

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE HOUARI BOUMEDIENE DE BAB EZZOUAR

FACULTE DE PHYSIQUE

MEMOIRE PRESENTE POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE
MAGISTER

EN : PHYSIQUE

SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE DE LA MATIERE ET DES
HAUTES ENERGIES

Par : Ouiza ARAR

Sujet

*Modélisation de la structure de bandes photoniques
par la méthode des différences finies dans le
domaine temporel*

Soutenu le 18/10/2004, devant le jury d'examen composé de :

M. DRIR	Professeur	USTHB	Président
N. BELDJOUDI	Maître de conférence	USTHB	Dteur de thèse
O. LAMROUS	Professeur	UMMTO	Examineur
O. RAFIL	Professeur	UMMTO	Examineur
M. SAIDI	Maître de conférence	USTHB	Examineur

A mes chers parents

A mes frères et sœurs

A mes neveux karim et Basset

A la mémoire de mon oncle Ahmed et mon frère

A Nadra et ses sœurs

A tous ceux qui me sont chers

Remerciements :

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou en collaboration avec le Laboratoire de Physique Théorique de l'université Houari Boumediene de Bab Ezzouar.

Je tiens à remercier particulièrement Monsieur Nadir BELDJOUDI Maître de Conférence à l'USTHB et Monsieur Omar LAMROUS professeur à l'université Mouloud Mammeri de Tizi ousou pour la confiance sans faille qu'il m'ont accordé durant ce travail. Quelques lignes ne suffiront évidemment pas à exprimer l'étendue de ma gratitude à leur égard.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur Mahrez DRIR Professeur à L'USTHB, pour m'avoir fait l'honneur d'être président de jury.

J'exprime une deuxième fois ma profonde reconnaissance à Monsieur Omar LAMROUS pour sa présence tant qu'examineur dans le jury .

Je tiens a exprimer à Monsieur Omar RAFIL professeur à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou et Monsieur Mohamed SAIDI maître de conférence à L'USTHB toute ma reconnaissance pour l'honneur qu'ils m'ont fait d'avoir accepter de participer aux jury.

Je remercie Monsieur Abderahmane BELKHIR maître assistant à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-ouzou pour les conseils et son intérêt à mes travaux.

Mes remerciements vont également à Monsieur Said OUTIOUA et Monsieur Djamel DEGUICHE pour l'aide qu'ils m'ont apporté.

Cette thèse a donné lieu à de nombreuses collaborations, et je tiens a remercier sincèrement toutes les personnes qui ont participé de près et de loin à ces travaux. Merci en particulier à : Zembri. D, Ouahiba Hocine, Boudaa. A et Mezegrene.A et tous les membre de LPCQ.

Que l'ensemble du personnel de l'institut de physique de l'USTHB trouve ici l'expression de mes remerciements pour son accueil et sa gentillesse. Je remercie sincèrement M^{elle} Khalfi Zohra et M^{mm}e Alouche Malika de la poste graduation.

Enfin, je ne peux pas oublier de remercier Dieu, le grand puissant pour m'avoir laissé en vie jusque là.

Références:

- [1] Yannick, Merle, Etude de la dispersion électromagnétique dans les matériaux périodiques diélectriques bidimensionnel, thèse de doctorat, université de Limoges, 2003.
- [2] Kittel, C., Introduction to Solid-State Physics. 1971.
- [3] Streifer, W., Scifres, D.R., and Burnham, A.D., Coupled Wave Analysis of DFB and DBR Lasers. IEEE Journal of Quantum Electronics, 13(4) : p. 134-141. 1977.
- [4] Yang, F. R., Ma, K. P., Qian, Y. and Itot, T., IEEE Trans. Microwave Theory and Tech., Vol. 34, No. 21, 2041-2042, Oct. 1998.
- [5] Yang, F. R., Ma, K. P., Qian, Y. and Itot, T., IEEE Trans. Microwave Theory and Tech., Vol. 47, No. 8, 1509-1514, Aug. 1999.
- [6] Yablonovitch, E., Inhibited spontaneous emission in Solid-State Physics and electronics . Physical Review Letters, 58(20) : p.2059-2062. 1987.
- [7] Yablonovitch, E ., Gmetter, T. J., and Leung, K. M., Photonic band structure : the face – centred-cubic case employing non spherical atoms. Physical Reviews Letters, 67(22) : p. 2295. 1991.
- [8] Yablonovich, E., Phys. Rev. Lett., Vol. 67, No. 17, 2295-2300, 1991
- [9] Kosaka, H., Kawashima, T., Tomita, A., Notomi, M., Tamamura, T., Sato, T., and Kawakami, S., Applied Physics Letters, Vol. 74, No. 10, 1370-1372, 1999.
- [10] Bouche, D., Moulinet, F., Méthodes asymptotiques en électromagnétisme, Springer verlag.
- [11] Ho, K. M., Chan, C. T., and Soukoulis, C.M., Physical Review Letters, Vol. 65, 3152, 1990.
- [12] Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., Chan, C. T., and D. Turner, physical Review B, Vol. 53, 8340, 1996
- [13] Ryu, H. Y., Hwang, J. K., and Lee, Y. H., Physical Review B, vol. 59, 5463, 1999.
- [14] Li, Z. Y., Zhang, X., and Zhang, Z. Q., physical Review B, vol. 61, 15738, 2000.
- [15] Fargeot, Etude d'un résonateur diélectrique cylindrique antenne. Application à la caractérisation des matériaux, thèse de doctorat, Université de Limoges, 20 Janvier 1999.
- [16] Pelosi, G., Coccioli, R., and Selleri, S., Quick Finite Elements for Electromagnetic Waves, Artech House
- [17] Smith, D. R., Padilla, W. J., Vier, D. C., Nemat-Nasser, S. C., and Schulz, S., Phys. Rev. Lett., Vol. 84, No. 18, 4184-4187, 2000.
- [18] Pendry, J.B., Mackinnon, A., Phys. Rev. Lett. 69(1993) 2772.

- [19] Pendry, J. B., J. Mod. Opt. 41. 209, 1994.
- [20] Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., Chan, C. T., and Ho, K. M., Phys. Rev. B, Vol. 49, 11080-11087, 1994.
- [21] Pendry, J. B., Martin- Moreno, L., Phys. Rev. B, Vol. 50, 5062-5073, 1994
- [22] Smith, D. R., Schultz, S., Kroll, N., Ho, M., and Soukoulis, C. M., Appl. Phys. Lett., Vol.65, 2059-2061, 1994.
- [23] Felbacq, D., Tayeb, G., and Maystre, D., Journal of the Optical Society A, Vol. 11, 2526, 1994.
- [24] Abramovitz, M. and Stegun, I., Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1970.
- [25] Sabouroux, P., Tayeb, G., and Mystre, Optics Communication, Vol. 160, 33, 1999.
- [26] Mystre, D., Pure Applied Optics, Vol. 3, 975, 1994.
- [27] Taflove, A., Computational Electromagnetics, the Finite-Difference Time Domain Method, Artech House, Boston, London, 1995.
- [28] Belkhir. A., Modélisation electromagnetique par la méthode FDTD: Application à la caractérisation des matériaux, thèse de Magister, Université Mouloud Mammeri de Tizi - Ouzou, 2001
- [29] Gadot, F., Ammouche, A., de lustrac, A., Chelnokov, A., Bouillault, F., Crozat, P., and Lourtioz, J. M., IEEE Trans. On Magn., Vol. 34, No. 5, Sept. 1998.
- [30] McGurn, A. R., Phys. Rev. B, Vol. 53, No. 11, 7059-7065, 1996.
- [31] Sakoda, K., and Shiroma, H., Phys. Rev. B, Vol. 56, No. 8, 4830-4836, 1997.
- [32] Yen, K. S., Numerical Solution of initial boundary value problems involving Maxwells equations in isotropic media, IEEE Trans. Antennas Propag, Vol. AP-14, pp. 302-307, May 1966.
- [33] Kraus, J. D., Electromagnetics (Fourth Edition), McGraw. Hill, Inc., New York, 1992
- [34] Belkhir. A, Ibazizen. A, Lamrous.O, Contribution a la simulation électromagnétique par la méthode FDTD, 4^{ème} congrès national de physique et de ses application CNPA, Nov2000, USTHB
- [35] Taflove, A., Computational Electrodynamics, The Finite-Difference Time Domain Method, Artech House, NordWood, MA, 1995.
- [36] Engquist, B., Madjda, A., Absorbing Boundary Conditions for The Numerical Simulation Of Waves. Math. Comput., Vol. 31, pp. 629-651, July 1977.

- [37] Mur, G., Absorbing Boundary Conditions For The Finite-Difference Approximation Of The Time Domain Electromagnetic Field Equations, IEEE Trans. Electromag. Compatibility, Vol. 23, p. 377-382, Nov. 1981.
- [38] REJIBA, F., Modélisation de la propagation des ondes électromagnétiques en milieux hétérogènes – Application au Radar Sol, thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie Paris-VI, 27 Mars 2002.
- [39] Chan, C.T., Yu, Q.L, and Ho, K. M, Phys, Rev B, Vol 51, No 23, 15 june 1995.
- Lindman, E. L., Free Space Boundary Conditions For The Time-Dependent Wave Equations, Journ. Comput. Phys., Vol. 18, pp. 66-78, 1975.
- [40] Plihal, M., Shambrook, A., Maradudin , A. A., ” Tow- Dimensionnel photonic band structure”, Vo 80, No3, 4, 1 January 1991.
- [41] Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., Chan, C.T., and turner, D., localization of electromagnetic wave in tow-dimensionnel disordered systems, physical Review. Vo. 53, No. 13, 1Avril 1996.
- [42] Plihal, M., Maradudin, A.A., Photonic Band Structure Systems: The triangular lattice, Physical Review. Vo. 44, No. 16, 15 October 1991

RESUME

Les cristaux photoniques sont des structures périodiques diélectriques ou métalliques présentant des bandes d'énergie et de fréquence interdite et autorisée contrôlables. Ils ont été introduits à la fin des années 1980 par Ili Yablonovitch, dans le but d'améliorer les systèmes électromagnétiques tels que les supports d'antennes, résonateurs, filtres,.....etc. Le bon fonctionnement de tels systèmes est lié aux bandes photoniques de leurs structures cristallines. Ces bandes sont très sensibles et liées à la géométrie et aux matériaux utilisés. Par ailleurs, l'étude géométrique et paramétrique des structures de bandes photoniques paraît une étape très indispensable.

Dans ce présent travail, nous avons étudié, par la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD), la structure de bande photonique d'un système constitué d'un ensemble infini de cylindres diélectriques identiques, infiniment longs, parallèles entre eux et périodiques. Ces derniers sont plongés dans un autre milieu diélectrique homogène. L'intersection de ces cylindres avec un plan perpendiculaire constitue un réseau carré simple. Les bandes interdites photoniques (BIP) et les intensités spectrales des modes transverses électriques (TE) et transverse magnétique (TM) sont calculées. L'effet du facteur de remplissage et de la permittivité des cylindres est discuté.

MOTS CLES

- *Equations de Maxwell*
- *Méthode des différences finies dans le domaine temporel*
- *Les cristaux photoniques*
- *BIP*

Principales notions et constantes

Célérité dans le vide : $c=3.10^8\text{m/s}$

Pulsation $\omega(\text{rad/s})$

Permittivité diélectrique(Faraday/m) : ϵ

Permittivité diélectrique relative : ϵ_r

Permittivité diélectrique dans le vide : $\epsilon_0=8.8541.10^{-12}\text{F/m}$

Perméabilité magnétique (Henry/m) : μ

Perméabilité magnétique dans le vide : $\mu_0=4\pi.10^{-7}\text{H/m}$

Nombre d'onde(m^{-1}) : k

Champ magnétique H (Ampère/m)

Champ électrique E(Volt/m)

Densité de flux électrique D (Coulomb/ m^2)

Densité de flux magnétique B (Webber / m^2)

Longueur d'onde (m) : λ

Fréquence (Hertz) : ν

Le paramètre du réseau (m) : a

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE

CHAPITRE 1 : GENERALITES

1-1 Quelques rappels de base.....	1
1-1-1 Réseau cristallin.....	1
1-1-2 Vecteurs de translation et réseau.....	1
1-1-3 Motif	1
1-1-4 Les réseaux périodiques bidimensionnels.....	2
1-1-5 Notions du réseau réciproque.....	4
1-1-6 Zone de Brillouin.....	5
1-1-7 Première zone de Brillouin.....	5
1-1-8 Limite de la zone dans des directions données.....	5
1-2 Quelques rappels d'électromagnétisme.....	7
1-2-1 Propriétés électromagnétiques du milieu.....	7
1-2-2 Conductivité électrique.....	7
1-2-3 Perméabilité magnétique.....	7
1-2-4 Permittivité électrique.....	8
1-2-5 Indice de réfraction.....	8
1-3 Introduction à la photonique.....	9
1-3-1 Revue des différents types de matériaux photoniques.....	9
1-3-2 Défauts.....	12
1-3-3 Diagramme de bande.....	13
1-4 Conclusion.....	15

CHAPITRE 2 : METHODES DE RESOLUTION DES EQUATIONS DE MAXWELL

2-1 Introduction.....	16
2-2 Différentes méthodes de simulation électromagnétique.....	16

2-2-1 Méthode des ondes planes.....	17
2-2-2 Méthode des éléments finis.....	18
2-2-3 Méthode de la matrice du transfert.....	18
2-2-4 Méthode rigoureuse de la dispersion.....	19
2-2-5 Théorie de la grille diffractée.....	20
2-2-6 Méthode des différences finies dans le domaine temporel FDTD.....	21
2-2-7 Résumé sur les méthodes de simulation.....	21
2-3 Formalisme de la méthode FDTD.....	22
2-3-1 Introduction.....	22
2-3-2 Equations de Maxwell.....	22
2-3-3 Système différentiel de base.....	23
2-3-4 Réduction des équations de Maxwell à deux dimensions.....	24
2-3-5 Réduction des équations de Maxwell à une dimension.....	25
2-3-6	Discrétisation de
l'espace et du temps.....	26
2-3-7 Schéma de Yee.....	28
2-4 Propriétés du Schéma de Yee.....	30
2-4-1 Stabilité.....	30
2-4-2 Dispersion numérique.....	30
2-5 Simulation de l'espace ouvert.....	32
2-5-1 Condition d'absorption de Mur (ABC).....	32
2-5-2 Couche absorbante de Bérenger.....	34
2-5-3 Conditions aux limites périodiques.....	36
2-6 Conditions initiales.....	37
2-7 Conclusion.....	39

CHAPITRE 3 : RESULTATS ET DISCUSSION

3-1 Application à la structure bidimensionnelle carrée.....	40
3-1-1 Paramètres de l'analyse FDTD.....	41
3-1-2 Résultats de la simulation.....	41
3-1-3 Effet du facteur de remplissage sur le gap.....	49
3-1-4 Effet de la permittivité et du facteur de remplissage sur l'ouverture du gap.....	51

3-2 Application à la structure bidimensionnelle triangulaire.....	54
3-3 Conclusion.....	57

CONCLUSION GENERALE

BIBLIOGRAPHIE

CHAPITRE 1

GENERALITES

CHAPITRE 2

METHODES DE RESOLUTION DES EQUATIONS DE MAXWELL

CHAPITRE 3

RESULTATS ET DISCUSSION

INTRODUCTION GENERALE

Ce travail de recherche a été effectué au laboratoire de physique et chimie quantique de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou. Il est consacré d'une part au développement d'un code de simulation électromagnétique par la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD), et d'autre part à l'utilisation de ce code pour l'étude des structures de cristaux photoniques.

Cette étude s'inscrit dans le cadre général d'une contribution à l'amélioration et l'optimisation des fonctionnalités de ces matériaux par détermination de leurs fréquences propres et de leurs structures de bandes.

En effet, depuis quelques années, la miniaturisation des systèmes électroniques n'a cessé de progresser. Un intérêt croissant s'est ainsi porté sur l'élaboration de nouveaux matériaux artificiels caractérisés par des bandes de fréquences interdites photoniques (BIP) dont l'apparition est liée tout simplement au fait que l'indice de réfraction varie périodiquement dans les différentes directions de l'espace.

Encore en phase de recherche et de développement, l'élaboration de ce type de cristaux nécessite une meilleure compréhension du rôle de la configuration et des caractéristiques électromagnétiques de ces matériaux. Pour cette raison, le premier objectif de cette étude est la mise en place d'un code de calcul permettant la détermination de fréquences propres de tels cristaux pour différentes configurations.

Le deuxième objectif que nous nous sommes assignés est d'appliquer ce code pour des cristaux $2D$ présentant un réseau carré et triangulaire. Ce choix est motivé par le fait que ces configurations présentent plusieurs avantages. Tout d'abord, elles sont simples à réaliser, leur faisabilité est à présent bien démontrée pour des longueurs submicroniques et de plus elles présentent une BIP bidimensionnelle qui autorise le contrôle de la lumière dans le plan.

Enfin, le dernier objectif visé par ce travail est de valider notre modèle théorique par comparaison de nos résultats avec ceux disponibles dans la littérature.

En vue d'atteindre ces différents objectifs, nous nous sommes proposés de diviser ce mémoire en trois chapitres.

Le premier chapitre est consacré à un bref rappel des notions de physique du solide et d'électromagnétisme et à une présentation générale des différentes structures à base de cristaux photoniques.

Dans le deuxième chapitre, après avoir rappelé les principales méthodes de simulation de structures photoniques ainsi que leurs domaines de validité, nous présentons la méthode FDTD utilisée dans le cadre de cette étude, en passant en revue son principe, sa validité et les paramètres d'analyses électromagnétiques liés au système étudié.

Dans le troisième et dernier chapitre, nous présentons et analysons dans une première étape les résultats de nos calculs. Afin de les valider, nous développons dans une seconde étape une étude comparative de nos calculs avec ceux extraits de la littérature.

Une conclusion générale ainsi que des perspectives relatives à cette étude sont rapportées à la fin de ce mémoire.

CHAPITRE 1
GÉNÉRALITÉS

1- GENERALITES :

Pour la compréhension des phénomènes physiques mis en exergue dans le cadre de ce travail, il nous a paru utile dans ce premier chapitre de rappeler et d'introduire quelques notions et grandeurs essentielles de physique du solide et d'électromagnétisme caractérisant le système étudié à savoir les cristaux photoniques.

1-1 Quelques rappels de base :

1-1-1 Réseau cristallin:

Le milieu cristallin est un état ordonné de la matière dans lequel il y a arrangement régulier et symétrique des atomes. Dans les cristaux, l'arrangement des atomes est tri-périodique, c'est à dire qu'il y a répétition d'atomes suivant les trois directions de l'espace.

1-1-2 Vecteurs de translation et réseau:

Un cristal est composé d'atomes arrangés en un réseau défini par trois vecteurs de translation fondamentaux $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ de telle manière que l'arrangement atomiques soit identique autour d'un point $\mathbf{r}$ ou autour de tous les points.

$$\vec{r}' = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (1.1)$$

où u, v, w sont des entiers arbitraires. L'ensemble des points $\mathbf{r}$ définit par (1.1) pour toutes les valeurs des entiers u, v, w , définit **un réseau**.

1-1-3 Motif:

Un motif élémentaire vient se positionner sur chaque nœud du réseau. Ce motif peut adopter des formes ou des volumes complexes. L'association motif-réseau est caractéristique de l'état cristallin.

1-1-4 Les réseaux périodiques bidimensionnels:

Les réseaux périodiques à deux dimensions se regroupent principalement suivant trois familles:

- **Réseau carré:**

Les nœuds du réseau sont situés sur un carré de côté " a " (voir figure1-1). Il a été montré [1] que ce type de réseau est très sensible à l'angle d'incidence et à la polarisation de l'onde électromagnétique. Il est ainsi difficile d'obtenir une bande interdite totale, c'est à dire une bande qui empêche la propagation quelque soit la polarisation.

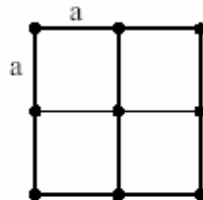


Figure 1-1 : Réseau carré

- **Réseau triangulaire:**

Chaque nœud du réseau est espacé de son proche voisin d'une distance " a " (voir figure 1-2). Cette structure est moins sensible à l'angle d'incidence que le réseau carré mais la bande interdite complète reste difficile à obtenir.

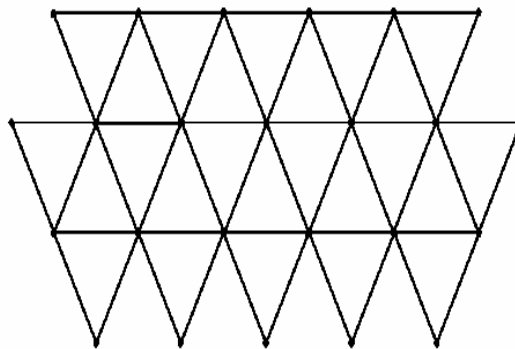


Figure1-2 : Réseau triangulaire

- **Structure hexagonale :**

Sur un réseau hexagonale dont tous les nœuds sont identiques et espacés de ‘ a ’ (figure 1-3), on appelle **graphite** cette structure.

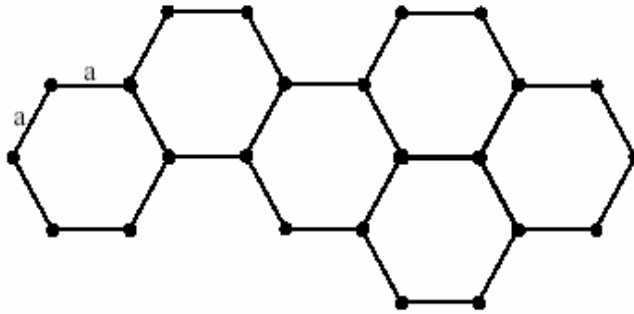


Figure1-3 : Structure Graphite [1]

Si un nœud diffère de son voisin par sa nature ou sa dimension, on obtient la structure cristalline du Nitrure de Bore (figure1-4). Celle-ci permet d’obtenir de larges bandes interdites lorsqu’on les compare à celle obtenue avec la structure graphite précédente.

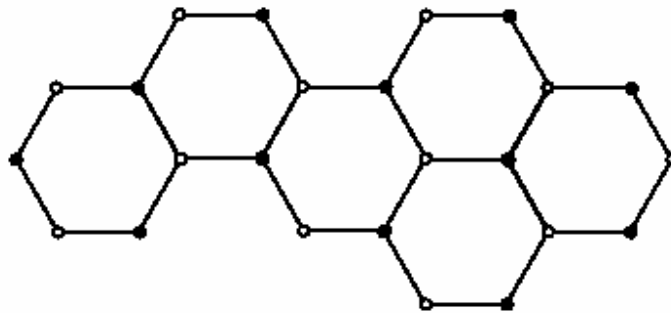


Figure1-4 : Structure Nitrure de Bore [1]

1-1-5 Notions du réseau réciproque:

A toute structure cristalline est associée deux réseaux: le réseau direct et le réseau réciproque. Les axes dans le réseau réciproque sont les normales aux plans principaux du réseau cristallin, on dit alors que les phénomènes de diffraction sont localisés dans l'espace réciproque ou l'espace de Fourier. A titre d'exemple, nous donnons dans la figure1-5 les vecteurs de base du réseau réciproque dans le cas d'un réseau de bravais oblique à deux dimensions.

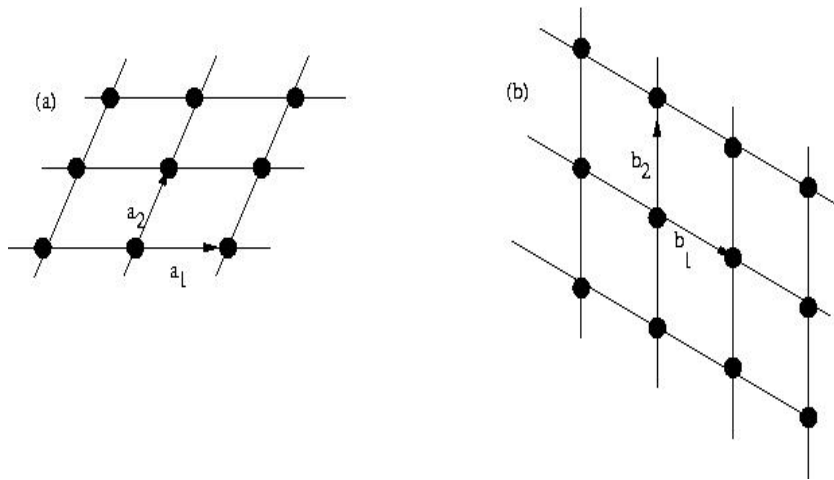


Figure1-5 : a) Réseau direct oblique à deux dimensions b) son réseau réciproque. Les vecteurs b_1 et b_2 sont respectivement perpendiculaires à a_1 et a_2

Il existe des relations qui relient le réseau direct au réseau réciproque:

- Un nœud N du réseau cristallin est repéré par un vecteur $\vec{r}$ donné par la relation suivante :

$$\vec{ON} = \vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (1.2)$$

- Un nœud G du réseau réciproque est repéré par un vecteur $\vec{r}'$ tel que,

$$\vec{OG} = \vec{r}' = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \quad (1.3)$$

des équations (1.2) et (1.3) résulte la relation suivante:

$$\vec{r} \cdot \vec{r}' = uh + vk + wl = m \quad (1.4)$$

où uvw sont les coordonnées numériques d'un nœud du réseau direct, hkl sont les coordonnées numériques d'un nœud du réseau réciproque, m est un entier et $\vec{A}$, $\vec{B}$, $\vec{C}$ sont les vecteurs de base dans l'espace réciproque.

1-1-6 Zone de Brillouin :

La notion de la zone de Brillouin est nécessaire pour décrire le comportement des photons à l'intérieur d'un cristal dans lequel la symétrie de translation joue un rôle essentiel.

1-1-7 Première zone de Brillouin :

Comme nous l'avons vu précédemment $\vec{A}$, $\vec{B}$, $\vec{C}$ définissent une maille élémentaire du réseau réciproque. En physique du solide, il est plus pratique d'utiliser une autre maille élémentaire appelée maille de Wigner-Seitz, celle-ci est définie comme le volume délimité par les plans médiateurs des plus petits vecteurs du réseau. Dans l'espace réciproque, la maille de Weigner-Seitz est appelée la première zone de Brillouin.

1-1-8 Limite de Zone

On définit la limite de zone dans une direction donnée comme le point d'intersection de cette direction avec la surface délimitant la première zone de Brillouin. Sur chacune des figures (1-6) et (1-7) nous avons représenté le réseau direct, le réseau réciproque et la première zone de Brillouin d'un réseau bidimensionnel carré et triangulaire.

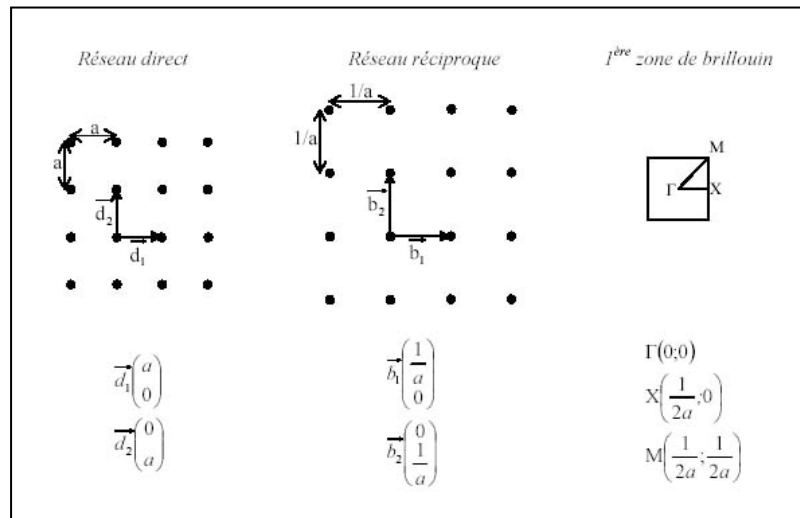


Figure 1-6 : Réseau direct , réseau réciproque et la première zone de Brillouin d'un réseau bidimensionnel d'un réseau carré.

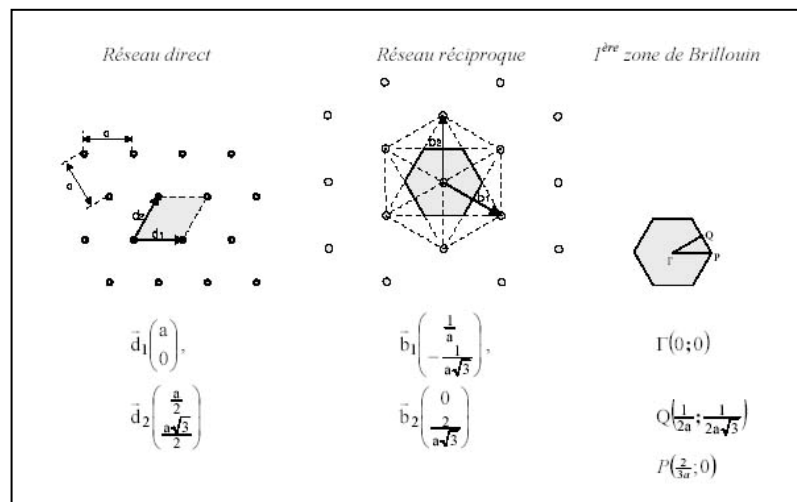


Figure 1-7 : Réseau direct , réseau réciproque et la première zone de Brillouin d'un réseau bidimensionnel d'un réseau triangulaire.

1-2 Quelques rappels d'électromagnétisme :

1-2-1 Propriétés électromagnétiques d'un milieu :

Trois quantités physiques caractérisent un milieu électromagnétique: la conductivité σ , la perméabilité magnétique μ et la permittivité ou la constante diélectrique ε . Ces trois quantités apparaissent clairement dans les équations de Maxwell et peuvent être des grandeurs tensorielles dans le cas d'un milieu anisotrope. Elles sont en général complexes et dépendent de la fréquence, montrant le caractère dispersif du milieu. La partie imaginaire est directement reliée à l'atténuation globale de l'onde électromagnétique.

1-2-2 Conductivité électrique (S/m) :

La conductivité électrique représente la capacité de la matière à mettre en mouvement les charges libres sous l'action d'un champ électrique. Cette grandeur qui est reliée à la densité du courant électrique au champ électrique est donnée par la loi d'Ohm:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}$$

Rappelons que la conductivité électrique du vide est nulle

1-2-3 Perméabilité magnétique μ (H/m) :

La perméabilité magnétique correspond à l'énergie stockée ou perdue dans le matériau suite aux phénomènes d'induction magnétique. Sous l'effet d'un champ magnétique, la polarisation de la rotation des électrons autour de leurs noyaux est caractérisée par le tenseur des perméabilités magnétiques μ qui décrit le pouvoir de polarisation du milieu. Le vecteur d'induction magnétique $\vec{B}$ est une fonction du champ magnétique $\vec{H}$ et s'écrit:

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

avec $\mu = \mu_r \mu_0$, où μ_r est la perméabilité relative du milieu.

1-2-4 Permittivité électrique (F/m) :

Lorsqu'un champ variable est appliqué, les particules constituant le matériau tendent à changer de position d'équilibre afin de compenser l'effet du champ. Ce phénomène de polarisation se fait pendant un temps minimum, dit de relaxation. On distingue quatre principaux types de polarisation :

- La polarisation électronique : déformation du nuage électronique sous l'action d'un champ.
- La polarisation dipolaire ou d'orientation : les molécules dipolaires soumises à un champ voient l'axe de leur dipôle tenter à s'aligner avec ce dernier.
- La polarisation ionique: l'existence d'ions de signes contraires dans certains solides provoquent des accumulations distinctes sous l'action d'un champ.
- La polarisation inter-faciale ou de charges: une accumulation des ions au niveau des interfaces dans un matériau hétérogène soumis à l'action d'un champ électrique.

Le phénomène de polarisation correspond à une accumulation de l'énergie électromagnétique. Mais lorsque ce dernier dépend de la fréquence il s'accompagne de pertes par dissipation. La mesure de la quantité d'énergie accumulée lors de la polarisation définit alors la partie réelle de la permittivité diélectrique et les pertes par dissipation permettent de quantifier la partie imaginaire. Cette quantité lie le courant de déplacement électrique au champ électrique par la relation :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}$$

avec $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$, où ϵ_r est la permittivité relative du milieu.

1-2-5 Indice de réfraction :

Dans un matériau diélectrique non magnétique ($\mu_r = 1$), l'indice optique est donné par :

$$n = \frac{V_p}{c} = \sqrt{\epsilon_r}$$

où V_p est la vitesse de phase. Si ce matériau est caractérisé par un indice optique (réfraction) périodique suivant les différentes directions de l'espace ce dernier est appelé **matériau photonique**.

1-3 Introduction à la photonique :

La photonique a pour but l'étude de tous les moyens permettant de contrôler les photons; particules de lumière : savoir les créer, les transporter, les filtrer,...etc. Bien que proche de l'optique, elle est plutôt à rapprocher de l'électronique, qui traite, elle des électrons. Les technologies de communication actuelles font appel de plus en plus au transport d'informations par la lumière qui présente de nombreux avantages : capacité, rapidité et insensibilité aux perturbations extérieures. Dans ce contexte, les recherches actuelles s'orientent vers l'étude des cristaux photoniques.

1-3-1 Revue des différents types de cristaux photoniques

Les cristaux photoniques ou systèmes à bande interdite de photons (BIPs) sont des matériaux caractérisés par une variation périodique de leur indice optique. Cette variation est capable d'engendrer par diffraction des bandes interdites spectrales pour la propagation des photons. Cette propriété peut être exploitée pour guider ou confiner les photons et pour contrôler l'émission spontanée dans des directions et fréquences données. En pratique, la périodicité peut être déclinée dans une, deux ou trois directions de l'espace. Les mécanismes de formation de bandes interdites sont à rapprocher des processus cohérents de diffraction de Bragg dans un système périodique. L'exemple le plus simple pour appréhender les mécanismes de formation de bandes interdites est celui d'un système unidimensionnel d'alternance $\frac{\lambda}{4}$ appelé miroir de Bragg [2] (voir figure 1-8). Ces matériaux sont très utilisés depuis un certain temps dans les cavités [3] et les filtres optiques [4]. La succession périodique de couches d'indices différents génère des phénomènes de réflexion. En respectant la condition de Bragg, ces réflexions empêchent la propagation des ondes électromagnétiques dans le milieu et donne ainsi naissance à des bandes interdites. Ces dernières sont d'autant plus larges que le rapport d'indice entre les deux milieux qui constitue le système est élevé et se réduisent lorsque le rapport d'indice est faible. Dans le cas d'une alternance d'indice très

élevé on peut obtenir des miroirs à haute réflectance [5]. Cependant, plus de la moitié de l'énergie lumineuse part sous forme de fuites et de mode guidé et ne contribue donc pas à l'émission spontanée. C'est dans ce contexte que E.Yablonovitch, travaillant sur l'inhibition de l'émission spontanée, suggéra l'extension du concept de Bragg à fort rapport d'indice de réfraction aux trois dimensions afin d'assurer l'existence de bande interdite sur une large gamme d'énergie et ce quelque soit l'angle d'incidence [6]. Il est clair que, des matériaux périodiquement structurés suivant les trois directions (systèmes colloïdaux, certains polymères, ...) existent. Mais ceux-ci ont des indices de réfraction trop faible, et les mesures sur ces matériaux montrent des effets classiques de diffraction.

La première démonstration expérimentale d'une BIP complète a eu lieu en 1991 [7]. Celle-ci fut obtenue dans le domaine des micro-ondes à partir d'une structure plexiglas percée suivant les trois axes $\langle 110 \rangle$ d'une maille diamant connue sous l'appellation de la Yablonovite. Depuis, plusieurs structures ont été proposées et même fabriquées avec une bande interdite dans le domaine des ondes millimétriques [8]. De telles structures ont tout de suite trouvé leurs applications notamment dans le domaine des antennes.

Malgré des avancées considérables des structures (3D), leur fabrication aux longueurs d'ondes optiques reste encore difficile. De plus, l'insertion d'un élément actif dans celles-ci peut s'avérer délicate. Une solution de mise en œuvre plus aisée, s'appuie sur l'utilisation des structures photoniques 2D. Ces dernières peuvent être de géométrie carrée, triangulaire ou encore hexagonale. Dans le cadre de ce travail, on s'intéresse aux structures photoniques carrées et triangulaires constituées d'un ensemble de cylindres diélectriques parallèles entre eux et périodiques plongés dans un autre milieu diélectrique. Notre choix est motivé par le fait que ces structures sont simples à réaliser et possèdent des bandes interdites qui permettent le contrôle de la lumière. Les structures 2D sont généralement utilisées en géométrie de guide d'ondes afin de réaliser des micro-cavités.

Les structures photoniques unidimensionnelle, bidimensionnelle et tridimensionnelle sont représentées dans la figure 1-9. La Yablonovite est schématisée dans la figure 1-10.

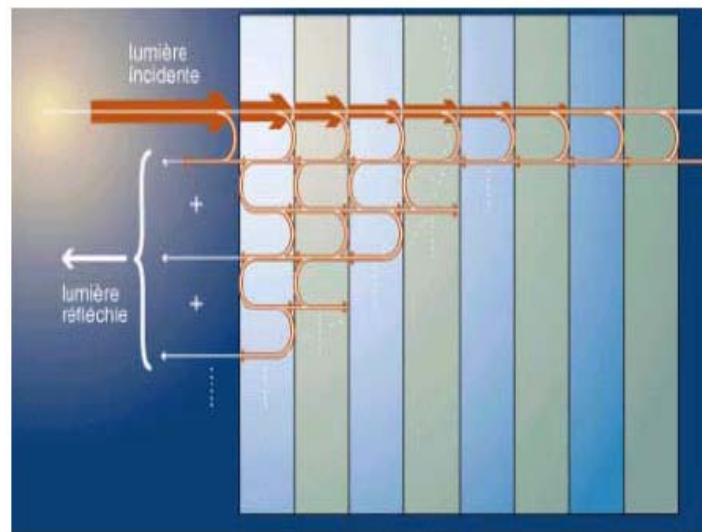


Figure1-8 : Miroir de Bragg [1]

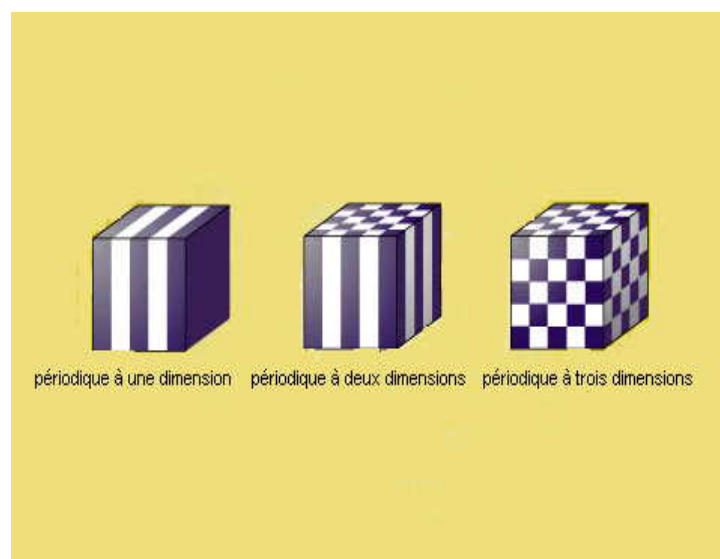
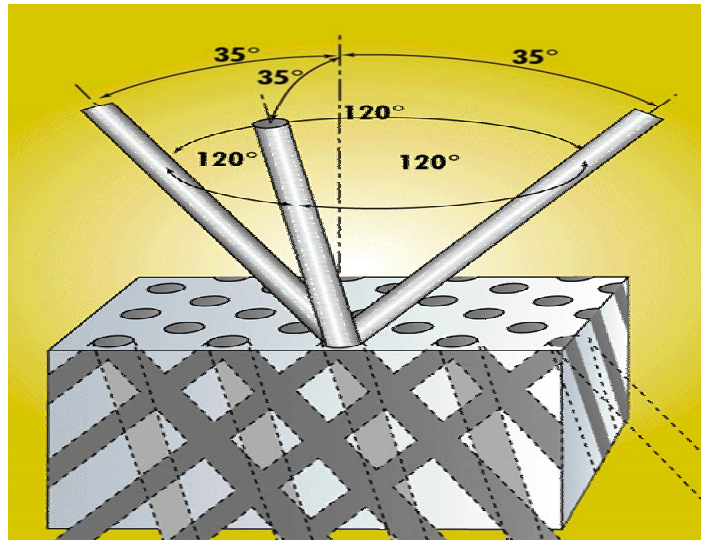


Figure1-9 : Structure photonique unidimensionnelle, bidimensionnelle et tridimensionnelle [9]

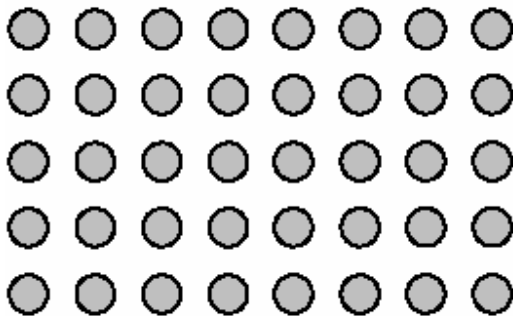
**Figure1-10 : La
Yablonovite [1]**



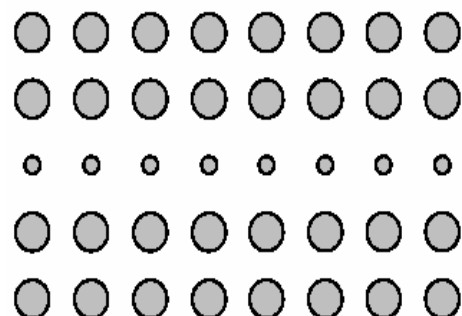
1-3-2 Les défauts

L'un des attraits conceptuels offert par les cristaux photoniques et leur structure cristalline et la possibilité d'y introduire les défauts (voir figure1-11). Comme en physique des semi-conducteurs, on crée un ou plusieurs niveaux localisés dans la bande interdite. Sans faire l'inventaire de tous les défauts possibles, on réalise aisément la très grande variété de défauts concevables donnant lieu à toutes sortes d'applications potentielles. Nous citons simplement les deux défauts fréquemment réalisés :

- l'omission localisée de trous, grâce à laquelle on obtient des microcavités résonantes.
- la suppression d'une ou de plusieurs rangées de trous dans lesquels la notion de guidage semble plus robuste.



(a)



(b)

Figure1-11: (a) Bip 2D (b) Bip 2D contenant une rangée de défaut

1-3-3 Diagramme de bande

Toute l'information liée à la cinétique du photon est contenue dans son diagramme de bande, d'où la nécessité de son étude. Ce dernier est défini par l'ensemble des relations qui lient les longueurs d'ondes à la fréquence de l'ensemble des modes se propageant dans une structure donnée.

Pour étudier donc la propagation d'une onde dans un milieu quelconque, nous sommes amenés à résoudre les équations de Maxwell qui s'écrivent dans un milieu ne contenant aucune source dans le système CGS comme suit:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.5)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\vec{\varepsilon}(\vec{r})}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.6)$$

$$\vec{\nabla} \cdot ((\vec{\varepsilon}(\vec{r})\vec{E})) = 0 \quad (1.7)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0 \quad (1.8)$$

La recherche des solutions harmoniques sous la forme:

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) e^{i\omega t} \text{ et } \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{i\omega t} \quad (1.9)$$

aboutit à deux équations d'ondes découplées pour $\vec{E}$ et $\vec{H}$

L'équation d'onde liée au champ magnétique s'écrit :

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\omega^2}{C^2} \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (1.10)$$

En introduisant l'opérateur :

$$\theta = \vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \quad (1.11)$$

On peut réécrire (1.10) sous la forme d'un problème aux valeurs propres

$$\theta \vec{H}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{C^2} \vec{H}(\vec{r}) \quad (1.12)$$

Dans les cristaux photoniques, l'information sur la périodicité est contenue dans la fonction diélectrique (voir figure 1-12), et on a pour tout vecteur $\vec{R}$ du réseau direct.

$$\varepsilon(\vec{r} + \vec{R}) = \varepsilon(\vec{r}) \quad (1.13)$$

L'opérateur θ est hermitique et possède de ce fait la symétrie de translation. Le théorème de Bloch indique que les états propres de θ sont tels que :

$$\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{h}_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.14)$$

avec

$$\vec{h}_{\vec{k}}(\vec{R} + \vec{r}) = \vec{h}_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.15)$$

$\vec{k}$: est le vecteur d'onde de Bloch appartenant à la première zone de Brillouin du réseau réciproque.

Les modes autorisés pour les photons sont donc donnés par le calcul des h_ν et des $\omega(k)$ pour chaque vecteur d'onde appartenant à la première zone de Brillouin. L'ensemble des solutions discrètes de ω constitue la structure de bande ou diagramme de dispersion du système considéré.

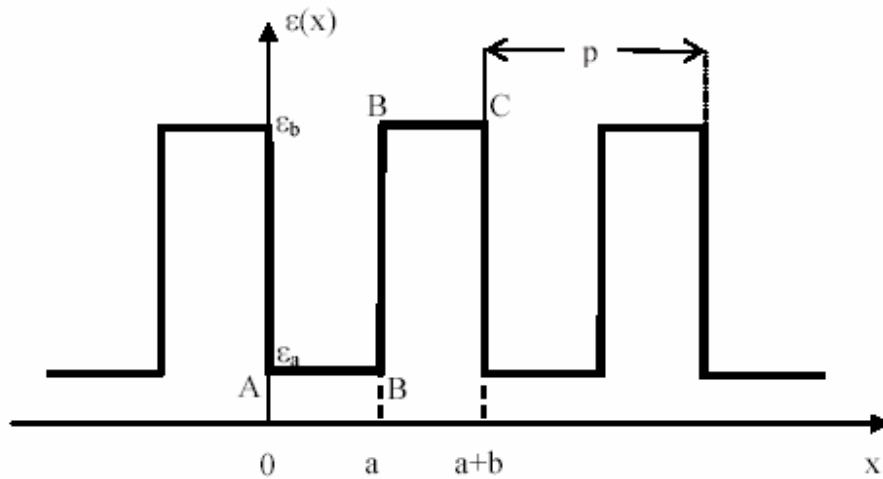


Figure1-12 : Constante diélectrique d'un matériau photonique à 1D

1-4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré aux rappels de quelques notions essentielles de la physique du solide et aux principales propriétés électromagnétiques caractérisant la propagation, l'atténuation et la dispersion des ondes. Les matériaux photoniques qui font l'objet de notre étude ont été décrits d'une manière très détaillée en mettant en exergue leurs propriétés de dispersion. C'est ainsi qu'il est possible de calculer leurs diagrammes de bandes pour l'ensemble des configurations étudiées. Les calculs sont basés sur différentes méthodes que nous présenterons dans le chapitre suivant.

2-1 Introduction

En 1880, Maxwell établit une théorie unique et cohérente à partir de ce qu'on considérait jusqu'alors comme deux choses distinctes l'électricité et le magnétisme. Par la suite, le couplage de l'électricité et du magnétisme a constitué la difficulté principale dans la résolution des problèmes propres à la discipline qu'on appelle l'électromagnétisme. Cette dernière est régie par les équations de Maxwell. Ces équations sont admises depuis comme postulat général de l'électromagnétisme. On peut les écrire sous la forme différentielle ou intégrale dans le domaine temporel ou fréquentiel. Elles sont résolues par des méthodes dites approximatives ou asymptotiques [10] qui traduisent les solutions sous forme de séries qui se rapprochent au mieux des résultats expérimentaux. L'efficacité de ces méthodes repose sur la modélisation des interactions ondes-objets : telles que la réflexion, la transmission, la diffraction, et la diffusion. Ces techniques sont en général rapides en temps de calcul et leur domaine d'application est celui des hautes fréquences. Par ailleurs, leur domaine de validité est souvent restreint et ne sont pas toujours en accord avec l'expérience.

La solution numérique est donc souvent recommandée lorsque ces méthodes asymptotiques ont échoué. Les méthodes numériques apportent des éléments nouveaux dans la compréhension des phénomènes d'interaction du milieu avec les ondes électromagnétiques et dans l'interprétation des mesures. Elles sont largement utilisées pour les calculs d'antennes, de diffraction d'objet en espace libre et des structures de bandes photoniques.

Dans ce chapitre, on s'intéressera particulièrement aux méthodes utilisées pour l'étude des structures de bandes photoniques qui constitue l'objectif de notre travail.

2-2 Différentes méthodes de simulation électromagnétique

Les méthodes numériques couramment utilisées pour l'étude des structures de bandes photoniques sont plus au moins en accord avec l'expérience. Nous exposerons brièvement leurs principes de base et leurs domaines de validité.

2-2-1 Méthode des ondes planes (Plane Wave Method)

Elle est de type fréquentiel et compte tenu de la périodicité de la permittivité $\varepsilon(r)$, elle consiste à développer $\varepsilon(r)$ et le champ électromagnétique sur une base finie de N ondes planes (décomposition en N séries de Fourier).

L'équation d'onde d'un champ électromagnétique $H(r)$ permanent dans un milieu sans perte de permittivité électrique $\varepsilon(r)$ est donnée par :

$$\nabla \times \nabla \cdot H(r) = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(r) \cdot H(r) \quad (2.1)$$

La décomposition de $E(r)$ et $\varepsilon(r)$ en ondes planes donnent:

$$H(r) = \sum_{m=1}^N h(G_m) e^{i(k+G_m) \cdot r} \quad (2.2)$$

$$\eta(r) = \sum_{m=1}^N \eta(G_m) e^{i G_m \cdot r} \quad (2.3)$$

avec

$$\eta(r) = \varepsilon(r)^{-1} \quad (2.4)$$

où les G_m sont les vecteurs du réseau réciproque définis par :

$$G_m \cdot R_n = \delta_{mn} \quad (2.5)$$

k est le vecteur d'onde appartenant à la première zone de Brillouin.

avec (2.2) et (2.3) l'équation (2.1) devient :

$$\sum_{m=1}^N (k + G_m)(k + G_n) \eta (G_m - G_n) h_m = \frac{\omega^2}{c^2} h_m \quad (2.6)$$

Le développement de (2.6), conduit à une équation aux valeurs propres $\frac{\omega^2}{c^2}$. Ainsi pour une structure bidimensionnelle donnée, on obtient un système linéaire de dimension $N \times N$.

Cette méthode [11] est bien adaptée à l'étude d'un BIP (bande interdite photonique) infini, elle a été utilisée par plusieurs auteurs pour la détermination de la bande photonique interdite des structures triangulaires bidimensionnelles ainsi que la structure du graphite [12-14]. Cependant, elle reste inadaptée pour le calcul de la transmission d'un BIP fini et à l'étude des défauts de périodicité.

2-2-2 Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis (Finite Element Method FEM) [15,16] est une méthode numérique adaptée à la résolution des équations aux dérivées partielles, elle a été appliquée à l'origine à des problèmes de la mécanique de structure. Cette méthode est basée sur la description géométrique de la structure sous forme d'un maillage.

Les éléments finis présentent des avantages intéressants dont les principaux sont l'utilisation de cellules triangulaires (2D) ou tétraédriques (3D) pour décrire les géométries complexes et la possibilité de travailler avec les fonctions de bases les plus diverses. Les éléments finis sont capables de simuler des structures photoniques de dimension finie ou infinie avec ou sans défauts contenant des sources extérieures ou intérieures [17]. Cette méthode a connu un développement très rapide mais elle nécessite des espaces mémoires très larges pour des structures à géométries complexes.

2-2-3 Méthode de la Matrice du Transfert (MMT)

La méthode de la matrice du transfert (Transfert Matrix Method) a été introduite par Pendry et Mackinnon [18,19]. C'est une méthode de calcul couche par couche du champ électromagnétique. Le concept de la MMT est très simple :

si on connaît le champ électromagnétique dans le plan $x - y$ au point $z = 0$, on peut par un maillage de l'espace réel puis une discrétisation des équations de Maxwell pour une

fréquence fixe, calculer le champ électromagnétique à travers le matériau en associant une matrice de transfert, soit :

$$F(z=0) = [E_x(z=0), E_y(z=0), H_x(z=0), H_y(z=0)] \quad (2.7)$$

alors

$$F(z=c) = T(c, z=0) F(z=0) \quad (2.8)$$

Pour un BIP infini, on impose les conditions aux limites de Bloch qui se présentent sous la forme suivante :

$$F(z=0).e^{ikc} = F(z=c) = T(c, z=0) F(z=0) \quad (2.9)$$

où T est la matrice de transfert.

L'équation (2.8) permet le calcul du champ électromagnétique couche par couche ou bloc par bloc dans la direction z. Les valeurs propres de la matrice T nous permet d'obtenir la structure de bande.

La méthode de la matrice de transfert est très utilisée pour le calcul des spectres de réflexion et de transmission. Plusieurs travaux basés sur cette méthode ont été publiés [20-22]. La limitation de cette méthode réside dans le calcul des modes de défauts.

2-2-4 Méthode rigoureuse de la dispersion

La méthode rigoureuse de la dispersion (Rigorous Theory of Scattering) [23] permet de traiter des structures photoniques bidimensionnelles constituées d'un nombre fini de cylindres diélectriques ou métalliques parallèles entre eux d'indice optique complexe. Cette méthode est basée sur la résolution d'un système linéaire où les inconnus sont les coefficients du champ diffracté. Le principe de la méthode est le suivant :

pour un cylindre arbitraire, le champ en un point quelconque au voisinage de ce cylindre est égal à la somme des champs locaux incidents et diffractés exprimée par l'expansion de

Fourier-Bessel. En utilisant la formule de Graf's [24] et la matrice qui donne pour chaque cylindre une relation simple entre les coefficients du champ local incident et les coefficients du champ local diffracté, on aboutit à un système d'équations. La résolution de ce dernier nous ramène au champ diffracté par l'ensemble des cylindres selon la relation :

$$E^d(p) = g(\theta) = \frac{e^{ikr}}{r^{1/2}} \quad (2.10)$$

$g(\theta)$ dépend des coordonnées angulaires et des coefficients du champ diffracté.

C'est une méthode exacte dans le cas où le système est constitué d'un ensemble fini de cylindres parallèles métalliques ou diélectriques à deux dimensions (ou un ensemble de sphères à trois dimensions). Récemment Sabouroux et al. [25] ont réalisé un matériau photonique bidimensionnel d'une géométrie hexagonale, la mesure du spectre de transmission dans le domaine micro-onde a donné des résultats très conformes à ceux obtenus par cette méthode. Cependant, l'inconvénient potentiel de cette méthode est qu'elle requiert des espaces mémoires relativement larges lorsque le nombre de cylindres (ou de sphères) à prendre en compte devient grand.

2-2-5 Théorie de la grille diffractée

La théorie de la grille diffractée (Diffraction Grating Theory) [26] permet le calcul des coefficients de réflexion et de transmission, elle est basée sur la formulation de la théorie des ondes couplées. La méthode permet le calcul de la matrice liant les ondes rentrantes aux ondes sortantes dans un ensemble de grilles identiques ou différentes. Cette matrice fournit alors les coefficients de transmission et de réflexion de la structure. C'est une méthode qui donne des résultats en accord avec l'expérience lorsqu'il s'agit des structures partiellement désordonnées ou des structures avec des cavités infiniment longues. Cependant cette méthode n'est pas capable de simuler des structures contenant des éléments actifs.

2-2-6 Méthodes des différences finies dans le domaine temporel (FDTD)

La FDTD (Finit Difference Time Domain Method) [27-29] est une technique numérique très adaptée à la modélisation des problèmes électromagnétiques, elle a été conçue par les mathématiciens pour la résolution des équations différentielles. Cette technique a été

ensuite appliquée dans le domaine des micro-ondes pour la résolution des équations de Maxwell dans l'espace et dans le temps. Du fait de son aptitude à prendre en considération tous les éléments constituant la structure et de sa disponibilité au laboratoire de physique et chimie quantique de l'université de Tizi-Ouzou, c'est cette méthode que nous avons choisi pour modéliser les structures de bandes photoniques. Elle sera présentée en détail dans le paragraphe {2-3}.

Il est à signaler qu'il existe dans la littérature d'autres méthodes de modélisation de la structure de bande photonique. Elles sont peu utilisées, on cite par exemples la méthode de la fonction de Green [30] et celle du dipôle oscillant [31].

2-2-7 Résumé sur les méthodes de simulation

Il est important de rappeler que le choix d'une méthode dépend en particulier de la nature et de la géométrie du problème à traiter. Pour obtenir la structure de bandes photoniques, la méthode des ondes planes est fortement recommandable, car elle donne des résultats très précis, rapide en temps de calcul. En revanche la théorie des grilles diffractées est moins évidente dans ce cas.

La théorie rigoureuse de la dispersion fournit des résultats sans aucune approximation pour le calcul des coefficients de transmission et de réflexion d'un matériau photonique fini présentant des défauts. L'inconvénient principal de cette méthode réside dans le fait que la structure doit être un ensemble de cylindres parallèles à deux dimensions ou d'un ensemble de sphères à trois dimensions. Bien que des méthodes temporelles sont très adaptées pour le calcul du facteur de qualité d'une cavité dans un cristal photonique, la méthode rigoureuse de la dispersion paraît la plus efficace. La technique des différences finies dans le domaine temporel et la méthode de la matrice de transfert ont indiqué des résultats très satisfaisants en les comparant aux résultats expérimentaux et permettent un calcul direct du spectre de transmission. Il est à noter que la FDTD présente l'avantage par rapport à la MMT dans sa capacité à simuler les composants actifs dans les matériaux photoniques de taille finie ou infinie.

2-3 Formalisme de la méthode FDTD et schéma de Yee :

2-3-1 Introduction :

La méthode FDTD initialement élaborée par S. Ken. Yee en 1966 [32] est actuellement très utilisée pour la résolution numérique des équations de Maxwell dans les systèmes hyperfréquences. Elle est basée sur une approximation des champs électriques et magnétiques par un schéma centré d'ordre deux en espace et en temps qui permet de passer des champs continus aux champs discrets dans un volume de l'espace et pendant un intervalle de temps lui-même discrétisé. Outre la simplicité de son algorithme et sa robustesse, elle permet à chaque pas du temps de calculer le champ en tout point de l'espace discrétisé. La méthode étant entièrement explicite, elle ne nécessite aucune inversion de matrice et possède de ce fait une bonne efficacité de calcul. Enfin, la FDTD peut reproduire le comportement d'une onde électromagnétique sur une large bande de fréquence par une simple transformée de Fourier.

2-3-2 Equations de Maxwell :

Dans l'espace vide ou dans des systèmes quelconques ne contenant ni source de courant électrique ou magnétique, ni matériau susceptible d'absorber l'énergie du champ électrique ou magnétique, les équations de Maxwell qui régissent le comportement des composantes du champ électrique et magnétique sont [33] :

Equation de Maxwell-Faraday :

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_s \vec{B} \cdot d\vec{s} = -\oint_l \vec{E} \cdot d\vec{l} \quad (2.12)$$

Equation de Maxwell-Ampère :

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_s \vec{D} \cdot d\vec{s} = \oint_l \vec{H} \cdot d\vec{l} \quad (2.14)$$

Equation de Gauss pour le champ électrique :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \quad (2.15)$$

$$\iint_s \vec{D} \cdot d\vec{s} = 0 \quad (2.16)$$

Loi de Gauss pour le champ magnétique :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.17)$$

$$\iint_s \vec{B} \cdot d\vec{s} = 0 \quad (2.18)$$

$\vec{E}$ et $\vec{H}$ sont les vecteurs champs électrique et magnétique,

$\vec{D}$ et $\vec{B}$ sont les vecteurs inductions électriques et magnétiques et

$\vec{\nabla}$ est l'opérateur nabla.

2-3-3 Système différentiel de base :

La projection des équations (2.11) et (2.13) dans un repère cartésien (ox, oy, oz) donne un système de six équations algébriques :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad (2.19-a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \quad (2.19-b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (2.19-c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \quad (2.19-d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (2.19-e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (2.19-f)$$

2-3-4 Réduction des équations de Maxwell à deux dimensions :

Notons que lorsque le champ et la géométrie sont invariants par rapport à une dimension donnée, par exemple (OZ), alors les dérivées par rapport à z sont nulles, et le système ci-dessus peut se découpler en deux sous systèmes différents de trois équations.

Le système décrivant les interactions électromagnétiques à deux dimensions lorsque la polarisation est Transverse Magnétique (TM) est :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (2.20-a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.20-b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (2.20-c)$$

Et celui décrivant les interactions électromagnétiques à deux dimensions lorsque la polarisation est Transverse Electrique (TE) est :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (2.20-e)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (2.20-f)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (2.20-c)$$

Nous pouvons traiter d'une manière indépendante la propagation de ces deux types de champ électromagnétique dans le matériau. Les phénomènes associés à ces deux modes peuvent être tout à fait différents. Cela est dû à l'orientation des lignes du champ électrique et magnétique à la surface de la structure à simuler.

2-3-5 Réduction des équations de Maxwell à une dimension :

Dans le cas unidimensionnel ou chaque composante est invariante suivant Y et Z comme dans le cas bidimensionnel, les six équations couplées se réduisent à deux systèmes d'équations découplés. Le premier est relatif au mode TM à une dimension défini par :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = 0 \quad (2.21-a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.21-b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (2.21-c)$$

En posant par exemple $H_x(t=0)=0$, le système se simplifie à deux équations :

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.22-a)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (2.22-b)$$

Le mode TE à une dimension est défini par :

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (2.22-c)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.22-e)$$

2-3-6 Discrétisation de l'espace et du temps :

Pour résoudre les équations de Maxwell, nous avons utilisé la discrétisation suivant le schéma de Yee [28,32]. Ce dernier se base sur les différences centrées pour le calcul des dérivées partielles premières.

Si f est une fonction quelconque, son approximation par les différences centrées s'écrit comme suit :

$$\frac{f^n(i, j, k)}{\partial t} = \frac{[f^{n+1/2}(i, j, k) - f^{n-1/2}(i, j, k)]}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (2.23)$$

$$\frac{f^n(i, j, k)}{\partial x} = \frac{[f^n(i+1/2, j, k) - f^n(i-1/2, j, k)]}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (2.24)$$

En remplaçant dans les équations [(2.19-a)-(2.19-f)] par les différences centrées on obtient :

$$\frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu(i, j, k)} \left(\frac{E_y^n(i, j, k+1) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j+1, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta y} \right) \quad (2.25-a)$$

$$\frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu(i, j, k)} \left(\frac{E_z^n(i+1, j, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i, j, k+1) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta z} \right) \quad (2.25-b)$$

$$\frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu(i, j, k)} \left(\frac{E_x^n(i, j+1, k) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i+1, j, k) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta x} \right) \quad (2.25-c)$$

$$\frac{E_x^{n+1}(i, j, k) - E_x^n(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon(i, j, k)} \left(\frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n+1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} \right) \quad (2.25-d)$$

$$\frac{E_y^{n+1}(i, j, k) - E_y^n(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon(i, j, k)} \left(\frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n+1/2}(i, j, k-1)}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} \right) \quad (2.25-e)$$

$$\frac{E_z^{n+1}(i, j, k) - E_z^n(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon(i, j, k)} \left(\frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n+1/2}(i-1, j, k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n+1/2}(i, j-1, k)}{\Delta y} \right) \quad (2.25-f)$$

A deux dimensions, la discrétisation des équations de Maxwell s'écrivent sous la forme suivante pour le mode TM :

$$\frac{H_x^{n+1/2}(i, j) - H_x^{n-1/2}(i, j)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu(i, j)} \left(\frac{E_z^n(i, j+1) - E_z^n(i, j)}{\Delta y} \right) \quad (2.26-a)$$

$$\frac{H_y^{n+1/2}(i, j) - H_y^{n-1/2}(i, j)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu(i, j)} \left(\frac{E_z^n(i+1, j) - E_z^n(i, j)}{\Delta x} \right) \quad (2.26-b)$$

$$\frac{E_z^{n+1}(i, j) - E_z^n(i, j)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon(i, j)} \left(\frac{H_y^{n+1/2}(i, j) - H_y^{n+1/2}(i-1, j)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i, j) - H_x^{n+1/2}(i, j-1)}{\Delta y} \right) \quad (2.26-c)$$

Pour le mode (TE) on obtient :

$$\frac{E_x^{n+1}(i, j) - E_x^n(i, j)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon(i, j)} \left(\frac{H_z^{n+1/2}(i, j) - H_z^{n+1/2}(i, j-1)}{\Delta y} \right) \quad (2.27-a)$$

$$\frac{E_y^{n+1}(i, j) - E_y^n(i, j)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon(i, j)} \left(\frac{H_z^{n+1/2}(i, j) - H_z^{n+1/2}(i-1, j)}{\Delta x} \right) \quad (2.27-b)$$

$$\frac{H_z^{n+1/2}(i, j) - H_z^{n-1/2}(i, j)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu(i, j)} \left(\frac{E_x^n(i, j+1) - E_x^n(i, j)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i+1, j) - E_y^n(i, j)}{\Delta x} \right) \quad (2.27-c)$$

2-3-7 Schéma de Yee:

L'algorithme de Yee est basé sur le décalage en espace et en temps de calcul des composantes des champs E et H . La Figure 2-1 représente leurs positionnements sur une cellule unitaire.

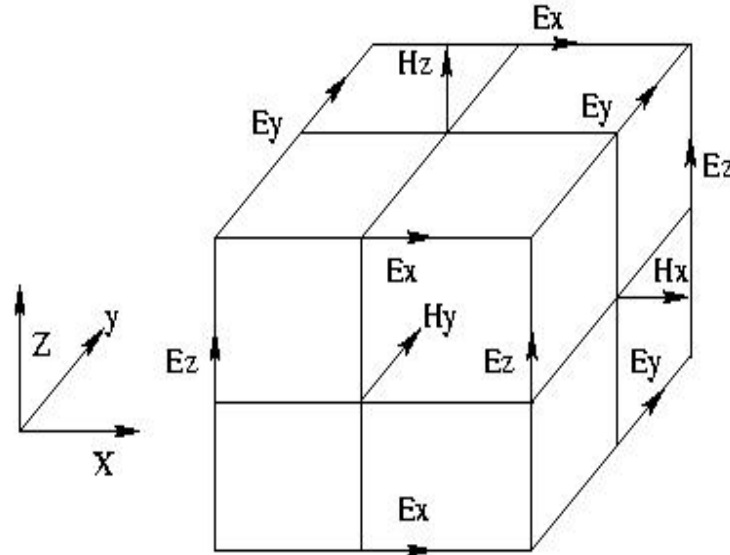


Figure 2-1 : Position des composantes des champs sur une cellule unitaire

Dans les équations de mise à jour des composantes du champ électromagnétique le calcul de E et H se fait d'une manière alternative. Le calcul des composantes H est décalé d'un demi pas de temps sur celui des composantes E . Les composantes électriques sont calculées tous les $n \times \Delta t$, les composantes du champ magnétique quant à elles sont calculées aux instants $(n+1/2) \times \Delta t$ voir (figure 2-2).

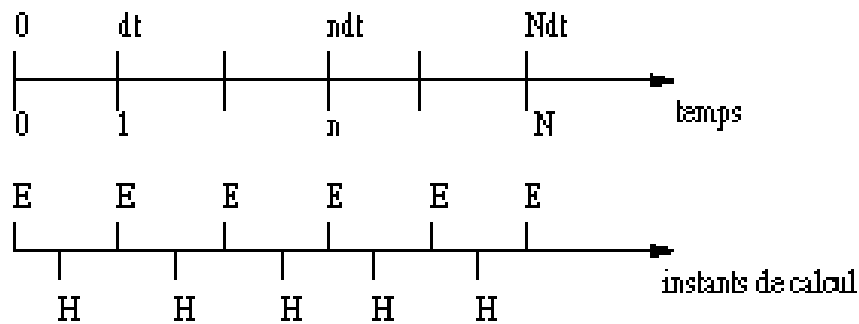


Figure2-2 : Calcul alternatif de E et H

Cette disposition présente deux avantages principaux :

- elle assure un processus itératif entièrement explicite (pas d'inversion de matrice),
- elle permet un centrage naturel des différences finies temporelles.

Sur la figure 2-3 est représentée la cellule de Yee bidimensionnelle uniquement pour le mode (TE), le mode (TM) est obtenu de la même façon.

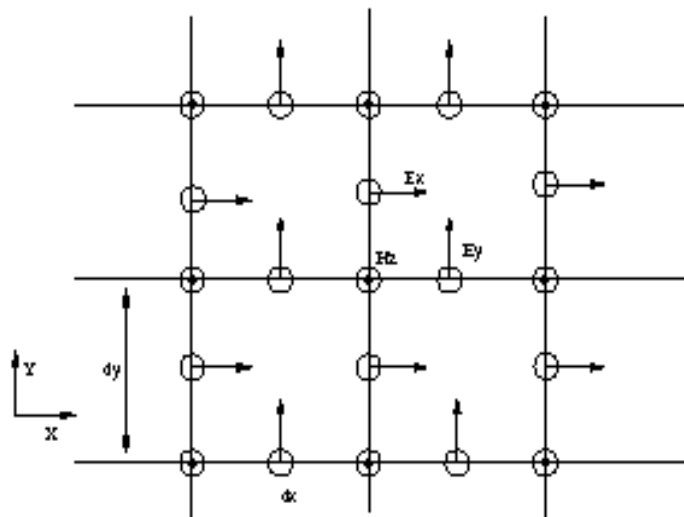


Figure2-3 : Cellule de Yee pour le mode (TE)

2-4 Propriétés du schéma de Yee :

2-4-1 Stabilité :

Comme tous les schémas explicites, le schéma de Yee [32] est soumis à une condition de stabilité liant le pas du temps aux pas d'espace. A deux dimensions cette condition est donnée par :

$$V_{\max} \times dt \leq \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}}} \quad (2.28)$$

où $V_{\max}$ est la vitesse maximale de propagation dans le milieu étudié, en général $V_{\max} = c$.

L'équation (2.28) signifie que la vitesse de propagation dans un milieu doit être plus grande que la vitesse de propagation des modes d'ondes numériques simulés se propageant dans la grille FDTD.

2-4-2 Dispersion numérique :

Le passage des formes continues aux formes discrétisées est à l'origine des dispersions numériques. Ces erreurs ont été analysées en premier par A. Taflové [34]. Elles sont dues à plusieurs facteurs, comme la précision des calculateurs, la différence entre la solution analytique et la solution numérique.

Les dispersions numériques dépendent de diverses paramètres comme la finesse du maillage, le choix du pas du temps,.....etc. Dans le cadre des ondes planes, A. Taflové formule l'équation de la dispersion numérique du schéma de Yee liant la pulsation aux vecteurs d'ondes à trois dimensions. A deux dimensions cette équation se présente sous la forme suivante :

$$\left[\frac{1}{c\Delta t} \sin\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) \right]^2 = \left[\frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \right]^2 \quad (2.29)$$

- Comparaison avec le cas idéal :

En comparant cette équation avec celle d'une onde électromagnétique se propageant dans un milieu continue donnée par :

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (2.30)$$

On constate qu'à la limite lorsque Δx , Δy , Δt tendent tous vers zéro les deux équations sont identiques. Cette dernière remarque signifie que la dispersion numérique dépend en proportion inverse de la finesse du maillage de la grille FDTD.

Les erreurs de la dispersion numérique peuvent apparaître sous plusieurs formes comme les erreurs de phases, la déformation des signaux, l'anisotropie numérique, les pertes en amplitude, l'élargissement des impulsions,...etc.

- Les erreurs de phase :

La variation de la vitesse de phase numérique en fonction de l'angle de propagation que fait une onde TM avec l'axe des abscisses du repère d'un domaine de calcul bidimensionnel ($10\lambda_0 * 10\lambda_0$) [28] est représentée sur la figure2-4 .

On remarque sur cette figure que la vitesse de phase numérique est toujours inférieure à la célérité de la lumière dans le vide. D'autre part, l'erreur sur la vitesse de phase numérique diminue d'un facteur quatre environ lorsque la taille d'une cellule de la grille est réduite de moitié. La diminution de la taille de cellule du maillage apparaît donc comme un moyen très efficace pour réduire les erreurs de phase.

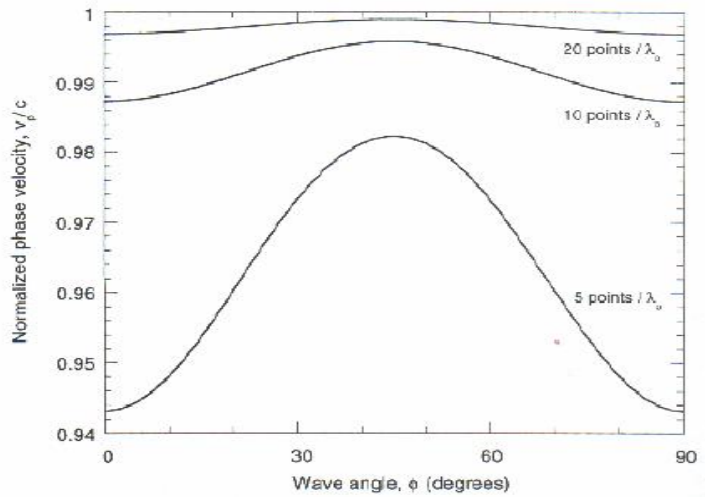


Figure2-4 : Vitesse de phase en fonction de l'angle de propagation

- Anisotropie numérique :

Nous observons aussi sur la figure 2-4 que la vitesse de phase numérique atteint un maximum en 45° et un minimum en 0° et 90° , et ce quelque soit la résolution de la grille FDTD. Cette remarque démontre la présence d'une anisotropie numérique. Afin de diminuer cet effet, l'augmentation de la résolution est nécessaire.

Pour remédier aux effets de la dispersion numérique, un pas de discrétisation minimum ($\Delta x \leq \lambda/10$) doit être respecté.

2-5 Simulation de l'espace ouvert :

L'un des inconvénients principaux des méthodes de simulation utilisant le maillage à titre d'exemples les différences finies et les éléments finis réside dans le fait que les espaces mémoire des calculateurs sont nécessairement limités, alors que la plupart des systèmes rencontrés en pratiques sont ouverts. Dans le but de simuler l'espace infini lors de la résolution des équations de Maxwell, plusieurs méthodes ont fait leur apparition [35, 36].

Dans cet exposé nous nous restreindrons à une brève présentation des conditions aux limites les plus utilisées pour la modélisation de l'espace ouvert des structures photoniques.

2-5-1 Conditions d'absorption de Mur (ABC) :

Les conditions d'absorption de Mur sont tirées de l'équation générale de propagation. Les composantes tangentielles du champ électrique sont mises à jour par les conditions d'absorption aux frontières puisque ce sont les seules composantes dont le calcul requiert la connaissance des composantes extérieures au domaine.

Partons donc de l'équation de propagation suivante :

$$L.E = \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \quad (2.31)$$

L étant l'opérateur d'Alembert.

Nous cherchons à absorber une onde plane qui a pour solution l'expression générale suivante :

$$E(x, y, z) = E_0 e^{i(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)} \quad (2.32)$$

Nous décomposons l'opérateur L comme suit :

$$L = L^+ L^- = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (2.33)$$

L est le produit de deux opérateurs qui ont pour solution des ondes qui se propagent dans le sens opposé.

Si on veut écrire l'expression de la condition d'absorption en $x=0$, la solution d'onde doit satisfaire l'équation $L^+ E = 0$ ou $L^- E = 0$ en $x = x_{\max}$

En $x=0$ par exemple, les conditions d'absorption de Mur au premier ordre sont données par [37]:

$$L^- E_t = \frac{\partial E_t}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial E_t}{\partial t} = 0 \quad (2.34)$$

La discrétisation de cette équation suivant le schéma de Yee donne :

$$E_t^{n+1}(0, j, k) = E_t^n(0, j, k) + \frac{v\Delta t - \Delta x}{v\Delta t + \Delta x} [E_t^{n+1}(1, j, k) - E_t^n(0, j, k)] \quad (2.35)$$

Les équations similaires peuvent être développées pour les composantes tangentielles du champ électrique pour tous les plans absorbants.

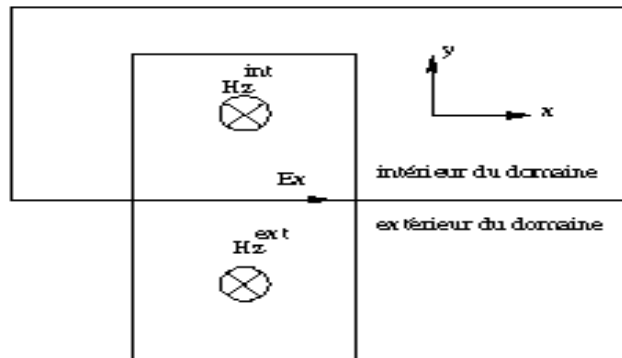


Figure2-5 : Composantes du champ sur les frontières

2-5-2 Couche absorbante de Bérenger :

Une des conditions aux limites les plus utilisées sont les PML (couches parfaitement adaptées) décrites par Bérenger en 1977 [38]. Elle consiste à disposer en périphérie du volume de calcul un milieu à pertes dit PML dans lequel le champ électrique et le champ magnétique sont décomposés en deux sous composantes.

A deux dimensions le principe de cette méthode est donnée comme suit :
soit un milieu de permittivité ε , et de perméabilité μ et des conductivités électrique et magnétiques σ et σ' . Dans ce milieu les équations de Maxwell s'écrivent :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} + \sigma \vec{H} \quad (2.36)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma' \vec{E} \quad (2.37)$$

Ce qui, en mode TE par exemple par rapport à l'axe (OZ), donne :

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma' E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (2.38-a)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma' E_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (2.38-b)$$

$$\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma H_z = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.38-c)$$

Dans le milieu PML, le champ électromagnétique a quatre composantes, E_x, E_y, H_{zx}, H_{zy}

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma'_y E_x = \frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial y} \quad (2.39-a)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma'_x E_y = -\frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial x} \quad (2.39-b)$$

$$\mu \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial t} \quad (2.39-$$

c)

$$\mu \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y H_{zy} = -\frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (2.39-$$

d)

Pour le cas tridimensionnel, on obtient un système de douze équations différentielles. Ce découplage des composantes du champ électromagnétique et des équations n'est nécessaire que dans les PML.

Un exemple du milieu PML est donné par la (figure2-6)

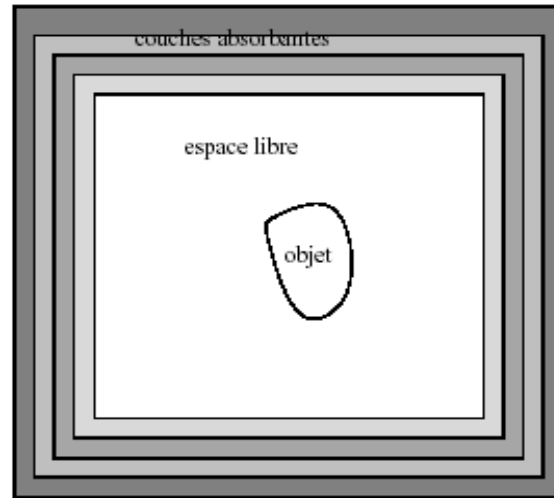


Figure2-6 : Couche absorbante PML pour un objet en espace libre

La technique PML fournit une très bonne absorption pour toutes les fréquences et pour tous les angles d'incidences. Cependant, cette méthode nécessite un traitement supplémentaire relativement lourd en temps de calcul et implique l'augmentation du domaine de calcul.

2-5-3 Conditions aux limites périodiques :

Le système que nous avons étudié est périodique, les conditions aux limites périodiques [39] sont donc largement suffisantes pour simuler l'espace ouvert, cette condition se présente sous deux formes différentes :

- Les conditions aux limites de Bloch :

Pour une structure périodique les champs électriques et magnétiques peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$E_k(r) = e^{ikr} \cdot e_k(r) \quad (2.40)$$

$$H_k(r) = e^{ikr} \cdot h_k(r) \quad (2.41)$$

où $e_k(r)$ et $h_k(r)$ représentent respectivement les champs électrique et magnétique réduits et qui vérifient les relations :

$$e_k(r+R) = e_k(r) \quad (2.42)$$

et

$$h_k(r+R) = h_k(r) \quad (2.43)$$

k est le vecteur d'onde appartenant à la première zone de Brillouin du réseau réciproque et R est le paramètre du réseau

En remplaçant (2.42) et (2.43) dans les équations de Maxwell, on aboutit au système d'équations suivant :

$$i.k \times e + \nabla \times e = -\mu \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.44)$$

$$i.k \times h + \nabla \times h = \varepsilon_r \frac{\partial e}{\partial t} \quad (2.45)$$

Ainsi la simulations sera basée sur les composantes réduites $h(r)$ et $e(r)$.

- Conditions aux limites périodiques explicites :

Dans ce cas le champ électrique et magnétique à travers une cellule adjacente satisfait la relation :

$$E(r + R) = e^{ikr} E(r) \quad (2.46)$$

et

$$H(r + R) = e^{ikr} H(r) \quad (2.47)$$

Avec la méthode des différences finies dans le domaine temporel on suggère d'adopter tout simplement les conditions aux limites périodiques explicites qui se révéleront les plus commodes.

2-6 Les conditions initiales :

Nous avons excité notre système en introduisant de l'énergie sous forme d'une onde plane dans le maillage [39]. Nous avons imposé à $t=0$ à la structure des composantes de la forme :

$$H(r) = \sum_G h_0(k + G) \exp i(k + G).r \quad (2.48)$$

$$h_0(k + G) = v \times (k + G) \quad (2.49)$$

G est le vecteur du réseau réciproque

h_0 est l'amplitude du champ,

v est un vecteur à composantes aléatoires.

Notons que les champs gardent le même sens pendant toute la simulation.

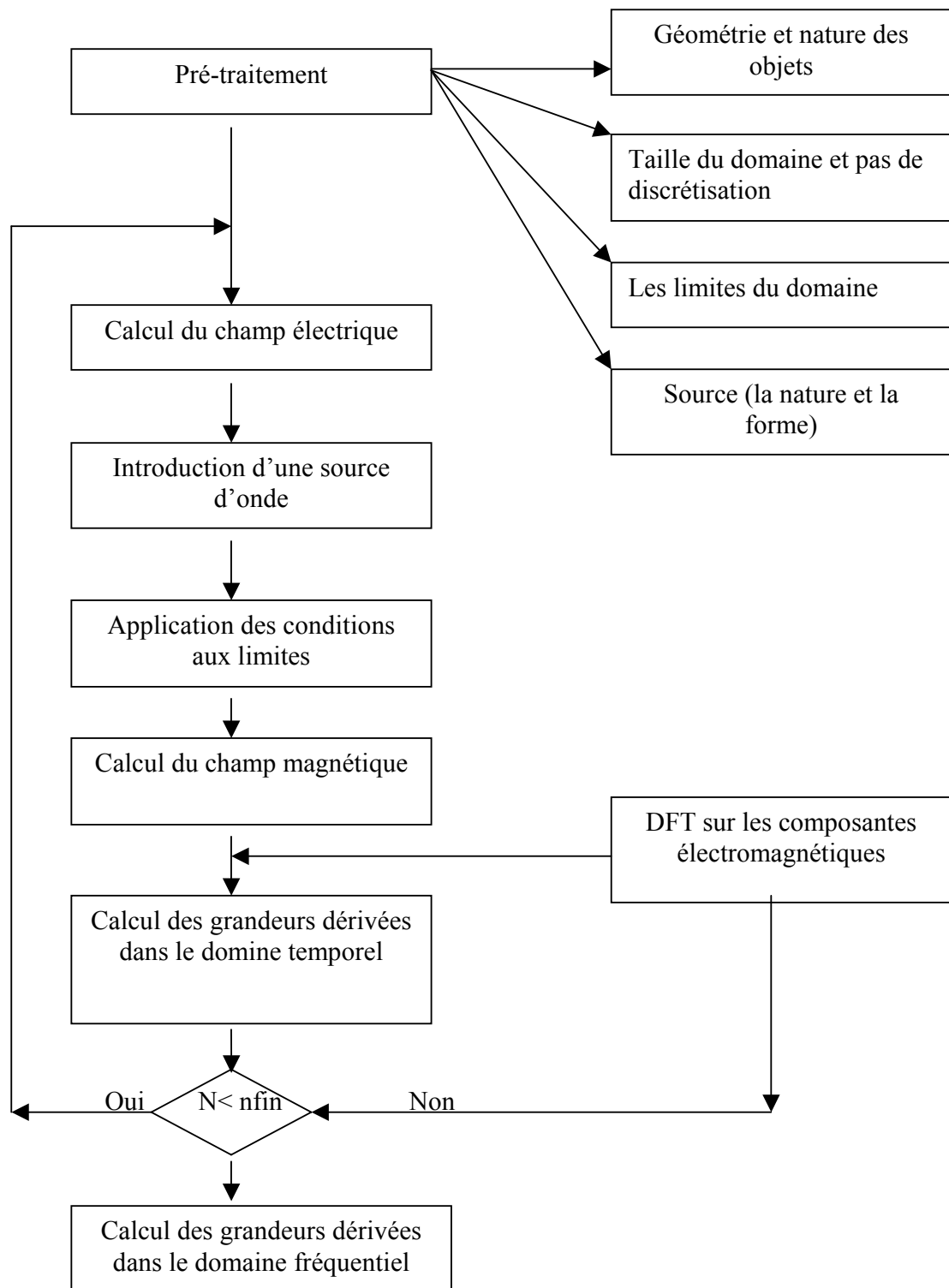


Figure2-7 : L'organigramme de calcul

2-7 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté succinctement les techniques numériques adaptées à l'étude des dispositifs à base des matériaux photoniques et de leurs domaines de validité. Par ailleurs, nous avons jugé utile de décrire plus en détail la méthode des différences finies dans le domaine temporel utilisée dans le cadre ce travail.

Comme nous l'avons déjà souligné, la FDTD basée sur la résolution directe des équations de Maxwell dans le domaine temporel ne nécessite aucune hypothèse de départ sur la forme des solutions ou des ondes se propageant dans la structure, ce qui la rend indépendante de la géométrie du système à modéliser. Un autre avantage réside dans sa faculté à couvrir un large spectre de fréquence avec une seule simulation en ayant recourt à la transformée de Fourier. C'est une méthode générale très adaptée à l'analyse des problèmes électromagnétiques variés.

Bien entendu, la FDTD comme toutes les méthodes numériques possède des inconvénients. Le premier est lié à l'espace mémoire relativement large qu'elle requiert ainsi à des temps de calcul parfois assez long notamment lorsque le système étudié est de géométrie complexe. L'inconvénient majeur de la FDTD est que son domaine de calcul est un ensemble de cubes élémentaires à trois dimensions ou des carrés à deux dimensions, l'approximation en escalier de lignes ou de surfaces courbées engendrent des erreurs. Malgré ces inconvénients, la FDTD reste comme nous allons le voir un outil de simulation très adaptée pour l'étude des structures de bandes photoniques.

3-1 Application à la structure bidimensionnelle carrée

La première structure que nous nous proposons d'étudier est schématisée sur la figure3-1. Elle est constituée d'un ensemble infini de cylindres diélectriques infiniment longs, identiques, périodiques et parallèles entre eux, de permittivité ε_1 plongés dans un autre milieu diélectrique homogène de permittivité ε_2 . L'intersection de ces cylindres avec un plan perpendiculaire forme l'un des cinq réseaux de Bravais qui, dans notre cas, est un réseau carré simple. Il est à noter que cette structure a fait l'objet de nombreux travaux théoriques et expérimentaux [40, 41]. L'ensemble de ces travaux est basé sur le calcul du diagramme de dispersion et l'étude de l'influence de la permittivité et du facteur de remplissage sur les bandes interdites en utilisant la méthode des ondes planes.

Comme il est montré sur la figure3-1, les ondes électromagnétiques se propageant dans le plan perpendiculaire aux cylindres peuvent être séparées en deux polarisations suivant que le champ électrique (polarisation E) ou magnétique (polarisation H) est parallèle à l'axe des cylindres.

De plus, des considérations de symétrie permettent la restriction du domaine de l'espace réciproque à la première zone de Brillouin. Cette dernière correspond à la région délimitée par les points de haute symétrie Γ , X , M qui sont montrés dans la figure3-1. Il est à noter qu'une telle représentation est suffisante pour décrire les propriétés de dispersion du matériau étudié :

- ΓX est la direction $[01]$, elle correspond à la position des premiers voisins du réseau direct.
- ΓM est la direction $[11]$, elle correspond à la direction des seconds voisins.

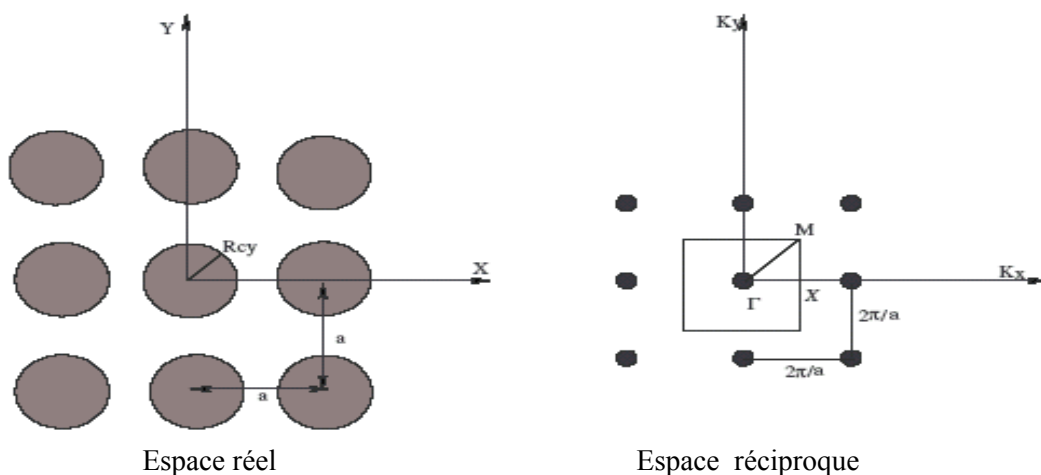


Figure3-1 : Cristal photonique bidimensionnel et le réseau réciproque associé

3-1-1 Paramètres de l'analyse FDTD :

Il est important de noter que les pas de discrétisation spatial et temporel sont choisis de telle façon à satisfaire le critère de stabilité et à minimiser les erreurs de la dispersion numérique. Les paramètres de calcul ainsi définis pour exécuter nos procédures sont les suivants : $\Delta x = \Delta y = 0.016$ cm, $\Delta t = 0.266$ ps dans un volume de taille 60x60 mailles et avec des conditions aux limites périodiques.

3-1-2 Résultats de la simulation :

3-1-2 a) Cas d'un milieu diélectrique contenant des trous infinis d'air :

Dans un premier temps, nous avons considéré une structure constituée de trous infinis d'air ($\varepsilon_1 = 1$) plongés dans un milieu diélectrique différent de permittivité ε_2 , avec $\varepsilon_2 = 10$ ($\varepsilon_2 = 5$) respectivement pour une polarisation H (polarisation E) avec des facteurs de remplissage $\tau = 0.526$ ($\tau = 0.785$) (voir figure3-2). C'est la même structure étudiée théoriquement par la méthode des ondes planes [40].

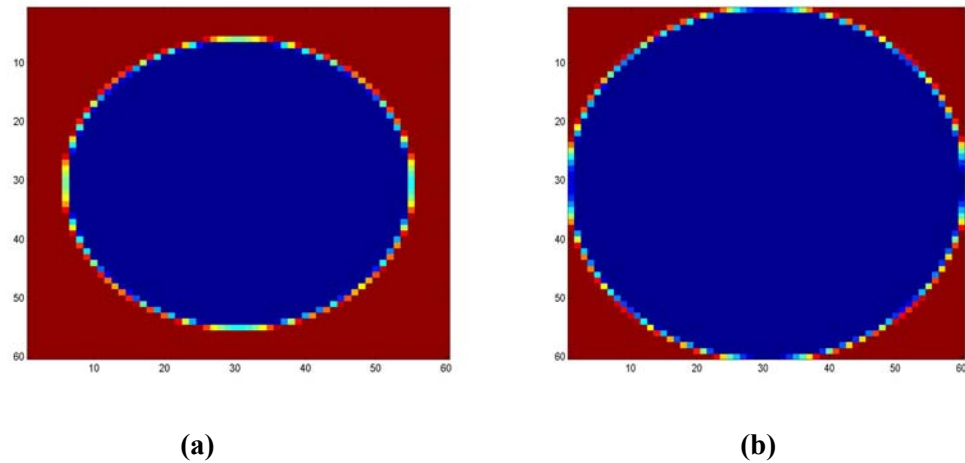


Figure3-2 : Structure bidimensionnelle carrée considérée

(a) : $\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 10, \tau = 0.526$, **(b) :** $\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 5, \tau = 0.785$

Rappelons que le facteur de remplissage est par définition le rapport du volume total occupé par les cylindres sur le volume total de la structure, ce facteur est donné par :

$$\tau = \frac{\pi.R^2}{a^2}$$

R et a désignent respectivement le rayon des cylindres et le paramètre du réseau.

Sur les figures (3-3) et (3-4) sont représentées les intensités spectrales au point Γ des deux polarisations. Ces figures montrent l'apparition d'une série discrète de pics régulièrement espacés. Le premier pic apparaît pour une fréquence nulle pour les deux modes. Nous observons ensuite l'apparition d'une première série de pics de forte intensité comprise entre les fréquences normalisées 0.42 et 0.62 pour la polarisation H , suivi d'une deuxième série un peu plus dense que la précédente se situant entre 0.756 et 0.910. Pour le mode TE, la première série de pics apparaît dans la gamme 0.67 et 0.83 et la deuxième entre 1.12 et 1.40 d'amplitude supérieure à ceux associés à la polarisation H .

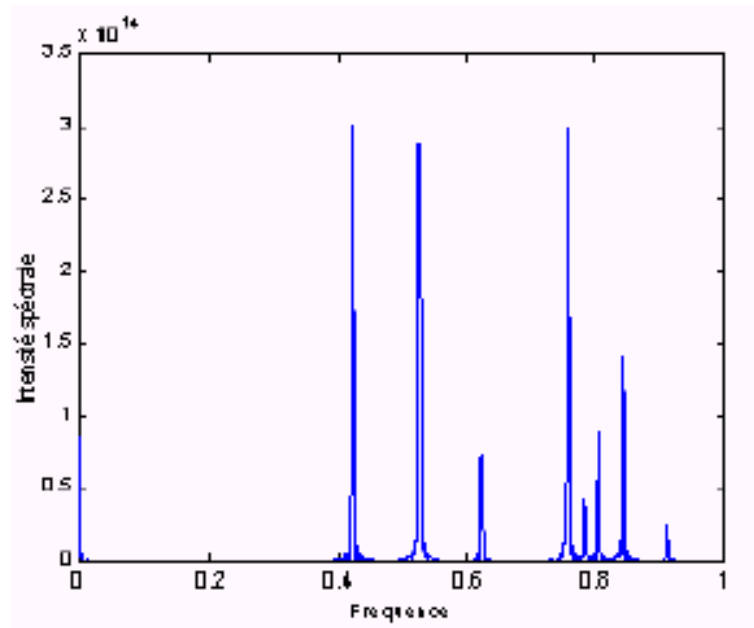


Figure 3-3 : Intensité spectrale au point Γ pour une polarisation H

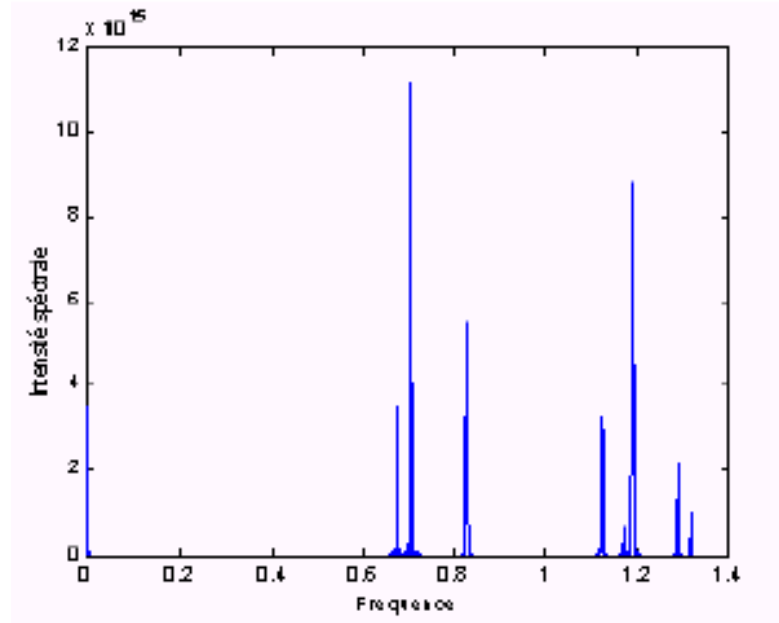


Figure3-4 : Intensité spectrale au point Γ pour une polarisation E

La courbe de dispersion des deux premiers modes de propagation suivant la direction X est représentée sur la figure3-5 toujours pour les deux polarisations. Le diagramme de dispersion montre l'existence des plages de fréquences interdites pour les photons suivant cette direction s'étendant entre les fréquences réduites [0.208 à 0.328] pour la polarisation H et de [0.321 à 0.447] pour la polarisation E .

Le diagramme de bande dans l'espace du réseau réciproque relatif à cette structure est représenté sur les figures (3-6) et (3-7) toujours pour les deux modes. Il est à noter que nos résultats (figure 3-6-a et figure3-7-a) sont en bon accord avec ceux calculés par la méthode des ondes planes [40] (figure3-6-b et figure3-7-b). La figure 3-6 montre que pour la polarisation H , le diagramme de dispersion révèle l'existence de deux gammes de fréquences interdites, la première s'étale entre les valeurs de fréquence réduites 0.304 et 0.328, la deuxième entre 0.422 et 0.470.

Par ailleurs, une seule bande interdite est observée entre 0.390 et 0.447 pour la polarisation E . Ces gammes de fréquences correspondent aux extrêmes suivant les directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin et se traduisent expérimentalement par un coefficient de réflexion élevé pour les champs électromagnétiques incidents correspondants.

Rappelons que le taux de remplissage utilisé pour obtenir ces résultats est optimal. Ce facteur correspond aux valeurs de τ qui donnent un gap plus élevé aux basses fréquences pour les valeurs des permittivités considérées.

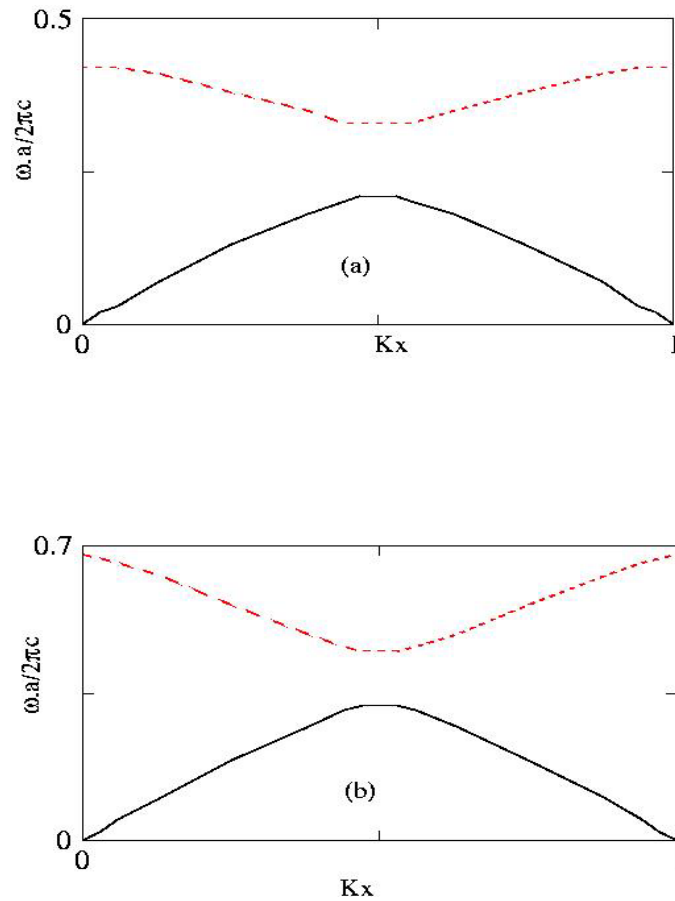


Figure 3-5 : Structure photonique suivant la direction X

(a) Polarisation H : $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 10$, $\tau = 0.526$

(b) Polarisation E : $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 5$, $\tau = 0.785$

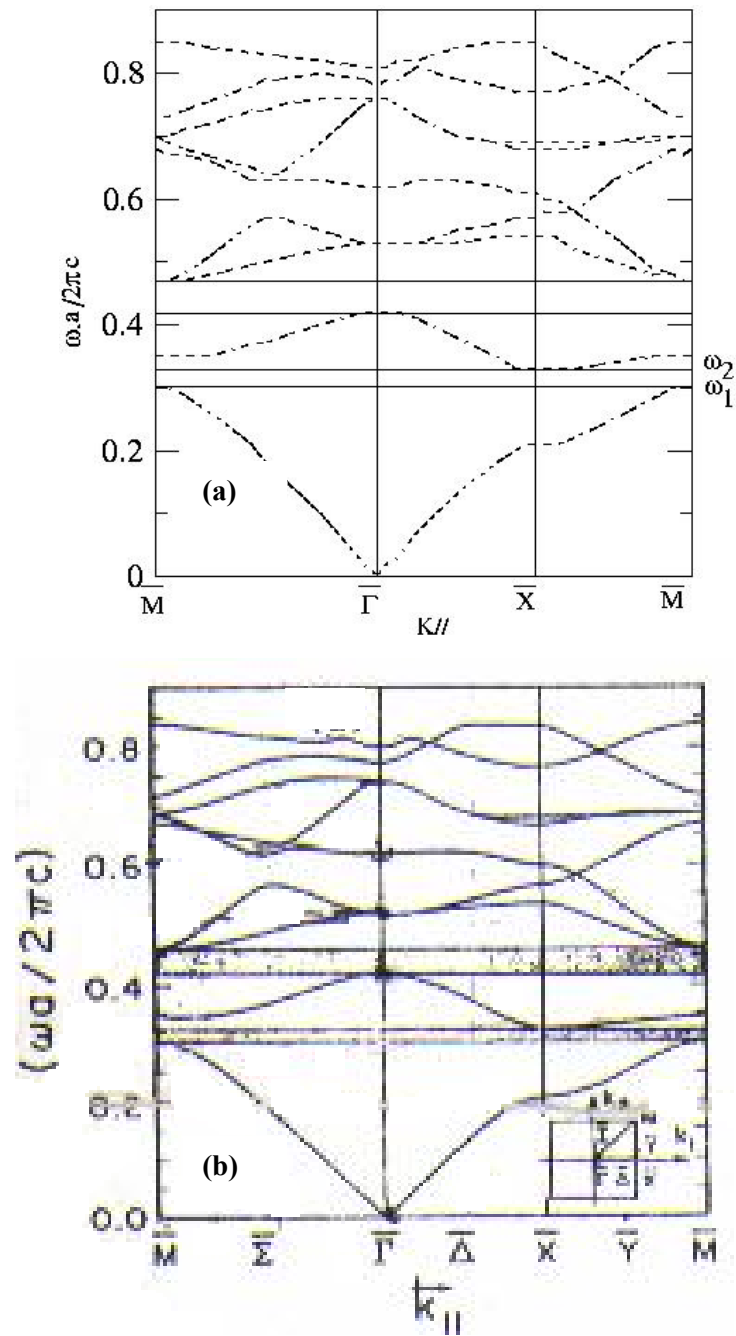


Figure3-6 : Structure de bande photonique

Polarisation H : $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 10$, $\tau = 0.526$

(a) : calculs FDTD, (b) : calculs ondes planes [40]

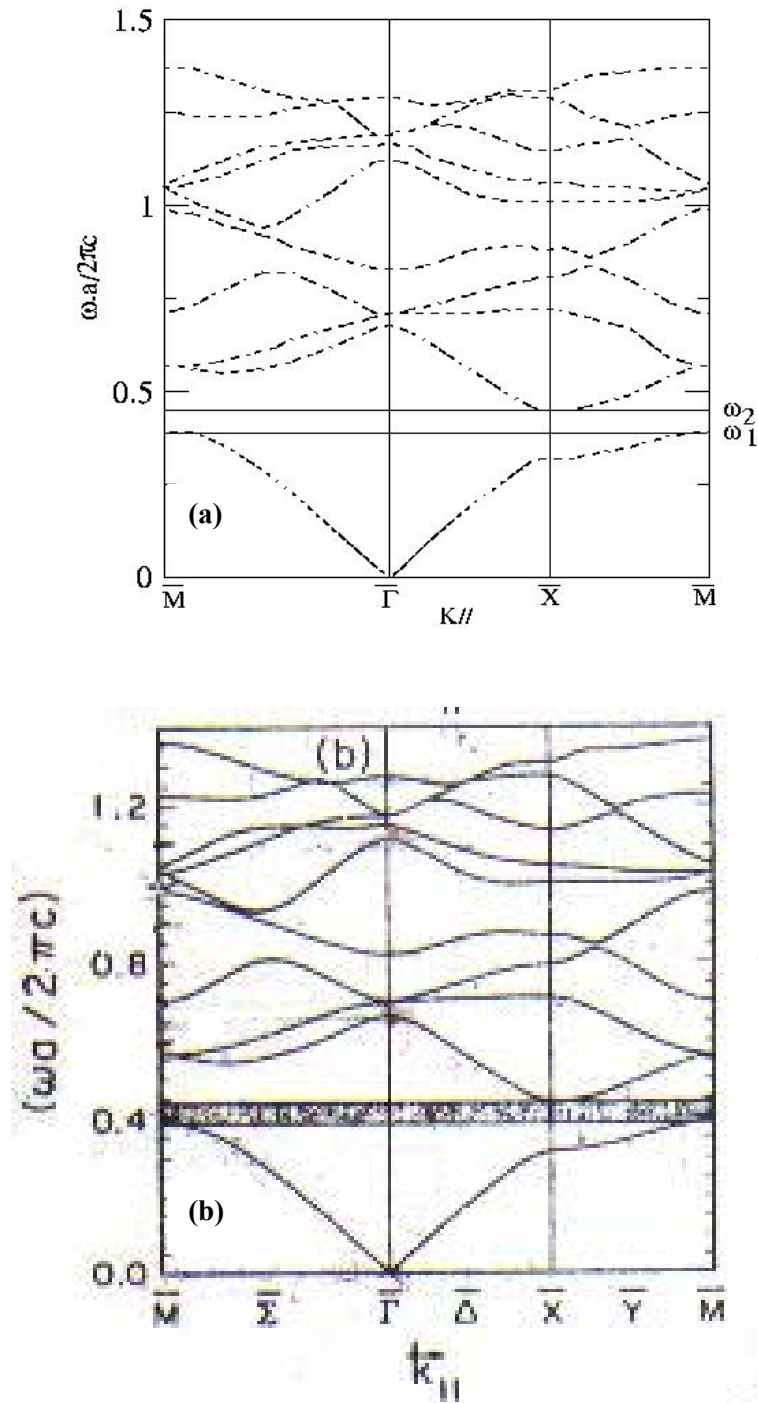


Figure3-7 : Structure de bande photonique

Polarisation E : $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 5$, $\tau = 0.785$

(a) : calculs FDTD, (b) calculs ondes planes [40]

3-1-2b) Cas d'une structure constituée de cylindres diélectriques plongés dans le vide :

Nous avons considéré ensuite, une structure constituée d'un ensemble de cylindres diélectriques de permittivité ε_1 plongés dans le vide ($\varepsilon_2 = 1$) avec respectivement :

$\varepsilon_1 = 10$ ($\varepsilon_1 = 5$), $\tau = 0.526$ ($\tau = 0.785$), pour la polarisation H (polarisation E).

Sur les figures (3-8) et (3-9) sont représentées les intensités spectrales au point Γ pour les deux polarisations E et H .

Sur la figure 3-8, on remarque l'apparition d'une série dense de pics de faibles intensités (ordre de 10^{13}) en comparaison à ceux calculés pour la première structure. Pour la polarisation H (voir figure 3-9) on observe également une série de pics très espacés de faibles amplitudes par rapport à ceux calculés précédemment. Le premier pic apparaît pour des fréquences nulles pour les deux modes. Il est à noter que le diagramme de bande calculé pour cette structure ne présente aucun gap pour les deux polarisations.

En résumé, on constate que la largeur de la bande interdite obtenue pour une structure constituée d'un ensemble infini de cylindres diélectriques plongés dans le vide est différente pour la même polarisation de celle calculée pour un milieu constitué d'un ensemble infini de cylindres d'air dans un milieu diélectrique homogène. Aussi, il est important de remarquer que la largeur de la bande obtenue pour deux modes différents d'une même structure n'est pas la même. Ces différents résultats montrent que la largeur de la bande interdite est très sensible à la nature, la géométrie du milieu et aux modes utilisés. Ces résultats montrent également que les deux modes utilisés sont complètement découplés, conformément à la théorie.

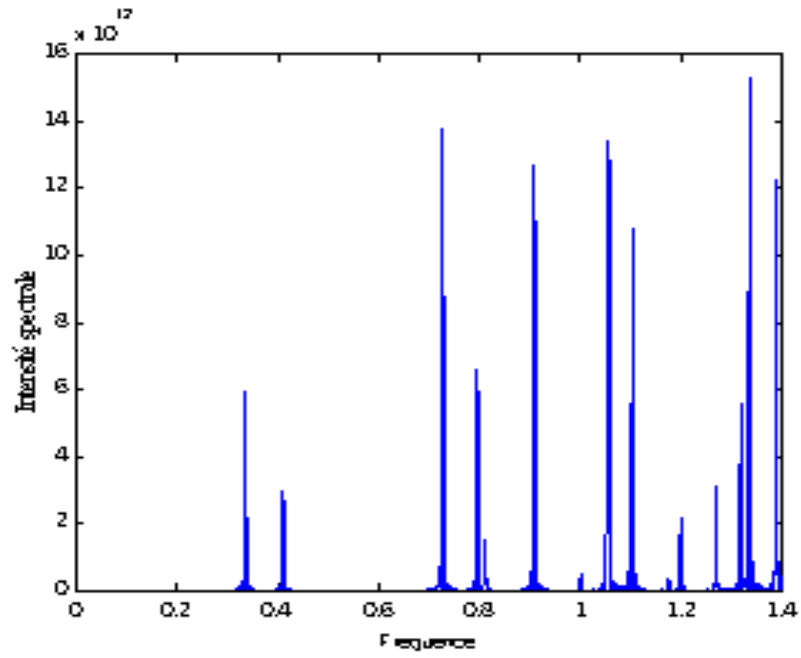


Figure3-8: Intensité spectrale au point Γ pour une polarisation E : $\varepsilon_1 = 5$, $\varepsilon_2 = 1$, $\tau = 0.785$

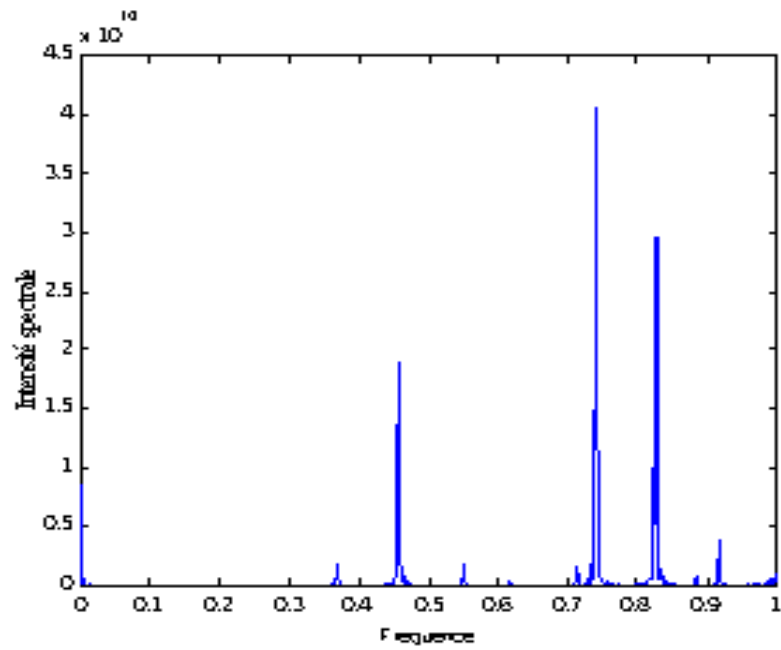


Figure3-9: Intensité spectrale au point Γ pour une polarisation H : $\varepsilon_1 = 10$, $\varepsilon_2 = 1$, $\tau = 0.526$

3-1-3 Effet du facteur de remplissage sur la largeur du gap :

La variation de la largeur relative du gap $\frac{\Delta\omega}{\omega_g}$ en fonction du facteur de remplissage

τ pour la polarisation E est représentée par la figure 3-10, ω_g est la largeur à mi-hauteur elle est donnée par la relation suivante :

$$\omega_g = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \quad \text{et} \quad \Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$$

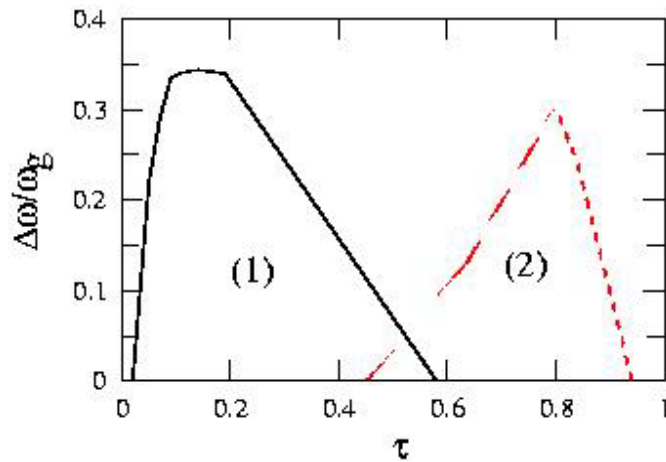
Là aussi, on remarque que nos résultats (figure3-10-a) s'approchent de ceux calculés par [41] (figure3-10-b).

La figure (3-10-a-1) est obtenue pour un milieu constitué d'un ensemble de cylindres diélectriques plongés dans le vide ($\varepsilon_1 = 10$, $\varepsilon_2 = 1$). Elle montre que la largeur relative du gap $\frac{\Delta\omega}{\omega_g}$ augmente avec le facteur de remplissage. La largeur du gap $\frac{\Delta\omega}{\omega_g}$ atteint une valeur

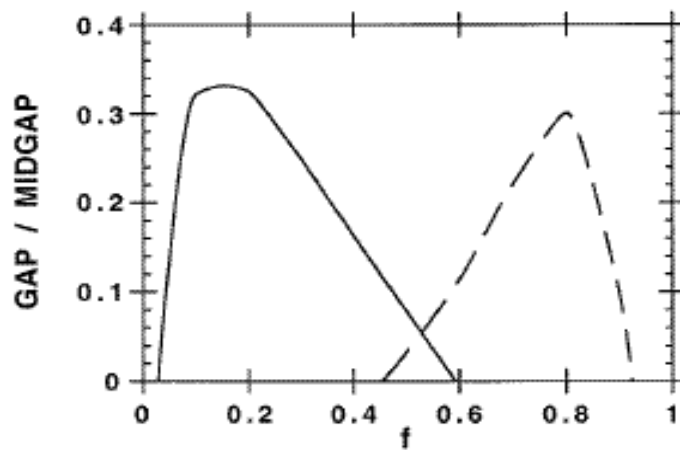
maximale de 34.3 % aux alentours de $\tau = 0.18$. Pour les valeurs de $\tau > 0.2$, la largeur relative du gap diminue progressivement, ensuite elle s'annule pour $\tau > 0.58$. Lorsque la structure est constituée d'un ensemble de cylindres d'air enfoncés dans un milieu diélectrique ($\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 10$), voir figure(3-10-a-2), on remarque que le gap n'apparaît qu'à partir de $\tau = 0.45$. La largeur du gap $\frac{\Delta\omega}{\omega_g}$ augmente avec le taux de remplissage, elle atteint

un maximum de 30% aux alentours de $\tau = 0.8$. Pour $\tau > 0.8$ la largeur du gap diminue en s'annulant lorsque τ devient supérieur à 0.9.

Les calculs effectués pour la polarisation H montrent que cette dernière ne possède aucun gap pour un milieu constitué d'un ensemble de cylindres diélectriques plongés dans le vide ($\varepsilon_1 = 10$, $\varepsilon_2 = 1$) quelque soient les valeurs de τ . Cependant, lorsque ($\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 10$), la largeur relative du gap atteint un maximum de 8 % aux alentours de $\tau = 0.526$. On remarque aussi que les deux structures ont la même largeur aux alentours de $\tau = 0.52$.



3-10-a : nos calculs



3-10-b : calculs ondes planes

Figure3-10 (a et b): Influence du facteur de remplissage sur la largeur relative du gap

(1) $\varepsilon_1=10, \varepsilon_2=1$, (2) $\varepsilon_1=1, \varepsilon_2=10$

A travers ces résultats, on constate que pour la polarisation E, lorsque $\varepsilon_1 = 10$ et $\varepsilon_2 = 1$, un gap très fort est atteint pour de très faibles valeurs du facteur de remplissage. Alors que cette largeur est beaucoup plus importante pour des facteurs de remplissage élevés, et ce lorsque $\varepsilon_1 = 1$, et $\varepsilon_2 = 10$.

Notons que, la largeur de la bande interdite est calculée en déterminant les extremums entre deux branches adjacentes suivant les directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin. La différence entre le minimum de la deuxième branche et le maximum de la première branche correspond à la valeur du gap.

3-1-4 Effet de la permittivité et du facteur de remplissage sur l'ouverture du gap :

Les figures (3-11) et (3-12) représentent la variation du rapport des permittivités des deux milieux γ en fonction du taux de remplissage qui donnent naissance à l'ouverture d'un gap pour les deux polarisations. On observe que nos résultats (figure3-11-a et figure3-12-a) sont proches de ceux calculés par [41] (figure3-11-b et figure3-12-b).

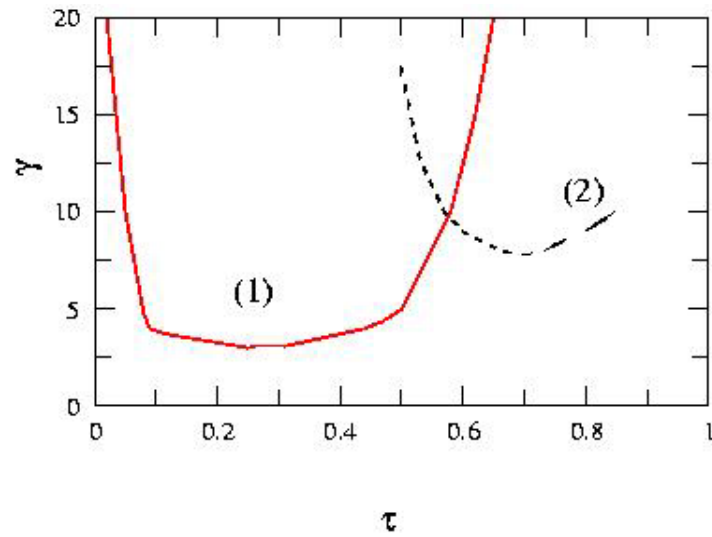
3-1-4a) Milieu constitué de cylindres diélectriques plongés dans le vide :

Pour une polarisation E (figure3-11-a-1), on constate que la valeur minimale de la permittivité et du facteur de remplissage autorisant l'ouverture d'un gap sont respectivement $\epsilon_1 \approx 3$ et $\tau \approx 0.25$. Dans le cas d'une polarisation H (figure3-12-a-1), le gap s'ouvre pour $\epsilon_1 \approx 15$ et $\tau \approx 0.35$.

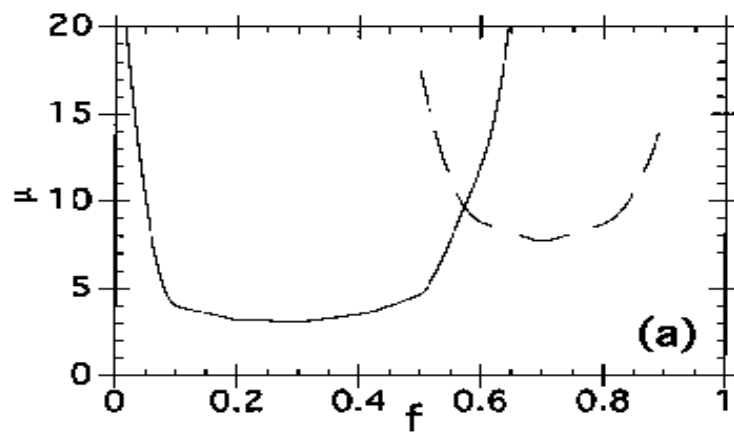
3-1-4b) Milieu diélectrique contenant des trous infinis d'air :

Pour la polarisation E (figure3-11-a-2), l'ouverture du gap est observée pour les valeurs de la permittivité $\epsilon_2 \approx 8$ et du facteur de remplissage $\tau \approx 0.66$. Pour la polarisation H (figure3-12-a-2), ces valeurs sont respectivement $\epsilon_2 \approx 5$ et $\tau \approx 0.51$.

A travers ces résultats, on constate que pour la polarisation E, les conditions optimales qui autorisent l'ouverture du gap sont obtenues aux alentours de $\tau = 0.25$ pour un milieu constitué d'un ensemble de cylindres diélectriques dans le vide. Ces conditions sont obtenues aux alentours de $\tau = 0.51$, dans le cas d'une polarisation H, pour un milieu diélectrique constitué de cylindres d'air.

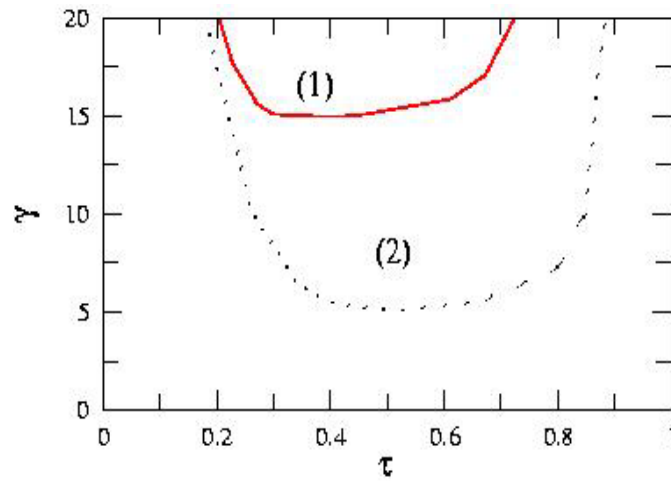


3-11-a : nos calculs

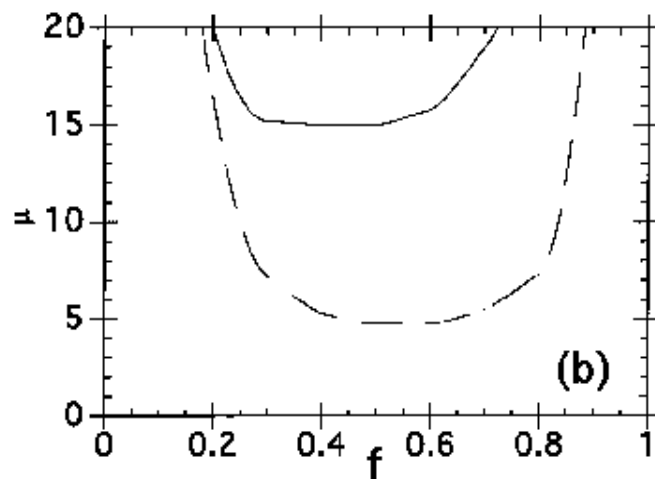


3-11-b : calculs ondes planes

**Figure3-11 (a et b): Les valeurs seuils du rapport des permittivités qui autorisent l'ouverture d'un gap en fonction du taux de remplissage pour la polarisation E : (1) cylindres diélectriques dans le vide, (2) trous d'air dans un diélectrique
(a) calcul ondes planes [41], (b) calcul FDTD**



3-12-a : nos calculs

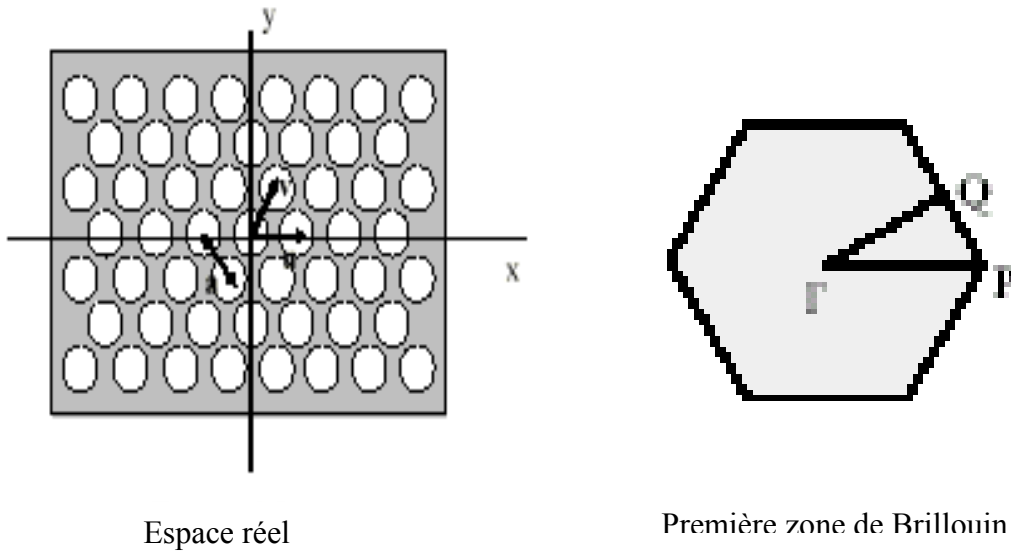


3-12-b : calculs ondes planes

Figure 3-12 (a et b): Les valeurs seuils du rapport des permittivités qui autorisent l'ouverture d'un gap en fonction du taux de remplissage pour la polarisation H : (1) cylindres diélectriques dans le vide, (2) trous d'air dans un diélectrique (a) calcul FDTD, (b) calcul ondes planes [41]

3-2 Application à la structure bidimensionnelle triangulaire :

Le réseau triangulaire est celui qui offre en 2D un recouvrement maximum des bandes interdites associées à chaque direction cristallographique. Cette structure est schématisée sur la figure (3-13). Elle est constituée d'un ensemble infini de cylindres diélectriques infiniment longs, identiques, périodiques et parallèles entre eux plongés dans le vide. L'intersection de ces cylindres avec le plan perpendiculaire constitue un réseau triangulaire [1, 42].



**Figure 3-13 : Structure photonique triangulaire
et la première zone de Brillouin associée**

Comme il est montré sur la figure 3-13, la première zone de Brillouin est délimitée par les points de haute symétrie Γ , P, Q.

Les paramètres de calcul définis pour exécuter nos procédures sont : $\Delta x = \Delta y = 0.024 \text{ cm}$, $\Delta t = 0.406 \text{ ps}$ dans un volume de taille 41×71 mailles .

La structure considéré ci-dessus est représentée sur la figure3-14, elle est obtenue pour les paramètres suivant : $\varepsilon_1 = 5$, $\varepsilon_2 = 1$, $\tau = 0.169$.

Rappelons que le facteur de remplissage est donné par : $\tau = \frac{2\pi R^2}{a^2 \sqrt{3}}$

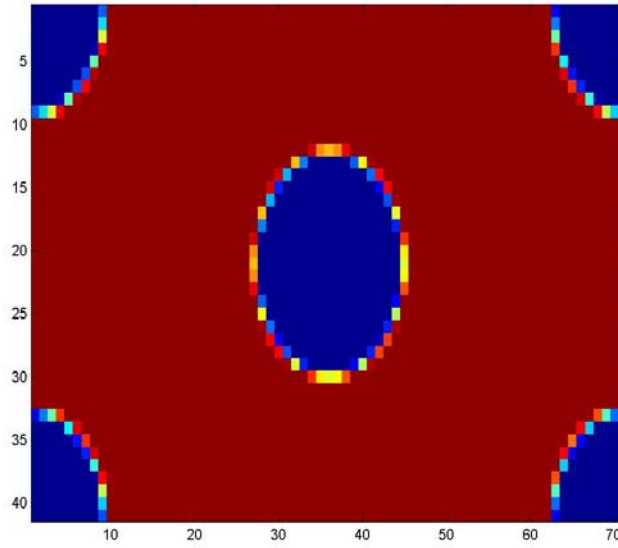


figure 3-14 : Structure triangulaire considérée

$$\varepsilon_1 = 5, \varepsilon_2 = 1, \tau = 0.169$$

Le diagramme de bande relatif à cette structure pour le mode TM, est représenté par la figure3-15. Comme dans le cas de la structure carrée, la figure3-15 montre l'existence d'une seule bande interdite entre les deux premiers modes de propagations situant entre les fréquences normalisées 0.549 et 0.400. Il est à noter que le facteur de remplissage utilisé pour obtenir ce résultat est optimal et que nos résultats sont en accord avec ceux obtenus par la méthode des ondes planes [42] (voir figure3-16).

Nous avons appliqué les mêmes paramètres pour la structure bidimensionnelle carrée, cette dernière a montré l'existence d'une bande interdite de largeur $\Delta\omega = 0.069$ pour un facteur de remplissage $\tau = 0.189$. Il est important de signaler que la bande interdite obtenue pour les deux configurations pour la même polarisation n'est pas la même. Ce résultat nous permet de déduire l'effet dominant de la géométrie sur le gap.

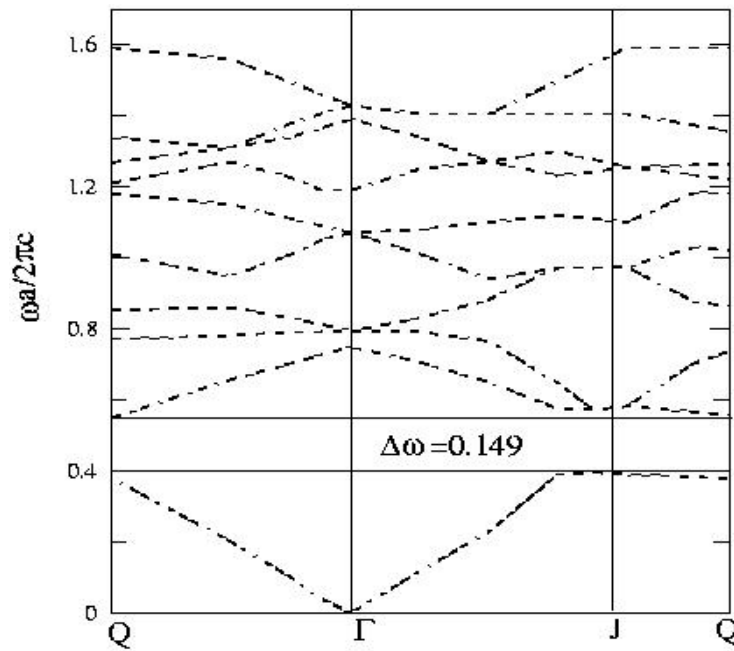


Figure 3-15 : Structure de bande photonique

Polarisation E : $\varepsilon_1 = 5$, $\varepsilon_2 = 1$, $\tau = 0.169$

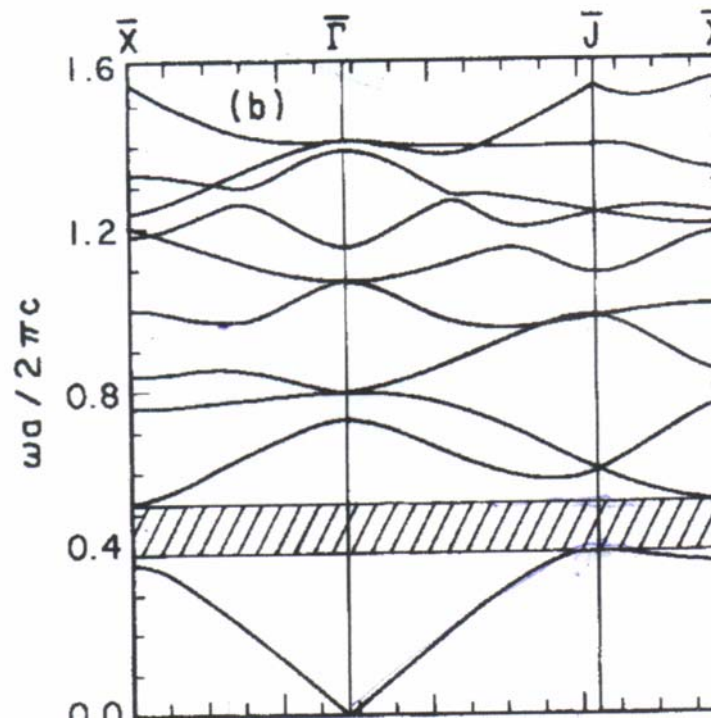


Figure 3-16: Structure de bande photonique

Polarisation E : $\varepsilon_1 = 5$, $\varepsilon_2 = 1$, $\tau = 0.169$

3-3 Conclusion :

Les différents résultats obtenus au cours de notre simulation sont basés sur le calcul des intensités spectrales issues de la réponse du milieu aux ondes électromagnétiques pour les deux polarisations. Ce calcul nous a permis de mettre en évidence des bandes interdites photoniques.

L'effet de la permittivité et du facteur de remplissage sur la largeur de la bande interdite a été discuté. L'ensemble de ces résultats montre aussi l'effet dominant de la géométrie, la nature du milieu et des modes utilisés sur l'apparition du gap. Enfin, la comparaison systématique de nos résultats avec ceux de la littérature a permis de valider notre modèle construit sur la base de la méthode FDTD.

CONCLUSION GENERALE

Ce travail de recherche a été consacré à la simulation des propriétés optiques de matériaux artificiels par calcul de leurs structures de bandes photoniques et de leurs fréquences propres. Ces propriétés sont étudiées pour des structures bidimensionnelles carrées et triangulaires très utilisées dans le domaine des micro-ondes. Elles sont constituées d'un ensemble infini de cylindres diélectriques, identiques, infiniment longs et parallèles entre eux. Ces cylindres sont ensuite plongés dans un autre milieu diélectrique de telle façon que leurs intersections avec un plan perpendiculaire constituent respectivement un réseau carré simple et triangulaire. Puis, à partir de ces structures aux conditions aux limites connues, les équations de Maxwell ont été écrites et résolues à l'aide de la méthode FDTD. Le diagramme de bande photonique et les fréquences propres sont alors déterminés pour plusieurs valeurs des paramètres géométriques et électromagnétiques de la structure du matériau. Nous avons également mis en évidence l'importance et l'influence de la géométrie, de la nature du milieu et des modes utilisés sur la largeur des bandes.

Enfin, la comparaison des résultats extraits de la littérature avec les grandeurs que nous avons calculées a permis de valider notre modèle théorique ouvrant ainsi des perspectives quant à l'application du code développé pour d'autres structures.

Le chapitre 1 a été consacré aux rappels sur les structures cristallines et aux développements théoriques utilisés. Nous nous sommes intéressés en particulier aux équations de Maxwell et à la description des cristaux photoniques en mettant en exergue leurs propriétés de dispersion.

Dans le chapitre 2, nous nous sommes intéressés tout d'abord aux différentes méthodes utilisées pour le calcul de structure de bandes photoniques. Un intérêt particulier a été accordé à la méthode FDTD développée dans le cadre de ce travail et qui constitue le premier objectif de mes travaux de recherche. Pour ce faire, en se basant sur le schéma de Yee, nous avons décrit la discrétisation spatio-temporelle des équations de Maxwell, puis nous avons posé l'ensemble des impératifs d'implémentation de la méthode FDTD telles

que les conditions aux limites, les conditions de stabilité et les problèmes de la dispersion numérique.

Enfin, dans le chapitre 3, nous avons discuté les résultats obtenus au cours de notre simulation. Le deuxième objectif visé est de montrer l'existence de bandes interdites photoniques et d'analyser les effets des paramètres géométriques et électromagnétiques sur le diagramme du spectre de dispersion des structures étudiées. Enfin, le dernier objectif est de comparer nos résultats à ceux existant dans la littérature en vue de valider notre modèle.

En somme, la méthode FDTD s'est révélée comme une méthode efficace pour le calcul de structure de bande et par le biais de cette étude, il ressort que la structure bidimensionnelle carrée (triangulaire) est toute indiquée pour les applications dans le domaine des micro-ondes vu qu'elle présente des plages de fréquences interdites dont une est située aux basses fréquences.

En perspectives, l'étude toujours par FDTD, des structures de cristaux photoniques présentant d'autres configurations (maille hexagonale par exemple) et l'extension du code aux cas de cristaux anisotropes sont envisagés par notre groupe de recherche et seront développées dans le cadre d'une coopération avec l'université de Franche-Comté. Ce projet de recherche, nous permettra sans aucun doute de mieux connaître les fonctionnalités de ces cristaux et d'optimiser leurs fonctionnements dans le but de répondre aux attentes des expérimentateurs.