainsi, on aura :

$$E_z|_l^{n+1} = E_z|_l^n + \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} \left( H_y|_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \left( H_y|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + H_{y_{\text{inc}}}|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \right) \quad (1.17)$$

Ce qui se traduit donc par une équation de mise à jour modifiée :

$$E_z|_l^{n+1} = E_z|_l^n + \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} \left( H_y|_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} H_{y_{\text{inc}}}|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (1.18)$$

Cette équation permet donc d'introduire le champ incident pour les points de la grille d'indice supérieur à  $l$ , par l'intermédiaire du champ  $E$  en  $l$ . Cependant, le champ  $H$  en  $l - \frac{1}{2}$  n'est pas censé propager le champ incident, ainsi l'équation (1.15) doit être modifiée pour éliminer la contribution précédente, soit :

$$H_y|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = H_y|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\mu\Delta x} \left( (E_z|_l^{n+1} - E_{z_{\text{inc}}}|_l^{n+1}) - E_z|_{l-1}^{n+1} \right) \quad (1.19)$$

Soit l'équation de mise à jour :

$$H_y|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = H_y|_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\mu\Delta x} \left( E_z|_l^{n+1} - E_z|_{l-1}^{n+1} \right) - \frac{\Delta t}{\mu\Delta x} E_{z_{\text{inc}}}|_l^{n+1} \quad (1.20)$$

Les deux équations ici présentées permettent alors d'introduire le champ incident à partir de la limite définie. La procédure est aisément généralisable à deux ou trois dimensions[46].

### 1.2.3 La convolution récursive

Telle qu'elle a été initialement définie, la FDTD ne permettait de traiter que des matériaux à indice optique constant, c'est-à-dire ne dépendant pas de la fréquence de l'onde incidente. Cela ne constitue cependant qu'un cas très particulier, bien loin du comportement réel des matériaux dont on a habituellement l'usage.

Ceci a conduit les chercheurs à développer de nouvelles méthodes pour pouvoir correctement décrire les matériaux dit dispersifs, dont les paramètres optiques dépendent de la longueur d'onde. Une de ces méthodes, la Convolution Récursive, a été publiée par Raymond J. Luebbers en 1990 [47]. Dans la formulation initiale de la FDTD,  $D$  est simplement remplacé par  $\epsilon E$  ce qui conduit à ce problème d'indice optique constant, Luebbers a donc choisi de modifier cette étape afin d'utiliser une définition plus générale de  $D$ . Ainsi  $D$  est défini par :

$$D(t) = \epsilon_0\epsilon_\infty E(t) + \epsilon_0 \int_0^t E(t-\tau)\chi(\tau)d\tau \quad (1.21)$$

Si on passe en notation discrète, en notant que  $t = n\Delta t$ , ceci devient :

$$D|n = \epsilon_0 \epsilon_\infty E|n + \epsilon_0 \int_0^{n\Delta t} E(n\Delta t - \tau) \chi(\tau) d\tau \quad (1.22)$$

Une approximation est ici faite, on considère en effet que le champ est constant entre deux instant séparés par  $\Delta t$ . Ceci permet de réécrire l'expression précédente sous la forme :

$$D|n = \epsilon_0 \epsilon_\infty E|n + \epsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} E|^{n-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi(\tau) d\tau \quad (1.23)$$

De même, on peut écrire que :

$$D|^{n+1} = \epsilon_0 \epsilon_\infty E|^{n+1} + \epsilon_0 \sum_{m=0}^n E|^{n+1-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi(\tau) d\tau \quad (1.24)$$

On peut extraire de la somme précédente la partie correspondant à  $m = 0$ , d'où :

$$D|^{n+1} = \epsilon_0 \epsilon_\infty E|^{n+1} + \epsilon_0 E|^{n+1} \int_0^{\Delta t} \chi(\tau) d\tau + \epsilon_0 \sum_{m=1}^n E|^{n+1-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi(\tau) d\tau \quad (1.25)$$

Si on décale les indices de la somme restante, on obtient alors :

$$D|^{n+1} = \epsilon_0 \epsilon_\infty E|^{n+1} + \epsilon_0 E|^{n+1} \int_0^{\Delta t} \chi(\tau) d\tau + \epsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} E|^{n-m} \int_{(m+1)\Delta t}^{(m+2)\Delta t} \chi(\tau) d\tau \quad (1.26)$$

Ainsi, si on dicrétise la dérivée de  $D$  par rapport au temps dans (1.1) :

$$\left. \frac{\partial D}{\partial t} \right|^{n+\frac{1}{2}} = \frac{D|^{n+1} - D|n}{\Delta t} \quad (1.27)$$

Avec :

$$\begin{aligned} D|^{n+1} - D|n &= \epsilon_0 \epsilon_\infty (E|^{n+1} - E|n) + \epsilon_0 E|^{n+1} \int_0^{\Delta t} \chi(\tau) d\tau + \epsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} E|^{n-m} \\ &\quad \times \left( \int_{(m+1)\Delta t}^{(m+2)\Delta t} \chi(\tau) d\tau - \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi(\tau) d\tau \right) \end{aligned} \quad (1.28)$$

Arrivé à ce niveau, Luebbers définit deux nouvelles notation dans le but d'alléger les écritures

des équations :

$$\chi_m = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi(\tau) d\tau \quad \Delta\chi_m = \chi_m - \chi_{m+1} \quad (1.29)$$

Par conséquent :

$$D|^{n+1} - D|^n = \epsilon_0(\epsilon_\infty + \chi_0)E|^{n+1} - \epsilon_0\epsilon_\infty E|^n - \epsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} E|^{n-m} \Delta\chi_m \quad (1.30)$$

Il convient de noter que ceci est valable pour un point particulier de l'espace, ainsi dans une grille représentant un milieu hétérogène, les matériaux varieront, et donc les  $\chi$  et leurs variantes dépendront du point considéré. L'expression précédente est maintenant prête à être réinjectée dans les équations de Maxwell pour former les équations de la FDTD en tenant compte des matériaux dispersifs.

Si on reprend l'exemple unidimensionnel habituel sans avoir pris en compte la simplification de la FDTD classique :

$$D_z|_i^{n+1} - D_z|_i^n = \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) - \Delta t J_z|_i^{n+\frac{1}{2}} \quad (1.31)$$

$$H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\mu\Delta x} \left( E_z|_{i+1}^{n+1} - E_z|_i^{n+1} \right) \quad (1.32)$$

On obtient alors après réorganisation de l'équation et en prenant  $J|^{n+\frac{1}{2}} = \sigma E|^{n+1}$  :

$$E_z|_i^{n+1} = \frac{\epsilon_\infty(i)}{\epsilon_\infty(i) + \chi_0(i) + \frac{\sigma(i)\Delta t}{\epsilon_0}} E|_i^n + \frac{1}{\epsilon_\infty(i) + \chi_0(i) + \frac{\sigma(i)\Delta t}{\epsilon_0}} \sum_{m=0}^{n-1} E_z|_i^{n-m} \Delta\chi_m(i) + \frac{\Delta t}{\epsilon_0(\epsilon_\infty(i) + \chi_0(i) + \frac{\sigma(i)\Delta t}{\epsilon_0})\Delta x} \left( H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (1.33)$$

L'équation est presque prête à être utilisée, mais un terme pose problème pour le calcul. En effet, la somme impliquerait de stocker le champ électrique pour toutes les itérations précédentes, ce qui nécessiterait des capacités mémoire importantes, et une augmentation du temps de calcul à chaque nouvelle itération. Pour circonvenir le problème, Luebbers définit des accumulateurs

récursifs du type :

$$\psi_z|_i^n = \sum_{m=0}^{n-1} E_z|_i^{n-m} \Delta \chi_m(i) \quad (1.34)$$

Pour la plupart des matériaux dispersifs utilisés, il est possible de mettre  $\chi_m$  sous la forme :

$$\chi_m = \Re \left( \alpha e^{\beta \Delta t} \right) \quad (1.35)$$

Cette propriété particulière permet de définir une relation de récurrence pour  $\psi$ . Bien entendu c'est une contrainte sur le type de modèle de dispersion utilisable, mais elle reste suffisamment générale pour couvrir au moins les modèles de dispersion les plus importants. Ainsi on peut définir la relation de récurrence :

$$\psi_z|_i^n = E_z|_i^n \Delta \chi_0(i) + C_{rec} \psi_z|_i^{n-1} \quad (1.36)$$

$C_{rec}$  dépendant alors du modèle de dispersion choisi. Il est ainsi possible de mettre les équations sous la forme :

$$E_z|_i^{n+1} = C_1 E|_i^n + C_2 \left( H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) + C_3 \psi_z|_i^n \quad (1.37)$$

$$\psi_z|_i^n = E_z|_i^n \Delta \chi_0(i) + C_{rec} \psi_z|_i^{n-1} \quad (1.38)$$

$$H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = H_y|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} \left( E_z|_{i+1}^{n+1} - E_z|_i^{n+1} \right) \quad (1.39)$$

Avec :

$$C_1 = \frac{\epsilon_\infty(i)}{\epsilon_\infty(i) + \chi_0(i) + \frac{\sigma(i)\Delta t}{\epsilon_0}} \quad (1.40)$$



$$C_2 = \frac{\Delta t}{\epsilon_0(\epsilon_\infty(i) + \chi_0(i) + \frac{\sigma(i)\Delta t}{\epsilon_0})\Delta x} \quad (1.41)$$

$$C_3 = \frac{1}{\epsilon_\infty(i) + \chi_0(i) + \frac{\sigma(i)\Delta t}{\epsilon_0}} \quad (1.42)$$

Entre chaque itération, les accumulateurs récursifs devront être mis à jour, et stockés aux points où un matériau dispersif est présent. Ces équations peuvent être généralisées à l'ensemble des composantes du champ électrique, mais aussi aux composantes du champ magnétique [48].

La convolution récursive est la méthode principale qui a été utilisée pour les simulations impliquant l'utilisation de métaux.

#### 1.2.4 Les PML

Les conditions de frontière les plus importantes sont sans conteste les conditions absorbantes. En effet de nombreux problèmes se situant dans l'espace libre ou des milieux de tailles infinies, il est nécessaire de pouvoir reproduire ce que ceux-ci impliquent, c'est-à-dire l'absence de réflexions provenant des bords de la fenêtre de calcul. Comme on ne peut pas prendre une grille de taille infinie pour effectuer la simulation, il est nécessaire d'utiliser une voie détournée, constituée par les conditions absorbantes.

Celles-ci ont pour but d'absorber tout champ s'approchant du bord de la fenêtre de calcul, de sorte à ce qu'aucune réflexion ne soit possible. L'une de ces techniques est la CPML (Convolutional Perfectly Matched Layer) [46][49], qui est une évolution de l'UPML (Uniaxial Perfectly Matched Layer) et dont le principe est de créer un matériau artificiel anisotrope fortement absorbant au bord de la fenêtre de calcul. C'est cette technique qui a été utilisée dans la totalité des simulations. Sans redémontrer la méthode, il convient ici de détailler les équations importantes.

Tout comme la convolution récursive, la CPML fait appel à des accumulateurs récursifs. Si

on prend l'exemple de l'équation :

$$E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \left( \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right) \quad (1.43)$$

Celle-ci est modifiée par la méthode pour s'écrire :

$$E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \left( \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_x(i)\Delta x} + \Psi_{E_z,x}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_y(j)\Delta y} - \Psi_{E_z,y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right) \quad (1.44)$$

Avec :

$$\Psi_{E_z,x}|_{i,j,k}^n = b_x \Psi_{E_z,x}|_{i,j,k}^{n-1} + c_x \left( \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right) \quad (1.45)$$

$$\Psi_{E_z,y}|_{i,j,k}^n = b_y \Psi_{E_z,y}|_{i,j,k}^{n-1} + c_y \left( \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right) \quad (1.46)$$

De manière strictement identique, on peut écrire :

$$H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{\Delta t}{\mu_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}} \left( \frac{E_z|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_x(i)\Delta x} + \Psi_{H_y,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n - \frac{E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{n+\frac{1}{2}} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_z(k)\Delta z} - \Psi_{H_y,z}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n \right) \quad (1.47)$$

La mise à jour des accumulateurs se faisant comme précédemment en permuttant les indices et  $H$  avec  $E$ . Il convient alors de définir les termes introduits pour la mise à jour des accumulateurs :

$$b_\nu(i, j, k) = e^{-\left(\frac{\sigma_\nu(i,j,k)}{\kappa_\nu(i,j,k)} + \alpha_\nu(i,j,k)\right) \frac{\Delta t}{\epsilon_0}} \quad (1.48)$$

$$c_\nu(i, j, k) = \frac{\sigma_\nu}{\sigma_\nu \kappa_\nu + \kappa_\nu^2 \alpha_\nu} (b_\nu(i, j, k) - 1) \quad (1.49)$$

Les paramètres  $\kappa_\nu$ ,  $\sigma_\nu$  et  $\alpha_\nu$  sont les paramètres qui constituent la PML. Ils varient uniquement dans la direction  $\nu$ . Prenons l'exemple de la direction  $x$ . Si on choisit à la PML une épaisseur  $d$  du bord de la fenêtre de calcul, alors on peut écrire :

$$\kappa_x(x) = 1 + (\kappa_{xmax} - 1) \left(\frac{x}{d}\right)^m \quad (1.50)$$

$$\sigma_x(x) = \left(\frac{x}{d}\right)^m \sigma_{xmax} \quad (1.51)$$

$$\alpha_x(x) = \alpha_{xmax} \left(\frac{d-x}{d}\right)^{ma} \quad (1.52)$$

Ainsi, les paramètres  $\kappa$  et  $\sigma$  vont croître vers leur valeur maximale au fur et à mesure que l'on s'approche de la limite de la grille, tandis que  $\alpha$  va décroître. Dans les publications et les explications de Taflove, on peut constater que les valeurs des différents paramètres sont généralement :

$$\sigma_{max} = \sigma_{opt} = \frac{0.8(m+1)}{\eta\Delta} \quad m = 3 \quad (1.53)$$

$$\kappa_{max} = 15 \quad (1.54)$$

$$\alpha_{max} = 0.2 \quad ma = 1 \quad (1.55)$$

Où  $\Delta$  est le plus petit pas spatial, et  $\eta$  l'impédance optique.

### **Conclusion**

Les quelques méthodes décrites précédemment ne constituent que le strict minimum nécessaire pour simuler la réponse optique de structures métalliques en incidence normale. Les méthodes destinées au calcul de cette réponse sous incidence oblique ou à la simulation de matériaux à gain seront exposées dans les chapitres [3](#) et [5](#).



## Chapitre 2

# Métamatériaux et indice effectif

Dans ce projet mais aussi de manière plus générale, l'étude des métamatériaux n'est qu'une étape, le but final étant leur intégration dans des systèmes plus complexes. Cependant, il pourrait s'avérer utile de pouvoir considérer ces métamatériaux comme des blocs de base de propriétés connues, ce qui permettrait alors de simplifier la description du système. Cependant extraire ces propriétés n'est pas chose aisée, et nombreux sont les articles consacrés à ce sujet.

### 2.1 Indice effectif

L'approche effective part de l'hypothèse que la réponse optique d'un métamatériau peut être considérée en champ lointain comme provenant d'un matériau homogène se comportant de manière "classique" en optique linéaire. Cela signifie que dans ce milieu hypothétique, les équations suivantes sont valables :

$$\begin{cases} \vec{D} = \hat{\epsilon}\vec{E} + \hat{\zeta}\vec{H} \\ \vec{B} = \hat{\mu}\vec{H} + \hat{\xi}\vec{E} \end{cases} \quad (2.1)$$

où  $\hat{\epsilon}$ ,  $\hat{\zeta}$ ,  $\hat{\mu}$  et  $\hat{\xi}$  sont les tenseurs déterminant les propriétés optiques du matériau. Puisque ces tenseurs servent à représenter le métamatériau, on considère alors qu'ils en sont les tenseurs effectifs.

Dans les équations précédentes l'existence des tenseurs de couplage  $\hat{\zeta}$  et  $\hat{\xi}$  est prise en compte,

mais dans le cas qui nous intéresse plus particulièrement nous faisons l'hypothèse qu'ils sont nuls, ce qui permet de ne plus avoir à considérer que les tenseurs de permittivité et perméabilité, de la forme

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_{yy} & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

A cause de la structuration particulière des métamatériaux il est nécessaire de considérer ces tenseurs comme anisotropes. Par ailleurs, nos investigations se sont principalement penchées sur des métamatériaux à base de métaux, ce qui signifie qu'il est nécessaire de considérer chaque composante de ces tenseurs comme potentiellement complexes. Autrement dit, pour décrire un métamatériau donné il sera nécessaire de récupérer en tout 36 composantes scalaires réelles.

## 2.2 Extraction des paramètres effectifs

L'objectif principal de notre étude était de trouver une approche permettant d'extraire les paramètres effectifs d'un métamatériau réel, et donc de travailler à partir de spectres expérimentaux. Cependant, les seules mesures expérimentales fiables que l'on peut raisonnablement espérer obtenir sur des structures telles que les métamatériaux planaires sont des mesures en champ lointain, c'est-à-dire les coefficients de transmission et de réflexion.

Le problème est alors de trouver pour des coefficients de réflexion et de transmission donnés les valeurs des composantes des tenseurs effectifs correspondants. En l'essence, cela revient à résoudre le "problème inverse" et peut être vu comme une technique avancée d'ellipsométrie. L'approche suivie a alors été de traiter ce problème comme un problème d'optimisation avec une résolution numérique.

### 2.2.1 Optimisation

Pour illustrer le principe de l'optimisation, simplifions le problème en supposant que le matériau est isotrope. Le problème est alors de déterminer  $\epsilon$  et  $\mu$  qui sont alors de simples nombres complexes. Il y a donc 4 inconnues réelles :  $\epsilon_r$ ,  $\epsilon_i$ ,  $\mu_r$  et  $\mu_i$ , et l'espace de recherche

(l'espace des solutions) est donc  $\mathbb{R}^4$ . Un coefficient de réflexion et un de transmission suffisent alors pour évaluer le nombre d'inconnues et inverser le problème. Nous appellerons ces deux coefficients  $t_M$  et  $r_M$ .

Pour traiter ce problème par optimisation, il faut d'abord définir une fonction objectif. Celle-ci doit répondre à une propriété fondamentale : elle s'applique sur l'espace de recherche (ici  $\mathbb{R}^4$ ) et l'envoie sur  $\mathbb{R}$ , de sorte que son minimum global soit positionné sur la solution réelle du problème. Ainsi, trouver la solution au problème d'optimisation revient à trouver ce minimum.

Dans notre cas, comme les données du problème sont  $r_M$  et  $t_M$ , le minimum de la fonction se trouvera pour  $r(\varepsilon, \mu) = r_M$  et  $t(\varepsilon, \mu) = t_M$ . Ainsi, une manière "naturelle" de définir la fonction objectif sera

$$\mathcal{O}(\varepsilon, \mu) = |r(\varepsilon, \mu) - r_M| + |t(\varepsilon, \mu) - t_M| \quad (2.3)$$

Bien entendu, cette fonction n'est en aucun cas unique, une autre manière de la définir pourrait être

$$\mathcal{O}(\varepsilon, \mu) = \left| \frac{r(\varepsilon, \mu) - r_M}{r_M} \right| + \left| \frac{t(\varepsilon, \mu) - t_M}{t_M} \right| \quad (2.4)$$

ce qui peut cependant poser problème dans le cas où  $r_M = 0$  et/ou  $t_M = 0$ . La fonction objectif peut aussi servir à définir certaines contraintes, par exemple si on voulait interdire toutes les solutions où  $\mu_r$  serait négatif, il suffit juste de modifier  $\mathcal{O}$  de la manière suivante :

$$\mathcal{O}(\varepsilon, \mu) = |r(\varepsilon, \mu) - r_M| + |t(\varepsilon, \mu) - t_M| + (\mu_r < 0)K \quad (2.5)$$

où  $K$  est une constante positive, idéalement très grande, et où  $<$  dénote l'opération booléenne qui vaut 1 si elle est vraie et 0 sinon.

Si on accepte la possibilité qu'il puisse y avoir des rotations de polarisation à l'intérieur du métamatériau, alors il existe pour un angle donné quatre coefficients de réflexion, et quatre coefficients de transmission :  $r_{\text{TE} \rightarrow \text{TE}}$ ,  $r_{\text{TE} \rightarrow \text{TM}}$ ,  $r_{\text{TM} \rightarrow \text{TE}}$ ,  $r_{\text{TM} \rightarrow \text{TM}}$ ,  $t_{\text{TE} \rightarrow \text{TE}}$ ,  $t_{\text{TE} \rightarrow \text{TM}}$ ,  $t_{\text{TM} \rightarrow \text{TE}}$  et  $t_{\text{TM} \rightarrow \text{TM}}$ . Ces coefficients étant complexes, on a donc accès à 16 grandeurs pour un angle.



Ceci est moins de la moitié du nombre total d'inconnues (36), ce qui implique qu'il faudra les données d'au moins trois angles différents pour pouvoir espérer déterminer totalement le problème. Si on fait par contre l'hypothèse que le matériau est anisotrope diagonal (et donc sans conversion de polarisation), alors le nombre d'inconnues se réduit à 12, et deux angles devraient alors suffire à déterminer entièrement le problème.

Il faut noter cependant que les mesures nécessaires restent difficiles à mettre en place expérimentalement. Il faut en effet non seulement mesurer avec précision les amplitudes des coefficients mais aussi leurs phases, ce qui requiert un montage interférométrique, et ce pour toutes les combinaisons de polarisations possibles en entrée comme en sortie.

### 2.2.2 Approche

D'un point de vue numérique, il y a plusieurs manières d'aborder le problème. La première est simplement de fournir à l'algorithme de recherche l'ensemble des données à disposition. Celui-ci cherchera donc l'optimum sur toutes les données, et pour toutes les inconnues. La seconde méthode est de faire l'optimisation par étapes.

En effet, les composantes des tenseurs effectifs ne vont pas toutes contribuer à la réponse du matériau de la même manière. Dans le cadre des métasurfaces deux cas particuliers se dégagent : l'illumination à incidence normale, et l'illumination à angle rasant. Le second cas ne va pas nous servir beaucoup, mais le cas de l'incidence normale est particulièrement intéressant. A incidence normale,  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  restent parallèles au substrat, ce qui leur interdit toute interaction avec quatre des neuf composantes de chaque tenseur effectif, comme le résume le tableau 2.1. Ainsi, à incidence normale, seules les composantes  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{xy}$ ,  $\varepsilon_{yx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\mu_{xx}$ ,  $\mu_{xy}$ ,  $\mu_{yx}$  et  $\mu_{yy}$  doivent être déterminées, soit en tout 16 inconnues réelles, ce qui est exactement le nombre de grandeurs connues pour un angle d'incidence donné ( $0^\circ$  en l'occurrence). Ainsi, l'approche que nous avons suivie a été de faire l'optimisation en deux étapes ;

1.  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{xy}$ ,  $\varepsilon_{yx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\mu_{xx}$ ,  $\mu_{xy}$ ,  $\mu_{yx}$  et  $\mu_{yy}$  sont déterminés par optimisation pour l'angle d'incidence nul
2. Le reste des inconnues est déterminé par optimisation, en utilisant des données à incidence oblique. Pour ce faire, les composantes des tenseurs calculées à l'étape précédente

Excitation	TE		TM	
	TE	TM	TE	TM
$\varepsilon_{xx}$				○
$\varepsilon_{xy}$		○		
$\varepsilon_{xz}$				×
$\varepsilon_{yx}$			○	
$\varepsilon_{yy}$	○			
$\varepsilon_{yz}$			×	
$\varepsilon_{zx}$				×
$\varepsilon_{zy}$		×		
$\varepsilon_{zz}$				×
$\mu_{xx}$	○			
$\mu_{xy}$			○	
$\mu_{xz}$	×			
$\mu_{yx}$		○		
$\mu_{yy}$				○
$\mu_{yz}$		×		
$\mu_{zx}$	×			
$\mu_{zy}$			×	
$\mu_{zz}$	×			

TABLE 2.1 – Influence des composantes des tenseurs sur la réponse optique d’une couche mince anisotrope entre deux milieux isotropes. Le symbole ○ indique les composantes dont l’effet peut être vu à incidence normale, tandis que × est lié aux composantes dont l’effet n’est perceptible qu’à incidence oblique. Les composantes partageant le même symbole doivent être extraites simultanément.

sont alors considérées comme connues et utilisées. Cette étape nécessite cependant l’apport de données de deux angles différents de 0.

L’intérêt principal de cette méthode est de diminuer la taille de l’espace de recherche. Lors de l’étape 1 celui-ci ne comprend au maximum que 16 dimensions, puis 20 pour l’étape 2. Ceci permet d’accélérer la vitesse de calcul en rendant chaque solution, et donc la solution globale, plus simple à trouver.

### 2.2.3 Continuité

Une propriété supplémentaire des métamatériaux à base métallique vient par ailleurs aider la détermination de la solution. En effet, il arrive assez fréquemment que l’effet qui nous intéresse soit lié à une résonance. Ces résonances sont en général localisées dans le spectre, et loin de celles-ci le métamatériau est pour ainsi dire transparent pour le champ incident, et celui-ci

n'est plus principalement affecté que par le substrat. Ainsi, loin de la résonance, le métamatériau peut être considéré comme un matériau isotrope, non magnétique et d'indice proche de 1 (comparativement aux valeurs à la résonance, des précisions supplémentaires se trouvent au [A.2.2](#)). Ceci permet de restreindre l'espace de recherche initial.

Si on fait l'hypothèse que les composantes des tenseurs effectifs sont des fonctions continues de la fréquence, alors une solution au problème inverse trouvée pour une longueur d'onde  $\lambda$  se trouvera proche dans l'espace des solutions de celle pour  $\lambda + \Delta\lambda$ . Ainsi, si les données contiennent suffisamment de points pour observer cette continuité il est possible de trouver l'ensemble des solutions en "remontant" le spectre.

En appliquant ceci à la propriété précédente, il devient alors possible de trouver les solutions pour l'ensemble du spectre à partir d'une solution pour les grandes longueurs d'onde. Cela permet encore une fois de trouver plus rapidement le minimum local de la fonction objectif. Cependant, cela peut poser certains problèmes lorsque l'indice effectif varie de manière importante, et ceci peut alors nécessiter d'augmenter le nombre de points dans les spectres, soit lors des simulations, soit a posteriori par interpolation des résultats, ce qui est aussi applicable aux mesures réelles.

#### 2.2.4 Algorithme de recherche

Par simplicité, l'algorithme de recherche principalement utilisé ici est un simple échantillonnage de type Monte-Carlo, et fonctionne comme suit : la zone de recherche est d'abord définie, et  $N$  points sont pris aléatoirement sur la fonction à minimiser. Parmi ces points, celui pour lequel la fonction objectif a la valeur la plus faible est déterminé, et l'espace de recherche est modifié de sorte à le centrer autour de ce point, et à ce que la zone totale de recherche soit plus étroite que précédemment. Ensuite,  $N$  nouveaux points sont à nouveau pris dans la nouvelle zone de recherche, et ainsi de suite jusqu'à ce que celle-ci soit réduite au delà d'un critère d'arrêt.

L'intérêt principal de cet algorithme est sa simplicité d'implémentation et sa robustesse. Par ailleurs, une fois un minimum local trouvé, il permet de déterminer avec une grande précision la valeur de ce minimum, ce qui permet de se dispenser de méthodes annexes telles que la descente du gradient. Il a cependant deux défauts : le premier est que si le minimum que l'on

cherche à déterminer se trouve en dehors de la zone de recherche initiale, il est très improbable que la méthode puisse le trouver. Le second défaut est un temps de calcul potentiellement plus important puisque qu'il doit explorer l'ensemble de l'espace de recherche au lieu de simplement suivre un chemin "naturel" vers le minimum global.

Bien entendu, ce n'est pas la seule méthode utilisable, et nos premiers essais étaient basés sur un algorithme de recherche évolutionniste. De manière générale, l'ensemble des méthodes développées pour les problèmes d'optimisation sont applicables.

### 2.2.5 Modèle direct

La fonction objectif définie dans l'équation 2.3 nécessite de savoir calculer aussi le problème direct, c'est-à-dire la réponse optique d'une couche mince ayant des tenseurs de perméabilité et permittivité quelconques. Dans le cas général, la réponse d'une couche mince anisotrope fait appel à un formalisme matriciel complexe, telle l'approche de Berreman [50]. Le modèle de Berreman a été implémenté dans le code, mais reste relativement lourd au niveau calcul puisqu'il fait appel à des exponentielles de matrices.

Si on fait l'approximation que les tenseurs sont diagonaux, alors il est possible de trouver analytiquement les coefficients de transmission et de réflexion  $r$  et  $t$  grâce aux équations suivantes :

$$r' = \frac{\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\gamma_1 - \gamma_2} + \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{\gamma_2 - \gamma_3} e^{-2\beta_2 h}}{1 + \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\gamma_1 - \gamma_2} \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{\gamma_2 - \gamma_3} e^{-2\beta_2 h}} \quad ; \quad t' = \frac{\frac{2\gamma_1}{\gamma_1 - \gamma_2} \frac{2\gamma_2}{\gamma_2 - \gamma_3} e^{-\beta_2 h}}{1 + \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\gamma_1 - \gamma_2} \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{\gamma_2 - \gamma_3} e^{-2\beta_2 h}} \quad (2.6)$$

Avec dans le cas TE :

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu_x}{\mu_z} (k_x^2 - \omega^2 \varepsilon_y \mu_z)} \quad ; \quad \gamma = \frac{i\beta}{\omega \mu_x} \quad (2.7)$$

$$r = r' \quad ; \quad t = t' \quad (2.8)$$

et dans le cas TM :

$$\beta = \sqrt{\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z}(k_x^2 - \omega^2\mu_y\varepsilon_z)} \quad ; \quad \gamma = \frac{-i\beta}{\omega\varepsilon_x} \quad (2.9)$$

$$r = -r' \quad ; \quad t = \frac{\eta_3}{\eta_1}t' \quad (2.10)$$

avec  $h$  l'épaisseur de la couche  $\eta = \sqrt{\mu/\varepsilon}$  l'impédance du milieu.

Que l'on fasse ou non l'approximation que les tenseurs sont diagonaux, les équations sont extrêmement non-linéaires, ce qui justifie l'inversion par recherche stochastique.

### 2.3 Exemple numérique

Pour illustrer ceci, voici un exemple d'extraction des tenseurs effectifs réalisé sur une couche mince de bâtonnets d'or. Tel que représenté sur la figure 2.1, cette couche est constituée d'un réseau carré d'un pas de  $300\text{nm}$ , pour des bâtonnets de  $130\text{nm}$  de long,  $35\text{nm}$  de large et  $20\text{nm}$  d'épaisseur (pour plus de précisions, voir le A.2.3).

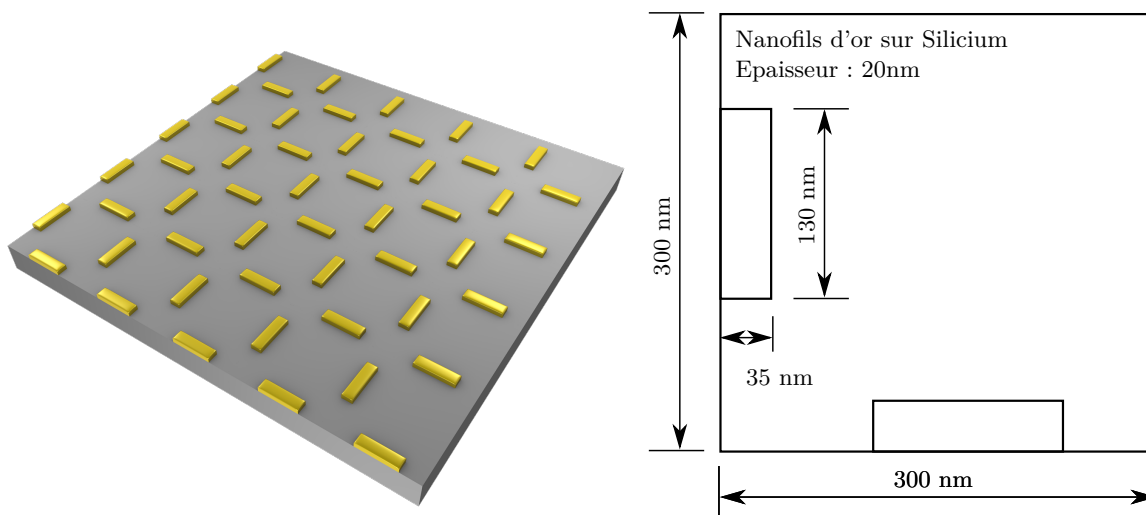


FIGURE 2.1 – Paramètres de la grille de bâtonnets utilisée comme structure test pour l'algorithme d'extraction des propriétés effectives.

La structure possède un substrat en silicium, défini par un indice de 3.4 dans les simulations, et est résonante autour de  $1.55\mu m$ . Comme elle possède une symétrie de rotation de  $\pi/2$  autour de l'axe  $z$ , on peut faire l'approximation que  $\varepsilon_x = \varepsilon_y$ , et  $\mu_x = \mu_y$ . Par ailleurs, les simulations ont montré que la réponse de la structure ne présentait pas de conversion de polarisation, ce qui implique que les tenseurs effectifs sont diagonaux. Compte tenu de ces propriétés, ce métamatériau peut donc être considéré comme un matériau biréfringent uniaxe.

Au final, les tenseurs effectifs peuvent donc être totalement déterminés grâce aux données de simplement deux angles différents, les spectres correspondant étant représentés par la figure 2.2. Les deux angles choisis ont été  $0^\circ$  (incidence normale) et  $60^\circ$ . Dans le cas de l'incidence

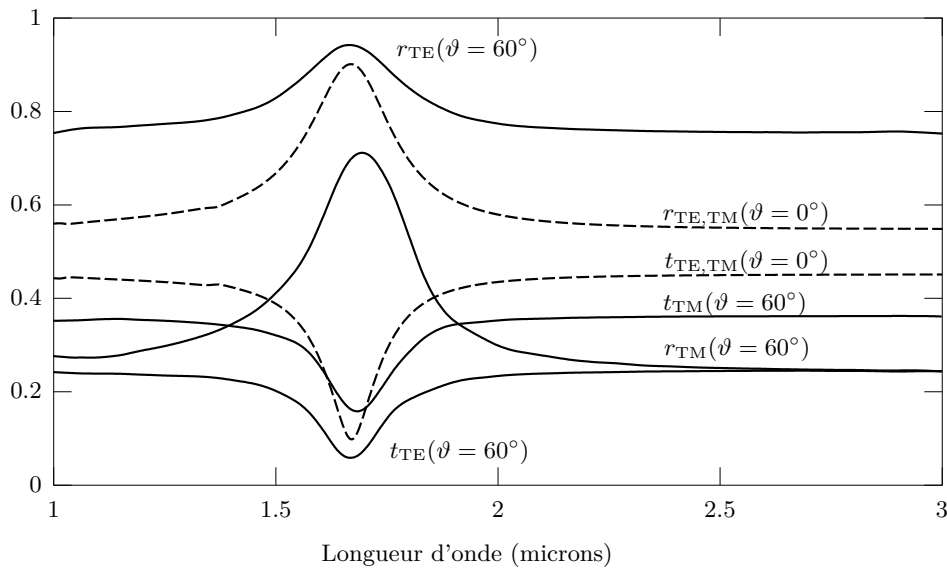


FIGURE 2.2 – Spectres de transmission et de réflexion en amplitude dans les cas TE et TM d'une grille de bâtonnets, pour des angles de  $0^\circ$  et de  $60^\circ$ .

oblique, les calculs ont été réalisés grâce la méthode d'Aminian et Rahmat-Samii (voir 3.2), ce qui a nécessité l'utilisation de 20 simulations différentes dans chaque cas et l'interpolation des résultats. L'extraction des paramètres effectifs a été faite en supposant que la couche mince équivalente avait la même épaisseur que les structures.

### 2.3.1 Incidence normale : $\varepsilon_x$ , $\varepsilon_y$ , $\mu_x$ , $\mu_y$

La première étape de la méthode est d'utiliser les données à incidence normale pour calculer une partie des tenseurs. Dans le cas de la structure qui nous intéresse cela revient juste à calculer  $\varepsilon_x$ ,  $\varepsilon_y$ ,  $\mu_x$  et  $\mu_y$ . Les résultats appartenant au tenseur de permittivité sont contenus dans la figure 2.3, tandis que ceux appartenant au tenseur de perméabilité sont présentés sur la figure 2.4.

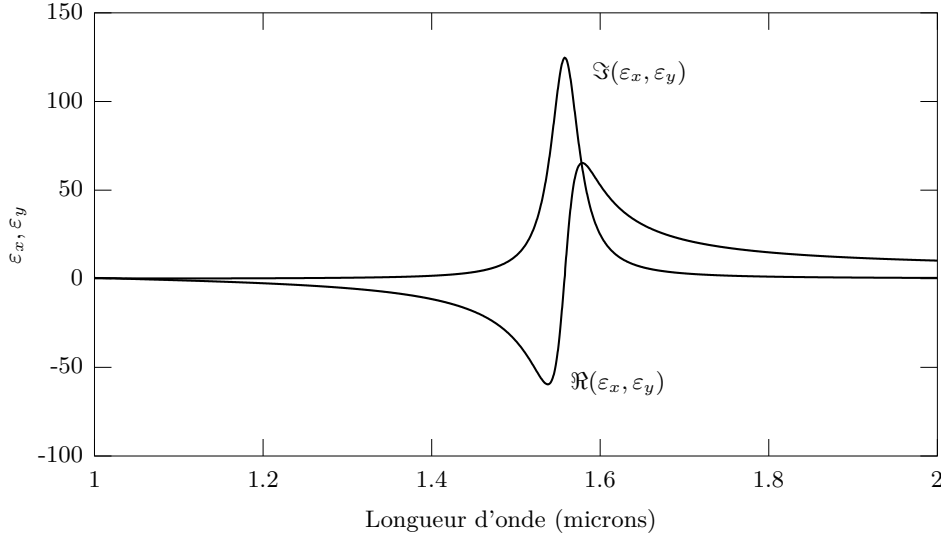


FIGURE 2.3 – Composantes du tenseur de permittivité effective extraites à partir des données en incidence normale de la grille de bâtonnets.

Les résultats indiquent un très fort comportement lorentzien (voir A.2.3) autour de la résonance, avec un indice équivalent de l'ordre de  $8(1 + i)$ . Au niveau magnétique, l'impact de la résonance est faible mais présent, avec un  $\mu$  restant globalement égal à 1 sauf pour une petite perturbation à la position de la résonance. Il faut noter cependant que la partie imaginaire de  $\mu$  devenant légèrement négative est une chose peu commune dans les matériaux en général, mais est relativement connue dans le cas des métamatériaux et est parfois appelée anti-résonance magnétique [7].

Pour ce qui est de la validité des résultats, il faut se référer à la fonction objectif. Celle-ci a été définie de la même manière que l'équation 2.3, et ses valeurs sont présentées dans la figure 2.5. On peut constater que globalement la valeur de la fonction objectif est extrêmement faible et tourne autour de  $10^{-6}$ . Compte tenu du bruit numérique dans les simulations (et se retrouvant donc dans les résultats), on peut donc dire qu'il y a bien ici une solution exacte au

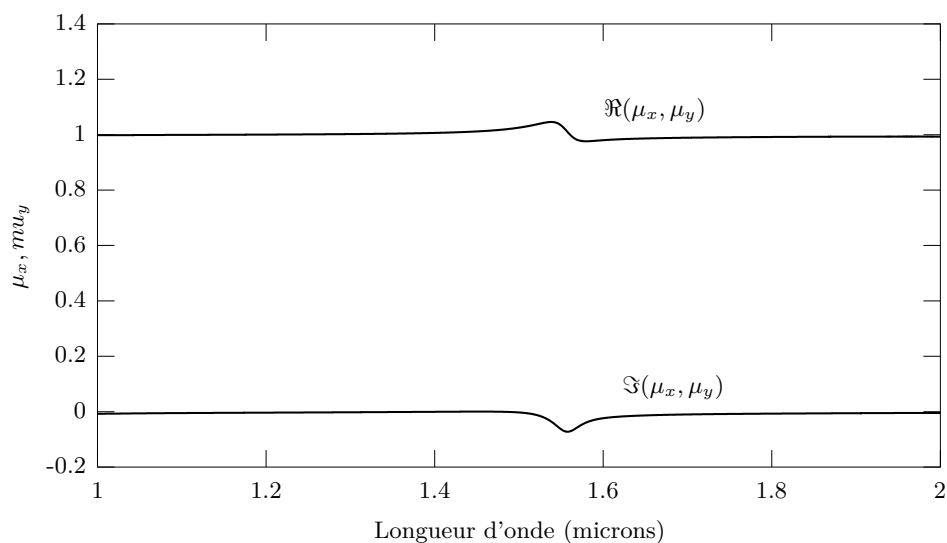


FIGURE 2.4 – Composantes du tenseur de perméabilité effectif extraites à partir des données en incidence normale de la grille de bâtonnets.

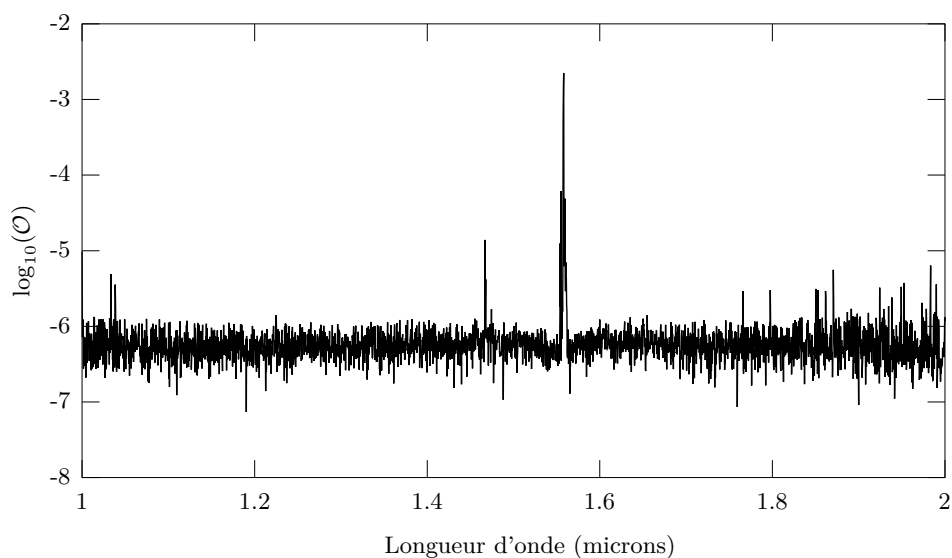


FIGURE 2.5 – Valeur de la fonction objectif pour l'extraction des paramètres effectifs de la grille de bâtonnets dans le cas de l'incidence normale

problème d'inversion dans ce cas, et que l'on en est aussi proche que possible. Seuls deux à trois points du spectre ont des valeurs de fonction objectif plus élevées, et correspondent aux points où  $\Re(\varepsilon) \approx 0$ . Ce ne sont que de simples erreurs numériques liées à la sensibilité de la méthode dans ce cas là.



### 2.3.2 Incidence oblique : $\varepsilon_z$

Une fois l'étape 1 effectuée, il ne reste plus qu'à extraire les composantes dont l'impact n'est visible qu'en incidence oblique. Commençons d'abord par  $\varepsilon_z$  qui est extractible à partir de la réponse en polarisation TM. Les résultats sont visibles dans la figure 2.6. Ce que l'on peut

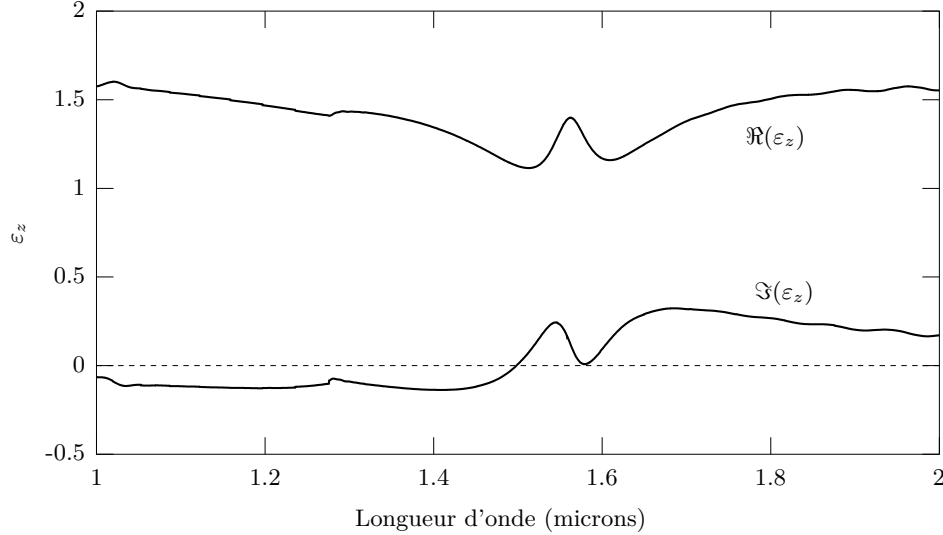


FIGURE 2.6 – Valeurs de la composante  $\varepsilon_z$  des tenseurs effectifs de la grille de nanobâtonnets.

tout d'abord constater est que les valeurs de  $\varepsilon_z$  sont relativement faibles et proches de 1. Il n'y a pas de grande résonance évidente comme pour  $\varepsilon_x$ , ce qui se comprend très bien lorsque l'on considère la géométrie de la structure. L'épaisseur de celle-ci étant relativement fine, une résonance équivalente à la précédente n'apparaîtrait que pour des longueurs d'onde beaucoup plus courtes.

Cependant, la forme globale de  $\varepsilon_z$  n'est certainement pas celle d'une constante, et on peut constater des variations qui semblent liées à la résonance de  $\varepsilon_x$ . La partie réelle fluctue autour de 1 et a une forme globalement symétrique autour de la longueur d'onde de résonance, tandis que la partie imaginaire a une forme plutôt anti-symétrique et fluctue autour de 0.

La partie imaginaire de  $\varepsilon_z$  présente une anomalie dans le sens qu'elle devient (quoique faiblement) négative sur une large gamme de fréquences. Ceci implique que dans le cas où le champ incident serait si rasant que l'impact de  $\varepsilon_x$  serait négligeable, alors l'indice effectif de la couche aurait une partie imaginaire négative, ce qui impliquerait une création d'énergie dans le

matériau. Ceci est bien entendu impossible.

On est en droit de se demander si la solution est réellement valide, et pour se faire il est alors nécessaire de consulter les valeurs de la fonction objectif (figure 2.7). On peut constater que comparativement à l'extraction précédente, la solution est moins bonne. Cependant, la fonction objective n'a pas des valeurs très élevées, ce qui signifie que l'erreur sur la solution reste faible, notamment dans le cas où  $\Im(\varepsilon_z) < 0$ . Les erreurs ne deviennent notables qu'autour de la fréquence de résonance de la structure, et tournent autour la dizaine de pourcents en erreur relative sur la transmission, ce qui s'explique par la faiblesse de celle-ci à la résonance (des précisions supplémentaires se trouvent au A.2.3).

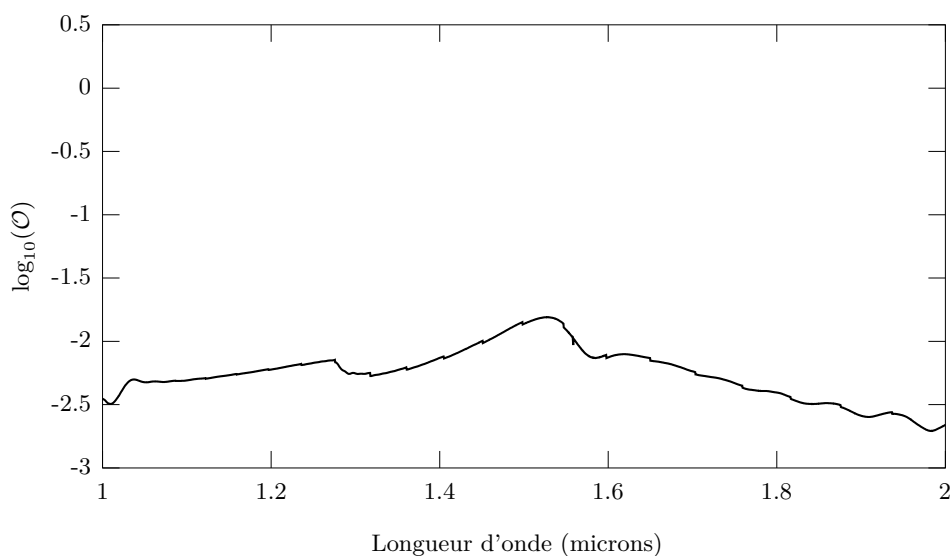


FIGURE 2.7 – Valeurs de la fonction objective liée à l'extraction de  $\varepsilon_z$  pour la grille de nanobâtonnets.

### 2.3.3 Incidence oblique : $\mu_z$

De la même manière que précédemment, on peut extraire la composante  $\mu_z$  des données, à partir du cas TE cette fois-ci et les résultats sont présentés dans la figure 2.8. De manière globale, la valeur de  $\mu_z$  tourne autour de 1, et les remarques sur les propriétés de symétrie de  $\varepsilon_z$  restent grossièrement vraies pour  $\mu_z$ . Cependant, la forme générale est encore une fois plutôt unique.

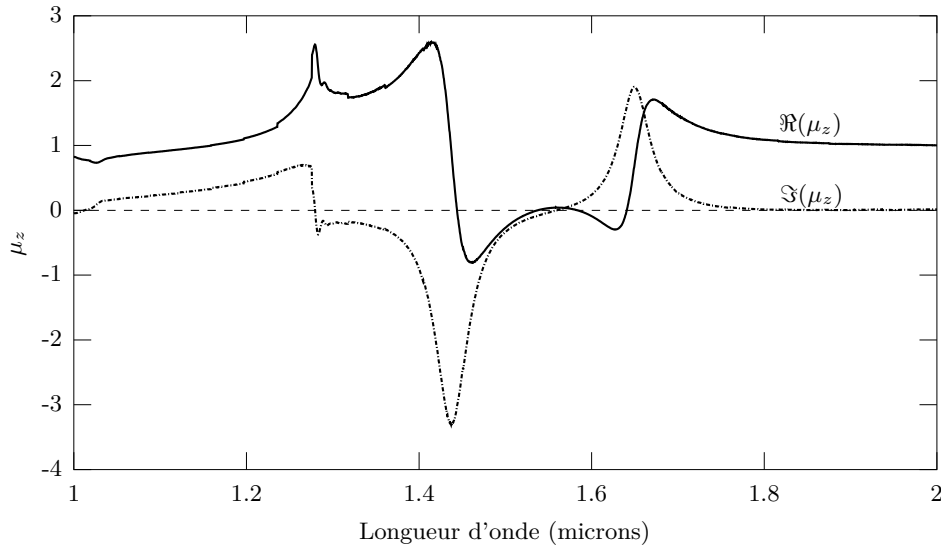


FIGURE 2.8 – Valeurs de la composante  $\mu_z$  des tenseurs effectifs de la grille de nanobatônnets.

Premièrement, les fluctuations sont relativement importantes avec une amplitude de 3. Ensuite, la partie imaginaire est négative par endroits, même si l'impact n'est pas aussi grave que précédemment puisque la multiplication par  $\varepsilon_y$  pour obtenir un indice effectif devrait permettre de garantir la conservation de l'énergie. Enfin, partie réelle et partie imaginaire deviennent presque simultanément nulles autour de la résonance.

Ceci étant, la solution est encore meilleure que dans le cas de  $\varepsilon_z$ , en effet si on se réfère aux valeurs de la fonction objectif (figure 2.9), celles-ci ne dépassent pas  $10^{-3}$ , ce qui ici garantit une très faible erreur relative sur les coefficients de transmission et de réflexion. La solution pourrait alors difficilement être meilleure.

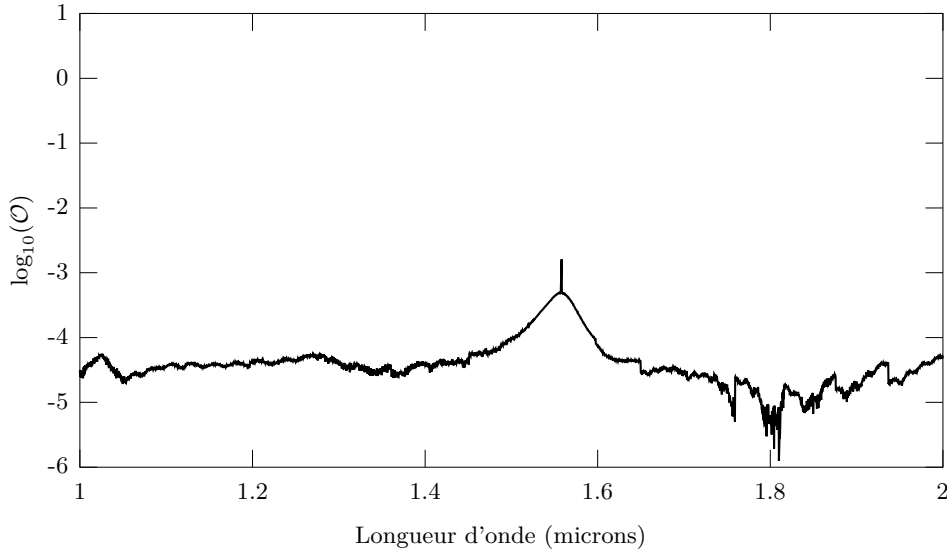


FIGURE 2.9 – Valeurs de la fonction objective liée à l’extraction de  $\mu_z$  pour la grille de nanobâtonnets.

### 2.3.4 Discussion

D’un point de vue purement numérique, les résultats ont tout pour être satisfaisants. L’algorithme fonctionne particulièrement bien dans le cas de l’incidence normale, et reste efficace dans le cas de l’incidence oblique. Cependant, il est bon de s’interroger sur la nature des résultats.

En effet, autant  $\varepsilon_z$  que  $\mu_z$  comportent des valeurs pour le moins inhabituelles. Le fait même qu’ils connaissent des variations importantes est une anomalie, puisque celles-ci semblent liées à une résonance qui ne semble pas pouvoir être portée par la géométrie suivant l’axe  $\vec{z}$ . Au contraire, les variations de  $\varepsilon_z$  et  $\mu_z$ , semblent n’être qu’un artefact de la résonance sur les autres composantes.

Une preuve indirecte de ceci a été observée avec une version moins aboutie du programme d’inversion. A l’époque, les solutions pour  $\varepsilon_x$  étaient cherchées avec moins de rigueur, de sorte qu’un bruit lié à la méthode stochastique perdurait dans les résultats, bien qu’étant extrêmement faible. Ce bruit sur  $\varepsilon_x$  avait pour effet d’induire des variations relativement importantes de  $\varepsilon_z$  et  $\mu_z$  par rapport aux résultats présentés ici. Cependant, si on essaie de forcer  $\varepsilon_z$  et  $\mu_z$  à devenir des constantes les erreurs deviennent relativement importantes, et donc même si leur forme semble intimement liée à celle de  $\varepsilon_x$  elles n’ont pas véritablement d’autre choix que d’avoir les

valeurs trouvées ici.

Peut-être le problème se situe-t-il dans les hypothèses de départ. L'hypothèse des tenseurs diagonaux semble justifiée face à l'absence de conversion de polarisation, mais l'épaisseur effective a été choisie de manière arbitraire. Peut-être qu'une épaisseur plus importante aurait été préférable, comme semble l'indiquer les développements dans 2.4.2. Ou peut-être que le nombre même de tenseurs nécessaires est-il erroné, et que des relations de la forme 2.1 sont nécessaires, indiquant une physique très complexe dans des structures au contraire très simples. Ces pistes restent encore à poursuivre.

## 2.4 Limites et critique du modèle

Le modèle de l'indice effectif est intellectuellement satisfaisant. Il permet de réduire la complexité du problème en traitant le métamatériau comme un matériau "classique", mais avec un indice optique potentiellement étrange. Cependant, il est nécessaire de se pencher sur la validité de cette approche. Il y a plusieurs problèmes qui viennent en effet limiter le champ d'application du modèle, et que nous allons détailler dans ce qui suit.

### 2.4.1 Unicité et existence de la solution

Un problème critique de la recherche d'un indice effectif porte sur l'unicité de la solution trouvée. Le problème peut survenir dans les cas les plus simples. Prenons par exemple le cas d'une couche mince homogène d'indice réel  $n_2$ , illuminée en incidence normale, et placée entre deux milieux d'indices  $n_1$  et  $n_3$ . La réponse optique de cette couche est calculable analytiquement, et est donnée par :

$$r(n_2) = \frac{r_{12} + r_{23}e^{2i\beta}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2i\beta}} \quad ; \quad t(n_2) = \frac{t_{12}t_{23}e^{i\beta}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2i\beta}} \quad ; \quad (2.11)$$

avec

$$r_{12} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad ; \quad r_{23} = \frac{n_2 - n_3}{n_2 + n_3} \quad (2.12)$$

$$t_{12} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad ; \quad t_{23} = \frac{2n_2}{n_2 + n_3} \quad (2.13)$$

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_2 h \quad (2.14)$$

Dans le cas d'un métamatériau, on s'attend et on cherche à obtenir des propriétés inhabi-

tuelles telles que des indices négatifs. Or, dans le cas présent il est possible de démontrer que  $r(-n_2) = r(n_2)$ , et  $t(-n_2) = t(n_2)$ , ce qui signifie que si on avait fait une recherche sur  $n_2$  par optimisation,  $-n_2$  serait aussi un zéro de la fonction objectif. Et donc la propriété étonnante “indice négatif” est ici tout à fait acceptable même si elle n’a strictement aucun impact sur la réponse optique.

Même si le cas précédent n’est surtout qu’un exercice de style, avec des conditions très particulières, cela n’implique pas que les solutions soient uniques dans le cas général, et donc toute recherche numérique des propriétés effectives d’une métasurface court le risque de se trouver dans un cas où plusieurs solutions existent. La méthode exposée précédemment qui consiste à suivre le minimum local depuis les grandes longueurs d’onde n’est ici d’aucun secours, car rien ne garantit qu’il n’y aura pas de “bifurcation” dans la fonction objectif, chaque branche menant potentiellement à des solutions complètement différentes.

Tout ceci n’est cependant valable que lorsque la fonction objectif possède un ou plusieurs vrais zéros. En pratique, ce ne peut être que rarement le cas si les données proviennent de simulations ou de mesures expérimentales car les imperfections des mesures ou des calculs ne pourront pas forcément être décrites exactement par un indice effectif. Dans ce cas le minimum correspondant à ce qui aurait dû être un zéro de la fonction aura bien sûr une valeur très faible, et le problème d’unicité décrit précédemment s’appliquera alors à l’existence ou non d’autres minima de valeur équivalente.

Il reste un cas qui peut encore survenir, c’est celui où le modèle effectif ou les hypothèses de départ choisies ne permettent pas de trouver un minimum proche de 0, mais seulement une valeur non négligeable par rapport aux coefficients de réflexion et de transmission. Dans ce cas la solution trouvée au problème d’inversion ne sera alors qu’une grossière approximation. S’il n’y a pas de minimum global, mais plusieurs minima locaux de valeurs équivalentes, alors il n’y a pas lieu de préférer l’un à un autre et le modèle effectif devient alors purement descriptif, les propriétés effectives ne pouvant plus alors nous renseigner fiablement sur la physique du problème.

Cette situation a été observée lors de divers essais numériques avant l’implémentation des conditions de continuité (décrites en 2.2.3), avec l’algorithme sautant d’un minimum à un autre,

parfois simplement à cause de légères fluctuations dans les données. Si de simples erreurs numériques peuvent permettre d’observer ce phénomène, alors il est à craindre que la méthode elle-même ne soit pas viable si elle se trouvait appliquée à des mesures expérimentales, celles-ci contenant toujours des erreurs de mesure. Il peut même être envisageable d’observer un cas où, à cause des fluctuations, le meilleur minimum correspondra à une physique totalement anormale compte tenu du problème réel, le “vrai” minimum n’ayant pas été choisi par l’algorithme, ayant une valeur légèrement plus importante que le précédent. Qui plus est, l’impact de ces fluctuations peut se trouver amplifié par le choix de la fonction objectif utilisée. Prenons par exemple le cas où la fonction serait choisie pour minimiser les erreurs relatives, avec des termes du type  $|t - t_M|/|t_M|$ , alors si  $t_M$  est proche de 0 il faut s’attendre à de fortes différences dans la position de l’optimum pour deux longueurs d’onde successives, car l’amplitude des fluctuations peut devenir très grande par rapport à la valeur “exacte” de la mesure.

Enfin, compte tenu de la complexité de la fonction objectif, il est impossible de déterminer analytiquement combien de minima existent.

### 2.4.2 L’environnement du métamatériau

L’environnement du métamatériau joue une place prépondérante dans ses propriétés optiques. Premièrement, il est bon de se demander ce qui constitue réellement le métamatériau. Peut-on par exemple considérer que le métamatériau est simplement constitué par ses structures ? Dans le cas de ceux à base métallique, la réponse est bien évidemment non si l’on travaille autour de la résonance. La position de celle-ci est en effet fortement affectée par l’indice du substrat. Dans le cadre des propriétés effectives elle va être observable dans les tenseurs effectifs et donc une position différente de celle-ci impliquera que les tenseurs seront totalement différents. Ainsi, le substrat fait réellement partie du métamatériau, et le même raisonnement s’applique aussi au superstrat.

Un second problème lié aux métamatériaux à base métallique est la présence d’ondes évanescentes autour des structures. Celles-ci peuvent s’étendre relativement loin, et affecter les propriétés du métamatériau. Pour illustrer ceci, une série de simulations représentées par la figure 2.10 ont été effectuées. Le principe est le suivant :



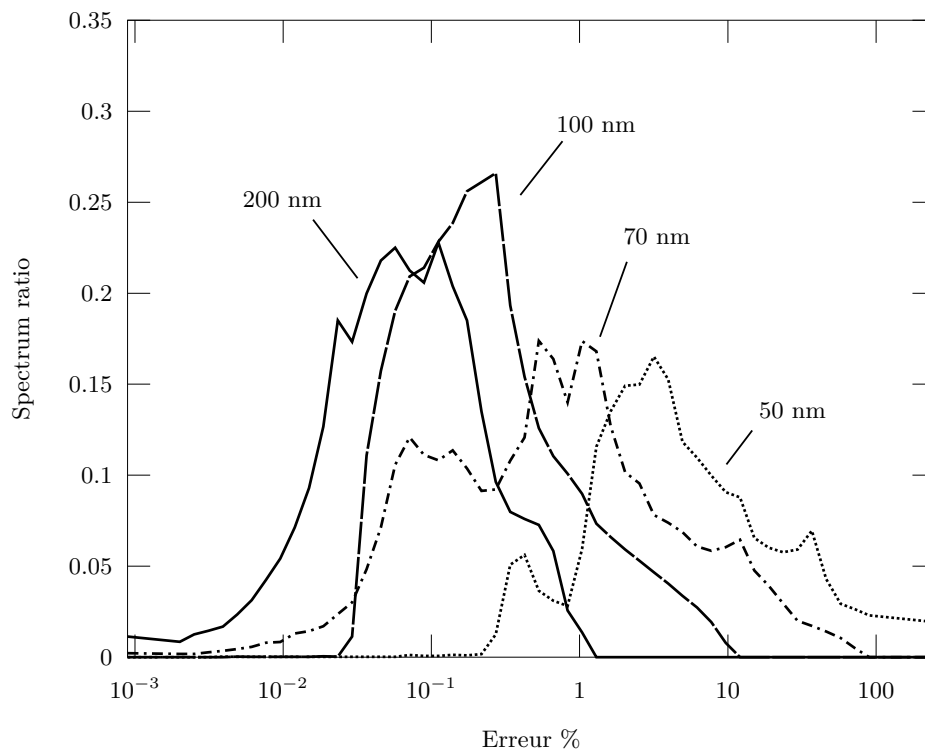


FIGURE 2.10 – Comparaison entre les spectres théoriques (obtenus grâce à un indice effectif) et simulés de la réponse optique d’un métamatériau placé sur un substrat d’épaisseur finie. Chaque courbe est obtenue par analyse statistique des erreurs relatives pour chaque point des spectres. Les calculs ont été réalisés pour des épaisseurs de substrat de 200, 100, 70 et 50nm.

1. En incidence normale, une simulation a été effectuée pour une métasurface placée sur substrat d’épaisseur semi-infinie
2. A partir de ces données, un indice effectif a été extrait, en utilisant l’épaisseur physique des structures comme épaisseur effective de la couche
3. Une série de simulations est ensuite réalisée en prenant cette fois-ci un substrat d’épaisseur finie et de plus en plus fin
4. Les spectres obtenus sont comparés avec les spectres théoriques que l’on obtiendrait à partir de l’indice effectif trouvé précédemment (précisions supplémentaires au [A.2.4](#))

Ces calculs ont été réalisés sur une grille de bâtonnets d’or de 130nm de long et 35nm de large pour seulement 20nm d’épaisseur. Ce que l’on peut alors constater, c’est que plus l’épaisseur du substrat diminue, plus les spectres obtenus diffèrent des spectres théoriques.

Ceci signifie que le simple ajout d’une interface entre deux diélectriques à proximité des

structures est suffisant pour perturber leur comportement, et plus cette interface est proche plus cette perturbation s'accroît. L'implication immédiate est que le métamatériau réel est bien plus qu'une simple couche mince de structures sur un substrat, et que le métamatériau a en réalité une extension bien plus importante que celle à laquelle on pourrait s'attendre de prime abord. Il y a alors une distance limite en deçà de laquelle tout nouvel élément risque de se coupler avec le métamatériau pour donner un nouveau métamatériau de taille encore plus importante. Dans le cas présenté ici, ces erreurs peuvent être déjà significatives pour une épaisseur de substrat de  $100nm$  soit cinq fois l'épaisseur des structures elles-mêmes. Puisque l'interface amène le métamatériau à interagir avec lui-même en réfléchissant les ondes évanescentes, on peut alors s'attendre à ce que la distance de couplage avec une structure externe (ou rapportée) soit plutôt de l'ordre de  $200nm$ , soit dix fois l'épaisseur de la couche !

Tout ceci peut affecter l'idée même de vouloir intégrer des métamatériaux dans des composants de taille nanométrique, puisque leur taille réelle n'est alors pas forcément bien définie et qu'il risque alors de devoir être nécessaire de simuler le dispositif entier pour s'assurer que le comportement est bien celui attendu. Ceci a d'ailleurs été observé dans le cas du dispositif présenté au chapitre 4, où tenter de diminuer l'épaisseur du guide d'onde sous les structures a montré une extinction totale des propriétés de conversion de polarisation.

Un autre impact de ceci est ce que cela implique pour l'indice effectif. Il est facile et tentant de définir l'épaisseur de la couche effective comme l'épaisseur physique des structures. Mais comme on vient de le voir, cette approximation n'est pas tout à fait correcte, et la véritable couche effective sera en réalité bien plus épaisse. Ainsi, l'indice effectif véritable pourra voir la spectacularité de ses propriétés fortement diminuée, puisque les effets doivent être considérés comme portés par une quantité de matière bien plus importante que la simple couche des structures.

### 2.4.3 Réponse asymétrique

Parmi les propriétés des métamatériaux qui remettent en question le modèle de l'indice effectif, celle-ci est la plus étrange et aussi la plus intéressante. Elle a initialement été observée lors de la mise au point du dispositif décrit dans le chapitre 4. Il s'est avéré en effet que, après

des opérations de symétrie simples qui ne devraient pas modifier les tenseurs effectifs, certains métamatériaux pouvaient voir leur réponse modifiée.

Prenons par exemple une structure constituée d'un réseau de barreaux d'or de base triangulaire, infinis suivant  $\vec{y}$  et périodique suivant  $\vec{x}$  et placée dans deux configurations différentes, chacune étant la symétrique de l'autre suivant  $\vec{z}$  (précisions supplémentaires au A.2.4). La structure est éclairée dans les deux cas en incidence normale et en polarisation TM, et ses spectres d'extinction sont représentés par la figure 2.11.

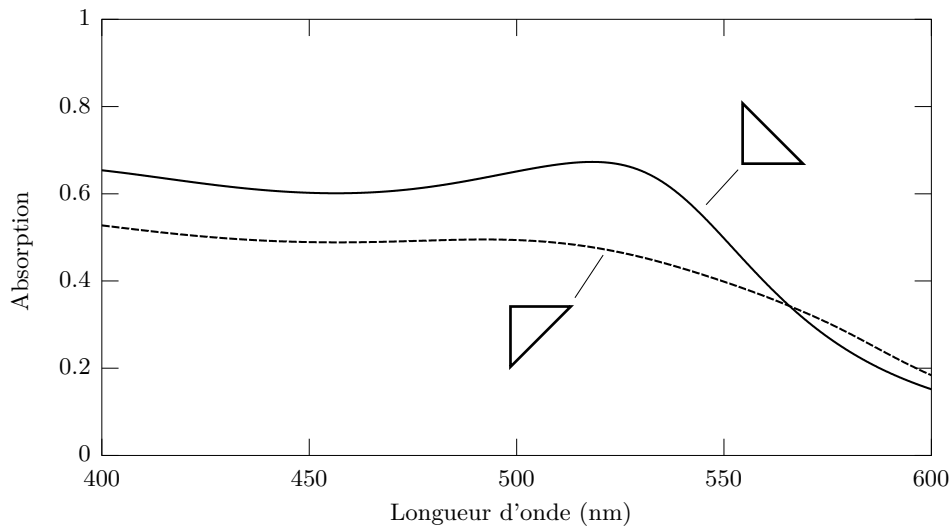


FIGURE 2.11 – Comparaison entre les spectres théoriques d’absorption de barreaux d’or triangulaires avec la base orientée face ou à l’opposé du champ incident. La différence de comportement entre les deux structures démontre l’importance de la géométrie locale dans la réponse du métamatériau.

On peut constater d’emblée sur cette figure que les réponses des deux configurations sont relativement différentes. Cette différence est encore plus flagrante sur la figure 2.12 où l’indice optique de la structure a été modifié. Ceci-ci n’est pas explicable par un problème de diffraction ou de diffusion puisque le pas a été choisi de sorte à ce que la structure soit sub-diffractive, ce qui théoriquement devrait permettre d’envisager de la décrire par un indice effectif. Or, les résultats indiquent clairement que les “tenseurs effectifs” que l’on pourrait déduire de certains résultats ne se comportent pas comme des tenseurs. Au lieu de se transformer par changement de base pour suivre les opérations géométriques appliquées à la structure, les “tenseurs effectifs” ont tendance à voir leur composantes être des fonctions du vecteur d’onde.

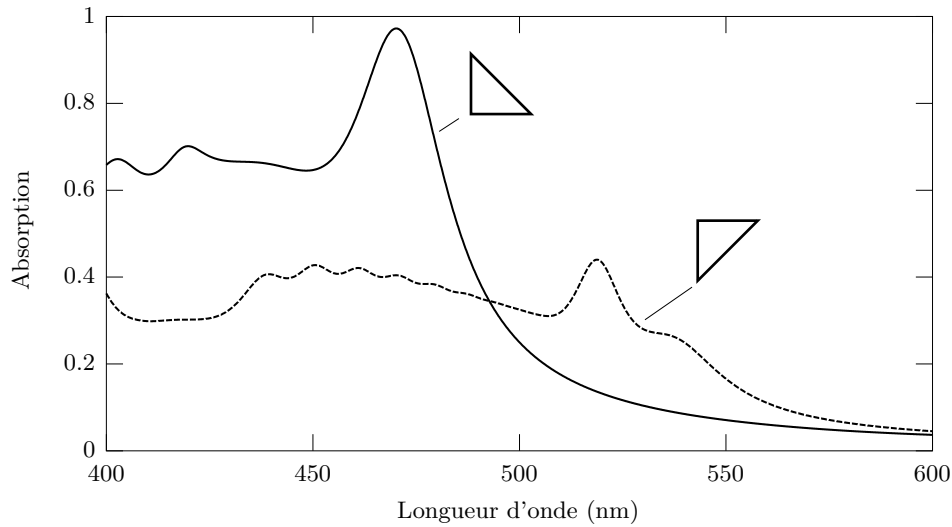


FIGURE 2.12 – Comparaison similaire à celle de la figure 2.11, mais avec un indice optique différent révélant des différences de comportement encore plus spectaculaires.

Tout ceci semble indiquer clairement que l’approche effective n’est pas la bonne dans le cas présent. Bien qu’il soit difficile de faire un commentaire général sur les métamatériaux à partir de ceci, il est raisonnable de penser que le degré de symétrie des structures a un impact important sur l’apparition ou non de cet effet. Ainsi, toute structure asymétrique dans une direction perpendiculairement au substrat risque de ne pas être entièrement descriptible par des propriétés effectives. L’approche effective cherche à décrire la structure dans sa globalité, mais il semble évident que dans le cas de structures asymétrique les propriétés locales et la dynamique du champ incident ont une place importante dans la réponse globale.

Un point intéressant est qu’il n’est même pas nécessaire de faire appel à un métamatériau complexe pour voir ce phénomène apparaître. Supposons en effet que nous ayons une couche de matériau dont  $n'' > 0$ , suspendue dans l’air, et d’épaisseur tendant vers l’infini (figure disponible au A.2.4). Cette couche comporte une face que nous appellerons A, et une face que nous appellerons B. La face B est traitée de sorte à comporter une couche anti-reflet. Lorsque la lumière arrive à incidence normale sur la face A, une partie est réfléchi (par exemple 20% de l’énergie), et une partie est transmise et ensuite absorbée par le matériau. Si la lumière est au contraire incidente sur la face B, alors toute l’énergie est transmise dans le matériau et absorbée avant de pouvoir atteindre la face A, et il n’y a alors ni réflexion ni transmission par la structure.

On voit donc bien que dans ce cas là une simple opération de symétrie (retourner la structure) change complètement sa réponse optique, et celle-ci ne saurait alors être décrite par un indice effectif.

Dans ce cas comme dans le précédent, l'origine du problème semble venir du fait que la géométrie locale des matériaux a une influence encore plus critique sur leurs propriétés que ce qui était envisagé, au point où il devient pour ainsi dire impossible de faire porter certains phénomènes par le matériau dans son ensemble. Et pourtant, c'est très exactement ce que le modèle effectif cherche à accomplir : ignorer la géométrie locale, et l'on est alors contraint de reconnaître que l'approche n'est pas justifiée ici.

## 2.5 Conclusion

En définitive, il semble possible dans une certaine mesure d'attribuer à un métamatériau des propriétés effectives. La méthode présentée fonctionne dans une mesure relative, mais reste cependant plutôt lourde à mettre en oeuvre, et compte tenu des problèmes d'unicité elle n'est pas réellement digne de confiance.

Bien que l'exemple numérique présenté soit plutôt satisfaisant, il ne rend pas forcément compte des échecs qui ont été rencontrés lors de la mise au point de la méthode. Il a été impossible notamment d'arriver à extraire des paramètres effectifs de structures présentant une conversion de polarisation, les solutions trouvées se faisant au prix d'erreurs importantes. Ces problèmes semblent encore une fois présenter un modèle à quatre tenseurs effectifs comme potentiel sauveur.

Cependant, l'utilisation potentielle de quatre tenseurs au lieu de deux est un frein important à la méthode. D'une part, cela augmente considérablement la quantité de données nécessaires pour extraire l'ensemble des tenseurs. Une optimisation sur quatre tenseurs a été tentée et présentée dans la littérature [15], mais la qualité des résultats semble toute relative alors que cette extraction a été faite sur des données purement théoriques et non pas des simulations.

Les problèmes numériques mis à part, il semble évident que le modèle effectif est lié à des contraintes importantes, quand il s'applique tout court. La potentielle réponse asymétrique est effet une preuve que ce modèle peut ne pas s'appliquer du tout. Or, à mesure que les techniques

réelles de structuration se perfectionnent on est en droit de s'attendre à voir apparaître de plus en plus de nanostructures tridimensionnelles, qui sont un terreau fertile pour ce genre de réponse. Même sans cela, la réponse asymétrique a été observée dans le cas de structures planaires déposées sur un guide d'onde, ce qui est le coeur du projet Métaphotonique.

En plus de tous les problèmes énoncés précédemment, il faut voir le modèle effectif pour ce qu'il est réellement. Il ne fait que prendre une quantité massive de données pour les transformer en quelques tenseurs. En ce sens, le modèle effectif n'est au final qu'une méthode pour compresser de l'information, cette compression se faisant avec des pertes. D'un point de vue pratique, peut-être serait-il plus efficace de trouver une méthode qui permet d'utiliser ces données directement en simulation, en éliminant l'étape d'extraction. Ceci permettrait d'éliminer toutes les imprécisions et approximations liées à la méthode d'extraction, et le calcul final n'en serait que plus valide. Par contre, ceci serait peu adapté au cas où l'on voudrait remonter à une structure en partant d'un indice donné, mais ceci n'est de toute manière pas garanti.



## Chapitre 3

# Incidence oblique en FDTD

Comme il a été vu précédemment, espérer remonter à l'indice effectif nécessitait de pouvoir simuler la réponses de nos structures en incidence oblique, ce qui a constitué un écueil qu'il a fallu franchir. A proprement parler, l'incidence oblique n'est pas un problème lié à la FDTD en elle-même, qui n'impose pas de condition particulière sur le champ incident. Le problème vient en fait de l'utilisation simultanée d'une méthode dans le domaine temporel (comme la FDTD) et de conditions périodiques aux bords de la fenêtre de calcul. Comme les métamatériaux que nous étudions sont principalement constitués de réseaux carrés de nanostructures, ces conditions périodiques sont nécessaires pour garantir à la fois une bonne qualité des simulations et un temps de calcul raisonnable.

Le problème trouve son origine dans la potentielle absence de continuité du champ aux bords de la fenêtre de calcul. En effet, avec des conditions périodiques simples un pulse gaussien devrait forcément se retrouver dans le cas décrit par la figure 3.1, où l'absence de continuité du champ aux bords de la fenêtre de calcul est flagrante. C'est pourquoi des conditions périodiques simples ne fonctionnent bien que dans le cas de l'incidence normale. Pour résoudre ce problème, il est alors nécessaire de créer des conditions périodiques particulières, dont deux exemples sont détaillés dans les sections suivantes.



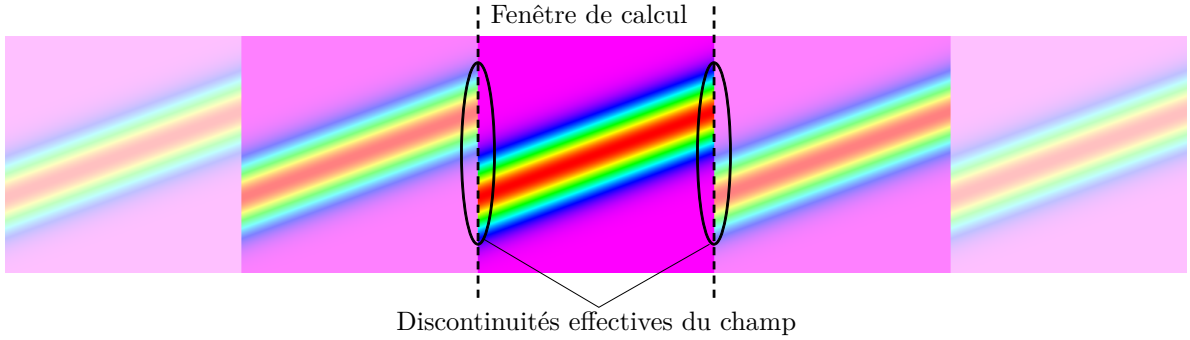


FIGURE 3.1 – Conditions périodiques appliquées à un pulse gaussien, dans le cas de l’incidence normale et avec un angle d’incidence de  $20^\circ$

## 3.1 Méthode itérative

### 3.1.1 Méthode et implémentation

Cette méthode a été initialement publiée par Valuev et al. en 2008[30]. Le but de la méthode vise à donner au champ ce qu’il attend, c’est-à-dire la continuité qui lui fait défaut.

Le principe de la méthode est explicable grâce à la figure 3.2. Trois lignes diagonales sont tracées, et représentent chacune un même front d’onde à trois instants différents. Pour éviter de rayonner à la frontière de la cellule élémentaire (de largeur  $L$ ), le champ à l’instant  $t$  nécessite d’être continu aux points  $\mathcal{P}$  et  $\mathcal{F}$ . Cette continuité n’est pas naturellement présente et doit donc être construite artificiellement grâce à l’algorithme. Dans le cas d’une structure infiniment périodique, on a la relation suivante :

$$\varphi(x, t) = \varphi(x + L, t + \tau) \Leftrightarrow \varphi(x + L, t) = \varphi(x, t - \tau) \quad (3.1)$$

et c’est cette relation qui va être utilisée pour construire l’algorithme.

Si on suppose que la solution au problème est déjà connue, on peut constater que le champ manquant au point  $\mathcal{F}$  se trouve de l’autre côté de la fenêtre de calcul à un instant antérieur, et de même pour le point  $\mathcal{P}$  mais à un instant ultérieur. Toute l’idée de la méthode est alors de lancer la même simulation plusieurs fois, en lui fournissant à chaque itération des informations sur la simulation précédente. Ceci permet de donner au champ une approximation de ce qu’il attend, cette approximation s’améliorant à chaque nouvelle itération. Ceci nécessite d’enregistrer le

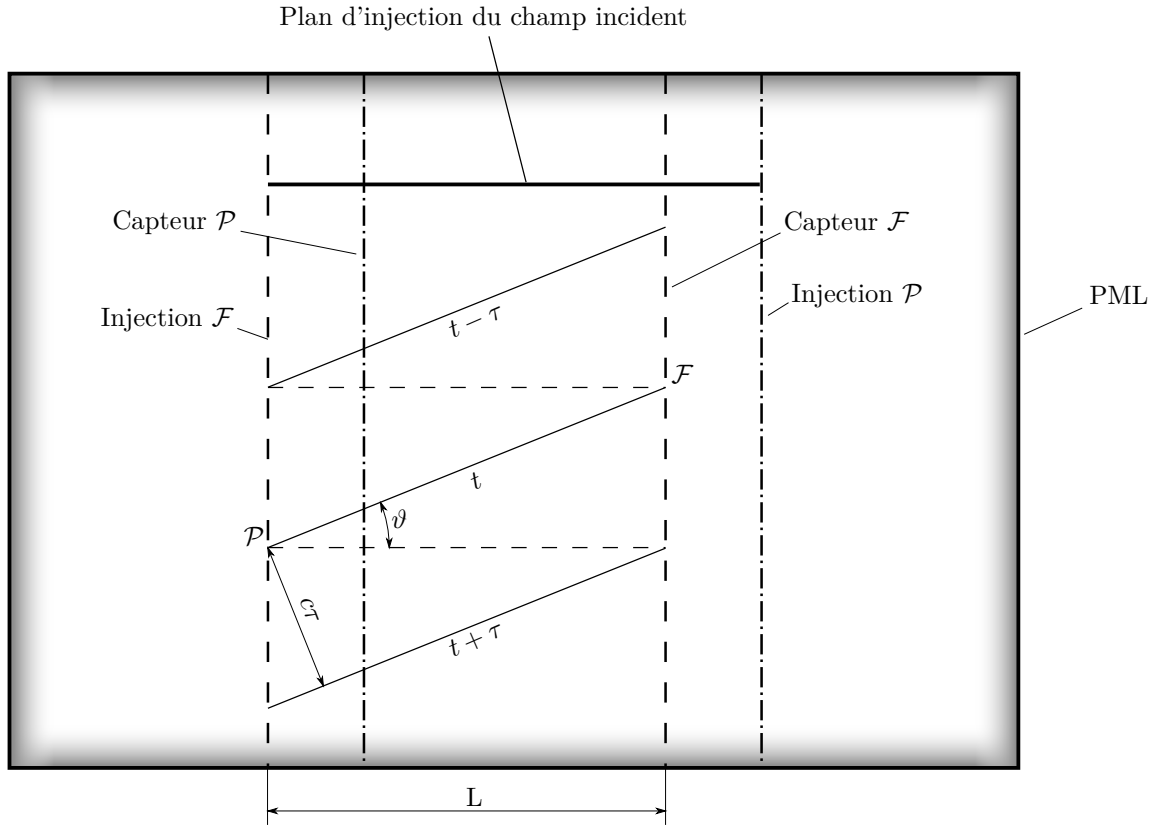


FIGURE 3.2 – Configuration de la fenêtre de calcul pour l’algorithme de Valuev

champ aux frontières effectives de la fenêtre de calcul pour chaque pas temporel. Celui-ci est alors fourni au calcul suivant par l’intermédiaire de la TFSF.

Un paramètre critique est la quantité  $\tau$ , qui va définir le décalage à prendre en compte dans la lecture des informations. Sa valeur est fonction de la largeur de la cellule élémentaire  $L$ , de la vitesse de propagation  $c$  et de l’angle d’incidence de l’onde  $\vartheta$ . On a alors

$$\tau = \frac{L}{c} \sin \vartheta \quad (3.2)$$

Mais ce qui sera utile dans le code est son équivalent en nombre de pas temporels  $N_\tau$ , on a alors

$$N_\tau = \frac{L}{c\Delta t} \sin \vartheta \quad (3.3)$$

Un point qui peut être important est que si  $N_\tau$  n'est pas un entier, alors des interpolations seront nécessaires. Par simplicité et pour minimiser les sources d'erreurs,  $N_\tau$  est défini comme un entier dans notre implémentation, ce qui implique que le nombre d'angles acceptables est discret et dépend de la largeur de la cellule. Plus celle-ci est large, plus un nombre important d'angles sera disponible.

Si on suppose par exemple que  $N_\tau = 7$ , alors l'opération sur les champs peut être résumée par la figure 3.3. A l'instant  $n$  de la simulation correspondant à l'itération  $i$ , les champs  $E$  et  $H$  sont enregistrés au niveaux des capteurs  $\mathcal{P}$  et  $\mathcal{F}$ . Au même moment, les champs enregistrés lors de la simulation précédente sont réinjectés dans la fenêtre de calcul avec un décalage temporel.

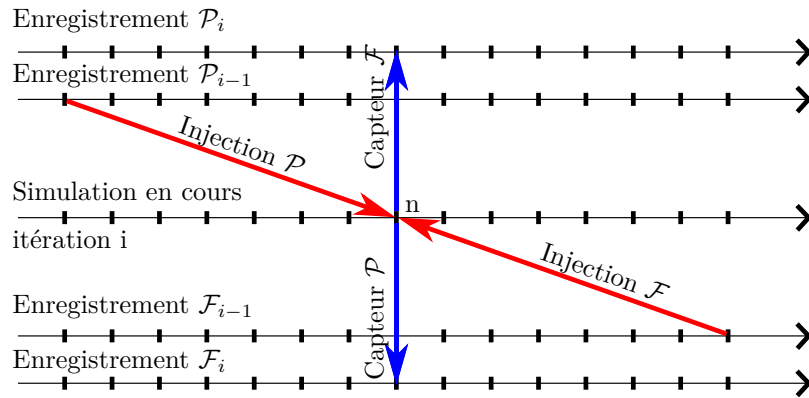


FIGURE 3.3 – Résumé de l'opération sur les champs

En pratique, un plan d'enregistrement ne peut pas se trouver au même endroit qu'un plan d'injection, pour éviter qu'ils interfèrent l'un avec l'autre. Ceci implique de décaler les plans  $\mathcal{P}$  et  $\mathcal{F}$  de quelques pas spatiaux, il est alors nécessaire d'étendre la structure dans la fenêtre de calcul pour prendre en compte cette quantité de matériau supplémentaire.

### Le problème de la mémoire

Un des problèmes majeurs de la méthode vient de l'espace mémoire qu'elle nécessite. Prenons par exemple une grille de calcul de taille  $N_x \times N_y \times N_z$ , ce qui implique que chaque plan  $(y, z)$  contient  $N_y N_z$  cellules de FDTD, l'algorithme demandant de s'intéresser à deux de ces plans. Puisqu'il est nécessaire d'enregistrer à chaque pas temporel quatre composantes du champ pour chacune de ces cellules, sur une durée totale  $N_t$ , il faudra lors d'une passe de l'algorithme

enregistrer un total de  $8N_yN_zN_t$  valeurs. Si on suppose que chacune de ces valeurs fait huit octets, ce qui est courant pour des réels en double précision, on obtient alors que la mémoire totale nécessaire pour enregistrer toutes ces valeurs est de  $64N_yN_zN_t$  octets.

En prenant des paramètres de simulation normaux, par exemple dans notre cas cela peut être  $N_y = N_z = 60$ ,  $N_t = 40000$ , la mémoire totale requise est alors de 9.2 Go, ce qui requiert déjà une machine de calcul spécialisée. Si l'on avait besoin d'augmenter la résolution spatiale par deux, alors cette quantité augmenterait d'un facteur huit, soit 74 Go de mémoire nécessaire.

Il est évident que les grandes quantités de mémoire qui peuvent éventuellement être requises par l'algorithme le rendent en pratique impossible à utiliser sur une machine de calcul conventionnelle si l'on s'appuie uniquement sur sa mémoire vive. Ainsi, une implémentation réaliste de l'algorithme nécessitera de faire appel au disque dur pour stocker temporairement les données. La conséquence immédiate est que, sauf accès à des systèmes de stockage très performants, les temps de lecture et d'écriture peuvent devenir comparables au temps de calcul brut.

### 3.1.2 Limites

#### Erreur et diffusion

Une fois la méthode implémentée, il a fallu la mettre à l'épreuve. Cependant, il a très rapidement semblé évident qu'aucun des résultats obtenus ne semblait satisfaisant, et que tous les spectres calculés étaient corrompus par des oscillations parasites. Un exemple de ceci est visible dans la figure 3.4 où est représenté le coefficient de transmission de l'espace libre calculé pour un angle d'incidence de  $45^\circ$  est représenté. Bien entendu, celui-ci devrait être théoriquement de 1, alors que le spectre de transmission obtenu oscille fortement autour de cette valeur.

Face à ce phénomène inattendu, un problème d'implémentation a d'abord été soupçonné, et le code a été revu plusieurs fois et même réécrit entièrement, et ce sans résoudre le problème. Finalement, il a pu être établi que le problème venait de l'algorithme lui-même et non pas d'un bug quelconque.

L'origine du phénomène peut être expliquée grâce à la figure 3.5. Lors de la toute première itération de l'algorithme, le champ incident est uniquement généré par un plan dont les extrémités sont laissées libres. Ceci les amène à se comporter comme des sources plus ou moins

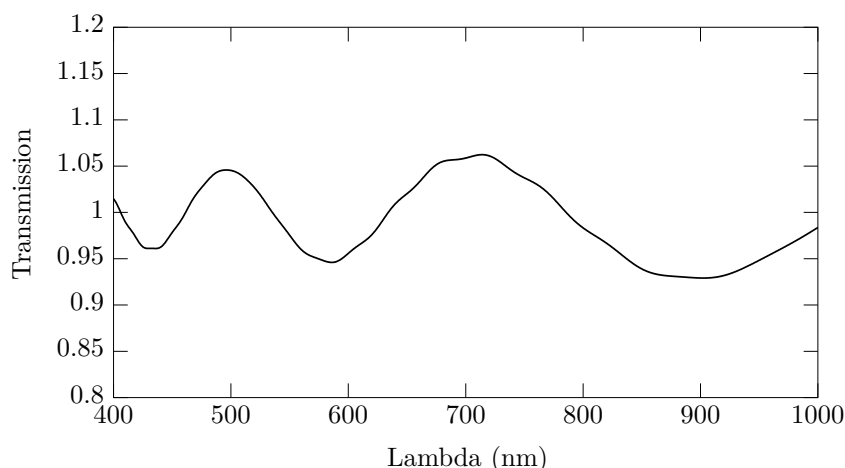
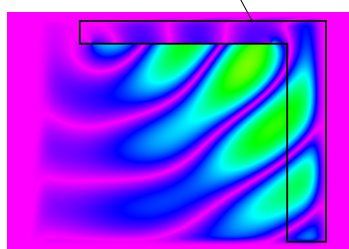


FIGURE 3.4 – Calcul du coefficient de transmission d’une lame l’air avec un angle d’incidence de  $45^\circ$  par la méthode de Valuev.

sphériques, qui diffusent du champ dans toutes les directions. Cette erreur, que l’on peut voir sur la première partie de la figure 3.5 est enregistrée par les capteurs, qui se chargeront alors de la transmettre à l’itération suivante, avec à chaque fois un petit décalage temporel. Ainsi, même si au bout d’un certain nombre d’itérations la solution voulue finit par apparaître, l’erreur est toujours présente dans la fenêtre de calcul comme on peut le voir sur le reste de la figure 3.5. Cette erreur est alors présente lors de l’analyse du champ pour obtenir les spectres ou d’autres

Erreur initiale enregistrée par le capteur “futur”

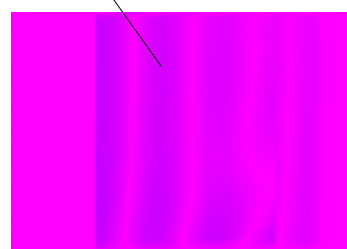
Erreur toujours présente à la passe 15



Passe 1, Itération 1800



Passe 15, Itération 1800



Passe 15, Itération 2800

FIGURE 3.5 – Instantanés du champ aux itérations 1800 pour les passes 1 et 15, et à l’itération 2800 pour la passe 15. On peut clairement voir que si la solution cherchée est bien présente, des erreurs le sont aussi et se propagent parallèlement aux PMLs, empêchant de fait leur dispersion.

résultats, et c’est en réalité son spectre que l’on peut voir apparaître dans la figure 3.4. Il devrait être théoriquement possible de filtrer cette erreur par transformée de Fourier spatiale, mais ceci

nécessiterait de simuler un grand nombre de cellules élémentaires, ce qui reviendrait de fait à se passer de la méthode de Valuev entièrement.

En réalité, la méthode est correcte et fonctionne, à condition que l'on ne l'applique qu'à des structures très diffusives telles que des cristaux photoniques. Dans ce cas là, l'erreur est diffusée par la structure vers les PMLs un peu plus à chaque itération, et donc son impact devient négligeable à la fin de la simulation. C'est ce que l'on peut voir sur la figure 3.6, qui décrit la quantité de champ qui se propage au delà du plan d'injection  $\mathcal{P}$  dans deux cas : lorsque la structure est simplement l'espace libre, et lorsque celui-ci contient un cylindre de conducteur parfait avec une périodicité bien plus large que la longueur d'onde. La figure contient l'ensemble

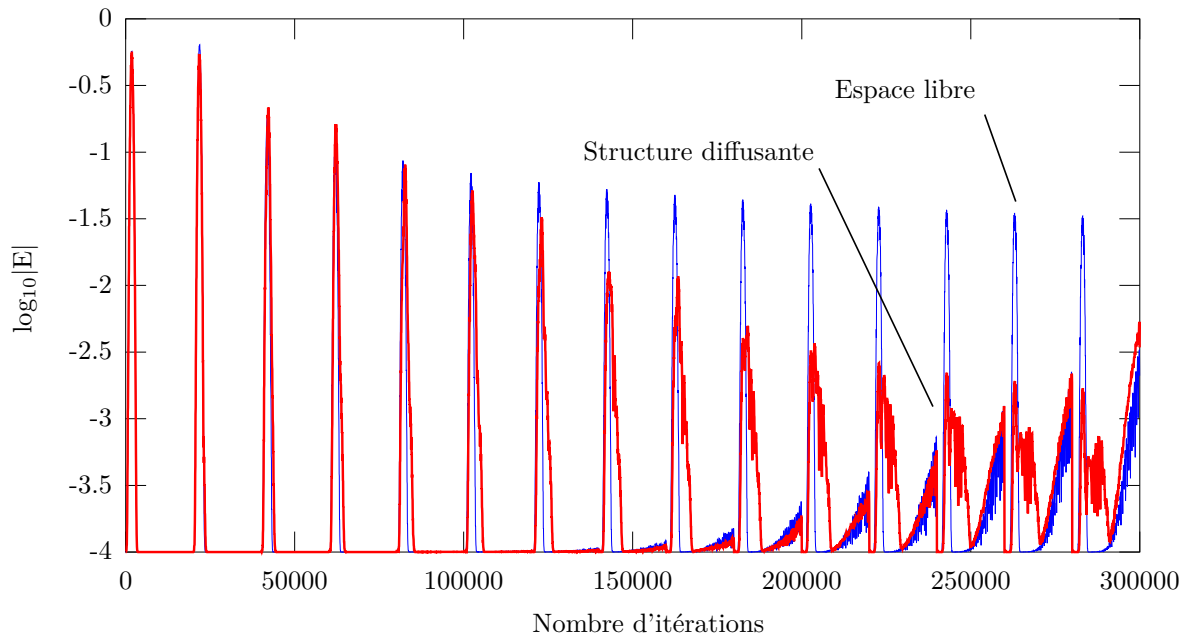


FIGURE 3.6 – Observation de l'amplitude du champ électrique en un point à droite du plan d'injection B, lorsque la fenêtre de calcul comporte ou pas une structure diffusive. Sans cette structure les erreurs de la méthode ont tendance à ne plus disparaître lors des itérations successives. Les différentes passes de l'algorithme sont représentées les unes à la suite des autres, chaque passe comportant 20000 itérations.

de la simulation, c'est-à-dire 15 itérations de 20000 pas de calcul chacune.

L'on peut voir que dans les deux cas le champ transmis décroît avec les itérations successives, mais dans le cas de l'espace libre cette décroissance initialement rapide finit pour ainsi dire par s'annuler. Cela signifie que l'erreur n'est alors qu'à peine perturbée à chaque nouvelle itération,

et se transmet à l'itération suivante. Dans le cas de la structure diffuse, l'on peut s'apercevoir que la décroissance ne se stabilise pas et continue de manière exponentielle. À la fin de la simulation l'erreur est donc pour ainsi dire négligeable, permettant l'obtention de résultats corrects dans le cas de structures diffusives. La croissance d'un autre phénomène est aussi observable, mais ceci sera détaillé dans la section suivante.

Il est apparu que Valuev a traité brièvement du problème en question dans son article :

*The second error delays gradually with iterations and finally separates from the solution. Because of scattering and diffraction inside the computational volume, some energy of the error signal avoids the recording image points, gets absorbed by PMLs, and is not reverted back at subsequent iterations. **This reduction of error depends greatly on the properties of the scattering structure under consideration.***

Cependant, rien ne laissait présager que la méthode ne pourrait au final véritablement s'appliquer qu'à une certaine gamme de structures. Ceci a été renforcé par l'exemple même utilisé pour illustrer l'article : la réflexion par un conducteur parfait qui ne diffuse pas. Il reste toujours la possibilité d'une erreur d'implémentation ou d'une technique supplémentaire utilisée par Valuev et dont nous ignorons l'existence. Un temps conséquent a été passé à tenter de minimiser ce problème, mais aucune des solutions envisagées ne s'est révélée satisfaisante.

### Bruit numérique

Dans son article, Valuev ne semble pas avoir de soucis avec les passes successives de l'algorithme, et chaque nouvelle passe semble tendre à réduire les erreurs de la fenêtre de calcul. Dans nos essais, ceci s'est en général révélé exact jusqu'à la dixième passe, après quoi la fenêtre de calcul semblait se remplir d'un bruit numérique haute fréquence (figure 3.7), celui-ci augmentant en amplitude à chaque nouvelle passe. Comme il est généré dès le début de la simulation, il contamine rapidement l'ensemble de la fenêtre de calcul et rend les résultats de la simulation inexploitable.

Son origine exacte n'a pas pu être déterminée. A première vue, on pourrait penser qu'il vient d'une erreur d'implémentation au niveau des plans d'injection, mais si c'est bien le cas

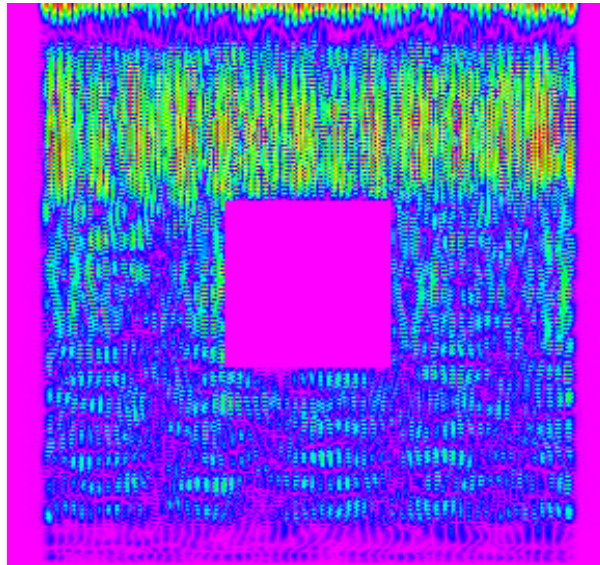


FIGURE 3.7 – Exemple de bruit numérique apparaissant après un nombre important de passes de l’algorithme

une relecture minutieuse du code n’a pas permis de trouver cette erreur. Une seconde hypothèse était que le bruit venait d’erreurs de troncature au moment du passage des données par le disque dur. Cette possibilité a été infirmée en forçant les données à être écrites sous forme hexadécimale, ceci n’introduisant pas d’erreurs supplémentaires.

Si on observe la figure 3.7, on peut constater que le bruit est réfléchi par les PMLs. En faisant varier l’épaisseur des PMLs (figure 3.8) sans changer leurs paramètres, on s’aperçoit que l’impact sur l’amplitude du bruit est notable. Plus les PMLs sont épaisses, moins l’amplitude du bruit est important pour l’ensemble des passes. Ceci indique donc que les PMLs jouent un rôle dans la dynamique de ce bruit, sans que celui-ci ne soit présent dans des simulations utilisant les mêmes paramètres mais pas la méthode de Valuev.

L’hypothèse sur son origine est donc la suivante :

- toute simulation numérique comporte un certain bruit numérique qui est réfléchi par les PMLs suivant leurs paramètres
- il est naturellement enregistré par la méthode de Valuev
- pendant la passe suivante, chaque plan d’injection se comporte en plus comme une source continue de bruit, d’amplitude similaire dans les deux cas. L’addition de ces deux sources double l’amplitude effective du bruit



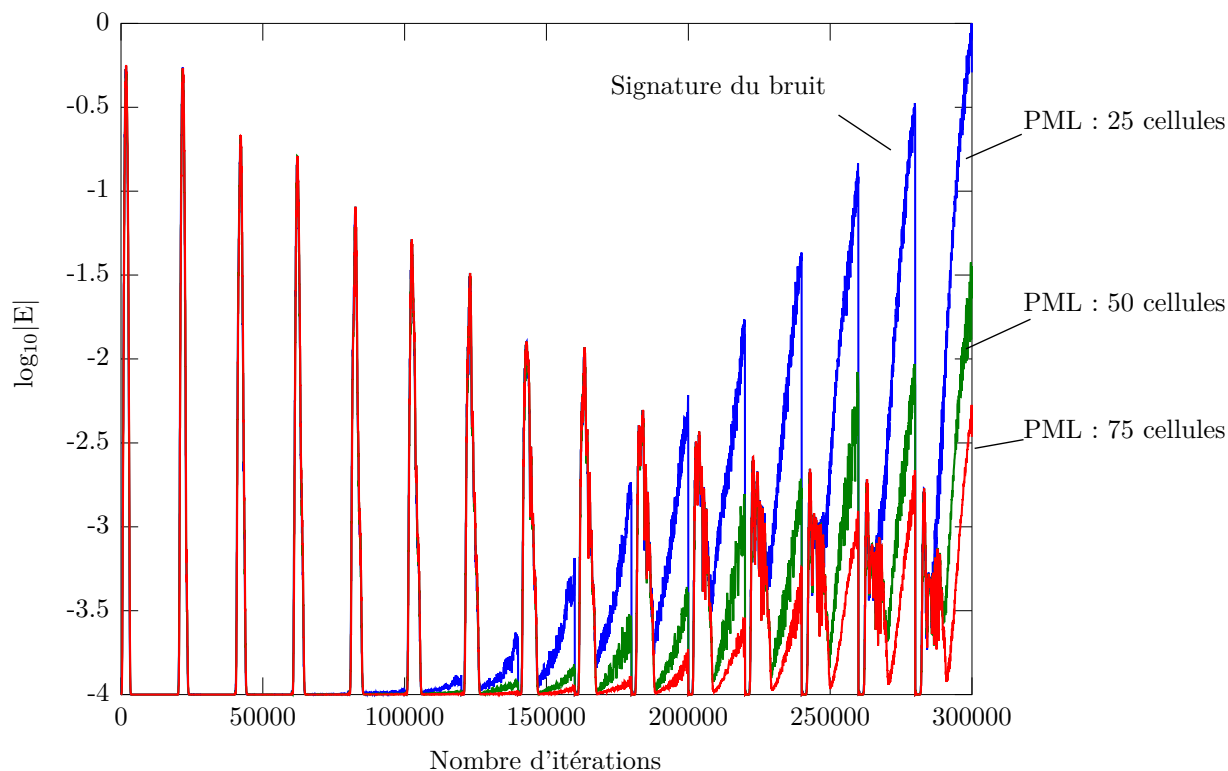


FIGURE 3.8 – Observation de l’amplitude du champ électrique en un point à droite du plan d’injection B, pour trois épaisseurs de PML différentes. Les différentes passes de l’algorithme sont représentées les unes à la suite des autres, chaque passe comportant 20000 itérations.

- cette amplitude doublée est enregistrée, et ré-émise à la passe suivante, ce qui la double encore une fois

Ainsi donc, l’amplitude du bruit va croître de manière exponentielle au fur et à mesure que les passes se succèdent. Si cela est vrai, cela implique qu’il est nécessaire de trouver un jeu de paramètres qui permet d’absorber totalement ce bruit, tout en gardant la même efficacité pour les fréquences que nous étudions.

Compte tenu du problème décrit dans la partie précédente, la méthode a cependant été abandonnée et les investigations sur le bruit n’ont pas été poussées plus loin.

### 3.2 Méthode d'Aminian et Rahmat-Samii

Face à l'incapacité de la méthode itérative à répondre à nos attentes, il a été nécessaire de se tourner vers une autre méthode. Celle qui a été finalement choisie fut la méthode d'Aminian et Rahmat-Samii [24], basée sur des conditions de Bloch. Elle avait initialement été rejetée à cause des contraintes qu'elle apportait, et qui seront détaillées dans ce qui suit.

#### 3.2.1 Principe

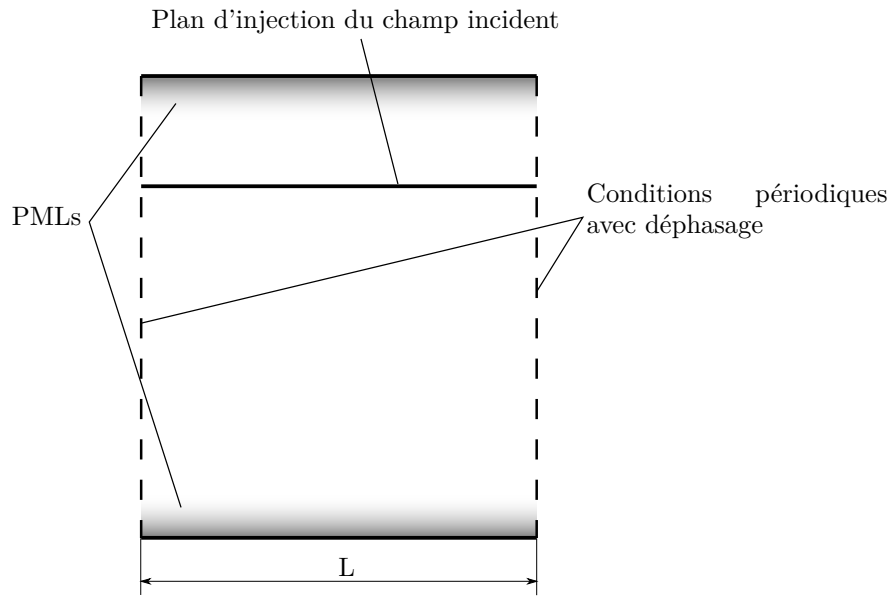


FIGURE 3.9 – Configuration de la fenêtre de calcul pour des conditions périodiques basées sur des conditions de Bloch

Le principe de base de la méthode est simple, prenons le cas d'un réseau unidimensionnel, périodique suivant  $\vec{x}$ . Dans ce cas, le champ électrique doit vérifier la condition

$$\vec{E}(x + L) = \vec{E}(x)e^{ik_x L} \quad ; \quad k_x = k_n \sin \vartheta \quad (3.4)$$

où  $\vartheta$  est l'angle d'incidence et  $k_n$  l'amplitude du vecteur d'onde du champ incident. Au niveau de l'implémentation, ceci nécessite de rajouter un déphasage au niveau des conditions périodiques. Ainsi le champ au bord B de la fenêtre de calcul (figure 3.9), sera déphasé de  $-k_x L$  pour le champ au bord A, et inversement.

Si la simulation FDTD est basée sur des champs complexes, l'ajout de cette condition est triviale. Dans le cas où le code de base ne considère que des champs réels (comme le notre), il est nécessaire de reconstruire au niveau des conditions périodiques un champ complexe, et ce en utilisant deux simulations de la même structure mais déphasées de  $\pi/2$ , tel qu'expliqué par Harms et al[23]. L'impact immédiat est que les méthodes basées sur des conditions de Bloch requièrent deux fois plus de mémoire, et un temps de calcul deux fois plus long, que si elles pouvaient s'appliquer à un champ strictement réel.

La version la plus basique et la plus ancienne de ce type de méthode consiste à utiliser une onde plane comme champ excitateur. L'inconvénient majeur est que faire une simulation par longueur d'onde allonge considérablement le temps de calcul pour obtenir un spectre entier, alors qu'un des intérêts principaux de la FDTD est justement de pouvoir effectuer des études multifréquentielles. Un autre problème lié à l'utilisation d'une onde plane est que l'analyse des résultats d'une simulation nécessite d'attendre l'apparition d'un régime permanent. Dans le cas de structures résonantes (comme des métamatériaux), celui-ci peut n'apparaître qu'après un nombre important d'itérations.

L'idée principale d'Aminian et Rahmat-Samii est de conserver les conditions de Bloch mais de forcer le champ incident à avoir un spectre large. En effet, la seule contrainte sur la simulation est le  $k_x$ , mais puisque l'on a la relation

$$k_x = \frac{2\pi n}{\lambda_0} \sin \vartheta \quad (3.5)$$

on constate qu'un même  $k_x$  peut correspondre à des longueurs d'onde différentes tant que l'angle d'incidence peut varier, soit

$$\vartheta(\lambda) = \arcsin \left( \frac{\lambda_0 k_x}{2\pi n} \right) \quad (3.6)$$

Pour donner un caractère pulsé au champ incident, celui-ci est pris comme une somme d'ondes planes avec un spectre large. On a alors, en supposant le problème à deux dimensions

$$\vec{E}(x, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{A}(\omega) e^{i(k_x x + k_z z - \omega t)} d\omega \quad (3.7)$$

Comme  $k_x$  est fixe,  $k_z$  doit, comme l'angle d'incidence, dépendre de la longueur d'onde

$$k_z = \pm \sqrt{k_n^2 - k_x^2} = \pm \sqrt{\frac{\omega^2 n^2}{c^2} - k_x^2} \quad (3.8)$$

L'étape finale est d'exprimer  $\vec{A}$  en fonction de  $k_x$  et d'un angle  $\varphi$  qui servira à définir la polarisation (TE :  $\varphi = 0$ ; TM  $\varphi = \pi/2$ ), et de déterminer  $\vec{H}$  grâce aux équations de Maxwell.

Finalement on obtient un champ incident de la forme

$$\vec{E}(x, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{\omega^2 n^2 - c^2 k_x^2}}{\omega n} \sin \varphi \\ \cos \varphi \\ \frac{c k_x}{\omega n} \sin \varphi \end{bmatrix} Sp(k_x, \omega) e^{i \left( k_x x - z \sqrt{\omega^2 \frac{n^2}{c^2} - k_x^2} - \omega t \right)} d\omega \quad (3.9)$$

$$\vec{H}(x, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \sqrt{\omega^2 \frac{n^2}{c^2} - k_x^2} \cos \varphi \\ \omega \frac{n}{c} \sin \varphi \\ k_x \cos \varphi \end{bmatrix} \frac{Sp(k_x, \omega)}{\omega \mu} e^{i \left( k_x x - z \sqrt{\omega^2 \frac{n^2}{c^2} - k_x^2} - \omega t \right)} d\omega \quad (3.10)$$

où  $Sp(k_x, \omega)$  est le spectre du champ incident.

Bien entendu, un champ défini comme précédemment ne va pas avoir l'aspect "habituel" d'une somme d'ondes planes, et sera sujet à de fortes déformations lors de sa propagation. C'est ce qui est représenté par la figure 3.10

### $k_y$ différent de 0

Les équations précédentes supposent que le plan d'incidence est le plan  $(\vec{x}, \vec{z})$ . La méthode permet cependant l'utilisation d'un  $k_y$  non nul. Pour ce faire, il faut d'abord modifier les équations précédentes en remplaçant  $k_x^2$  par  $k_x^2 + k_y^2$ , et ensuite effectuer une rotation des vecteurs autour de l'axe  $\vec{z}$ . Au niveau de l'implémentation il est par contre nécessaire de modifier les conditions périodiques suivant l'axe  $\vec{y}$  de la même manière que pour l'axe  $\vec{x}$ .

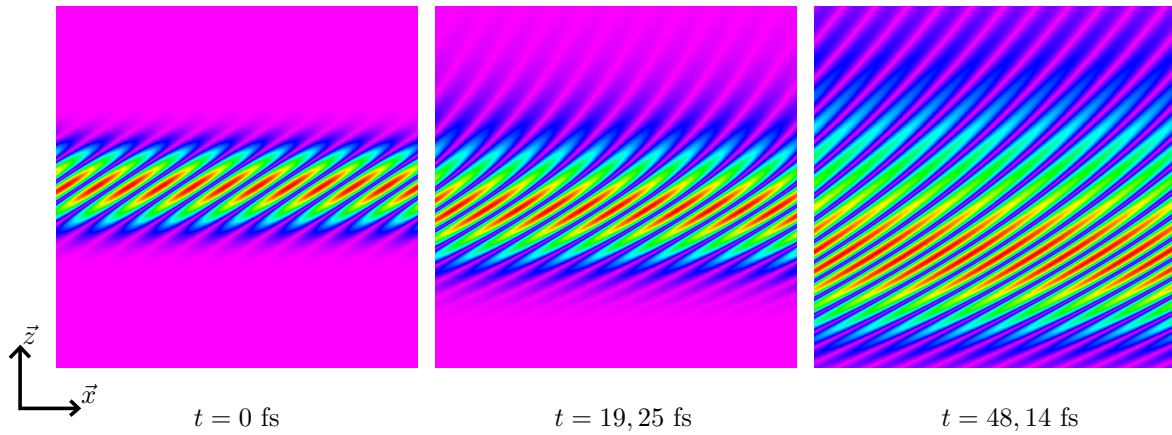


FIGURE 3.10 – Exemple de résultat calculable grâce à la méthode d’Aminian et Rahmat-Samii. La position en  $z$  est arbitraire pour des raisons de centrage, le champ se propageant suivant  $-\vec{z}$ .

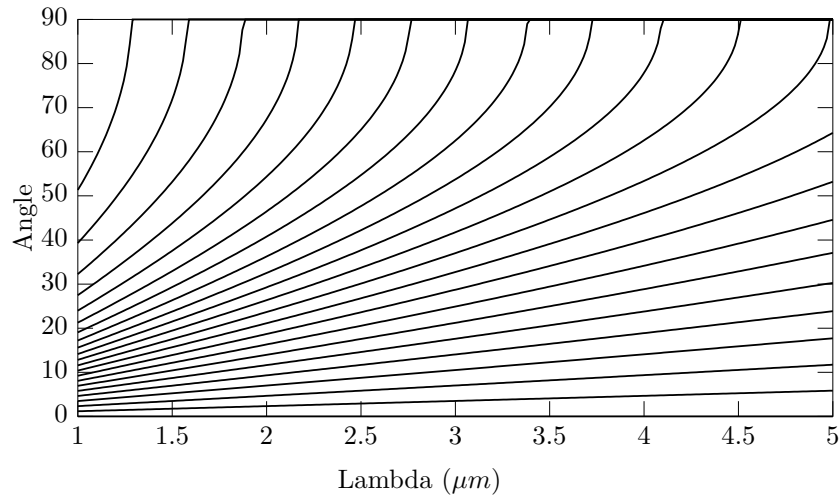


FIGURE 3.11 – Illustration de la contrainte sur l’angle d’incidence. Chaque courbe correspond à une valeur de  $k_x$  donnée.

### 3.2.2 Contraintes

#### Angle variable

Le principal problème de la méthode d’Aminian et Rahmat-Samii, et la raison pour laquelle la méthode de Valuev avait d’abord été préférée, est que l’angle d’incidence varie avec la longueur d’onde. Ceci est illustré par la figure 3.11, où chaque courbe représente cette contrainte. On voit aisément que pour une même simulation, les différents angles d’incidence peuvent varier de manière conséquente. Sur un plan pratique, cela implique que pendant une simulation,

l'analyse des résultats pour certaines longueurs d'onde peut s'avérer délicate puisque l'angle correspondant sera proche de l'incidence rasante. Un nombre important d'itérations peut alors être nécessaire pour que la transformée de Fourier du champ converge vers une valeur stable.

Par ailleurs, dans le cas où  $k_x$  devient supérieur à  $k_n$ ,  $k_z$  devient une valeur complexe, et le champ incident comporte alors des composantes évanescentes. Ceci est aisément filtrable par transformée de Fourier, mais peut néanmoins augmenter le nombre d'itérations nécessaires pour avoir des résultats "propres".

Une solution efficace aux deux problèmes précédents se trouve dans la définition du spectre du champ incident. On peut en effet lui donner une valeur nulle pour toutes les longueurs d'onde dont  $k_x > k_n$ , et une valeur faible pour les longueurs d'ondes dont l'angle d'incidence est rasant. Par ailleurs, il est important de vérifier que les intégrales qui définissent le champ incident convergent, notamment en  $\omega = 0$ , ce qui requiert encore une fois de bien définir le spectre. Idéalement, on voudra quelque chose de la forme

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} Sp(k_x, \omega) = \omega^{n+2} f(k_x) \quad (3.11)$$

avec  $n \geq 2$ . Ceci permet de contrebalancer les termes en  $\frac{1}{\omega}$  tout en s'assurant que  $Sp(k_x, \omega)$  est nul pour  $\omega = 0$

Enfin, si on veut obtenir la réponse optique d'une structure pour un angle donné, il est nécessaire de réaliser un grand nombre de simulations, puis d'interpoler les résultats.

### Implémentation

Cette méthode ne présente pas de difficultés d'implémentation particulières. L'injection du champ incident se fait simplement par l'intermédiaire de la TFSF. Un point qui peut être utile de prendre en compte est le fait que le champ est défini comme une intégrale, ce qui peut se révéler long à calculer suivant la finesse que l'on veut donner au calcul. Ainsi, il est bon de remarquer que le champ incident peut s'écrire comme un produit de deux fonctions

$$\phi(x, y, z, t) = e^{i(k_x x + k_y y)} f(z, t) \quad (3.12)$$

la fonction  $f$  contenant l'intégration. Comme l'injection se fait au niveau d'un plan, on peut donc ne calculer le résultat de la fonction  $f$  par itération temporelle qu'une fois pour chaque composante du champ.

### Essais numériques

Une première illustration de la méthode est le calcul des coefficients de réflexion et de transmission par un milieu semi-infini d'indice 1.5 dans le cas TM. L'angle d'incidence correspondant est reporté sur la figure adjacente. On peut constater une anomalie (entourée en rouge) dans les coefficients aux grandes longueurs d'onde. Elle vient du fait que pour celles-ci l'angle d'incidence est extrêmement rasant, et le calcul n'a donc pas convergé pour les longueurs d'onde correspondantes.

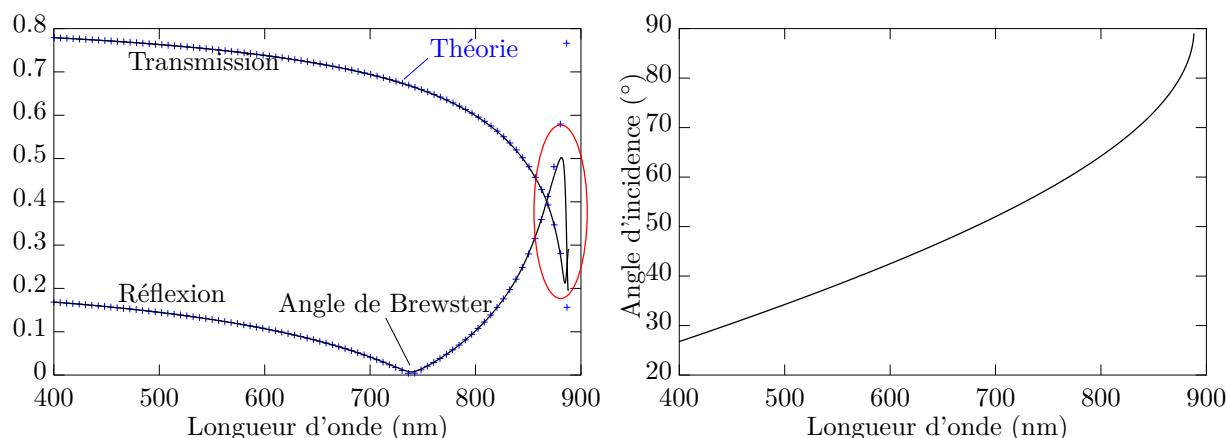


FIGURE 3.12 – Exemple de résultat calculable grâce à la méthode d'Aminian et Rahmat-Samii : coefficients de transmission et de réflexion d'une interface air-verre ( $n=1.5$ ) dans le cas TM.

Un deuxième exemple est illustré par la figure 3.13 qui représente l'amplitude des coefficients de transmission et de réflexion dans le cas TM pour une grille de nanorods d'or. Les oscillations que l'on peut voir sur ces deux cartes sont dues à la méthode d'interpolation.

### 3.3 Conclusion

Au final, deux méthodes complètement différentes auront dû être implémentées et testées. Ceci a entraîné un retard important des travaux, et la seule méthode viable dans notre cas reste

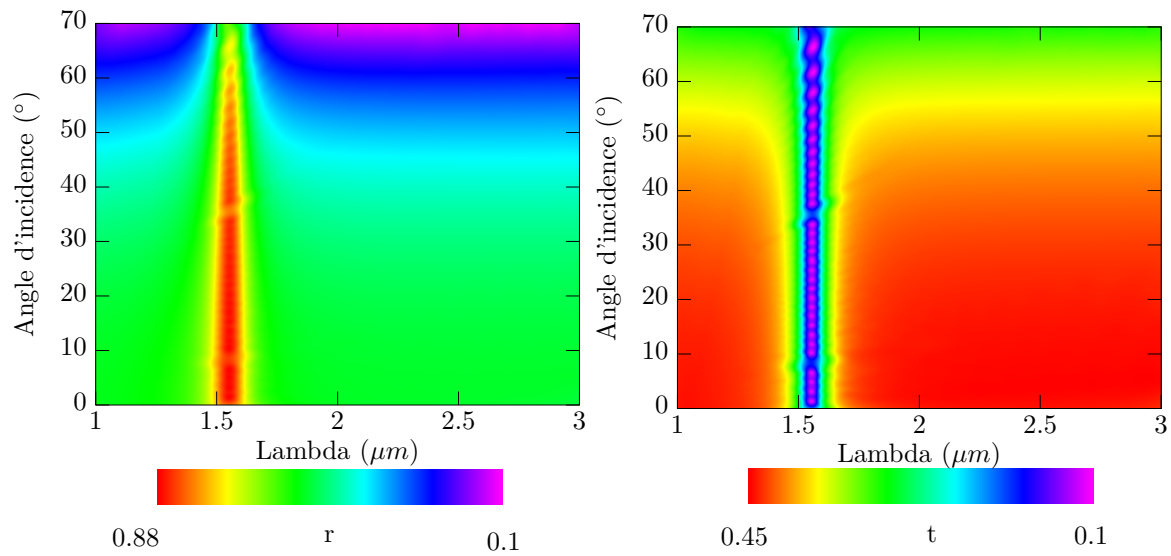


FIGURE 3.13 – Coefficients de transmission et de réflexion pour une grille de nanorods dans le cas TM, calculés par la méthode de Aminian et Rahmat-Samii

peu satisfaisante tant les contraintes associées sont importantes. Malgré tout, elle aura quand même permis d'obtenir certains résultats présentés au chapitre 2.

Même si la méthode de Valuev s'est avérée ici décevante et peu productive, il y a certaines pistes qui semblent permettre de la corriger, et elle devrait pouvoir être mise à contribution dans des études impliquant des cristaux photoniques ou des structures très diffusives.





## Chapitre 4

# Rotateur de polarisation

Jusque ici, la majorité des études avaient été faites par des simulations soit en incidence normale, soit en incidence oblique. Le coeur du projet restait cependant de concevoir des métamatériaux pour l'optique guidée, et c'est ce vers quoi nous nous sommes dirigés. Il est cependant rapidement apparu que nous avons mis en évidence un phénomène intéressant, qui est la possibilité de faire tourner la polarisation de modes guidés sur une distance très courte grâce à un faible nombre de structures.

Dans ce chapitre, nous allons donc revenir sur les résultats à l'origine de notre intérêt pour cette propriété, puis nous détaillerons les résultats obtenus pour trois structures différentes, mais permettant toutes de convertir la polarisation. Notons que dans tout ce qui suit, nous avons fait l'approximation que nos structures étaient fabriquées sur des guides plans, c'est-à-dire que les simulations comportaient des conditions périodiques suivant la direction  $\vec{y}$ .

### 4.1 Premiers résultats

À l'origine, l'effet de rotation de la polarisation n'avait été ni recherché, ni envisagé. C'est en tentant de simuler la réponse en configuration guidée de structures initialement fabriquées par nos collègues du LPN (figure 4.1) que l'effet nous est apparu. Que ce soit pour le cas TE ou le cas TM, nous avons pu constater autour de la résonance l'apparition de modes guidés ne pouvant pas venir du champ incident.

Il est important de noter que la méthode d'analyse qui avait ici été utilisée est relativement

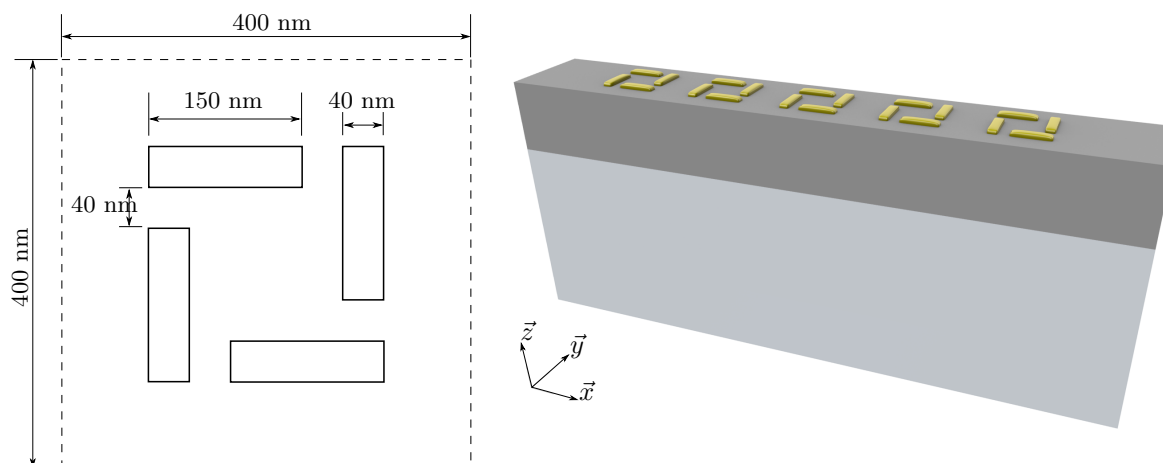


FIGURE 4.1 – Schéma des structures initialement simulées pour lesquelles la rotation de polarisation a été mise en évidence et rendu des mêmes structures sur une tranche d’un guide 300 nm d’épaisseur. La propagation se fait suivant la direction  $\vec{x}$ .

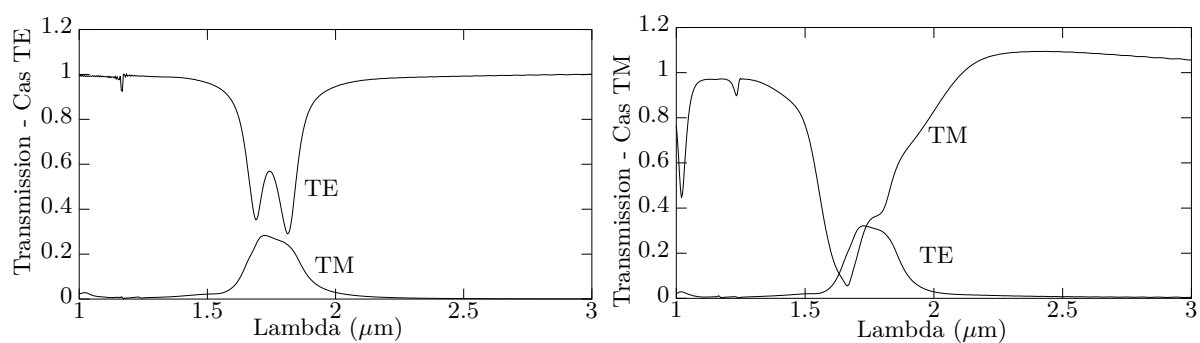


FIGURE 4.2 – Spectres de transmission rudimentaires pour les structures définies par la figure 4.1.

basique. Elle consiste simplement à intégrer sur la section du guide les valeurs absolues des composantes du champ, et à assigner aux modes TE les résultats venant de la composante  $E_y$ , et aux modes TM les résultats venant de la composante  $E_x$ . Le tout est normalisé par rapport à ce que l’on obtiendrait en l’absence de structures. Le traitement est rudimentaire et explique pourquoi certains spectres de “transmission” peuvent contenir des valeurs supérieures à 1. Ces résultats sont donnés par la figure 4.2. Une méthode plus correcte est détaillée dans la section 4.3.

Cette méthode d’analyse ne définissant que la transmission en “unités de champ”, l’efficacité de conversion des structures est bien moindre que ce que laisse imaginer la figure 4.2, et le taux d’énergie convertie est de l’ordre de quelques pourcents au mieux. Après avoir modifié les

structures pour observer comment l'effet évoluait, il a été établi que la conversion de polarisation ne provenait pas de la structure en carré elle-même, mais des L éclatés qu'elle comprenait. Ceci nous a mis sur la piste des structures définies dans la section suivante.

## 4.2 Structures étudiées

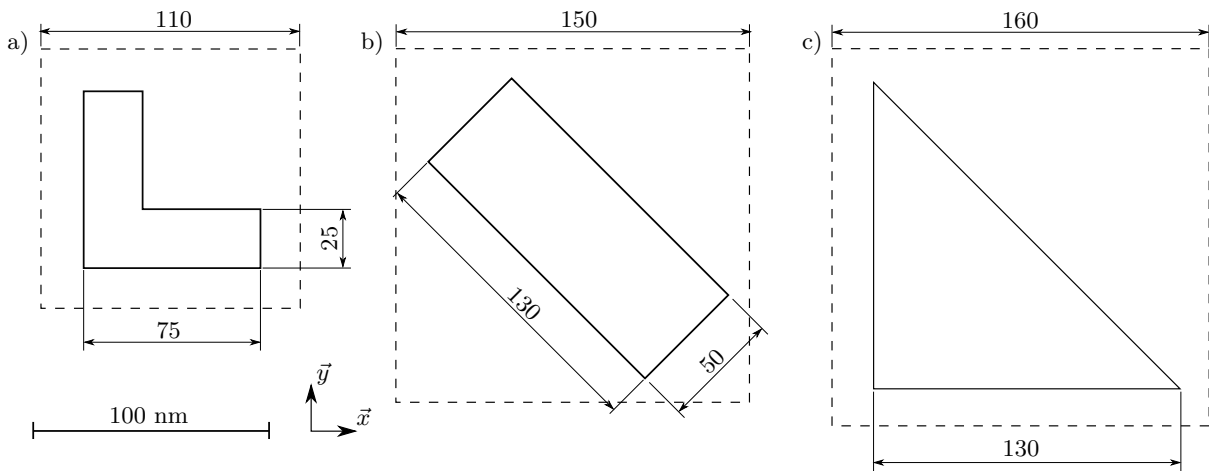


FIGURE 4.3 – Schéma des cellules élémentaires pour a) les structures en L, b) à base bâtonnets ou c) à base de nanotriangles. Toutes ont une épaisseur de 25 nm. Toutes les mesures sont en nanomètres.

Les structures en L furent les plus naturelles après celles présentées dans la section précédente, puisqu'elles étaient pour ainsi dire déjà présentes dans la disposition en carré. Les bras de chaque L font 75 nm de long pour 25 nm de large, et une épaisseur de 25 nm. Les bras sont alignés avec les axes  $\vec{x}$  et  $\vec{y}$ , et la périodicité dans les deux directions est de 110 nm.

Les structures à base de bâtonnets sont un simple réseau carré de bâtonnets de 130 nm de long pour 50 nm de large et 25 nm d'épaisseur. La seule spécificité de ces bâtonnets est leur angle de  $45^\circ$  par rapport à l'axe  $\vec{x}$ , et donc le même angle par rapport à la direction de propagation dans le guide. La périodicité de cette structure est de 150 nm.

Les structures à base de nanotriangles sont le mariage entre les deux structures précédentes. Les triangles sont rectangles et isocèles, de petit coté de longueur 130 nm, et avec une épaisseur de 25 nm. Comme pour les L, les petits côtés sont alignés avec les axes  $\vec{x}$  et  $\vec{y}$ . La périodicité est de 160 nm dans les deux directions. L'ensemble de ces structures est représenté par la figure

## 4.3.

Toutes les structures sont considérées comme constituées d'or, dont la dispersion est représentée par un modèle de Drude :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_D^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (4.1)$$

avec  $\varepsilon_\infty = 6.0031$ ,  $\omega_D = 1.2772 \cdot 10^{16}$  Hz et  $\gamma = 3.4578 \cdot 10^{13}$  Hz.

En ce qui concerne le guide lui-même, il a été pris comme une couche d'indice constant  $n_{\text{Si}} = 3.42$  entre un substrat d'indice  $n_{\text{SiO}_2} = 1.49$  et un superstrat d'indice 1. Dans tous les résultats présentés ci-dessous, l'épaisseur du guide a été fixée à 250 nm, ce qui lui permet d'être monomode à 1.55  $\mu\text{m}$ . Il devient multimode en dessous de 1.4  $\mu\text{m}$  avec l'apparition d'un nouveau mode TE. Des essais supplémentaires avaient été faits pour voir si un guide monomode au dessus de 1  $\mu\text{m}$  pouvaient être utilisé, mais il est apparu que des épaisseurs trop faibles pouvaient éteindre complètement la conversion de polarisation et transformer les structures en simples filtres.

### 4.3 Méthode d'analyse

La manière dont les résultats sont analysés à partir de ce point mérite de s'y attarder un peu. On fait l'hypothèse que le champ à la sortie du guide est une combinaison des modes guidés supportés par ce guide, et qu'il s'écrit donc de la forme

$$\vec{E}(z) = a_0\vec{\varphi}_0(z) + a_1\vec{\varphi}_1(z) + a_2\vec{\varphi}_2(z) + \dots \quad (4.2)$$

où  $\vec{\varphi}_i$  est un des modes. Les modes étant orthogonaux entre eux, on a alors

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(z) \cdot \vec{\varphi}_i(z) dz}{\int_{-\infty}^{\infty} \vec{\varphi}_i(z) \cdot \vec{\varphi}_i(z) dz} = a_i \quad (4.3)$$

Ceci devrait théoriquement permettre de décomposer le champ sur l'ensemble des modes guidés, mais deux problèmes liés à la FDTD surviennent : d'une part la fenêtre de calcul n'est

pas infiniment grande, et on ne peut donc intégrer que sur une épaisseur finie, et le champ est discrétisé. On définit alors la fonction

$$S(\vec{A}, \vec{B}) = \sum_{k=k_1}^{k_2} \vec{A}(k\Delta z) \cdot \vec{B}(k\Delta z) \quad (4.4)$$

qui sert de produit scalaire approximatif. On a alors

$$S(\vec{E}, \vec{\varphi}_i) = \dots + a_{i-1}S(\vec{\varphi}_{i-1}, \vec{\varphi}_i) + a_iS(\vec{\varphi}_i, \vec{\varphi}_i) + a_{i+1}S(\vec{\varphi}_{i+1}, \vec{\varphi}_i) + \dots \quad (4.5)$$

que l'on peut mettre sous forme matricielle. Dans le cas où il y aurait juste trois modes supportés, on aurait donc

$$\begin{pmatrix} S(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_1) & S(\vec{\varphi}_2, \vec{\varphi}_1) & S(\vec{\varphi}_3, \vec{\varphi}_1) \\ S(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2) & S(\vec{\varphi}_2, \vec{\varphi}_2) & S(\vec{\varphi}_3, \vec{\varphi}_2) \\ S(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_3) & S(\vec{\varphi}_2, \vec{\varphi}_3) & S(\vec{\varphi}_3, \vec{\varphi}_3) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S(\vec{E}, \vec{\varphi}_1) \\ S(\vec{E}, \vec{\varphi}_2) \\ S(\vec{E}, \vec{\varphi}_3) \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

et les coefficients sont alors obtenus en résolvant ce système. Il faut noter que le champ ici utilisé est celui obtenu après une transformée de Fourier temporelle et une intégration suivant l'axe  $\vec{y}$  pour éliminer d'éventuels modes diffractés.

Une fois les différents coefficients séparés, l'énergie portée par chaque mode est alors calculée, et normalisée par rapport à l'énergie portée par le champ incident, ce qui permet d'obtenir des spectres de transmission en énergie.

## 4.4 Cas des structures en L

Comme le montrent les figures 4.4 et 4.5 les structures en L présentent deux résonances autour de  $1.55 \mu\text{m}$ . La première à cette longueur d'onde et une seconde un peu en dessous de  $1 \mu\text{m}$ , la première étant celle que nous avons optimisée. Que ce soit dans le cas TE ou TM, l'efficacité de conversion en énergie tourne autour de 45 %. Dans le cas TE, une quantité significative d'énergie non convertie est transmise à la résonance, contrairement au cas TM. Dans l'ensemble, la structure est très peu réfléchissante avec moins de 4% de l'énergie réfléchie, tous

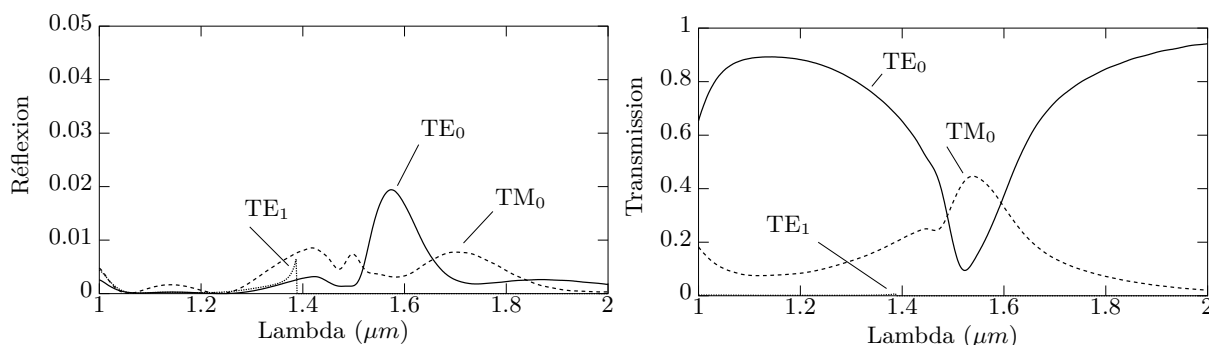


FIGURE 4.4 – Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de L dans le cas TE

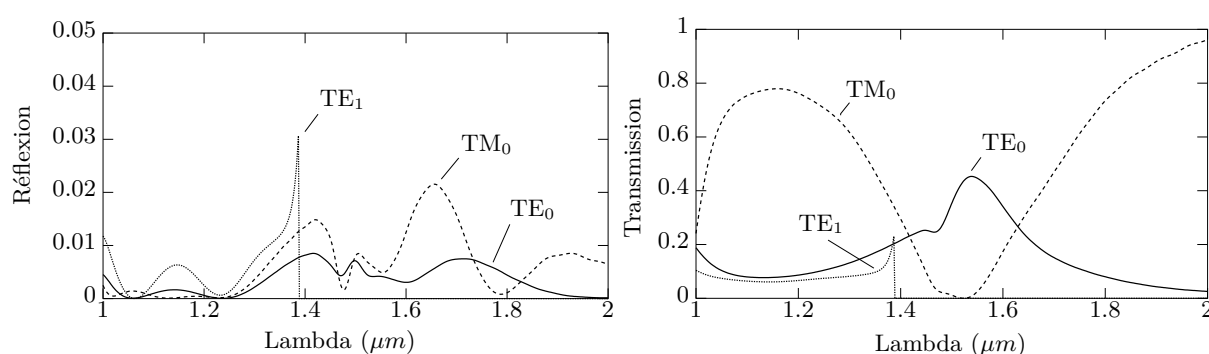


FIGURE 4.5 – Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de L dans le cas TM

modes confondus. Dans le cas TM, on peut constater l'apparition de modes  $TE_1$  en dessous de leur fréquence de coupure. Si le guide était plus épais ceux-ci seraient aussi présents à la fréquence de résonance. L'efficacité de conversion à la résonance peut être résumée de la manière suivante :

- Position de la résonance :  $1.54 \mu\text{m}$
- Conversion  $TE_0$  vers  $TM_0$  : 44.6 %
- Transmission  $TE_0$  vers  $TE_0$  : 12.5 %
- Conversion  $TM_0$  vers  $TE_0$  : 45.3 %
- Transmission  $TM_0$  vers  $TM_0$  : 0.85 %

## 4.5 Cas des nanorods

Les structures à base de bâtonnets ne comportent qu'une seule résonance à proximité de  $1.55 \mu\text{m}$  (figures 4.6 et 4.7) . L'efficacité de conversion est notablement plus grande que pour la

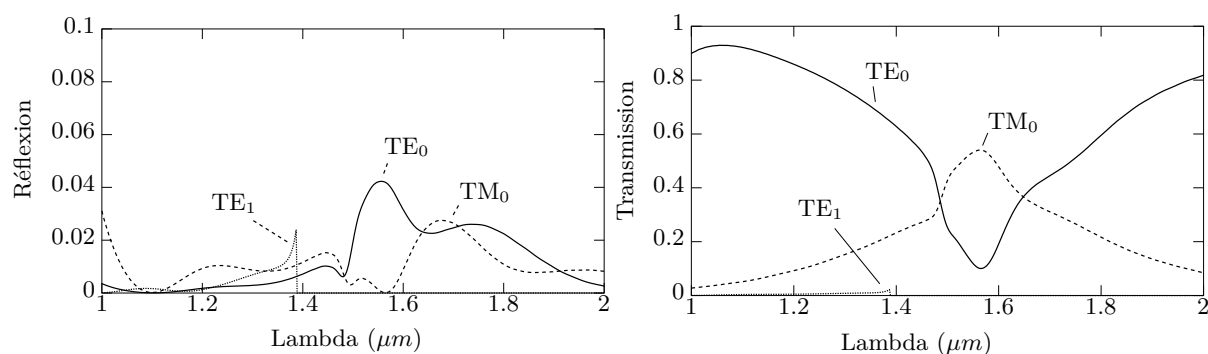


FIGURE 4.6 – Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de nanorods dans le cas TE

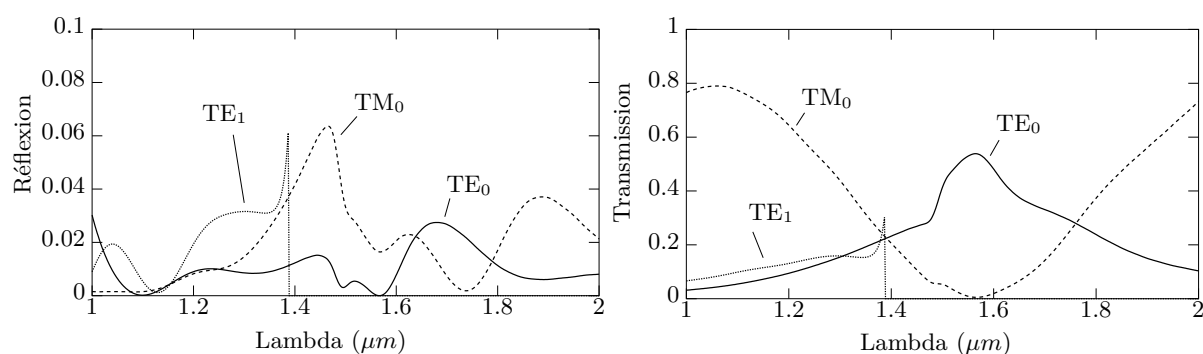


FIGURE 4.7 – Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base de nanorods dans le cas TM

structure à base de L, et l'énergie transmise mais non convertie dans le cas TE est légèrement moindre. La structure présente cependant une réflexion un peu plus élevée que précédemment, mais qui reste faible devant la quantité d'énergie convertie. Encore une fois, on peut observer l'apparition d'un mode  $TE_1$  dans le cas TM. L'efficacité de conversion à la résonance peut être résumée de la manière suivante :

- Position de la résonance :  $1.56 \mu\text{m}$
- Conversion  $TE_0$  vers  $TM_0$  : 54 %
- Transmission  $TE_0$  vers  $TE_0$  : 10 %
- Conversion  $TM_0$  vers  $TE_0$  : 53.8 %
- Transmission  $TM_0$  vers  $TM_0$  : 0.5 %



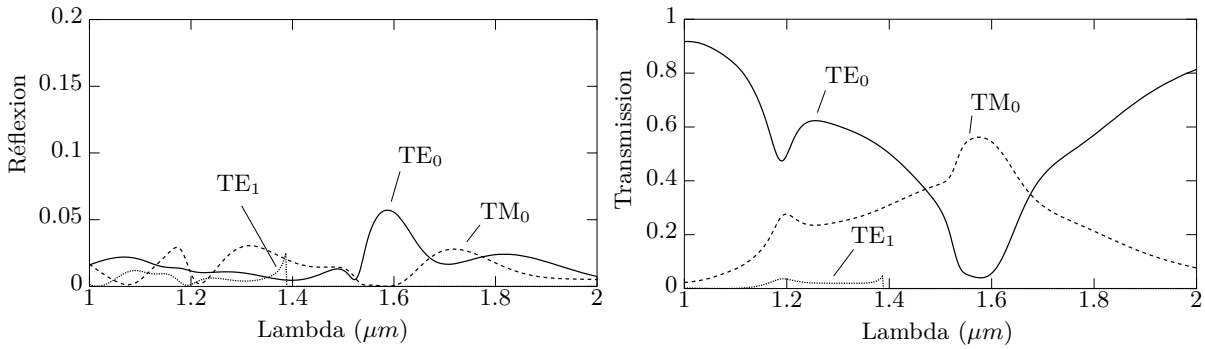


FIGURE 4.8 – Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base nanotriangles dans le cas TE

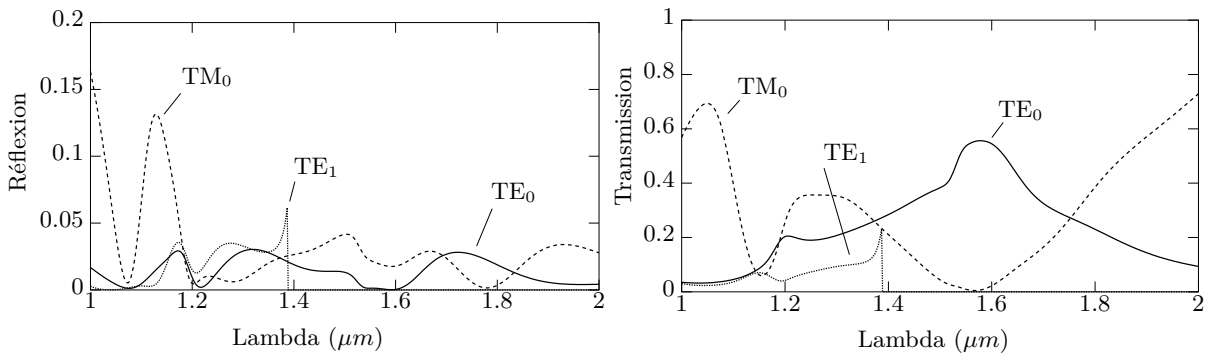


FIGURE 4.9 – Spectres de réflexion et de transmission pour les structures à base nanotriangles dans le cas TM

## 4.6 Cas des nanotriangles

Les structures à base de nanotriangles présentent deux résonances proches de  $1.55 \mu\text{m}$  (figures 4.8 et 4.9), la première étant à cette longueur d'onde et la seconde à  $1.2 \mu\text{m}$ . Une fois encore, l'optimisation de la structure s'est faite sur la première. L'efficacité de cette structure n'est que très légèrement meilleure que précédemment, mais la quantité d'énergie transmise sans conversion dans le cas TE est deux fois moindre, ce qui en fait la structure la plus efficace des trois si l'objectif est purement de convertir l'énergie. Encore une fois, la structure est relativement peu réfléchissante et le cas TM fait apparaître un mode  $\text{TE}_1$ . L'apparition de ce même mode dans le cas TE est par contre beaucoup plus prononcée que précédemment où il était pour ainsi dire inexistant. L'efficacité de conversion à la résonance peut être résumée de la manière suivante :

- Position de la résonance :  $1.58 \mu\text{m}$
- Conversion  $\text{TE}_0$  vers  $\text{TM}_0$  : 56.1 %

- Transmission  $TE_0$  vers  $TE_0$  : 4 %
- Conversion  $TM_0$  vers  $TE_0$  : 55.6 %
- Transmission  $TM_0$  vers  $TM$  : 0.64 %

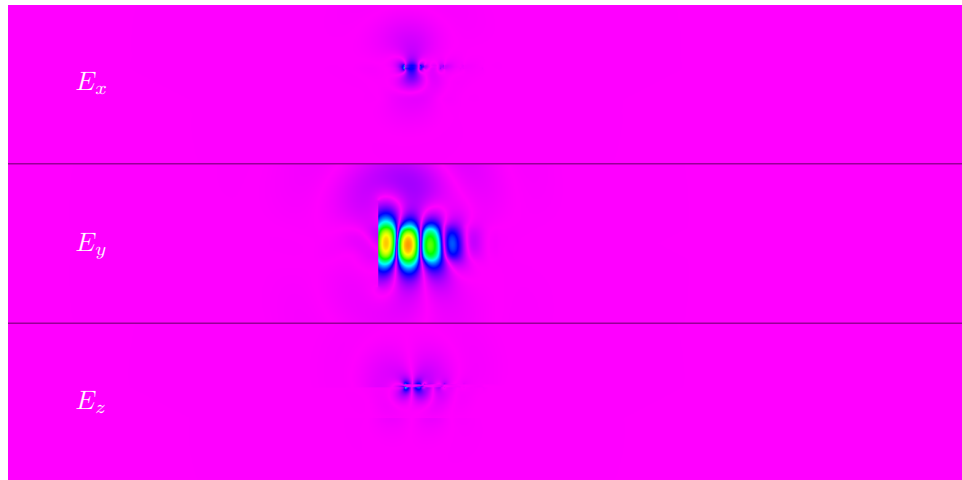
## Dynamique

Tous les résultats précédents ont été présentés pour le cas d'un régime permanent, déduit des simulations FDTD grâce à la transformée de Fourier. Cependant, il peut être intéressant de se pencher sur la dynamique du système. Les figures 4.10 et 4.11 présentent chacune trois instantanés des simulations, dans les cas TE et TM.

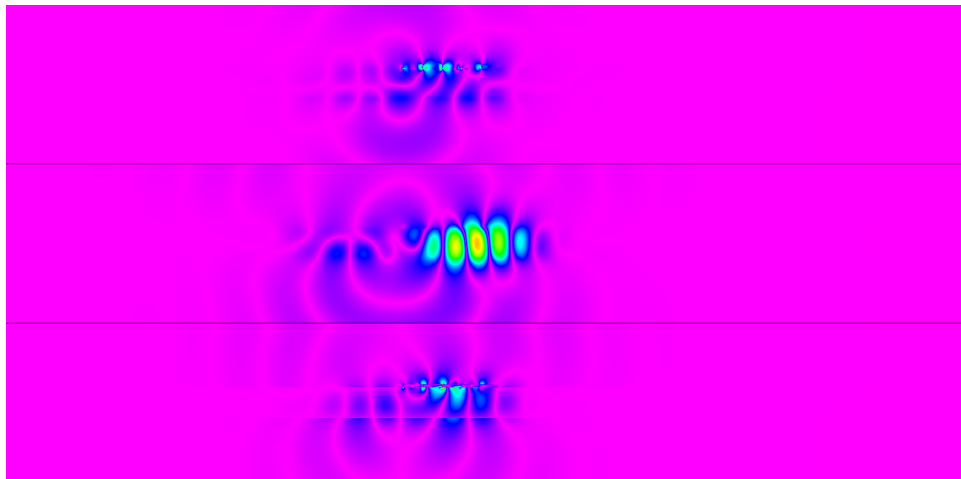
Prenons d'abord le cas TE (figure 4.10). Initialement les modes guidés, que l'on voit ici par l'intermédiaire des composantes  $E_y$  du champ, se propagent jusqu'à rencontrer la structure (itération 120,  $1.16 \cdot 10^{-15}$ s) et pénètrent alors dans sa zone d'interaction. Une faible partie du pulse incident est réfléchié à ce moment là, et une faible partie de l'énergie est diffusée hors du guide. Alors que le champ traverse les structures, celles-ci emmagasinent de l'énergie et se mettent à rayonner suivant une direction non parallèle à la polarisation incidence (voir section suivante). Ce rayonnement donne alors naissance aux autres modes guidés qui commencent à se propager (itération 200,  $1.93 \cdot 10^{-15}$ s). Le pulse incident traverse rapidement l'ensemble de la structure, mais l'énergie stockée dans celle-ci ne se dissipe pas à la même vitesse. Ainsi, la structure continue de rayonner longtemps après le passage du champ incident (itération 550,  $5.30 \cdot 10^{-15}$ s), et ce dans les deux directions. Dans le cas TM (figure 4.11), le comportement est globalement identique, à ceci près que le temps mis par l'énergie pour se dissiper est notablement plus long.

Même si ce que nous avons décrit ici concerne principalement les nanotriangles, le comportement dans le cas des structures en L ou des bâtonnets suit les mêmes étapes et le même principe.

Itération 120



Itération 200



Itération 550

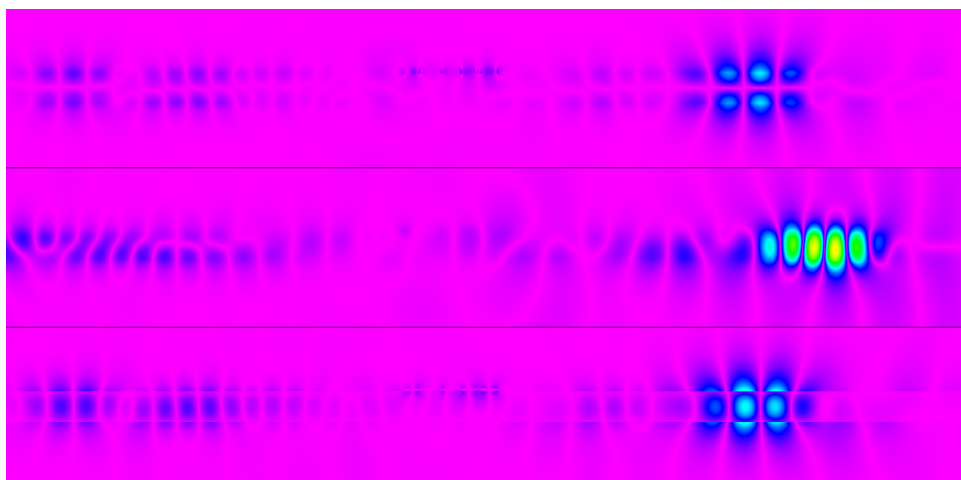
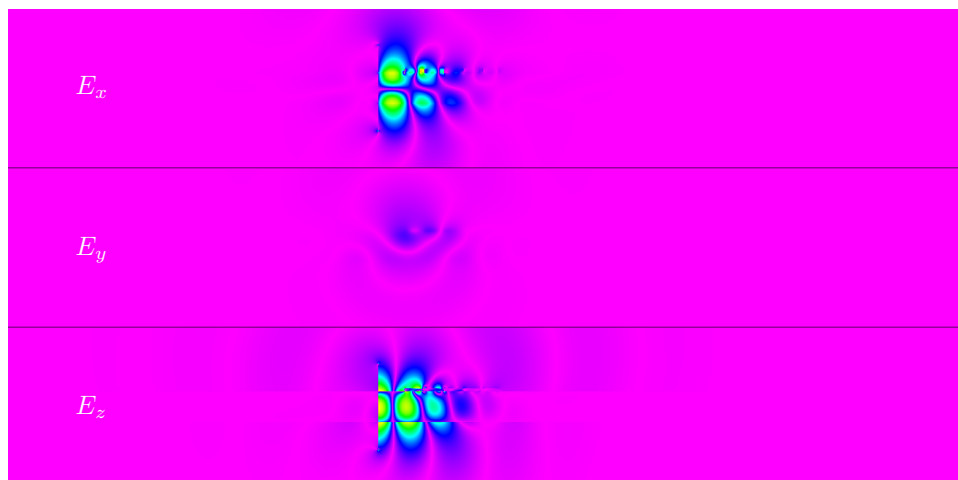
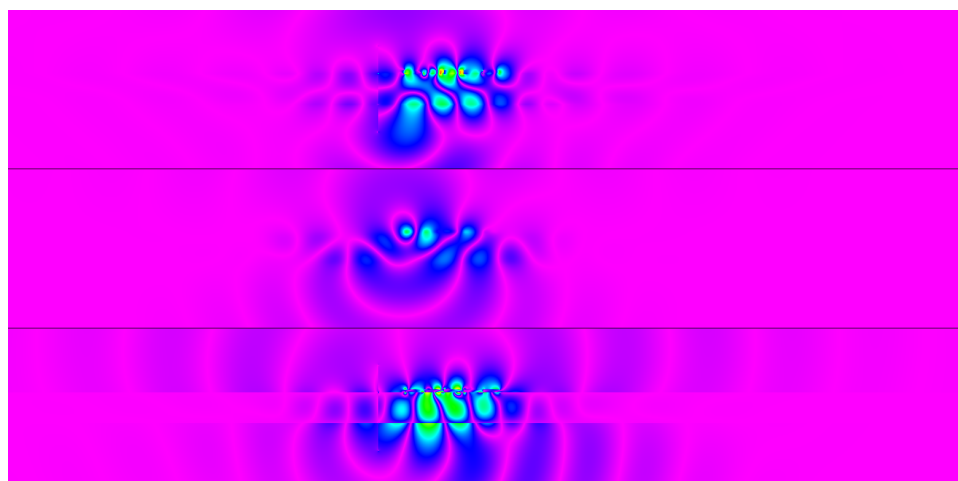


FIGURE 4.10 – Instantanés d’une simulation dans le cas de l’injection TE, pour un guide de 250 nm d’épaisseur et une structure constituée de 5 nanotriangles de long, pour les itérations 120, 200 et 550

Itération 220



Itération 300



Itération 650

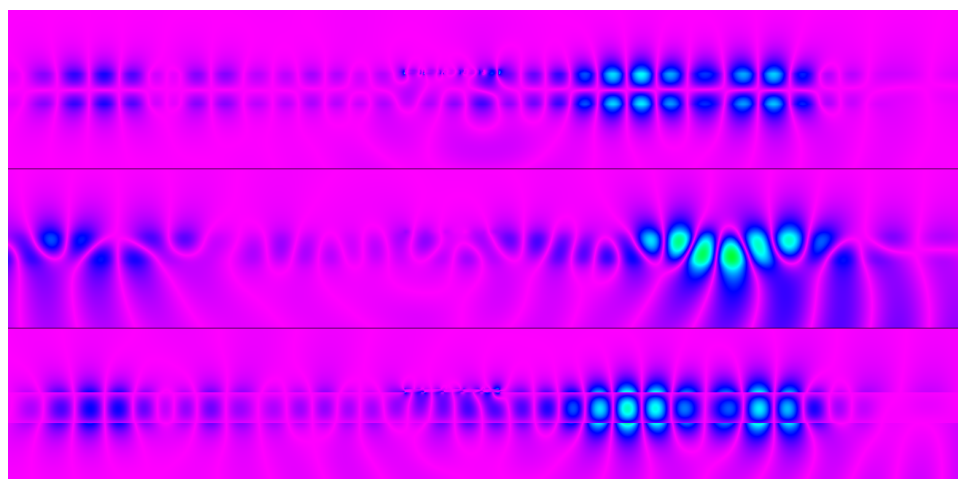


FIGURE 4.11 – Instantanés d'une simulation dans le cas de l'injection TM, pour un guide de 250 nm d'épaisseur et une structure constituée de 5 nanotriangles de long, pour les itérations 220, 300 et 650

## 4.7 Considérations générales aux structures

### 4.7.1 Origine de la conversion de polarisation

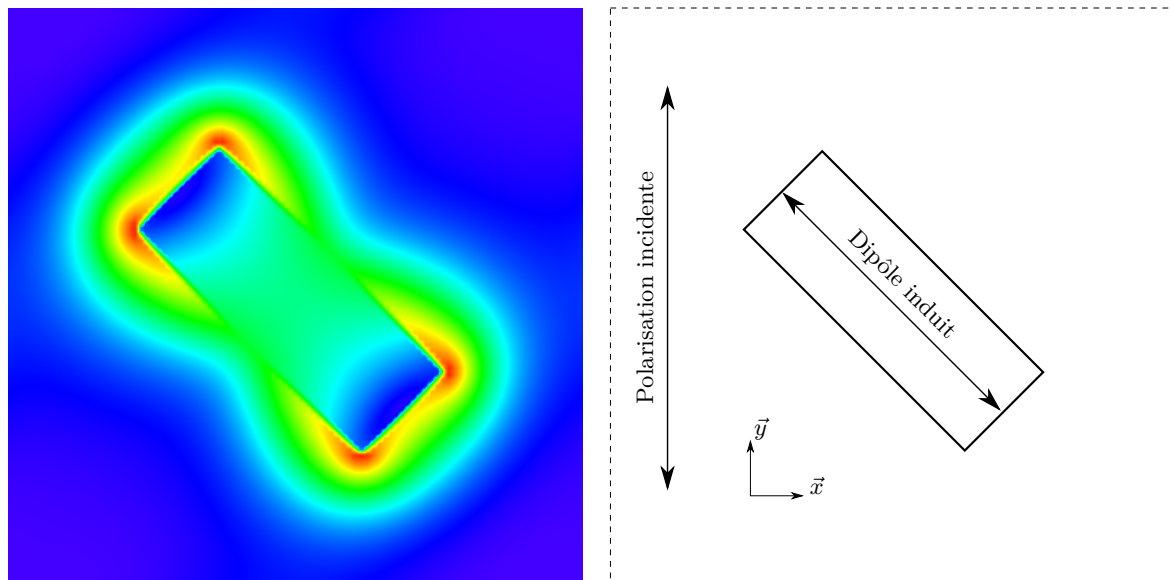


FIGURE 4.12 – Carte de champ autour d'un nanorod sous incidence normale, et diagramme équivalent.

Le mécanisme donnant naissance à une polarisation non présente dans le champ incident est similaire dans les trois structures. Il vient du fait que, à la résonance, celles-ci se comportent principalement comme un dipôle qui n'est parallèle ni à  $\vec{x}$ , ni à  $\vec{y}$  (voir figure 4.12). Celui-ci peut alors être excité aussi bien par des modes TE que par des modes TM. Une fois excité, celui-ci se met à osciller suivant sa direction naturelle, et peut se décomposer comme la somme de deux dipôles d'amplitude non nulle suivant les axes  $\vec{x}$  et  $\vec{y}$ , et chacun d'eux génère alors le mode guidé qui lui est lié.

### 4.7.2 Symétries

D'après nos essais, toute tentative d'augmenter le degré de symétrie des structures a résulté en une baisse de l'efficacité de conversion, et celle-ci semble donc profondément liée à leur asymétrie. Bien que des dipôles soient toujours induits dans les structures par le champ incident, l'augmentation de la symétrie semble les faire interférer destructivement les uns avec les autres.

Une autre propriété de “symétrie” est dans le comportement même des structures. En effet, à la résonance, on peut s’apercevoir que les efficacités de conversion TE vers TM et TM vers TE sont extrêmement similaires. En réalité, les courbes de conversion se superposent presque à la résonance, et ce pour les trois structures.

### 4.7.3 Nombre de cellules élémentaires

Dans tout ce qui a précédé, excepté pour les premiers résultats, l’ensemble des spectres de transmission et de réflexion ont été calculés pour le nombre optimal de structures, ces valeurs étant :

- structures en L : 8 cellules, pour une longueur totale de 845 nm
- bâtonnets : 5 cellules, pour une longueur totale de 730 nm
- nanotriangles : 5 cellules, pour une longueur totale de 770 nm

Le nombre optimal de cellules est contraint d’une part par l’efficacité d’une cellule unique, et d’autre part par les pertes dans les structures. Ainsi, une seule structure ne sera pas suffisante pour obtenir une efficacité maximale, et un nombre trop important de structures sera contre-productif. Lorsque l’on cherche à tracer l’évolution de l’efficacité de conversion en fonction du nombre de cellules élémentaires, on obtient la figure 4.13, dans le cas des nanotriangles, et des figures similaires dans les deux autres cas (mais centrés sur 8 dans pour les structures en L).

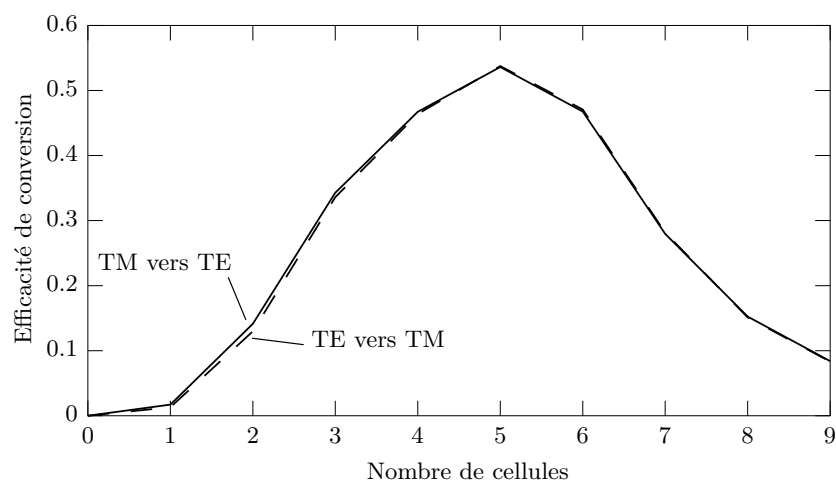


FIGURE 4.13 – Efficacité de conversion pour les nanotriangles en fonction du nombre de cellules élémentaires constituant la structure

Ce comportement est commun aux trois structures présentées dans ce chapitre, un nombre plus grand de cellules étant nécessaire dans le cas des L du fait de la petite taille de la cellule élémentaire. Il est bon de noter aussi que l'on peut observer un décalage de la position de la résonance en fonction du nombre de cellules.

## 4.8 Dissymétrie des nanotriangles : propriété secondaire

Il reste une propriété, secondaire mais néanmoins notable, à détailler. Elle est apparue en tentant de répondre à la question “Que se passerait-il si la lumière venait de l'autre direction?”, ce qui revient à simuler la même structure après une opération de symétrie par rapport au plan  $(\vec{y}, \vec{z})$ . Après simulation, il est apparu que la nouvelle structure se comportant différemment de sa structure soeur, ce qui est résumé par la figure 4.14. On peut y constater que, aussi bien

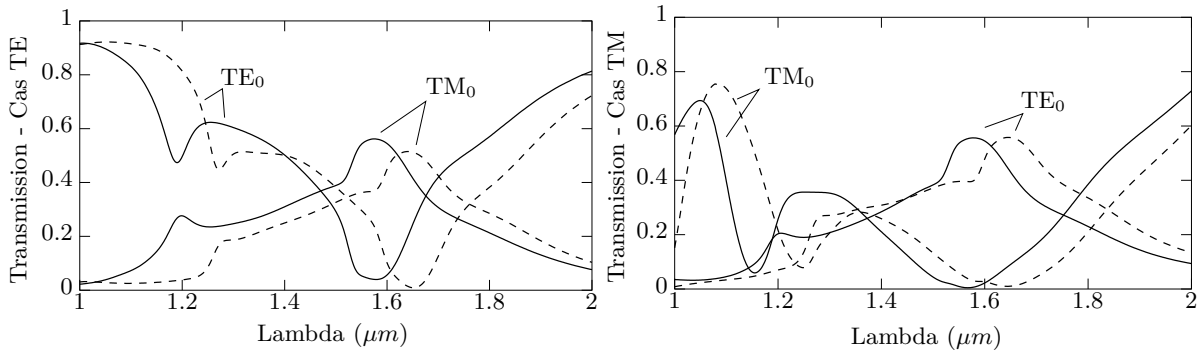


FIGURE 4.14 – Spectres de transmission pour les nanotriangles (en trait plein) ainsi que leur symétrique par rapport au plan  $(\vec{y}, \vec{z})$  (en pointillés) dans les cas TE et TM

dans le cas TE que TM, la longueur d’onde de résonance de la structure inversée est décalée de quelques dizaines de nanomètres par rapport à celle de la structure d’origine. Par ailleurs, bien que les spectres des deux structures aient un aspect globalement similaire avec la présence des mêmes résonances, on peut constater une différence notable au niveau de la forme. Ceci est particulièrement prononcé dans le cas TE avec une modification significative de l’amplitude de la résonance, ce qui brise la symétrie de conversion entre les cas TE et TM qui était présente dans la structure d’origine. La provenance de cette brisure n’a pas encore été déterminée.

Une conséquence directe de ceci est que vouloir modéliser ce système par un milieu effectif “classique” est voué à l’échec. En effet dans le cas présent les paramètres effectifs dépendraient

de l'orientation du vecteur d'onde, ce qui n'est pas compatible avec un modèle basé sur de simples tenseurs de permittivité et perméabilité.

## 4.9 Conclusion

Nous avons pu montrer au cours de ce chapitre qu'il était possible de réaliser une fonction élémentaire pour l'optique guidée grâce à un faible nombre de structures, le tout se faisant sur une distance deux fois plus courte que la longueur d'onde dans le vide et avec une efficacité supérieure à 50 %. Qui plus est, les structures en question ne nécessitent pas de modification profonde de la géométrie du guide et peuvent être fabriquées par des techniques "conventionnelles" de lithographie par faisceau d'électrons.

Plusieurs choses restent à faire cependant. La première est de comprendre exactement l'origine du décalage spectral lorsque les nanotriangles sont inversés. La seconde est de simuler ces structures non pas sur un guide planaire, mais sur un guide de section finie. Ceci est nécessaire en vue de pouvoir caractériser l'efficacité d'un éventuel prototype avant sa fabrication. Enfin, les pertes restent relativement importantes dû à l'utilisation de métal, et l'utilisation de matériaux actifs pour augmenter ces pertes reste une voie à explorer.





## Chapitre 5

# Matériaux à gain en FDTD

Comme pour beaucoup d'autres choses, la FDTD telle que formulée initialement par Yee n'est pas directement capable de simuler des matériaux actifs. Cependant, travaillant dans le domaine temporel, elle est fort bien adaptée à une résolution en parallèle d'autres équations différentielles impliquant le temps, ce qui est fort pratique dans le cas des matériaux actifs puisque le modèle faisant appel aux équations de population repose sur leur évolution dans le temps. Ainsi il est possible de greffer directement ce modèle sur la FDTD, permettant alors de simuler des matériaux parfaitement non-linéaires et actifs.

### 5.1 Modèle

#### 5.1.1 Fondamentaux

Le modèle présenté ici est basé sur les écrits d'Anthony Siegman dans son livre *Lasers* [38], et a été repris et implémenté en FDTD initialement par Nagra et York [37]. L'idée principale est de traiter les matériaux actifs de manière quasi classique, et dont les transitions stimulées entre les différents niveaux peuvent être modélisées par des oscillateurs quasi-lorentzien.

La quantité utile du modèle est alors la polarisation  $\vec{P}(t)$ , qui est décrite par l'équation 5.1

$$\frac{d^2 \vec{P}(t)}{dt^2} + \Delta\omega_a \frac{d\vec{P}(t)}{dt} + \omega_a^2 \vec{P}(t) = \kappa \Delta N(t) \vec{E}(t) \quad (5.1)$$

où  $\omega_a$  est la fréquence de la transition,  $\Delta\omega_a$  est la largeur fréquentielle de la raie d'émission,

$\Delta N$  est la différence de population entre deux niveaux et  $\kappa$  représente la force de l'oscillateur. Un matériau peut comporter plusieurs transitions stimulées, qu'elles soient utilisées pour de l'émission ou du pompage optique. Aussi, à chaque transition correspondra une équation de polarisation. A ceci viennent s'ajouter les équations de population, qui ont pour forme générale

$$\frac{dN_i}{dt} = \beta_i(t) + \sum_{j=0}^k \gamma_{ij} N_j(t) \quad (5.2)$$

Elles ne représentent pas directement des nombres d'atomes, mais des densités d'atomes. Une des hypothèses du modèle est que le milieu est considéré comme une matrice d'indice optique donné, dans laquelle sont dilués des atomes de matériau actif.

Le terme  $\beta_i$  comprend l'ensemble des termes des transitions "forcées" par des paramètres extérieurs, que ce soit par des termes de pompes scalaires, ou par la transition stimulée. Si  $\beta$  est une transition stimulée, alors on a

$$\beta = \pm W_s = \pm \frac{1}{\hbar\omega_a} \vec{E}(t) \cdot \frac{d\vec{P}(t)}{dt} \quad (5.3)$$

Le produit scalaire représente le travail que le champ effectue sur le milieu, et correspond donc à une énergie transférée depuis le champ vers le matériau. La division par  $\hbar\omega_a$  permet de convertir cette énergie en populations. C'est ce terme qui permet d'avoir un gain saturable dans le modèle.

### Système à quatre niveaux

Pour illustrer les équations, l'exemple d'un système à quatre niveaux simplifié, tel que dans la figure 5.1, est approprié. On considère que la pompe est assurée par un terme scalaire  $W_p$ , et que les populations d'un niveau ne peuvent au mieux se relaxer que vers le niveau directement inférieur. La transition stimulée se fait entre les niveaux 1 et 2. Ainsi, les équations de population

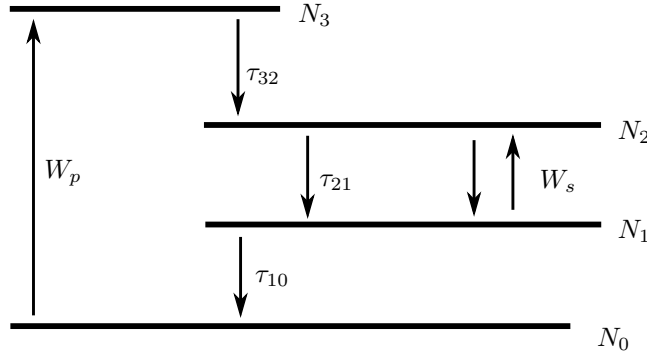


FIGURE 5.1 – Schéma d'un système à quatre niveaux simplifié

sont

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dN_3}{dt} = W_p - \gamma_3 N_3 \\ \frac{dN_2}{dt} = \gamma_{32} N_3 - \gamma_2 N_2 + \frac{1}{\hbar \omega_a} \vec{E}(t) \cdot \frac{d\vec{P}(t)}{dt} \\ \frac{dN_1}{dt} = \gamma_{21} N_2 - \gamma_1 N_1 - \frac{1}{\hbar \omega_a} \vec{E}(t) \cdot \frac{d\vec{P}(t)}{dt} \\ \frac{dN_0}{dt} = \gamma_{10} N_1 - W_p \end{array} \right. \quad (5.4)$$

En l'absence de champ, la différence de population à l'équilibre est assurée et vaut

$$\Delta N = N_1 - N_2 = W_p (\tau_1 - \tau_2) \quad (5.5)$$

tant que  $\tau_1 < \tau_2$ .

### 5.1.2 Approximation du champ faible

Une des difficultés avec ce modèle est d'évaluer correctement le coefficient  $\kappa$ . En effet, si l'on se fie à Siegman [38] ce coefficient, représentant la force d'oscillateur, peut être altéré de manière conséquente par rapport au modèle théorique, avec un coefficient multiplicateur pouvant varier de 1 à  $10^{-4}$ . Le problème est alors de connaître le  $\kappa$  correspondant au matériau réel.

Il est possible de relier simplement ce paramètre à des mesures expérimentales, mais ceci nécessite de faire quelques hypothèses :

1. le matériau est excité et les populations se trouvent à l'équilibre
2. le gain ou l'absorption du matériau est mesuré expérimentalement, et le  $\Delta N$  correspondant est connu
3. lors de la mesure, la puissance utilisée pour le champ à la longueur d'onde de transition est très faible

En faisant l'approximation que le champ est faible, alors on peut faire l'approximation que les termes  $W_{stim}$  dans les équations de populations sont négligeables devant tout le reste. Autrement dit, les transitions stimulées sont trop peu fréquentes pour affecter notablement les populations. Par ailleurs, si les populations dans le matériau sont initialement à l'équilibre, alors on peut dire que  $\Delta N(t)$  est une constante, et donc :

$$\frac{d^2 \vec{P}(t)}{dt^2} + \Delta\omega_a \frac{d\vec{P}(t)}{dt} + \omega_a^2 \vec{P}(t) = \kappa \Delta N \vec{E}(t) \quad (5.6)$$

Par transformée de Fourier, on obtient alors

$$\vec{P}(\omega) = \frac{\kappa \Delta N}{\omega_a^2 - \omega^2 - i\Delta\omega_a \omega} \vec{E}(\omega) \quad (5.7)$$

Par définition,

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon_0 \vec{E}(\omega) + \vec{P}_{matrice}(\omega) + \vec{P}_{at}(\omega) = \varepsilon(\omega) \vec{E}(\omega) \quad (5.8)$$

où

$$\vec{P}_{matrice}(\omega) = \varepsilon_0 \chi_{matrice} \vec{E}(\omega) \quad (5.9)$$

est la polarisation de la matrice englobant les atomes de matériau actif, et  $\vec{P}_{at}$  est la polarisation de ces mêmes atomes, définie précédemment. On peut alors en déduire la permittivité de

l'ensemble

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left( \varepsilon_r + \frac{\kappa \Delta N}{\varepsilon_0(\omega_a^2 - \omega^2 - i\Delta\omega_a\omega)} \right) \quad ; \quad \varepsilon_r = 1 + \chi_{matrice} \quad (5.10)$$

où  $\varepsilon_r$  est défini comme lié à la matrice seule. Maintenant, on sait que

$$(n'')^2 = \frac{-\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2} \quad (5.11)$$

et

$$\begin{cases} \varepsilon'(\omega_a) = \varepsilon_r \\ \varepsilon''(\omega_a) = \frac{\kappa \Delta N}{\varepsilon_0 \omega_a \Delta \omega_a} \end{cases} \quad (5.12)$$

On obtient alors le coefficient d'absorption  $\alpha$

$$\alpha = \frac{2n''\omega_a}{c} = \frac{\sqrt{2}\omega_a}{c} \operatorname{sgn}(\Delta N) \sqrt{-\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \left( \frac{\kappa \Delta N}{\varepsilon_0 \omega_a \Delta \omega_a} \right)^2}} \quad (5.13)$$

Si  $\Delta N$  est positif alors le matériau sera absorbant, et présentera du gain dans le cas contraire.

Finalement, on peut inverser la relation précédente

$$\kappa = \frac{\varepsilon_0 \omega_a \Delta \omega_a}{|\Delta N|} \sqrt{\left( \frac{\alpha^2 c^2}{2\omega_a^2} + \varepsilon_r \right)^2 - \varepsilon_r^2} \quad (5.14)$$

On obtient donc une relation qui permet de lier  $\kappa$  au coefficient d'absorption (ou de gain).

### 5.1.3 Implémentation

#### Polarisation, discrétisation temporelle

On démarre avec l'équation de polarisation à l'instant  $t = n\Delta t$ . Pour simplifier le calcul les coefficients  $\omega_a^2$  et  $\Delta\omega_a$  sont remplacés par des termes plus génériques.

$$\left. \frac{d^2 \vec{P}}{dt^2} \right|^n + \beta \left. \frac{d \vec{P}}{dt} \right|^n + \gamma \vec{P}|^n = \kappa \Delta N |^n \vec{E}|^n \quad (5.15)$$

La discrétisation des dérivées premières et secondes est faite avec un pas  $\Delta t$ , cela donne alors

$$\frac{\vec{P}|^{n+1} - 2\vec{P}|^n + \vec{P}|^{n-1}}{(\Delta t)^2} + \beta \frac{\vec{P}|^{n+1} - \vec{P}|^{n-1}}{2\Delta t} + \gamma \vec{P}|^n = \kappa \Delta N|^n \vec{E}|^n \quad (5.16)$$

Après réagencement des termes, on obtient finalement l'équation à implémenter

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{P}|^{n+1} = C_1 \vec{P}|^n + C_2 \vec{P}|^{n-1} + C_3 \Delta N|^n \vec{E}|^n \\ C_1 = \frac{4 - 2\gamma(\Delta t)^2}{2 + \beta\Delta t} \quad ; \quad C_2 = \frac{\beta\Delta t - 2}{2 + \beta\Delta t} \quad ; \quad C_3 = \frac{2(\Delta t)^2 \kappa}{2 + \beta\Delta t} \\ \beta = \Delta\omega_a \quad ; \quad \gamma = \omega_a^2 \end{array} \right. \quad (5.17)$$

### Equations de population, discrétisation temporelle

La discrétisation commence avec les équations de population sous formes générale, à l'instant  $n + 1/2$

$$\frac{dN_i}{dt} \Big|^{n+\frac{1}{2}} = \beta_i |^{n+\frac{1}{2}} + \sum_{j=0}^k \gamma_{ij} N_j |^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.18)$$

Le pas de discrétisation choisi ici est  $\Delta t/2$ . Le terme  $N_j |^{n+\frac{1}{2}}$  est approximé par la moyenne entre les instants  $n$  et  $n + 1$ .

$$\frac{N_i |^{n+1} - N_i |^n}{\Delta t} = \beta_i |^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^k \gamma_{ij} (N_j |^{n+1} + N_j |^n) \quad (5.19)$$

En isolant le terme  $N_i |^{n+1}$ , et en posant  $\gamma_{ii} = \frac{1}{\tau_i}$ , on obtient alors

$$N_i |^{n+1} = \frac{2\tau_i \Delta t}{2\tau_i - \Delta t} \left[ \beta_i |^{n+\frac{1}{2}} + \left( \frac{1}{2\tau_i} + \frac{1}{\Delta t} \right) N_i |^n + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^k \gamma_{ij} (N_j |^{n+1} + N_j |^n) \right] \quad (5.20)$$

La discrétisation du terme de transition stimulée  $W_s$  se fait exactement de la même manière que précédemment

$$W_s|^{n+\frac{1}{2}} = \left[ \vec{E}(t) \cdot \frac{d\vec{P}(t)}{dt} \right] \Big|^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2} (\vec{E}|^{n+1} + \vec{E}|^n) \cdot \frac{\vec{P}|^{n+1} - \vec{P}|^n}{\Delta t} \quad (5.21)$$

Un point important pour l'implémentation est de constater que l'équation 5.20 relie entre elles toutes les populations à l'instant  $n + 1$ . Autrement dit, le calcul de ces populations à cet instant devrait nécessiter une inversion matricielle.

Cependant, ceci ne serait réellement nécessaire que si les populations dans le matériau pouvaient se "relaxer" naturellement vers des énergies plus élevées que leur énergie de départ. Dans les cas qui nous intéressent, nous considérons qu'aucun phénomène physique exotique permettant ceci ne sera présent, et que le matériau tend à minimiser son énergie. Ainsi, la population du niveau  $i$  ne sera pas dépendante de la population au niveau  $i - 1$ , et on peut alors mettre à jour les populations de manière successive en partant du niveau d'énergie le plus élevé. L'équation 5.20 devient finalement

$$N_i|^{n+1} = \frac{2\tau_i + \Delta t}{2\tau_i - \Delta t} N_i|^{n+1} + \frac{2\tau_i \Delta t}{2\tau_i - \Delta t} \left[ \beta_i|^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \sum_{j=i+1}^k \gamma_{ij} (N_j|^{n+1} + N_j|^{n+1}) \right] \quad (5.22)$$

### Mise à jour du champ électrique

L'implémentation de la polarisation dans les équations mêmes de la FDTD est triviale, et repose sur une des équations de Maxwell

$$\nabla \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \quad (5.23)$$

Ainsi, après discrétisation de  $\vec{P}$  dans le temps, on obtient

$$\vec{E}|^{n+1} = \vec{E}|^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \nabla \times \vec{H} - \frac{1}{\varepsilon} (\vec{P}|^{n+1} - \vec{P}|^n) \quad (5.24)$$

Il faut noter que le  $\varepsilon$  est ici celui de la matrice seule.



## Résumé

Une fois l'ensemble des équations discrétisées, il reste à définir l'ordre de mise à jour ainsi que l'espace mémoire requis. Ceci est illustré par la figure 5.2 qui montre comment les différentes équations interagissent les unes avec les autres. Cette figure se concentre sur la mise à jour de

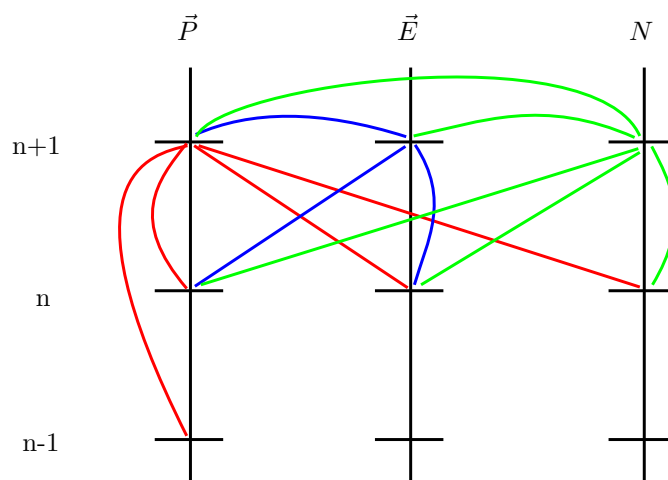


FIGURE 5.2 – Résumé graphique de l'ordre de mise à jour des différentes variables du modèle chaque variable à l'étape  $n+1$ , et fais le lien avec l'ensemble des variables nécessaires. On peut clairement voir que  $P|^{n+1}$  doit être calculé en premier, suivi de  $E|^{n+1}$  et enfin de  $N|^{n+1}$ .

## Discrétisation spatiale ?

Un point qui n'a pas encore été abordé est celui de la discrétisation spatiale. Par simplicité, et parce que l'implémentation de la méthode n'est pas terminée, nous avons choisi de donner aux trois composantes de la polarisation les mêmes positions que les composantes du champ électrique. Les populations sont quant-à elles "délocalisées". Cette approximation rend l'implémentation triviale et n'a aucun impact sur les résultats tant que l'on reste dans l'approximation du champ faible. Cependant, elle créera des erreurs au moment où les transitions stimulées deviendront importantes.

Une autre manière de procéder serait soit de localiser les populations en  $(i, j, k)$ , soit en  $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ . Il faudra faire une interpolation spatiale de  $\Delta N$  pour mettre à jour les

polarisations, et une interpolation de la polarisation et du champ pour calculer correctement les termes de transitions stimulées.

Une troisième manière pourrait être de centrer à la fois les populations mais aussi les composantes de la polarisation au même point, ce qui amènera d'autres interpolations.

Dans les deux cas précédents, le point délicat sera le traitement correct du matériau près des interfaces.

#### 5.1.4 Critique du modèle

##### Emission spontanée

Un des problèmes du modèle est l'absence de prise en compte correcte de l'émission spontanée. Si on se réfère aux équations de population, l'émission spontanée est présente à travers les termes de transition, mais rien ne relie ceux-ci au champ. En effet la "création" de champ se fait grâce à l'évolution de la polarisation, qui n'est liée qu'aux transitions stimulées.

Si on se place dans un cas où à un instant donné, le champ et la polarisation du milieu sont tous les deux nuls, alors d'après l'équation 5.1 il n'y a aucune raison pour que la polarisation du milieu évolue. En effet, la contribution de l'émission spontanée dans le modèle se fait ici uniquement par une modification du  $\Delta N$ , qui a lui seul ne peut "piloter" la polarisation.

La conséquence immédiate est que, si on tente de simuler un système qui pourrait laser, tout en utilisant une puissance de pompe supérieure au seuil, on ne verra pas l'apparition d'une oscillation laser s'il n'y a pas déjà un champ existant à la même fréquence. On est donc obligé, avec ce modèle, de rajouter une excitation supplémentaire qui prendra la place de l'émission spontanée jusqu'à ce que l'influence de l'émission stimulée soit plus importante.

##### Les temps de peuplement

Un problème sérieux de la méthode est que les temps de transition entre les niveaux pour des matériaux réels sont souvent extrêmement longs face au pas temporel auquel nous sommes habituellement confronté ( $\approx 10^{-17}$  s), et les temps de peuplement peuvent varier de plusieurs milliers d'itérations, à plusieurs milliards dans certains cas. Autrement dit, suivant le matériau il peut être vain de vouloir peupler les différents niveaux depuis l'état fondamental, et d'autres

méthodes doivent alors être envisagées.

Avec un terme de pompe scalaire, on considère que la pompe est homogène dans tout le matériau, et donc il est aisé de le mettre dans un état pré-peuplé, qui est aisément calculable, au début de la simulation. C'est cette technique que nous utilisons principalement ici. Si l'on utilise un pompage optique, alors cette méthode ne fonctionne plus, notamment quand la structure présente des inclusions et nanostructures complexes. Même si nous n'avons pas eu le temps de nous pencher sur ce problème particulier, il devrait être possible d'utiliser des cartes de champ de la pompe pour définir des amplitudes relatives de peuplement. On pourrait aussi imaginer d'extrapoler les variations de population en simulation pour avoir un pas de calcul effectif beaucoup plus grand que le pas de la FDTD elle-même dans l'étape de peuplement.

### **Est-ce toujours utile ?**

Une question que l'on peut se poser est de savoir si l'on a réellement besoin de ce modèle, et du temps de calcul supplémentaire et des contraintes qui vont avec. Si on ne cherche pas à avoir d'émission laser, alors la réponse est a priori non. Si le système que l'on simule ne peut pas laser aux puissances de pompe considérées, alors on peut travailler dans l'approximation du champ faible, et utiliser un modèle plus simple décrit uniquement par l'équation 5.1, mais où  $\Delta N$  est fixé à -1, et  $\kappa$  recalculé de manière appropriée par l'équation 5.14.

Si l'hypothèse de base est erronée, à savoir que le système simulé peut laser, alors l'amplitude du champ augmentera de manière exponentielle dans la fenêtre de simulation.

## **5.2 Essais numériques**

### **5.2.1 Matériaux**

Avant de pouvoir faire des essais plus poussés, il a été nécessaire de définir des matériaux appropriés. En mettant de côté les divers jeux de paramètres qui ont été testés pour déboguer l'implémentation, deux matériaux ont principalement été testés. Dans les deux cas, la pompe a été considérée comme un scalaire, même s'il serait plus correct d'utiliser un pompage optique.

### Matériau organique dopé Erbium

Ce matériau correspond à celui développé par nos partenaires de Thalès et qui devait être utilisé dans le cadre du projet Métaphotonique, étant à l'origine destiné à être déposé sur nos métamatériaux. On se concentre ici sur une raie d'émission à 1530 nm, et on considère que le matériau est modélisable par un système à trois niveaux. Le modèle du matériau est inspiré des données de [51] et de Thalès, et est défini de la manière suivante :

- l'indice optique de la matrice est  $n = 1.49$
- la densité d'Erbium est estimée à  $N = 4.86 \cdot 10^{20} \text{ ion} \cdot \text{cm}^{-3}$
- le coefficient de transition du niveau 2 vers le niveau 1 est estimée par  $\gamma_{21} = 15 \cdot 10^4$ .

Le coefficient de transition du niveau 1 vers le niveau fondamental est approximé par

$$\gamma_{10} = 3 \cdot 10^3$$

- la longueur d'onde considérée est  $\lambda_a = 1530 \text{ nm}$ , pour une largeur de raie  $\Delta\omega_a = 1.2 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$

- la section efficace d'absorption mesurée par nos collègues de Thalès est  $\sigma = 3 \cdot 10^{-25} \text{ m}^2$ .

On obtient alors un coefficient d'absorption  $\alpha = N\sigma = 1.458 \text{ cm}^{-1}$ . En supposant que l'intégralité de la population se trouve au niveau d'énergie fondamental, on arrive alors à estimer le coefficient  $\kappa = 4.883 \cdot 10^{-13}$

Malgré ceci, ce matériau n'a pour ainsi dire pas été utilisé pour les simulations. La raison est simple, et vient du fait que gain et absorption étant des phénomènes symétriques, le gain maximal envisageable ne peut pas ici être supérieur à  $1.458 \text{ cm}^{-1}$ . Autrement dit, pour voir son énergie augmenter de 1%, le champ doit se propager à travers 70 microns de matériau. Avec un pas de discrétisation de 5 nm, une telle épaisseur nécessiterait 14000 blocs de grille FDTD.

### ZnO (hypothétique)

Face à la faiblesse du gain dans le matériau précédent, il a été choisi pour les essais de se tourner vers un matériau réel, dont le gain est connu comme étant très important : le ZnO. Cependant, ceci n'est valable que dans l'UV, ce matériau n'est donc pas utilisable dans le cadre du projet, et a seulement ici servi à tester le modèle numérique. Le matériau est considéré comme un système à quatre niveaux (figure 5.1).

- Les temps de transition entre les niveaux sont estimés par  $\tau_{32} = \tau_{10} = 100$  fs et  $\tau_{21} = 10$  ps
- la longueur d’onde d’émission est fixée à  $\lambda_{las} = 390$  nm, pour une largeur spectrale  $\Delta\omega_{las} = 6.2 \cdot 10^{13}$  rad · Hz
- l’indice optique de la matrice est estimé à  $n = 2.4$
- on fait l’hypothèse que plutôt que de refléter la densité d’atomes de matériau actif, les populations du modèle décrivent la densité d’excitons. On prend comme population totale  $10^{36}$  a · cm<sup>-3</sup>
- le gain est pris comme  $G = 1000$  cm<sup>-1</sup> pour une densité d’exciton  $\Delta N = 5.35 \cdot 10^{18}$  a · cm<sup>-3</sup>[52]. Ceci permet de définir le coefficient  $\kappa_{las} = 7.38 \cdot 10^{-10}$ .

## 5.2.2 Cavit  laser

Une mani re simple de tester la m thode est de tenter de faire laser une cavit . Dans ce qui suit, la cavit  est simplement constitu e d’une couche du “ZnO” d fini pr c demment, de 650 nm d’ paisseur et entour e par de l’air. Il va de soi que cette cavit  est tr s mauvaise puisque la r flectivit    l’interface n’est que de 17%. Ceci implique que la puissance de pompe n cessaire pour avoir une oscillation laser est relativement  lev e (figure 5.4). Dans toutes les simulations,

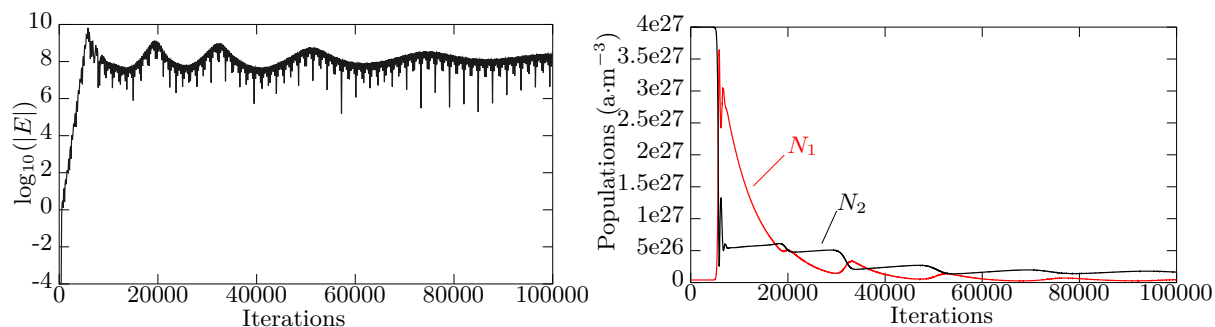


FIGURE 5.3 – Exemple de la signature de l’oscillation laser. A gauche, l’amplitude du champ  lectrique dans la cavit  en fonction du temps, avec une puissance de pompe  $W_p = 10^{38}$ . A droite, l’ volution des populations des niveaux  $N_1$  et  $N_2$  en fonction du temps, pour la m me simulation.

la cavit  est excit e par un oscillateur d’amplitude 1,   la fr quence de transition. Lorsque l’on est au dessus du seuil, le champ se met   cro tre de mani re exponentielle dans la cavit . Ceci est clairement repr sent  par la figure 5.3 avec une croissante lin aire du champ sur une  chelle

logarithmique. Durant cette période relativement longue on peut considérer que l'approximation du champ faible est valide.

Mais le champ ne peut pas croître indéfiniment dans la cavité. L'amplitude élevée du champ rend le terme de transition stimulée (5.3) suffisamment important pour qu'il influe de manière notable sur les populations. A ce moment là on peut observer un effondrement catastrophique de la différence de population  $N_1 - N_2$ , et on a saturation du gain suivi d'une nouvelle inversion des populations. L'amplitude du champ dans la cavité ainsi que la différence de population oscillent ensuite un certain temps jusqu'à ce que le gain du matériau compense exactement les pertes de la cavité. Comme on peut le voir sur la figure 5.3, l'apparition de ce "régime permanent" peut nécessiter un nombre extrêmement important d'itérations malgré un système extrêmement simple.

Ce comportement est cependant très lié à ce modèle, et notamment à son manque de prise en compte de l'émission spontanée. En effet, dans un système réel celle-ci aurait donné naissance à des transitions stimulées qui aurait naturellement fait tendre les populations vers un état d'équilibre relatif pendant le pompage initial. Dans notre cas, le système se trouve dans un état pré-peuplé au début de la simulation, et forcément hors équilibre dès que la moindre perturbation se fait sentir. La figure 5.4 permet de constater que le système a les propriétés caractéristiques

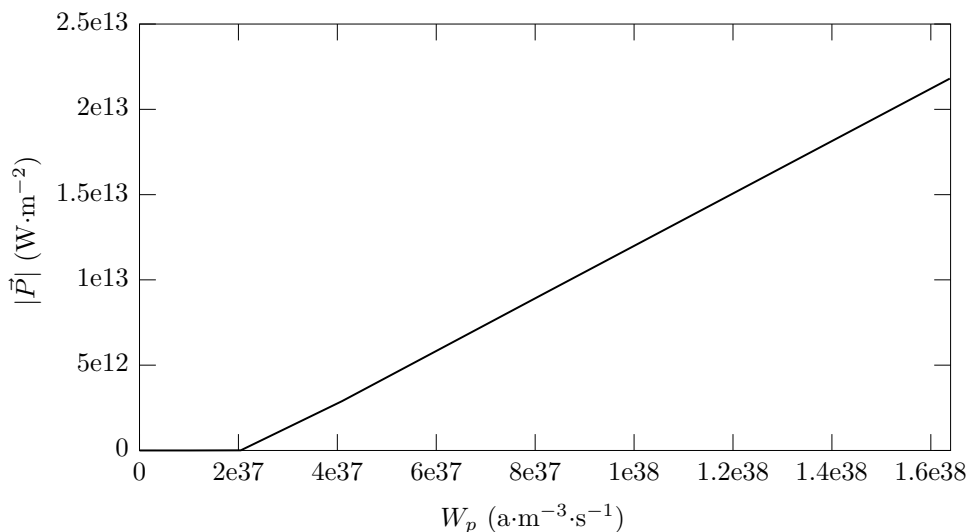


FIGURE 5.4 – Amplitude du vecteur de Poynting à la sortie de la cavité en fonction de la puissance de pompe

d'un laser, avec une puissance de sortie qui augmente linéairement, dans le régime permanent, avec la puissance de pompe une fois un certain seuil franchi, celui-ci se trouvant à  $W_p = 2 \cdot 10^{37}$   $\text{a}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ .

### 5.2.3 Microdisque

Les microdisques sont un autre exemple de cavité laser simulable grâce à cette méthode. La figure 5.5 présente le champ obtenu dans un disque de 493 nm de rayon pour 120 nm d'épaisseur, constitué du "ZnO" défini précédemment, posé sur un substrat d'indice 1.9 et entouré par de l'air.

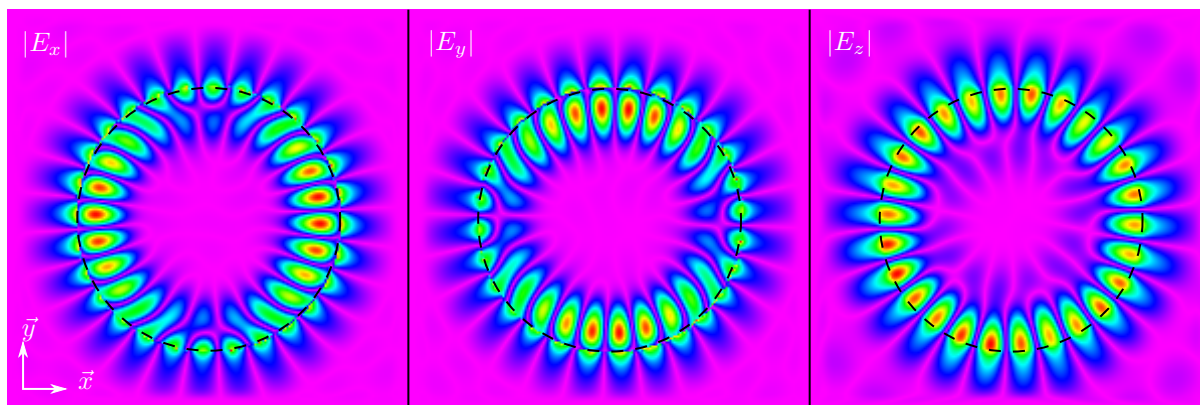


FIGURE 5.5 – Exemple de champ électrique dans un microdisque présentant une émission laser. Chaque image est normalisée indépendamment des autres.

La simulation a été effectuée avec un facteur de pompe de  $10^{38}$ , ce qui est suffisant dans ce cas pour observer une émission laser. A noter que dans ce cas là celle-ci met un long moment, d'un point de vue numérique, pour atteindre son régime stationnaire. En effet dans le cas de la figure 5.5 bien que l'émission laser était présente elle n'était toujours pas stable au bout de 60000 itérations (un peu moins d'une picoseconde). Le champ représenté est donc un instantané de la simulation au bout de 60000 itérations.

Dans cette simulation, le pas spatial a été fixé à 7.5 nm et le matériau considéré comme pré-peuplé. L'excitation a été assurée en forçant l'oscillation d'un point de  $E_z$  proche de la surface du matériau pendant un millier d'itérations, avec un spectre centré autour de 390 nm.

## 5.3 Conclusion

Pour conclure, les résultats obtenus jusqu'à présent montrent que la méthode est prometteuse. Malheureusement, elle n'a pas encore été totalement explorée faute de temps. L'implémentation est à peaufiner, et le problème du peuplement à résoudre.

Dans le cadre du projet Métaphotonique, il reste à définir un matériau actif ayant un gain suffisamment important pour obtenir un effet notable lorsqu'il est combiné à des métamatériaux. Le polymère dopé Erbium initialement prévu pour cette utilisation n'a manifestement pas les propriétés requises. Par ailleurs, dans les cas qui nous intéressent nous ne nous attendons pas à avoir de l'émission laser. Autrement dit le calcul de populations pourrait être évité en première approximation en faveur d'un modèle plus simple.

Cependant, il reste encore à déterminer si le modèle actuel sera suffisamment évolué pour décrire les expériences ou si des modèles plus complets, tels ceux décrits par Chang [39] ou Huang [41], pourraient être nécessaires dans le cas des semi-conducteurs comme le ZnO. L'hypothèse de base de la méthode étant que les atomes de matériau actif sont dilués dans une matrice, il n'est pas garanti que la méthode fonctionne toujours correctement dans le cas des semi-conducteurs.





# Conclusion

Le projet Métaphotonique tel que pensé initialement devait s'intéresser à la faisabilité de structures pour l'optique guidée intégrant des métamatériaux (c.f. figure 5.6), pour une utilisation à la longueur d'onde télécom de 1.55 microns. Il est rapidement apparu que cet objectif faisait appel à des outils et des modèles dont nous ne disposions pas alors.

Les travaux de thèse effectués dans le cadre de ce projet ont donc été variés et ont porté sur des domaines relativement différents. Ils se sont étendus sur la FDTD elle-même, les métamatériaux, les problèmes d'optimisation et la physique des lasers. Malheureusement, un temps non négligeable a été passé à tenter de faire fonctionner la méthode de Valuev. Ce temps qui a été au final perdu pour le projet lui-même a impliqué de devoir se rabattre sur une méthode complètement différente pour les simulations à angle variable, et le temps est donc venu à manquer lors de l'exploitation du code lié aux milieux à gains.

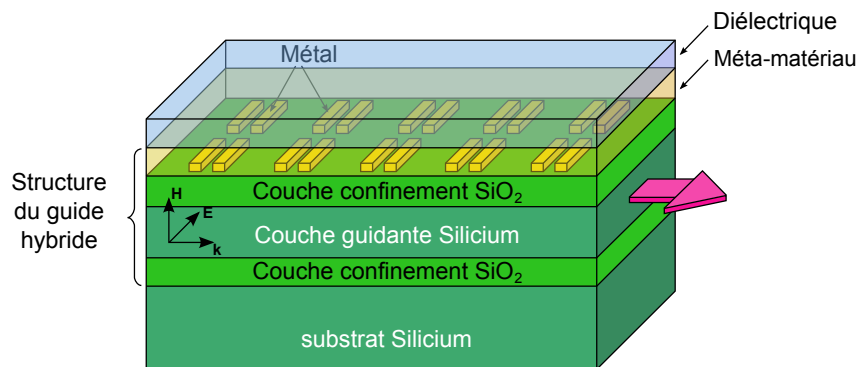


FIGURE 5.6 – Figure réalisée au début du projet Métaphotonique illustrant son idée et objectif initiaux.

Malgré nos efforts, il n'a pas été réellement possible de conclure sur la possibilité d'affecter ou non un indice effectif à un métamatériau. Le modèle développé fonctionne dans une certaine

mesure, mais uniquement sur des cas simples. Qui plus est, les contraintes qui sont apparues, et notamment le problème de la réponse asymétrique, laissent à penser que cette approche n'est pas la bonne.

Le rotateur de polarisation fut une intéressante surprise. D'une part parce que cet effet était totalement inattendu, et d'autre part parce qu'il a été "conçu" sans faire appel à la moindre considération d'indice effectif. Autrement dit, l'objectif du projet Métaphotonique de créer un composant pour l'optique guidée a vraisemblablement été atteint en esquivant totalement la problématique du passage d'un indice effectif à une structure réelle. Notre composant est toutefois légèrement plus simple, structurellement parlant, que ce qui avait été envisagé au début du projet, idée décrite par la figure 5.6.

## Développements futurs

### Recherche

Nombreux sont les travaux qui restent à faire. Premièrement, la problématique de l'indice effectif des métamatériaux n'a pas ici été résolue, et les choses laissent à penser que ce ne serait a priori pas la bonne approche tant la complexité du problème est importante. Au final, le problème réel est celui de la modélisation multi-échelle. En effet les métamatériaux ne sont censés être qu'une brique dans des systèmes bien plus larges en terme d'échelle, et simuler la réponse globale de ces systèmes implique de connaître le comportement de chacune de ses briques. L'intérêt du modèle effectif est de transformer des comportements microscopiques en propriétés macroscopiques simples à traiter peu importe l'échelle. Il semble alors nécessaire de développer une autre manière de résoudre le problème. Une approche possible pourrait être un équivalent de ce qui est connu en infographie comme les BRDF (Bidirectional Reflectance Distribution Function) sous une forme scientifiquement plus rigoureuse. Cependant, ceci impliquerait de ne traiter alors le problème plus que d'une manière descriptive, en occultant totalement les explications physiques que pourraient donner de vrais tenseurs effectifs.

Le phénomène le plus important qui a été observé lors de cette thèse est très probablement la réponse asymétrique du rotateur de polarisation. Ce phénomène est directement lié à l'uti-

lisation de structures élémentaires elles-mêmes asymétriques, et un travail conséquent reste à faire sur l'origine de ce phénomène. D'une part sur les structures elles-mêmes, c'est-à-dire ce que cette asymétrie implique sur les modes supportés par la structures et comment ceux-ci se couplent au champ incident suivant la direction du vecteur d'onde, et d'autre part comment la réponse collective de telles structure fonctionne réellement. Ensuite il y a très probablement un grand champ d'applications possibles pour des nanostructures asymétriques, et nous n'avons fait qu'effleurer l'une d'entre elles.

Enfin, la compensation des pertes dans les métamatériaux, qui était un des objectifs principaux du projet, reste encore totalement à explorer, ce qui n'a pas pu être fait par manque de temps. Cependant au niveau numérique au moins l'ensemble des outils sont pour ainsi dire présents pour combiner métamatériaux et matériaux actifs.

## Code

Cette thèse a aussi permis de produire un code FDTD relativement complet. Celui-ci, entièrement écrit en C++, s'étend à l'heure actuelle sur plus de 20000 lignes réparties dans une cinquantaine de fichiers. Un travail conséquent reste à effectuer.

D'abord, la véritable validation du modèle actif : en effet l'implémentation actuelle reste une première étape, et il est nécessaire de comparer proprement les résultats avec des expériences conduites par nous-mêmes ou avec la littérature existante. Une fois ceci fait, il restera ensuite à réellement exploiter le code, les applications possibles étant nombreuses : combinaison avec des métamatériaux comme le projet le souhaitait, nanolasers à base de cristaux photoniques, guides à gain, etc.

Ensuite, le programme lui-même reste à affiner avec sa documentation complète à rédiger, autant manuscrite que graphique avec un tracé propre des structures les plus importantes sous forme d'organigrammes. L'objectif étant que n'importe qui puisse comprendre simplement et rapidement la structure du code et aller modifier (ou corriger) certaines parties sans que cela ne prenne des mois.

Au niveau de l'utilisation du logiciel, une étape importante qui n'a été qu'à peine entamée est l'écriture d'une interface utilisateur correcte. Dans l'état actuel des choses tout ne fonctionne

réellement que par l'intermédiaire de scripts avec un retour en ligne de commande. L'objectif final étant que le logiciel puisse être utilisé à peu près par n'importe qui, cet état n'est pas acceptable. Cette interface devra non-seulement permettre de définir ces structures et de les simuler, mais aussi d'offrir un traitement immédiat des résultats tout en laissant la possibilité de les exporter vers d'autres logiciels.

## Produits de la recherche

### Publication dans des journaux internationaux référencés

- Roy Aad, Vesna Simic, Loïc Le Cunff, Licinio Rocha, Vincent Sallet, Corinne Sartel, Alain Lusson, Christophe Couteau and Gilles Lerondel, ZnO nanowires as an effective luminescent sensing material for nitroaromatic derivatives. *Nanoscale* 5(19), 9176–9180. 2013.
- Natalia Dubrovina, Loïc O. Le Cunff, N. Burokur, R. Ghasemi, Aloïs Degiron, André De Lustrac, Alexandre Vial, Gilles Léronnel, Anatole Lupu, Single metafilm effective medium behavior in optical domain : Maxwell–Garnett approximation and beyond. *Appl. Phys. A-Mater. Sci. Process.* 109(4), 901–906. 2012.
- Alexandre Vial, Thierry Laroche, Montacer Dridi, Loïc Le Cunff, A new model of dispersion for metals leading to a more accurate modeling of plasmonic structures using the FDTD method. *Appl. Phys. A-Mater. Sci. Process.* 103(3), 849–853. 2011.

### Articles soumis

- Loïc O. Le Cunff, Natalia Dubrovina, Alexandre Vial, Anatole Lupu, André De Lustrac, Gilles Lerondel, Metamaterials effective properties retrieval as an optimization problem. Soumis à *Phys. Rev. B*
- Loïc O. Le Cunff, Alexandre Vial, Mickaël Fevrier, Rafael Salas-Montiel, Sylvain Blaize, and Gilles Léronnel, Half Wavelength Scale Polarization Rotator for Integrated Photonics. Soumis à *Optica*

## Communications avec actes répertoriés dans les bases de données internationales

- Natalia Dubrovina, Loïc Le Cunff, N Burokur, N Ghasemi, Aloyse Degiron, A. De Lustrac, Alexandre Vial, Gilles Lerondel, Anatole Lupu, Single metafilm effective medium behavior in optical domain : Maxwell-Garnett approximation and beyond. *META '12 3rd International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics*, Paris, April 2012, 5. 2012.
- Loïc Le Cunff, Alexandre Vial, Sylvain Blaize, Stéphane Collin, Anatole Lupu, Gilles Lérondel, 3D modeling of metamaterials at oblique incidence and effective analysis. *SPIE Optical Systems Design*, Barcelona, 26-29 november 2012.
- Roy Aad, Vesna Simic, Loïc Le Cunff, Corinne Sartel, Vincent Sallet, Alain Lusson, Christophe Couteau, Gilles Lerondel, ZnO as an effective fluorescence sensor for nitroaromatic derivatives. *SPIE Optics and Photonics*, San Diego Convention Center, San Diego, California (USA), August 25-29th, 2013.
- Loïc Le Cunff, Alexandre Vial, Rafael Salas-Montiel, Sylvain Blaize, Aurélien Bruyant, Anatole Lupu, Gilles Lérondel, Ultracompact metamaterials-based polarization converter for photonics at telecom wavelength. *SPIE Optics+Photonics*, San Diego, 25-29 august 2013.

## Communications orales sans actes dans un congrès

- N Dubrovina, Loïc Le Cunff, X Le Roux, N Burokur, A De Lustrac, Sylvain Blaize, Alexandre Vial, Gilles Lerondel, Anatole Lupu, Metal-dielectric metamaterials effective medium behavior in the near-infrared domain. *Journées du GDR « Ondes »*, groupes GT1 & GT2, Troyes, Novembre 2012. 2012.



# Bibliographie

- [1] Richard A Shelby, David R Smith, and Seldon Schultz. Experimental verification of a negative index of refraction. *science*, 292(5514) :77–79, 2001.
- [2] D. R. Smith, J. J. Mock, A. F. Starr, and D. Schurig. Gradient index metamaterials. *Phys. Rev. E*, 71 :036609, Mar 2005.
- [3] John B Pendry, David Schurig, and David R Smith. Controlling electromagnetic fields. *science*, 312(5781) :1780–1782, 2006.
- [4] David Schurig, JJ Mock, BJ Justice, Steven A Cummer, JB Pendry, AF Starr, and DR Smith. Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies. *Science*, 314(5801) :977–980, 2006.
- [5] Qiang Cheng, Tie Jun Cui, Wei Xiang Jiang, and Ben Geng Cai. An omnidirectional electromagnetic absorber made of metamaterials. *New Journal of Physics*, 12(6) :063006, 2010.
- [6] D. R. Smith, S. Schultz, P. Markoš, and C. M. Soukoulis. Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission coefficients. *Phys. Rev. B*, 65 :195104, Apr 2002.
- [7] T. Koschny, P. Markoš, D. R. Smith, and C. M. Soukoulis. Resonant and antiresonant frequency dependence of the effective parameters of metamaterials. *Phys. Rev. E*, 68 :065602, Dec 2003.
- [8] Xudong Chen, Tomasz M. Grzegorczyk, Bae-Ian Wu, Joe Pacheco, and Jin Au Kong. Robust method to retrieve the constitutive effective parameters of metamaterials. *Phys. Rev. E*, 70 :016608, Jul 2004.



- [9] D. R. Smith, D. C. Vier, Th. Koschny, and C. M. Soukoulis. Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials. *Phys. Rev. E*, 71 :036617, Mar 2005.
- [10] Christoph Menzel, Carsten Rockstuhl, Thomas Paul, Falk Lederer, and Thomas Pertsch. Retrieving effective parameters for metamaterials at oblique incidence. *Phys. Rev. B*, 77 :195328, May 2008.
- [11] Zhi Hao Jiang, Jeremy A. Bossard, Xiande Wang, and Douglas H. Werner. Synthesizing metamaterials with angularly independent effective medium properties based on an anisotropic parameter retrieval technique coupled with a genetic algorithm. *Journal of Applied Physics*, 109(1) :013515, 2011.
- [12] David R. Smith and John B. Pendry. Homogenization of metamaterials by field averaging (invited paper). *J. Opt. Soc. Am. B*, 23(3) :391–403, Mar 2006.
- [13] J.-M. Lerat, N. Malléjac, and O. Acher. Determination of the effective parameters of a metamaterial by field summation method. *Journal of Applied Physics*, 100(8) :084908, 2006.
- [14] Xudong Chen, Bae-Ian Wu, Jin Au Kong, and Tomasz M. Grzegorzczak. Retrieval of the effective constitutive parameters of bianisotropic metamaterials. *Phys. Rev. E*, 71 :046610, Apr 2005.
- [15] Xudong Chen, T. M. Grzegorzczak, and J. A. Kong. Optimization approach to the retrieval of the constitutive parameters of a slab of general bianisotropic medium. *Progress In Electromagnetics Research*, 60 :1–18, 2006.
- [16] Zhechao Wang and Daoxin Dai. Ultrasmall si-nanowire-based polarization rotator. *J. Opt. Soc. Am. B*, 25(5) :747–753, May 2008.
- [17] Hiroshi Fukuda, Koji Yamada, Tai Tsuchizawa, Toshifumi Watanabe, Hiroyuki Shinjima, and Sei ichi Itabashi. Polarization rotator based on silicon wire waveguides. *Opt. Express*, 16(4) :2628–2635, Feb 2008.
- [18] Hiroshi Fukuda, Koji Yamada, Tai Tsuchizawa, Toshifumi Watanabe, Hiroyuki Shinjima, and Sei ichi Itabashi. Silicon photonic circuit with polarization diversity. *Opt. Express*, 16(7) :4872–4880, Mar 2008.

- [19] M. Komatsu, K. Saitoh, and M. Koshiba. Compact polarization rotator based on surface plasmon polariton with low insertion loss. *Photonics Journal, IEEE*, 4(3) :707–714, June 2012.
- [20] J. Niklas Caspers, M. Z. Alam, and Mo Mojahedi. Compact hybrid plasmonic polarization rotator. *Opt. Lett.*, 37(22) :4615–4617, Nov 2012.
- [21] J. Niklas Caspers, J. Stewart Aitchison, and Mo Mojahedi. Experimental demonstration of an integrated hybrid plasmonic polarization rotator. *Opt. Lett.*, 38(20) :4054–4057, Oct 2013.
- [22] Linfei Gao, Yijie Huo, J.S. Harris, and Zhiping Zhou. Ultra-compact and low-loss polarization rotator based on asymmetric hybrid plasmonic waveguide. *Photonics Technology Letters, IEEE*, 25(21) :2081–2084, Nov 2013.
- [23] P. Harms, R. Mittra, and Wai Ko. Implementation of the periodic boundary condition in the finite-difference time-domain algorithm for fss structures. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 42(9) :1317 –1324, sep 1994.
- [24] A. Aminian and Y. Rahmat-Samii. Spectral fdtd : a novel technique for the analysis of oblique incident plane wave on periodic structures. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 54(6) :1818 – 1825, june 2006.
- [25] H. Holter and H. Steyskal. Broadband fdtd analysis of infinite phased arrays using periodic boundary conditions. *Electronics Letters*, 35(10) :758 –759, may 1999.
- [26] H. Holter and H. Steyskal. Infinite phased-array analysis using fdtd periodic boundary conditions-pulse scanning in oblique directions. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 47(10) :1508 –1514, oct 1999.
- [27] H. Holter and H. Steyskal. On the size requirement for finite phased-array models. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 50(6) :836 –840, jun 2002.
- [28] R. Todd Lee and Glenn S. Smith. A conceptually simple method for incorporating periodic boundary conditions into the fdtd method. *Microwave and Optical Technology Letters*, 45(6) :472–476, 2005.

- [29] R.T. Lee and G.S. Smith. An alternative approach for implementing periodic boundary conditions in the fdtd method using multiple unit cells. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 54(2) :698 – 705, feb. 2006.
- [30] Ilya Valuev, Alexei Deinega, and Sergei Belousov. Iterative technique for analysis of periodic structures at oblique incidence in the finite-difference time-domain method. *Opt. Lett.*, 33(13) :1491–1493, Jul 2008.
- [31] ME Veysoglu, RT Shin, and Jin Au Kong. A finite-difference time-domain analysis of wave scattering from periodic surfaces : Oblique incidence case. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 7(12) :1595–1607, 1993.
- [32] Yin-Chun A Kao and Robert G Atkins. A finite difference-time domain approach for frequency selective surfaces at oblique incidence. In *Antennas and Propagation Society International Symposium, 1996. AP-S. Digest*, volume 2, pages 1432–1435. IEEE, 1996.
- [33] J.A Roden, S.D. Gedney, M.P. Kesler, J.G. Maloney, and P.H. Harms. Time-domain analysis of periodic structures at oblique incidence : orthogonal and nonorthogonal fdtd implementations. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 46(4) :420–427, Apr 1998.
- [34] F. I. Baida and A. Belkhir. Split-field fdtd method for oblique incidence study of periodic dispersive metallic structures. *Opt. Lett.*, 34(16) :2453–2455, Aug 2009.
- [35] Susan C Hagness, Rose M Joseph, and Allen Taflove. Subpicosecond electrodynamics of distributed bragg reflector microlasers : Results from finite difference time domain simulations. *Radio Science*, 31(4) :931–941, 1996.
- [36] Richard W. Ziolkowski, John M. Arnold, and Daniel M. Gogny. Ultrafast pulse interactions with two-level atoms. *Phys. Rev. A*, 52 :3082–3094, Oct 1995.
- [37] A.S. Nagra and R.A. York. Fdtd analysis of wave propagation in nonlinear absorbing and gain media. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 46(3) :334 –340, mar 1998.
- [38] A.E. Siegman. *Lasers*. University Science Books, 1986.
- [39] Shih-Hui Chang and Allen Taflove. Finite-difference time-domain model of lasing action in a four-level two-electron atomic system. *Opt. Express*, 12(16) :3827–3833, Aug 2004.

- [40] Yingyan Huang. Simulation of semiconductor materials using fdtd method. Master's thesis, Northwestern University, 2002.
- [41] Yingyan Huang and Seng-Tiong Ho. Computational model of solid-state, molecular, or atomic media for fdtd simulation based on a multi-level multi-electron system governed by pauli exclusion and fermi-dirac thermalization with application to semiconductor photonics. *Opt. Express*, 14(8) :3569–3587, Apr 2006.
- [42] Yingyan Huang and Seng-Tiong Ho. Simulation of electrically pumped nanophotonic lasers using dynamical semiconductor medium fdtd method. In *Nanoelectronics Conference, 2008. INEC 2008. 2nd IEEE International*, pages 202 –205, march 2008.
- [43] Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 14(3) :302 –307, may 1966.
- [44] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM J. Res. Dev.*, 11(2) :215–234, 1967.
- [45] DE Merewether, R Fisher, and FW Smith. On implementing a numeric huygen's source scheme in a finite difference program to illuminate scattering bodies. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, 27(6) :1829–1833, 1980.
- [46] A. Taflove and S.C. Hagness. *Computational electrodynamics : the finite-difference time-domain method*. Artech House antennas and propagation library. Artech House, 2005.
- [47] R. Luebbers, F.P. Hunsberger, K.S. Kunz, R.B. Standler, and M. Schneider. A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation for dispersive materials. *Electromagnetic Compatibility, IEEE Transactions on*, 32(3) :222 – 227, aug 1990.
- [48] Karl S. Kunz and Raymond J. Luebbers. *The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics*. CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [49] J. Alan Roden and Stephen D. Gedney. Convolution pml (cpml) : An efficient fdtd implementation of the cfs-pml for arbitrary media. *Microwave and Optical Technology Letters*, 27(5) :334–339, 2000.

- [50] Dwight W. Berreman. Optics in stratified and anisotropic media : 4 x 4-matrix formulation. *J. Opt. Soc. Am.*, 62(4) :502–510, Apr 1972.
- [51] E. Desurvire, C.R. Giles, and J.R. Simpson. Gain saturation effects in high-speed, multichannel erbium-doped fiber amplifiers at  $\lambda = 1.53 \mu\text{m}$ . *Lightwave Technology, Journal of*, 7(12) :2095 –2104, dec 1989.
- [52] A-S Gadallah, Komla Nomenyo, Christophe Couteau, David J Rogers, and Gilles Lérondel. Stimulated emission from zno thin films with high optical gain and low loss. *Applied Physics Letters*, 102(17) :171105, 2013.

## Annexe A

# Figures supplémentaires et clarifications

Cet appendice regroupe l'ensemble des explications et figures qui ont été rajoutées après la soutenance pour apporter une plus grande précision à ce manuscrit, notamment au niveau du chapitre 2. Les sections et sous-sections imitent les chapitres et les sections du manuscrit.

### A.2 Métamatériaux et indice effectif

#### A.2.2 Extraction des paramètres effectifs

##### Continuité

Il est fait mention qu'à grande distance de la résonance le métamatériau est "pour ainsi dire transparent pour le champ incident". Ceci est dû au fait que dans notre cas les métamatériaux sont principalement des structures métalliques se comportant comme des résonateurs. Tout comme des résonateurs mécaniques le couplage de l'énergie depuis une excitation vers le résonateur est peu efficace loin de la résonance. Un exemple de ceci peut être vu dans la figure 2.2 où loin de la résonance les coefficients de transmission et de réflexion se réduisent à ceux du substrat seul.

Bien sûr, dans cette région le métamatériau n'est pas absolument transparent, mais peut être modélisé par une couche d'indice proche de 1. Ceci permet de donner une approximation

de la solution au problème d'inversion, approximation qui peut être réutilisée dans l'algorithme de recherche pour accélérer le calcul de la véritable solution.

### A.2.3 Exemple numérique

Pour le bien des calculs, la grille de bâtonnets représentée sur la figure 2.1 a été discrétisée dans les trois directions avec un pas de  $5nm$ . Le substrat a un indice de 3.4272 tandis que le superstrat a un indice de 1. L'or quant-à-lui, est modélisé par un modèle de Drude tel qu'au 4.1 :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_D^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (\text{A.1})$$

avec  $\varepsilon_{\infty} = 6.0031$ ,  $\omega_D = 1.2772 \cdot 10^{16}$  Hz et  $\gamma = 3.4578 \cdot 10^{13}$  Hz.

#### Incidence normale : $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \mu_x, \mu_y$

Il est mentionné que les "résultats ont un très fort comportement lorentzien autour de la résonance". Ceci vient du fait que la permittivité extraite a une forme de type

$$\varepsilon(\omega) = \frac{\alpha}{\omega^2 - 1 + i\beta\omega} \quad (\text{A.2})$$

qui correspond au modèle de lorentz.

#### Incidence oblique : $\varepsilon_z$

Il est écrit : "Les erreurs ne deviennent notables qu'autour de la fréquence de résonance de la structure, et tournent autour la dizaine de pourcents en erreur relative sur la transmission, ce qui s'explique par la faiblesse de celle-ci à la résonance. "

Plus clairement, en observant la figure 2.2 on peut s'apercevoir qu'à la résonance, et pour un angle de  $60^\circ$ , le coefficient de transmission TM a une valeur approchant 0.1. Or, à cet endroit la fonction objectif correspondant à l'inversion de  $\varepsilon_z$  a une valeur supérieure à  $10^{-2}$ , ce qui comparativement à  $r_{TM}$  est plutôt important. Ainsi donc l'erreur relative sur le  $r_{TM}$  si on le reconstruisait à partir de l'indice extrait serait en fait de l'ordre de la dizaine de pourcent, même

si la fonction objectif semble a priori avoir une valeur faible.

### A.2.4 Limites et critique du modèle

#### L'environnement du métamatériau

Dans le cadre de la figure 2.10, les spectres théoriques et simulés de réflexion et transmission comportent tous le même nombre de points, correspondant aux mêmes longueurs d'onde. Les erreurs relatives sont ensuite calculées entre les spectres simulés et théoriques pour chaque longueur d'onde, puis sont sommées entre la réflexion et la transmission. Ainsi, on obtient pour chaque longueur d'onde une erreur regroupant les deux coefficients. Ensuite, les points sont répartis dans des classes statistiques suivant les erreurs qui leur sont associées, et ce sont ces classes statistiques qui sont tracées sur la figure 2.10.

#### Réponse asymétrique

Les structures utilisées pour illustrer le problème de la réponse asymétrique étaient des triangles isocèles rectangles d'or, semi-infinis suivant  $\vec{y}$  et périodiques suivant  $\vec{x}$ , illuminés à incidence normale. La périodicité était fixée à  $200nm$  tandis que le petit côté des triangles avait une longueur de  $130nm$ . La discrétisation spatiale avait-elle été fixée à  $5nm$ . Ces structures sont décrites sur la figure A.1. Pour les deux types de structures le superstrat et le substrat étaient

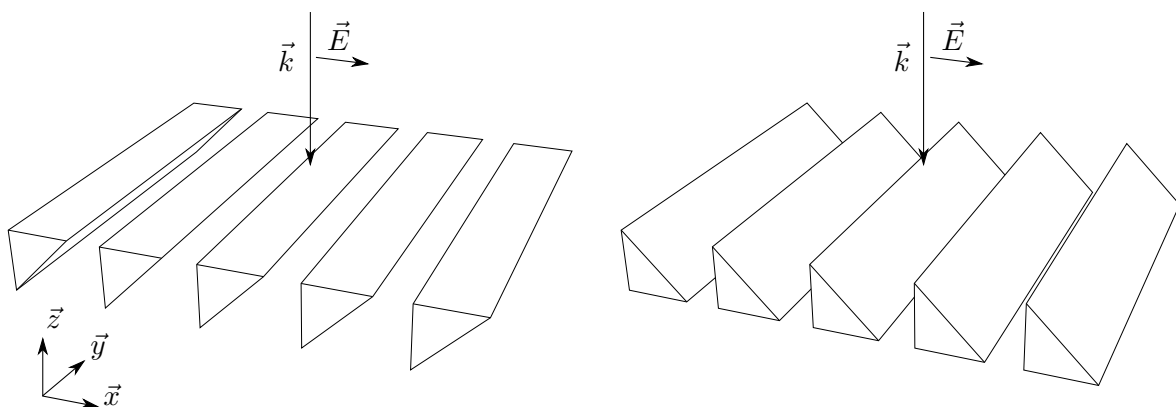


FIGURE A.1 – Schéma des structures utilisés dans le cadre de la section 2.4.3

considérés comme de l'air.



Dans le cas de la figure 2.11 l'or a été décrit par un modèle de type Drude-points critiques

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_D^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} + A_1\Omega_1 \left( \frac{e^{i\phi_1}}{\Omega_1 - \omega - i\Gamma_1} + \frac{e^{-i\phi_1}}{\Omega_1 + \omega + i\Gamma_1} \right) + A_2\Omega_2 \left( \frac{e^{i\phi_2}}{\Omega_2 - \omega - i\Gamma_2} + \frac{e^{-i\phi_2}}{\Omega_2 + \omega + i\Gamma_2} \right) \quad (\text{A.3})$$

avec les paramètres suivants :

$$\begin{cases} \varepsilon_\infty = 1.03 \\ \omega_D = 1.3064 \cdot 10^{16} \\ \gamma = 1.1274 \cdot 10^{14} \end{cases} \begin{cases} A_1 = 0.86822 \\ \Omega_1 = 4.0812 \cdot 10^{15} \\ \varphi_1 = -0.60756 \\ \Gamma_1 = 7.3277 \cdot 10^{14} \end{cases} \begin{cases} A_2 = 1.3700 \\ \Omega_2 = 6.4269 \cdot 10^{15} \\ \varphi_2 = -0.087341 \\ \Gamma_2 = 6.7371 \cdot 10^{14} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

ce modèle décrivant précisément l'or dans le domaine visible. Dans le cas de la figure 2.12, par contre, le modèle utilisé était toujours dédié à l'or, mais configuré pour ne fournir qu'une description de celui-ci dans l'infrarouge proche (4.1). Ainsi, appliqué dans le domaine visible l'indice résultant est complètement différent de celui donné par le modèle précédent.

### Réponse asymétrique sans métamatériau

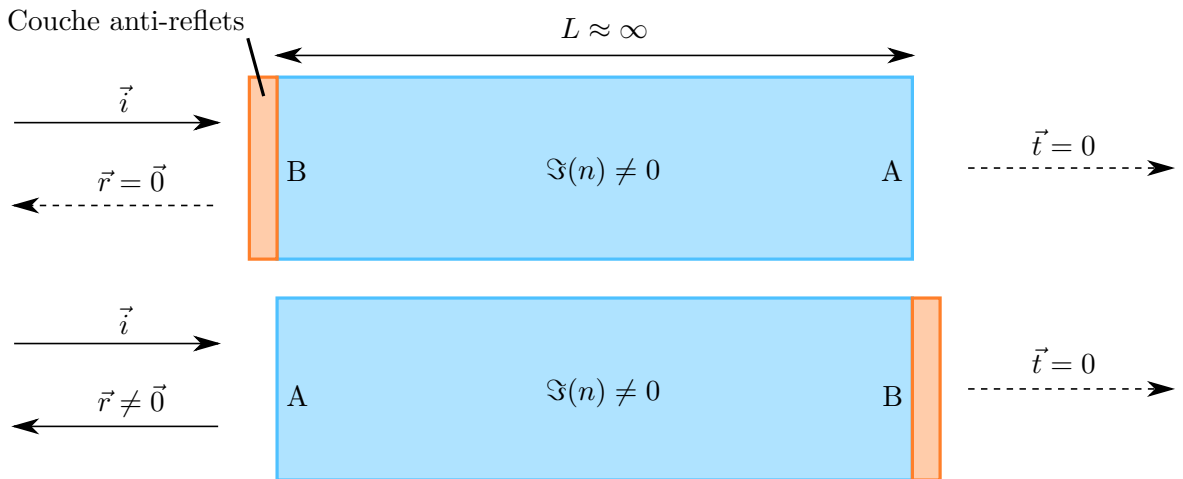


FIGURE A.2 – Schéma de l'expérience de pensée de la section 2.4.3

## A.4 Rotateur de polarisation

Dans toutes les simulations de ce chapitre, les structures ont été considérées comme en or tel que 4.1, sur un substrat d'indice 3.4272 et avec un superstrat d'indice 1.0. Dans tous les cas la discrétisation était de 5 nm.

### A.4.3 Méthode d'analyse

Dans la manière dont est exprimée la décomposition du champ dans le guide en somme des modes guidés correspondant, ces modes sont écrits comme ne dépendant que de  $z$ . En réalité les modes guidés sont plutôt de la forme  $f(z)e^{i\beta x}$ . L'analyse se faisant pour une position fixée cette dépendance en  $x$  n'apporte finalement qu'un terme de phase qui se retrouvera dans les coefficients  $a_i$  après la projection.

### A.4.4 Cas des structures en L

Il est écrit que “la première [résonance est] celle que nous avons optimisée”. Ceci signifie que les structures ont été calibrées pour que cette résonance soit proche de  $1.55 \mu\text{m}$ .

### A.4.6 Cas des nanotriangles

Il est mentionné que “l'optimisation s'est faite sur la première” résonance. Comme précédemment cela veut dire que les tailles des nanotriangles ont été définies de sorte à amener cette résonance à  $1.55 \mu\text{m}$ .

Plus loin, il est écrit : “L'apparition de ce même mode dans le cas TE est par contre beaucoup plus prononcée que précédemment où il était pour ainsi dire inexistant.” Ici, “précédemment” fait référence aux cas des nanorods et des L, et non pas au cas TM des nanotriangles.

# Loïc LE CUNFF

## Doctorat : Optique et Nanotechnologies

### Année 2014

#### Vers des métamatériaux intégrés à pertes compensées : modélisation

Au cours des dernières décennies, les métamatériaux ont montré qu'ils pouvaient avoir des propriétés étonnantes, permettant d'imaginer et de réaliser des dispositifs tels que des lentilles à indice négatif, des dispositifs de camouflage ou des lentilles parfaitement plates. Aussi, font-ils aujourd'hui l'objet d'une intense recherche.

Cette thèse, inscrite dans le projet ANR METAPHOTONIQUE, avait pour objectif principal d'étudier la possibilité d'utiliser des métamatériaux pour l'optique guidée à la longueur d'onde télécom. Ceci a requis une meilleure compréhension du comportement des métamatériaux, ce qui nous a orientés vers l'étude de modèles effectifs. La récupération des paramètres optiques effectifs a nécessité de pouvoir simuler la réponse des métamatériaux sous une illumination en incidence oblique, ce qui a requis l'implémentation de telles méthodes en FDTD. Aux cours de nos travaux, nous avons aussi mis en évidence un phénomène de rotation de la polarisation de modes guidés suite à leur interaction avec des métamatériaux asymétriques. Nous avons alors pu concevoir et caractériser un dispositif pour l'optique guidée destiné faire tourner la polarisation de la lumière sur une longueur deux fois plus courte que la longueur d'onde.

Enfin, un objectif secondaire a été de déterminer si les pertes dues à la présence de nanostructures métalliques dans nos métamatériaux pouvaient être compensées grâce à l'utilisation de matériaux à gain. Un modèle permettant de décrire de tels matériaux en FDTD a donc été étudié et implémenté.

Mots clés : différences finies - Maxwell, équations de, solutions numériques - métamatériaux - réfractométrie - lasers, matériaux - photonique - télécommunications, matériaux.

#### Towards Integrated and Loss-Compensated Metamaterials: Modelling

Over the last decades, metamaterials have been shown to exhibit extraordinary properties. These properties could allow the design of new devices such as negative refractive index lenses, cloaking devices and perfectly flat lenses.

This PhD is part of the ANR METAPHOTONIQUE project and its main objective was to study the potential of metamaterials for integrated photonics at telecommunication wavelengths. This required to first better understand the behavior of metamaterials, which led us to study effective index models. The retrieval of effective optical parameters required to be able to simulate the optical response of metamaterials under oblique incidence excitation. Due to this, we had to study and implement such methods for FDTD computations. Our work also showed that asymmetrical metamaterials possessed the ability to make the polarization of guided modes rotate. This allowed us to design and characterize a potential device for integrated photonics, which effectively converts the polarization of guided modes over lengths shorter than half the wavelength.

A secondary goal of this PhD was to study the potential compensation of losses occurring within the metallic nanostructures of our metamaterials through the use of materials with gain. Thus, a model allowing us to simulate such materials in FDTD has been implemented.

Keywords: finite differences - Maxwell equations, numerical solutions - metamaterials - refractometry - laser materials - photonics - telecommunication, materials.

Thèse réalisée en partenariat entre :

