2005

Modélisation, réalisation et caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels en vue d'applications à la compatibilité électromagnétique

Laurent OYHÉNART

Titre **"Modélisation, réalisation et caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels en vue d'applications à la compatibilité électromagnétique"**

Résumé L'objet de ce manuscrit est l'étude de l'interaction d'une onde électromagnétique avec des matériaux dont l'indice de réfraction est modulé périodiquement à l'échelle de la longueur d'onde. Ces matériaux sont communément appelés des cristaux photoniques ou matériaux à bande interdite photonique du fait de leur analogie très forte avec les structures cristallines étudiées en physique du solide. A partir de ce domaine de la physique, nous expliquerons leurs propriétés atypiques, comme le fait d'interdire tout état propagatif sur une gamme de fréquence, de localiser spatialement ou fréquentiellement une onde, d'obtenir une ultraréfraction, une réfraction négative... Nous étudierons et comparerons la plupart des méthodes permettant de modéliser les cristaux photoniques dont une plus particulièrement, la multidiffusion. Cette théorie analytique est appliquée à une collection de diffuseurs sphériques plus ou moins ordonnés afin d'étudier différents types de défauts apparaissant dans les cristaux photoniques. Les techniques de mesure en espace libre développées pour ces matériaux confirmeront nos résultats théoriques. Elles nous permettront aussi de caractériser en micro-ondes des cristaux photoniques tridimensionnels réalisés à partir de polymères conducteurs. Ces matériaux dont leur première application est la compatibilité électromagnétique pourront dans un futur proche bouleverser le domaine des télécommunications optiques et micro-ondes.

Mots clés cristaux photoniques, CPh, matériaux à bande interdite photonique, BIP, modélisation électromagnétique, multidiffusion, théorie de Mie, polymère conducteur, polyaniline

---

Title **"Modelling, realization, and characterization of three-dimensional photonic crystal for electromagnetic compatibility applications"**

Abstract This manuscript object is the study of the interaction between electromagnetic waves and materials whose refractive index is periodically modulated to the wavelength scale. These materials are usually called photonic crystals or photonic band gap structures because of their very strong analogy with the crystalline structures studied in solid state physics. From this field of physics, we will explain their atypical properties, like the fact to remove all radiative state on a frequency band, to locate a wave spatially or in frequency, to obtain an ultrarefraction, a negative refraction... We will study and compare the majority of the methods modelling the photonic crystals including more particularly, the multiple-scattering. This analytical theory is applied to a collection of spherical scatterers more or less ordered in order to study various cases of defects appearing in the photonic crystals. Free space measurement techniques developed for these materials will confirm our theoretical results. They will also enable us to characterize in microwaves field, three-dimensional photonic crystals made from conducting polymers. These materials whose first application is electromagnetic compatibility will be able in an immediate future to change radically the field of optical or microwave telecommunications.

Keywords photonic crystals, PC, photonic band gap structure, PBG, electromagnetic modelling, multiple-scattering, Mie theory, conducting polymers, polyaniline

N° d'ordre : 3114

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par **Laurent OYHÉNART**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : électronique

MODÉLISATION, RÉALISATION ET CARACTÉRISATION DE CRISTAUX PHOTONIQUES TRIDIMENSIONNELS EN VUE D'APPLICATIONS À LA COMPATIBILITÉ ÉLECTROMAGNÉTIQUE

Soutenue le 13 décembre 2005 devant la commission d'examen :

M. D. MAYSTRE, Directeur de Recherche au C.N.R.S.	Examinateur
M. P. MOUNAIX, Chargé de Recherche au C.N.R.S.	Examinateur
M. J.P. PARNEIX, Professeur à l'ENSCPB	Président
Mme H. ROUSSEL, Maître de conférence à l'Université Paris VI	Rapporteur
M. S. VERDEYME, Professeur à l'Université de Limoges	Rapporteur
Mme V. VIGNÉRAS-LEFEBVRE, Professeur à l'ENSCPB	Directrice de thèse

- 2005 -

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire de Physique des Interactions Ondes-Matière de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux. Je tiens à remercier son directeur Monsieur le Professeur Jean-Paul Parneix, pour sa participation au jury de thèse.

Je tiens à remercier tout particulièrement Madame la Professeur Valérie Vignéras-Lefebvre qui m'a proposé ce sujet de recherche et m'a prodigué aide et encouragement tout au long de mon travail. Je la remercie aussi de m'avoir laisser une très grande liberté tant sur l'orientation du sujet que sur l'organisation de mon travail.

Je veux remercier vivement Monsieur Serge Verdeyme, Professeur à l'Université de Limoges et Mme Hélène Roussel, Maître de conférence à l'Université Paris VI pour avoir accepté de juger ce travail.

Je tiens à remercier Messieurs Daniel Maystre, directeur de recherche au C.N.R.S. et Patrick Mounaix, Chargé de Recherche au C.N.R.S., pour m'avoir fait l'honneur de participer au jury de cette thèse.

Je remercie très sincèrement Monsieur Gilles Ruffié et Monsieur le professeur Jean Louis Miane de m'avoir fait profiter de leurs connaissances sur l'instrumentation micro-ondes et sur la physique des matériaux.

Plusieurs stagiaires ont également apporté leur pierre à l'édifice et plus particulièrement un merci à Charlotte Sury pour la fabrication de nombreux cristaux photoniques.

Je voudrais aussi souligner le nombre très important de revues de la bibliothèque de l'Uni-

versité Bordeaux 1 sans quoi ce manuscrit aurait eu une toute autre couleur.

Je ne saurais oublier tous les autres membres du laboratoire qui m'ont permis de mener cette étude dans une ambiance agréable et paisible. Qu'ils trouvent ici l'expression de toute ma sympathie.

Enfin, un grand merci à mes proches pour m'avoir soutenu tout au long de ces trois années.

"If only it were possible to make dielectric materials in which electromagnetic waves cannot propagate at certain frequencies all kinds of almost-magical things would be possible"

J. Maddox

Nature **348**, 481 (1990)

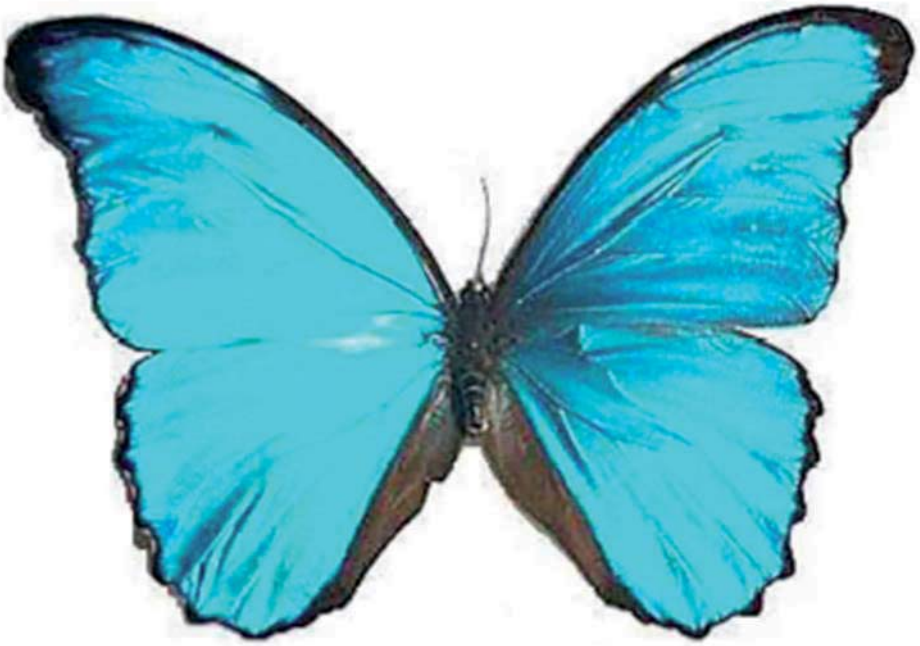


FIG. 1 – Les reflets bleus des ailes du papillon Morpho d'Amazonie sont dus à un matériau photonique

"On the maintenance of vibrations by forces of double frequency, and on the propagation of waves through a medium endowed with a periodic structure,"

Lord Rayleigh

Philosophical Magazine **24**, 145–159 (1887)

Table des matières

Introduction générale **ix**

1 Propriétés des cristaux photoniques **1**

1.1 Introduction 2

1.2 Équations d'ondes et modes de propagation dans une couche 5

1.3 Cristaux photoniques unidimensionnels 13

1.4 Cristaux photoniques bidimensionnels 29

1.5 Cristaux photoniques tridimensionnels 35

1.6 Cristaux photoniques métalliques 40

1.7 Réfraction négative et indice de réfraction négatif 47

1.8 Conclusion 55

Références 61

2 Les méthodes de modélisation des cristaux photoniques **63**

2.1 Introduction 64

2.2 Équations et domaine de calcul dans les CPhs 66

2.3 La multidiffusion unidimensionnelle (MST 1D) 71

2.4 Théorie des modes couplés 75

2.5 Approche par la fonction de Green unidimensionnelle 77

2.6 La méthode des éléments finis (FEM) 79

2.7 La méthode des différences finies temporelles (FDTD) 88

2.8 Méthode des volumes finis (FIT) 96

2.9 Méthode des différences finies dans le domaine fréquentiel (FDFD / TMM) . 100

2.10 Méthode des ondes planes (PWM) 105

2.11 Méthode des liaisons fortes (TB) 110

2.12 Méthode de la multidiffusion bidimensionnelle (MST 2D) 111
2.13 Conclusion : comparaison de l'ensemble des méthodes présentées 113
Références 119

3 Théorie de la multidiffusion appliquée aux cristaux photoniques 121

3.1 Introduction 122
3.2 Formalisme des fonctions d'ondes vectorielles sphériques 124
3.3 Développement multipolaire de l'onde plane 126
3.4 Champ diffracté par une sphère - théorie de Mie 128
3.5 La multidiffusion d'une onde électromagnétique par une collection de diffuseurs 132
3.6 Structure de bande à partir de l'équation de la multidiffusion 136
3.7 La multidiffusion appliquée aux CPhs finis 137
3.8 Architecture du code MST 144
3.9 Post-traitement - visualisation de différents paramètres 146
3.10 Du CPh Infini au CPh fini : étude paramétrique et vérification de la méthode 153
3.11 Du CPh parfait au CPh aléatoire : étude de défauts dans les CPhs 161
3.12 Conclusion et perspectives 167
Références 172

4 Mise en œuvre experimentale : application aux cristaux photoniques en polymère conducteur 173

4.1 Introduction 174
4.2 Le Banc de mesure millimétrique ABmm 175
4.3 Etalonnage et amélioration de la précision du banc de mesure 181
4.4 Méthodes et exemples de caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels 194
4.5 Les polymères conducteurs 202
4.6 Caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels en polymère conducteur 215
4.7 Conclusions et applications 225
Références 231

Conclusion générale 233

Publications et communications scientifiques 237

Abréviations **241**

Constantes et variables **243**

Table des figures **252**

Liste des tableaux **253**

Index **257**

Introduction générale

Depuis l'avènement de la mécanique quantique, beaucoup de concepts de l'électromagnétisme et de l'optique ont été appliqués à la physique du solide. Mais l'inverse était rarement le cas. Les cristaux photoniques ont rétabli un certain équilibre. En effet, les cristaux photoniques présentent des analogies très fortes avec les cristaux de la physique du solide. Ce sont ces analogies qui ont permis à Eli Yablonovitch de déceler l'intérêt considérable qui pouvait exister à généraliser le concept de miroir de Bragg et de cavité Fabry-Pérot aux dimensions supérieures. En 1987, l'objectif premier de Yablonovitch était de réaliser des cavités parfaites, afin de contrôler l'émission spontanée et donc d'obtenir des lasers sans seuil. Sont apparues quelques années plus tard, les premières applications des cristaux photoniques (CPh). En 1996, des fibres optiques sont réalisées à partir d'un cristal photonique bidimensionnel. Elles ont la faculté de guider un mode fondamental sur une très large bande. D'autres fibres sont étudiées pour annuler la dispersion chromatique. Aux vues des applications potentielles, la communauté scientifique redouble d'efforts pour obtenir des cristaux photoniques performants aux longueurs d'ondes optiques.

Dans le domaine des micro-ondes, les cristaux photoniques constituent une nouvelle voie dans la recherche de matériaux aux propriétés électromagnétiques spécifiques. En effet, on peut modeler l'onde électromagnétique à souhait. On peut par exemple guider une onde, la focaliser, la filtrer sur une gamme de fréquences, obtenir une réfraction négative. Les dispositifs micro-ondes utilisant des cristaux photoniques peuvent être séparés en deux parties : les dispositifs filtrants et les dispositifs rayonnants. Les premiers dispositifs utilisent la bande interdite photonique du cristal photonique comme filtre fréquentiel. Ces dispositifs peuvent être réalisés soit en multicouches soit en planaire. Une autre application consiste à introduire des cristaux photoniques ultra-compacts sur les parois d'un guide d'onde pour obtenir un nouveau type de guide quasi-TEM. Le guide n'a plus de fréquence de coupure et la propagation de l'onde se fait sur un mode unique. Une des voies les plus développées pour l'application des

cristaux photoniques concerne le domaine des antennes et leurs effets sur le rayonnement. Ils peuvent être utilisés comme substrat pour éliminer les ondes de surfaces ou comme radôme pour obtenir une meilleure directivité de l'antenne. On peut aussi insérer des diodes PIN dans les radômes précédents pour contrôler la directivité du faisceau voire le commuter ou le dépointer. Pour modéliser ces applications, il est nécessaire d'avoir des moyens de modélisations performants.

Cette thèse intitulée " Modélisation, réalisation et caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels en vue d'applications à la compatibilité électromagnétique " aborde la plupart des méthodes existantes pour étudier les cristaux photoniques : les méthodes de modélisation mais aussi les méthodes expérimentales.

Le plan de ce mémoire s'articule autour de quatre chapitres :

- Le premier chapitre présente une étude progressive des différents types de cristaux photoniques qui ont été créés. Cette étude permet de rappeler différents concepts utilisés constamment dans ce manuscrit comme par exemple le diagramme de bande électronique appliqué aux cristaux photoniques. Les similitudes entre les cristaux photoniques unidimensionnels et les cristaux photoniques bi- et tri-dimensionnels seront mises en lumière. Nous en profiterons pour donner quelques applications majeures de chacun de ces cristaux photoniques. Nous terminerons le chapitre par le comportement métamatériau des cristaux photoniques. Ce comportement suscite quelques questions qui donnent lieu à de nombreuses controverses dans la communauté scientifique.
- Nous verrons dans le deuxième chapitre combien il est difficile de modéliser un cristal photonique comparé à d'autres dispositifs micro-ondes. Sa périodicité proche de la longueur d'onde d'étude en est la raison principale. Après 15 ans de recherche sur les cristaux photoniques, il est temps de tirer un bilan sur les différentes méthodes de modélisations des cristaux photoniques. Ce bilan n'est pas une simple description de chaque méthode mais bien une mise en place de pratiquement toutes les méthodes dont certaines sont nouvelles. Deux exemples de cristaux photoniques seront modélisés et comparés avec l'ensemble des méthodes tridimensionnelles présentées.
- Le chapitre trois présente une nouvelle méthode de modélisation des cristaux photoniques, la multidiffusion. Cette méthode prend en compte de façon intrinsèque un défaut localisé dans un cristal photonique. Ce qui n'était pas le cas des méthodes du chapitre précédent. Naturellement, on va étudier l'influence de différents défauts dans

les cristaux photoniques. Une comparaison avec les méthodes du chapitre précédent, nous permettra de valider notre méthode.

– Le dernier chapitre abordera les questions expérimentales. Après avoir décrit le banc de mesure et mis en place une méthode de caractérisation, nous aborderons les cristaux photoniques en polymères conducteurs. Ce nouveau matériau est classé parmi la famille des plastiques conducteurs. Le polymère conducteur peut atteindre une conductivité de 10 000 S/m, amplement suffisant pour réaliser un cristal photonique. Ces cristaux photoniques ont été réalisés en vue d'applications à la compatibilité électromagnétique.

Chapitre 1

Propriétés des cristaux photoniques

Contenu du chapitre

1.1 Introduction **2**

1.2 Équations d'ondes et modes de propagation dans une couche . . **5**

1.2.1 Conventions et normalisations adoptées 5

1.2.2 Propriétés et analogies des différentes équations d'ondes 7

1.2.3 Modes de propagation et cône de lumière 10

1.3 Cristaux photoniques unidimensionnels **13**

1.3.1 CPh fini 17

1.3.2 Les défauts 18

1.3.3 Le miroir omnidirectionnel 25

1.4 Cristaux photoniques bidimensionnels **29**

1.4.1 Défauts 31

1.4.2 CPhs 2.5D 34

1.5 Cristaux photoniques tridimensionnels **35**

1.5.1 Historique 35

1.5.2 Les défauts 40

1.6 Cristaux photoniques métalliques **40**

1.6.1 CPhs métalliques aux fréquences optiques 41

1.6.2 CPhs métalliques aux fréquences micro-ondes 42

1.6.3 CPhs discrets et CPhs ultra-compacts 43

1.7 Réfraction négative et indice de réfraction négatif **47**

1.7.1 Ligne de transmission inversée 47

1.7.2 Indice négatif dans les métamatériaux 50

1.7.3 Réfraction négative dans les CPhs 51
1.8 Conclusion 55
Références 61

1.1 Introduction

Un cristal photonique est un matériau dont l'indice de réfraction est modulé périodiquement à l'échelle de la longueur d'onde d'étude afin de modifier la propagation des ondes électromagnétiques de la même manière qu'un potentiel périodique dans un cristal semi-conducteur affecte le déplacement des électrons en créant des bandes d'énergie autorisées et interdites. L'absence de modes propagatifs sur une plage de fréquences est alors qualifiée de bande interdite photonique. Les cristaux photoniques sont comme leur nom l'indique des cristaux dont le motif du réseau est composé de matériaux diélectriques ou de matériaux métalliques ou de la combinaison des deux (figure 1.1).

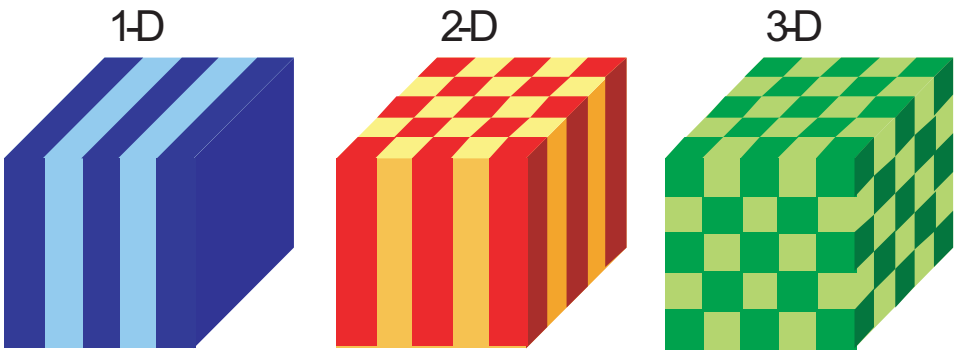


Fig. 1.1 – Cristaux photoniques à une, deux et trois dimensions

Lord Rayleigh en 1887 est le premier à avoir montré que l'on pouvait ainsi produire une bande interdite dans des structures périodiques. La forme la plus simple de cristal photonique est une structure périodique à une dimension composée d'un empilement multicouche également appelée "miroir de Bragg". La possibilité d'étendre les bandes interdites aux structures bidimensionnelles et tridimensionnelles a été initiée par Eli Yablonovitch [1] et Sajeev John [2] en 1987. Eli Yablonovitch proposa d'utiliser de telles structures pour créer un effet Purcell [3] et éliminer l'émission spontanée dans différents dispositifs comme les lasers à semi-conducteurs, les cellules solaires, les transistors bipolaires à hétérojonctions. Sajeev John proposa ce type de structure pour observer la localisation de l'onde électromagnétique

qui avait déjà été démontré dans le cas de l'électron par Anderson [4] et Mott [5].

En 1979, en remarquant la similitude entre les équations de Helmholtz et de Schrödinger, Ohtaka [6] a établi théoriquement la structure de bande d'une onde électromagnétique dans un réseau de sphères diélectriques. A l'état naturel, on peut trouver ce réseau de sphères dans des pierres appelées opales (figure 1.2).

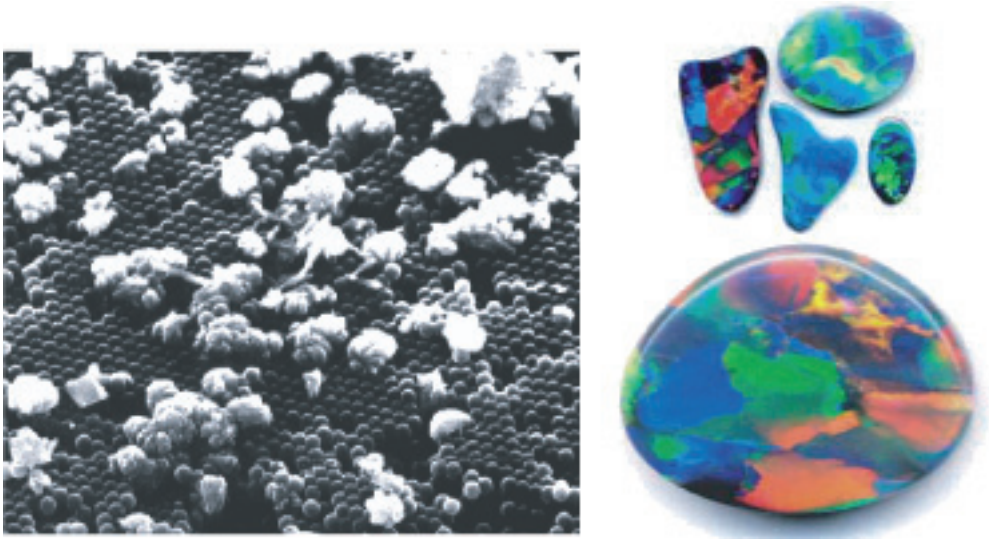


Fig. 1.2 – Photographies d'opales à différentes échelles

C'est une roche constituée de microbilles de silices réparties selon un arrangement plus ou moins régulier. C'est un cristal photonique naturel, même si celui-ci n'a pas de bande interdite complète (*i.e.* la bande interdite ne s'étend pas selon toutes les directions cristallographiques principales du matériau). La périodicité de ce cristal doit être de l'ordre de la moitié de la longueur d'onde de la lumière incidente pour générer des interférences, soit entre 200 et 400 nm pour fonctionner dans le visible.

L'intérêt des chercheurs pour le thème des cristaux photoniques n'a cessé d'augmenter depuis 1987. De nombreux articles sur les cristaux photoniques sont publiés chaque année dans des revues prestigieuses de physique mais aussi de science générale comme *Science* et *Nature.* Un travail colossal de référencement de tous les articles relatifs à ce sujet a été réalisé et est réactualisé chaque mois par Jonathan P. Dowling. Le nombre d'articles publiés par an augmente exponentiellement, il double tous les deux ans (figure 1.3).

Cet engouement pour les cristaux photoniques est dû à leur possibilité d'exclure toute la lumière sur une gamme de fréquence. En fait, la lumière est rejetée du cristal photonique non pas parce qu'elle ne peut pas pénétrer à travers la surface, mais parce qu'elle ne peut

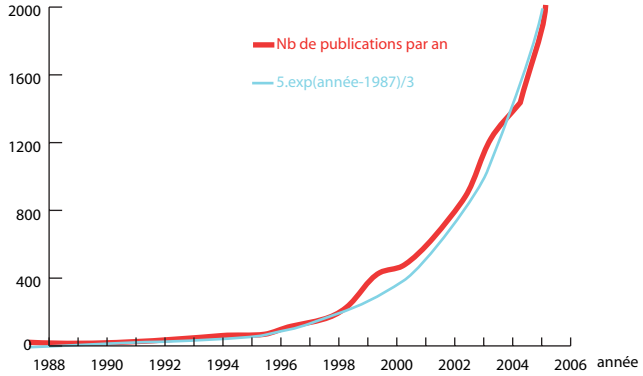


FIG. 1.3 – Nombre de publications par an sur les cristaux photoniques

pas être à l'intérieur du CPh, le CPh n'ayant pas d'états électromagnétiques disponibles à l'intérieur de la structure. C'est en cela que les CPhs sont différents d'une boite métallique. On peut prendre l'exemple donné par Pendry [7]. Si on allume une allumette dans une boîte métallique, la boîte s'illumine. La lumière se propage à l'intérieur de la boîte. Par contre si on essaie d'allumer une allumette dans un CPh, on ne peut pas (figure 1.4), le CPh ne permet pas la propagation de la lumière. Les photons crées par la réaction retourne à l'allumette.

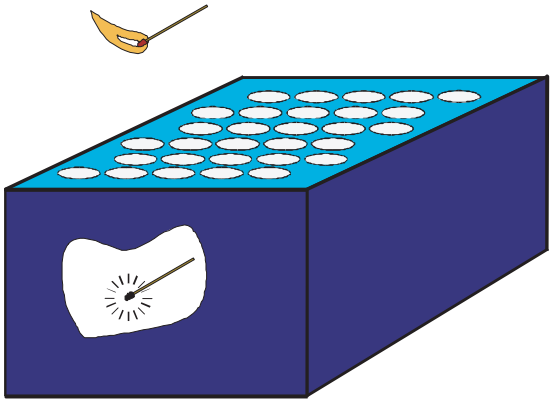


FIG. 1.4 – Eclairement d'un CPh

Comme la taille du CPh est proportionnelle à la longueur d'onde d'étude, la fabrication de cette structure est très difficile en optique. Il est par contre beaucoup plus simple de réaliser des matériaux interdisant une gamme de fréquence en micro-onde. Sur cette gamme de fréquence, les CPhs 1D, 2D et 3D permettent de créer de nouveaux radômes, des circuits micro-ondes, d'améliorer les gains des antennes, de modifier leur diagramme de rayonnement... En optique, Les CPhs unidimensionnels et bidimensionnels ont atteint un niveau de maturité nécessaire pour le développement d'applications [8]. Elles permettent d'améliorer

les performances des miroirs, des lasers... La fabrication en optique de cristaux photoniques à trois dimensions est encore au stade de la recherche. Lorsque une telle technologie sera disponible, le domaine de l'optique et des télécommunications sera bouleversé. Au fur et à mesure du chapitre, nous étudierons des structures de plus en plus élaborées :

- une couche simple,
- les cristaux photoniques unidimensionnels,
- les cristaux photoniques bidimensionnels, et
- les cristaux photoniques tridimensionnels.

Nous terminerons le chapitre par des matériaux à réfraction négative. Avant d'étudier ces structures, nous étudierons les différentes équations d'ondes et les modes qu'elles engendrent dans une couche de permittivité constante.

1.2 Équations d'ondes et modes de propagation dans une couche

Les propriétés des équations d'ondes sont à la base de l'étude des cristaux photoniques. Pour étudier leurs propriétés, nous devons choisir plusieurs conventions et normalisations.

1.2.1 Conventions et normalisations adoptées

Quelques équations d'électromagnétisme sont rappelées pour indiquer les normalisations choisies. Les quatre équations macroscopiques de Maxwell et les deux équations constitutives, rappelées ci-dessous, gouvernent la propagation de l'onde électromagnétique dans les cristaux photoniques.

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{0} & \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t) - \partial_t \mathbf{D}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{J}(\mathbf{r},t) & \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r},t) &= \rho(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{1.1}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r},t) &\equiv \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}) = \varepsilon_r(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &\equiv \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r},t) + \mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mu_r(\mathbf{r})\mathbf{H}(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{1.2}$$

Nous verrons d'ailleurs dans les chapitres suivants, que ces équations ont engendré pour leurs résolutions un nombre très important et très différent de méthodes numériques et analytiques. Notons ici qu'il n'y a pas de longueur fondamentale dans ces lois d'électromagnétisme écrites à l'échelle macroscopique. Ainsi, si $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ est solution du problème de distribution de permittivité $\varepsilon_r(\mathbf{r})$ à la longueur d'onde λ_0, alors pour tout réel s, $\mathbf{E}(\mathbf{r}/s,t)$ est solution du problème de distribution de permittivité $\varepsilon_r(\mathbf{r},/s)$ à la longueur d'onde λ_0/s [9]. Autrement dit, le même

comportement physique est observé si l'on change simultanément la longueur d'onde et les dimensions du système dans les mêmes proportions. C'est pourquoi il est commode, pour étudier les cristaux photoniques, d'introduire une fréquence réduite $a/\lambda_0 = af/c = k_0 a/2\pi$, avec a une période caractéristique du cristal, λ_0 la longueur d'onde dans le vide et k_0 le nombre d'onde dans le vide. Si la distribution de permittivité des cristaux photoniques est indépendante de la fréquence d'étude, seules les dimensions réduites du cristal sont nécessaires. Dans la suite du manuscrit, nous utiliserons des dimensions, des fréquences, des nombres d'ondes, et des vecteurs d'ondes réduits.

Les termes sources des équations de Maxwell seront la plupart du temps éliminés. Dans l'ensemble de ce manuscrit, nous nous intéresserons seulement aux matériaux diélectriques linéaires et isotropes. Les pertes diélectriques et la conductivité des matériaux seront modélisées respectivement par une permittivité complexe [1] et une conductivité réelle avec les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \varepsilon_r &= \varepsilon_r' + i\varepsilon_r'' \\ \varepsilon_r'' &= \frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \end{aligned} \tag{1.3}$$

Pour établir ces relations, nous avons adopté la convention suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{H}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t} \end{aligned} \tag{1.4}$$

L'indice de réfraction complexe est défini à partir de la permittivité et de la perméabilité :

$$n = n' + in'' = c\sqrt{\epsilon\mu} \tag{1.5}$$

Le vecteur d'onde complexe dans la direction de la propagation est défini de la manière suivante :

$$k = k' + ik'' = nk_0 \tag{1.6}$$

avec $k_0 = \frac{\omega}{c}$ le nombre d'onde dans le vide.

Pour la phase de la transmission et de la réflexion, nous avons adopté la convention des mesures du chapitre 4. Le signe moins sur les légendes des courbes de phase provient de la convention $\exp(-i\omega t)$ (figure 1.14). La phase doit être ascendante avec cette convention. Nous conserverons ces conventions et ces normalisations tout au long du manuscrit. L'ensemble des notations sont indiquées page 243.

[1] En micro-ondes et dans les études expérimentales, on utilise généralement la convention $\varepsilon_r = \varepsilon_r' - j\varepsilon_r''$ pour la permittivité complexe. Par souci d'homogénéité du manuscrit, cette notation ne sera pas adoptée ici.

1.2.2 Propriétés et analogies des différentes équations d'ondes

La théorie des cristaux photoniques s'inspire très largement de la physique du solide et de la mécanique quantique. Les équations de Maxwell et l'équation de Schrödinger d'un électron dans un potentiel périodique d'un réseau cristallin d'ions sont très proches, mis à part le fait que les premières sont vectorielles et la dernière est scalaire. Les équations de Maxwell seront plus complexes à résoudre. Cependant, la transversalité des champs nous simplifiera la tâche et sera même essentielle dans certains cas. L'équation de Schrödinger rappelée ci-dessous utilise l'opérateur hamiltonien.

$$\begin{aligned} \widehat{H}\left|\psi(\mathbf{r},t)\right\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(\mathbf{r},t)\right\rangle \\ \widehat{H} &= \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.7}$$

Cet opérateur est linéaire et hermitique[2]. Si on décompose la fonction d'onde en harmoniques, on obtient l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\begin{aligned} \widehat{H}\left|\psi(\mathbf{r})\right\rangle &= E\left|\psi(\mathbf{r})\right\rangle \\ \left|\psi(\mathbf{r},t)\right\rangle &= e^{-i\omega t}\left|\psi(\mathbf{r})\right\rangle \end{aligned} \tag{1.8}$$

Cette équation a pour valeurs propres les énergies E.

En l'absence de source, l'équation de Maxwell-Faraday et l'équation de Maxwell-Ampère peuvent être écrites sous une forme plus compacte appelée équation d'évolution de Maxwell :

$$\widehat{\mathbf{M}}\psi(\mathbf{r},t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) \tag{1.9}$$

$\widehat{\mathbf{M}}$ et $\psi(\mathbf{r},t)$ désignent respectivement l'opérateur de Maxwell et la fonction d'onde vectorielle regroupant le champ électrique et le champ magnétique :

$$\widehat{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 0 & i\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times \\ -i\mu^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times & 0 \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

$$\psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r},t) \end{pmatrix} \tag{1.11}$$

L'équation d'évolution de Maxwell est très intéressante pour réaliser une comparaison avec la mécanique quantique. L'opérateur de Maxwell est linéaire et hermitique [10]. Cette dernière propriété simplifie le problème : valeurs propres réelles, orthogonalité des vecteurs propres

[2] Un opérateur est dit *hermitique* (autoadjoint) s'il est égal à son adjoint : $\hat{A}^\dagger = {}^t\left(\hat{A}^*\right) = \hat{A}$

pour des valeurs propres non dégénérées, commutation avec l'opérateur de symétrie... Si on décompose la fonction d'onde en harmoniques, on obtient une équation aux valeurs propres :

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{M}}\psi(\mathbf{r}) &= \omega\psi(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r},t) &= e^{-i\omega t}\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.12}$$

Les valeurs propres sont les énergies pour l'équation de Schrödinger alors que pour l'équation d'évolution de Maxwell on utilisera les fréquences ou les longueurs d'ondes. Contrairement aux équations de Maxwell, l'équation de Schrödinger ne vérifie pas la loi d'échelle. Les cristaux de la physique du solide et les cristaux photoniques sont des matériaux périodiques en potentiel et en permittivité respectivement. Cette périodicité a pour conséquence que les champs comme les fonctions d'ondes sont décomposés en terme de fonctions de Bloch. La tableau 1.1 compare les propriétés des différentes équations d'évolution.

Par souci de simplification, on utilise l'opérateur $\widehat{\mathbf{M}}^2$:

$$\widehat{\mathbf{M}}^2 = \begin{pmatrix} \varepsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times\mu^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times & 0 \\ 0 & \mu^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{M}}_E & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{M}}_H \end{pmatrix} \tag{1.13}$$

Cet opérateur est autoadjoint, positif et les éléments ω^2 de son spectre sont des réels positifs. Les fréquences ω et -ω appartiennent aux spectres des opérateurs $\widehat{\mathbf{M}}^2$ et $\widehat{\mathbf{M}}$. Le champ électrique et le champ magnétique sont linéairement dépendants. Donc le spectre de $\widehat{\mathbf{M}}$ est le même que celui de $\hat{\mathbf{M}}_E$ et $\hat{\mathbf{M}}_H$. $\hat{\mathbf{M}}_E$ et $\hat{\mathbf{M}}_H$ sont les opérateurs respectifs des équations d'onde en $\mathbf{E}$ et en $\mathbf{H}$. Ces équations d'ondes sont donc équivalentes. Le passage du champ $\mathbf{E}$ au champ $\mathbf{H}$ et inversement est réalisé par des rotationnels :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \frac{-1}{i\omega\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{i\omega\mu(\mathbf{r})}\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.14}$$

Dans la pratique, les matériaux sont non magnétiques $\mu_r = 1$ et on utilise les équations d'ondes suivantes :

$$\nabla\times\left[\varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = k_0^2\mathbf{H}(\mathbf{r}) \tag{1.15}$$

$$\nabla\times\left[\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r})\right] = k_0^2\varepsilon_r(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) \tag{1.16}$$

$$\nabla\times\left[\nabla\times\varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r})\mathbf{D}(\mathbf{r})\right] = k_0^2\mathbf{D}(\mathbf{r}) \tag{1.17}$$

L'équation d'onde en $\mathbf{D}$ est obtenue à partir de la relation constitutive précédente (équation 1.2).

Domaine	Mécanique quantique	Electromagnétisme
Équation d'évolution	Équation de Schrödinger : $\widehat{H}\left\|\psi(\mathbf{r},t)\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\|\psi(\mathbf{r},t)\right\rangle$	Équation d'évolution de Maxwell : $\widehat{\mathbf{M}}\psi(\mathbf{r},t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)$
Opérateur	Opérateur Hamiltonien : $\widehat{H} = \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ – Linéaire – Hermitique	Opérateur de Maxwell : $\widehat{\mathbf{M}} = \begin{bmatrix} 0 & i\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times \\ -i\mu^{-1}(\mathbf{r})\nabla\times & 0 \end{bmatrix}$ – Linéaire – Hermitique
Fonction d'onde	$\left\|\psi(\mathbf{r},t)\right\rangle = e^{-i\omega t}\left\|\psi(\mathbf{r})\right\rangle$ – Scalaire – Continue	$\psi(\mathbf{r},t) = e^{-i\omega t}\psi(\mathbf{r})$ – Vectorielle – Continue
Équation harmonique	$\widehat{H}\left\|\psi(\mathbf{r})\right\rangle = E\left\|\psi(\mathbf{r})\right\rangle$	$\widehat{\mathbf{M}}\psi(\mathbf{r},t) = \omega\psi(\mathbf{r})$
Valeurs propres	Énergie E réelles	Pulsation ω réelle
Vecteurs propres	Fonctions d'ondes de Bloch $\left\|\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})\right\rangle = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\left\|u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})\right\rangle$	Modes harmoniques de Bloch $\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$
Fonction périodique	Potentiel : $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ – Approximé – Périodique	Permittivité et perméabilité : $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ $\mu(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ – Exacte – Périodique
Diagramme d'un matériau uniforme	Gaz d'électron libre ⇒ Diagramme de dispersion parabolique $E = \frac{\hbar^2K^2}{2m}$	Matériau uniforme ⇒ Diagramme de dispersion linéaire $\omega = cK$
Type de bande	Cristal périodique ⇒ Bande interdite électronique	Matériau périodique ⇒ Bande interdite photonique

TAB. 1.1 – Tableau comparant les équations d'évolution de la mécanique quantique et de l'électromagnétisme

Équation d'onde	en **E**	en **H**	en **D**
Vecteur propre	$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = e^{-i\omega t}\mathbf{E}(\mathbf{r})$ – Discontinu	$\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = e^{-i\omega t}\mathbf{H}(\mathbf{r})$ – Continu	$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = e^{-i\omega t}\mathbf{D}(\mathbf{r})$ – Continu
Opérateur	$\nabla \times [\nabla \times$ – Linéaire – Hermitique	$\nabla \times \varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r})\,[\nabla \times$ – Linéaire – Hermitique	$\nabla \times \left[\nabla \times \varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r})\right.$ – Linéaire – Non hermitique

TAB. 1.2 – Tableau comparant les différentes équations d'ondes

L'équation d'onde électromagnétique qui se rapproche le plus de la mécanique quantique est l'équation en champ **H** (tableau 1.2). L'opérateur est linéaire et hermitique comme l'hamiltonien, et de plus le champ **H** est continu aux interfaces entre deux matériaux de permittivités différentes. Il est possible aussi de rendre hermitique l'opérateur de l'équation en **D** de la façon suivante :

$$\begin{aligned} &n^{-1}(\mathbf{r})\,\nabla \times \left[\nabla \times n^{-1}(\mathbf{r})\,\mathbf{F}(\mathbf{r})\right] = k_0^2\mathbf{F}(\mathbf{r}) \\ &\text{avec } \mathbf{F}(\mathbf{r}) = n^{-1}(\mathbf{r})\,\mathbf{D}(\mathbf{r}) \text{ et } n(\mathbf{r}) = \sqrt{\varepsilon_r(\mathbf{r})} \end{aligned} \tag{1.18}$$

Par contre le champ **F** devient discontinu. Nous utiliserons l'équation d'onde en **H** pour des systèmes complexes comme les cristaux photoniques 2D et 3D. Pour des systèmes simples comme les miroirs de Bragg et les plaques, on utilisera plutôt les équations en **E** et **D** pour des raisons de visualisations.

1.2.3 Modes de propagation et cône de lumière

Pour mieux comprendre les modes qui se propagent dans un cristal photonique, nous commençons par l'étude d'une simple plaque de permittivité ε_r et d'épaisseur a (figure 1.5). Une plaque diélectrique peut être étudiée par les lois de Snell-Descartes mais ici nous aborderons le problème par l'équation d'onde et le vecteur d'onde **k**. Pour simplifier le problème, nous choisissons un champ électrique incident perpendiculaire au plan d'incidence (plan formé par le vecteur z et le vecteur d'onde incident).

$$\begin{aligned} &\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}E(z)\,\hat{\mathbf{e}}_{\parallel} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{z}} \text{ avec } \mathbf{k} = k_{\parallel}\hat{\mathbf{e}}_{\parallel} + k_z\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{z}} \\ &\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_0 e^{ik_z z} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}\hat{\mathbf{e}}_{\parallel} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{z}} \end{aligned} \tag{1.19}$$

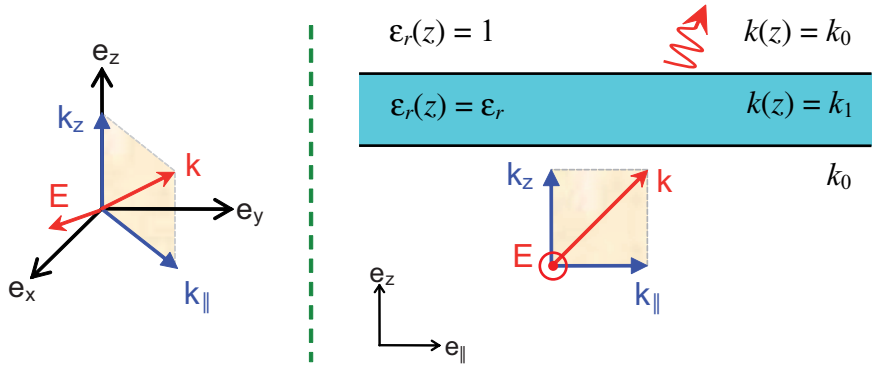


FIG. 1.5 – Plaque diélectrique infinie selon les directions x et y

On obtient les différents modes de la plaque en résolvant l'équation d'onde en $\mathbf{E}$ par exemple.

$$\begin{aligned} &\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = k^2(\mathbf{r})\,\mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ &\text{avec } k^2(\mathbf{r}) = \mathbf{k}.\mathbf{k} = n(\mathbf{r})\,k_0 = \left(\tfrac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_r(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.20}$$

En utilisant l'équation 1.19, l'équation d'onde devient une équation algébrique :

$$\begin{aligned} &-\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) = k^2(\mathbf{r})\,\mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ &k_z^2(z) + k_\parallel^2 = k^2(z) \end{aligned} \tag{1.21}$$

Dans le cas de la figure 1.5, l'équation 1.21 est écrite de la manière suivante :

$$\begin{cases} \text{dans le diélectrique, } k_{z,1}^2 = k_1^2 - k_\parallel^2 \\ \text{dans l'air, } k_{z,0}^2 = k_0^2 - k_\parallel^2 \end{cases} \tag{1.22}$$

Le vecteur d'onde $k_\parallel$ est conservé dans la structure. Cette loi de conservation est une autre formulation des lois de Snell-Descartes. Le nombre d'onde dans le vide k_0 est toujours inférieur au nombre d'onde dans le diélectrique k_1.

Les modes de la structure sont classées selon le vecteur d'onde parallèle :

- Si $k_\parallel < k_0$ alors $k_{z,0}^2$ et $k_{z,1}^2$ sont réels. Le champ électrique s'écrit $E(z) \propto \exp(ik_z z)$. Il se propage dans la plaque et dans l'air pour l'ensemble des valeurs du nombre d'onde. Les états forment un continuum dans le diagramme de dispersion (figure 1.6). Ces modes délocalisés sont appelés les modes *radiatifs ou rayonnants*. Ils forment un continuum d'états au dessus de la ligne de lumière et sont faiblement perturbés par la présence de la plaque ou d'un cristal photonique.
- $k_\parallel = k_0$ représente la ligne de lumière dans le diagramme de dispersion. En fait, on retrouve l'angle de réfraction limite $n_1 \sin i_l = 1$.

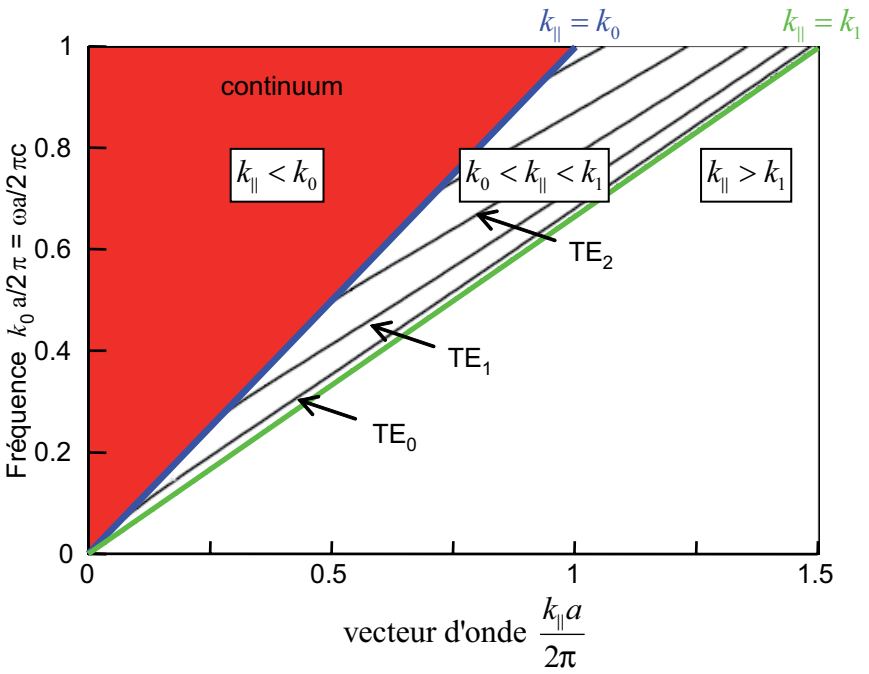


FIG. 1.6 – Diagramme de dispersion d'une plaque

- Si $k_0 < k_{\parallel} < k_1$ alors les vecteurs d'onde $k_{z,0}^2$ et $k_{z,1}^2$ sont respectivement imaginaire et réel. Les états diminuent exponentiellement dans l'air $E(z) \propto \exp(-\kappa z)$. Ces états sont pour la plupart des modes évanescents. Pour certaines valeurs de fréquences et de vecteurs d'ondes, des modes propagatifs peuvent exister. Ces modes se propagent dans la couche diélectrique. Ils diminuent exponentiellement selon z au-delà de la plaque (figure 1.6). Ces modes localisés sont appelés les modes *guidés*. Ces états ne peuvent pas former un continuum.
- Si $k_{\parallel} > k_1$ alors les vecteurs d'onde $k_{z,0}^2$ et $k_{z,1}^2$ sont imaginaires. Aucun mode propagatif ne peut être couplé.

Les conditions aux deux interfaces de la plaque sélectionnent l'ensemble discret de modes guidés :

$$\exp(ik_{z,1}a) = \pm\exp(ik_{z,1}0) \qquad a \text{ épaisseur de la plaque} \tag{1.23}$$

Les fréquences permises sont données par les relations suivantes :

$$k_{z,1} = \frac{m\pi}{a} \qquad \text{avec } m \text{ entier} \tag{1.24}$$

$$k_1^2 - k_{\parallel}^2 = \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 \qquad k_{\parallel} < m\pi/a \tag{1.25}$$

Ces modes sont classés par leur nombre de plans nodaux m (figure 1.7). Le mode fondamental

($m = 0$) ne s'annule pas dans le guide.

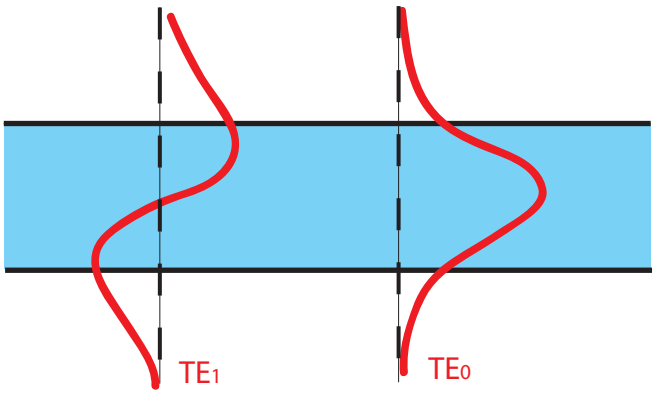


FIG. 1.7 – Les différents modes guidés dans une plaque

Dans les cristaux photoniques, en plus de ces modes, il peut exister des modes appelés modes *résonants* ou quasi-guidés. Ces modes fortement localisés dans le cristal photonique proviennent du repliement des modes guidés en bord de zone de Brillouin. Ce repliement les ramène au-dessus des lignes de lumière où ils constituent des résonances dans le continuum d'états radiatifs. Le couplage de ces modes avec les modes radiatifs est à l'origine de pertes verticales dans les cristaux photoniques bidimensionnels.

1.3 Cristaux photoniques unidimensionnels

Les cristaux photoniques unidimensionnels sont des simples alternances de couches de permittivités différentes. Un cas particulier très intéressant est le miroir de Bragg, qui est un empilement de couches d'épaisseur optique $\lambda/4$. Grâce à ses interférences constructives, il permet de renvoyer pratiquement la totalité de l'onde incidente. Dans le cas d'un miroir de Bragg, le nombre de couches doit être impair et débuter par la couche d'indice de réfraction le plus fort. En respectant ces conditions, on obtient uniquement des interférences constructives en réflexion, aux minima de transmission (figure 1.8).

Le miroir de Bragg est utilisé depuis fort longtemps comme miroir en optique et dans les cavités des lasers. C'est d'ailleurs cette dernière utilisation, qui permit à Eli Yablonovitch de généraliser ce concept de miroir unidimensionnel aux dimensions supérieures. Le but est d'obtenir des interférences constructives dans les CPhs pour tous les angles de la même manière que la figure 1.8. Tracer les différents faisceaux devient vite relativement complexe. Comme les CPhs ont des structures géométriques avec de nombreuses symétries, on utilise la

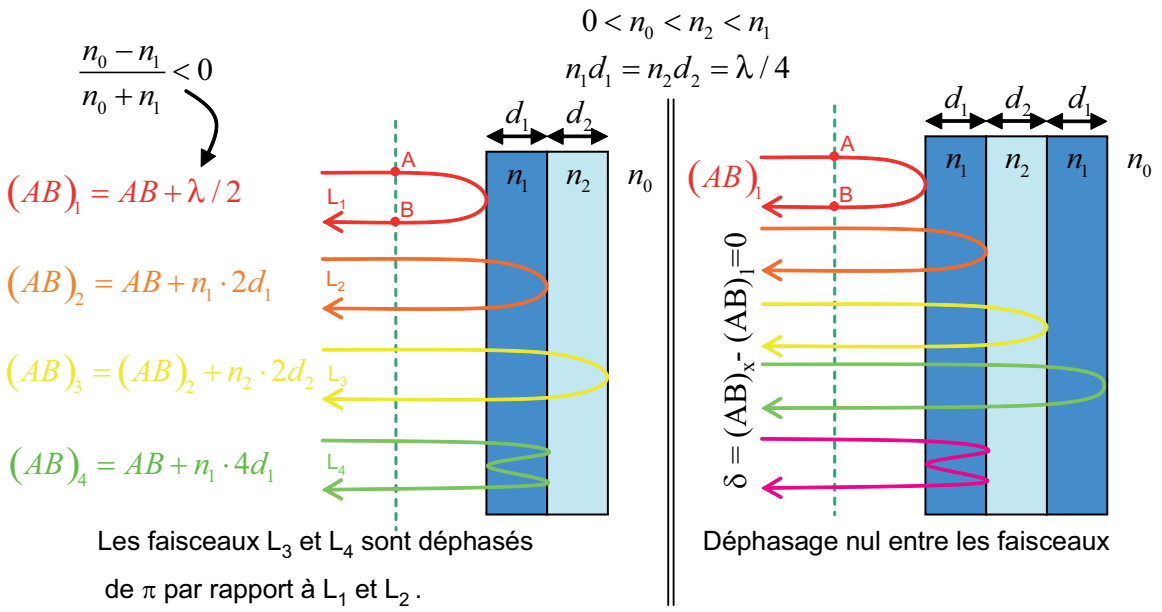


FIG. 1.8 – Interférences de différents faisceaux dans un miroir de Bragg à 2 et 3 couches

théorie des groupes et la physique du solide pour les étudier. C'est Kossel [11] en 1966 qui a étudié le premier les similitudes entre le CPh 1D et la physique du solide. En 1977, Yeh [12] proposa une méthode de matrice transfert pour résoudre ce système. Alors que l'on pensait connaître toutes les propriétés de ces structures très simples. En 1998, Winn démontra que l'on pouvait réaliser un miroir omnidirectionnel à partir d'un simple CPh 1D. Ce miroir sera étudié dans ce paragraphe. Cette structure nous permettra de mieux comprendre les CPhs 2D et 3D.

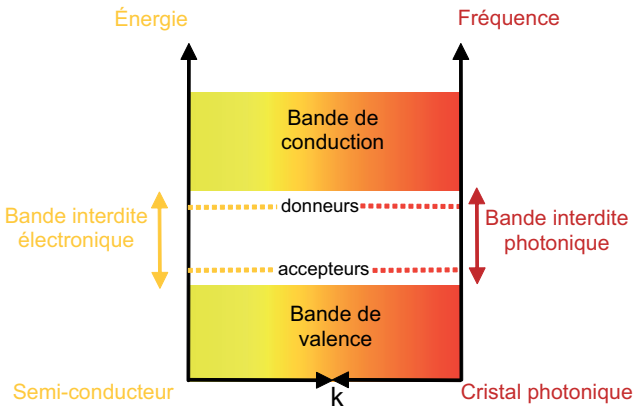


FIG. 1.9 – Analogies du diagramme de bande électronique et du diagramme de dispersion d'un cristal photonique

Mais tout d'abord, nous allons montrer comment un matériau peut interdire la propagation des ondes électromagnétiques à certaines fréquences, ou en d'autres termes offrir des bandes interdites. On est en droit d'imaginer que la réflexion de Bragg est un phénomène résonant et que les conditions pour obtenir $R = 1$ sont draconiennes en longueur d'ondes. Il n'en est rien ! En fait la formation des bandes interdites pour la lumière est tout à fait similaire à ce que l'on obtient pour les structures à bande interdite électronique (figure 1.9). Nous avons précédemment montré que l'équation de Schrödinger était très proche des équations d'ondes électromagnétiques. Par analogie à un cristal en physique du solide, on peut supposer que des bandes interdites photoniques existent.

Le diagramme de bande utilisé en physique des semiconducteurs est nécessaire pour la compréhension des milieux périodiques [13]. Le schéma de zone réduite est réalisé par le repliement de la relation de dispersion en bord de zone de Brillouin. Pour un matériau uniforme de permittivité ε_r, le diagramme de bande est un ensemble de losanges fermés (figure 1.10).

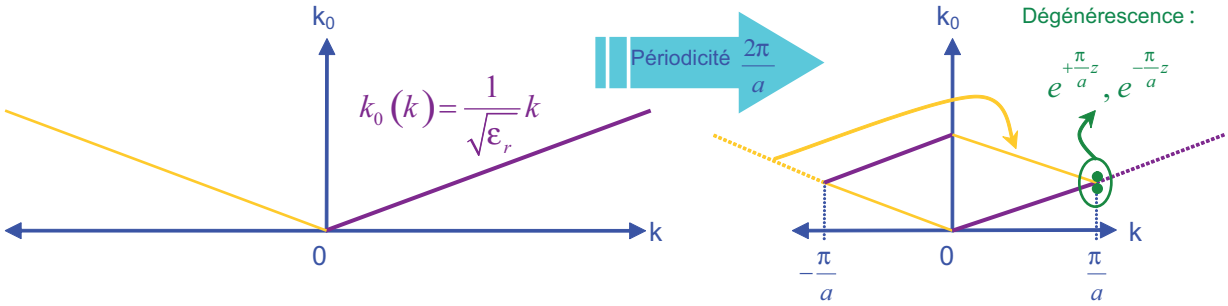


FIG. 1.10 – Création du schéma de zone réduite

En bord de zone de Brillouin, on obtient une dégénérescence de deux états pour un matériau uniforme. Si on varie périodiquement la permittivité du matériau uniforme précédent, on lève cette dégénérescence. On obtient une ouverture du diagramme de dispersion (figure 1.11). Cette ouverture est appelée bande interdite photonique (BIP) ou gap. Pour cette gamme de fréquence, aucun état propagatif n'existe. On observe une courbure de la relation de dispersion par rapport à la ligne de lumière (figure 1.11). Plus la différence de permittivité est grande et plus les bandes se courbent et le gap s'agrandit. Le diagramme de bande est obtenu par la résolution analytique de l'équation d'onde. On choisit l'équation d'onde en **E**. Le CPh choisi est un multicouche avec une alternance d'une couche d'air d'épaisseur $(a - d)$ et d'une couche de diélectrique d'épaisseur $d = 0.2a$ et de permittivité $\varepsilon_r = 13$. La couche de diélectrique est choisie ici uniforme pour simplifier le problème. Comme le système est périodique, la solution

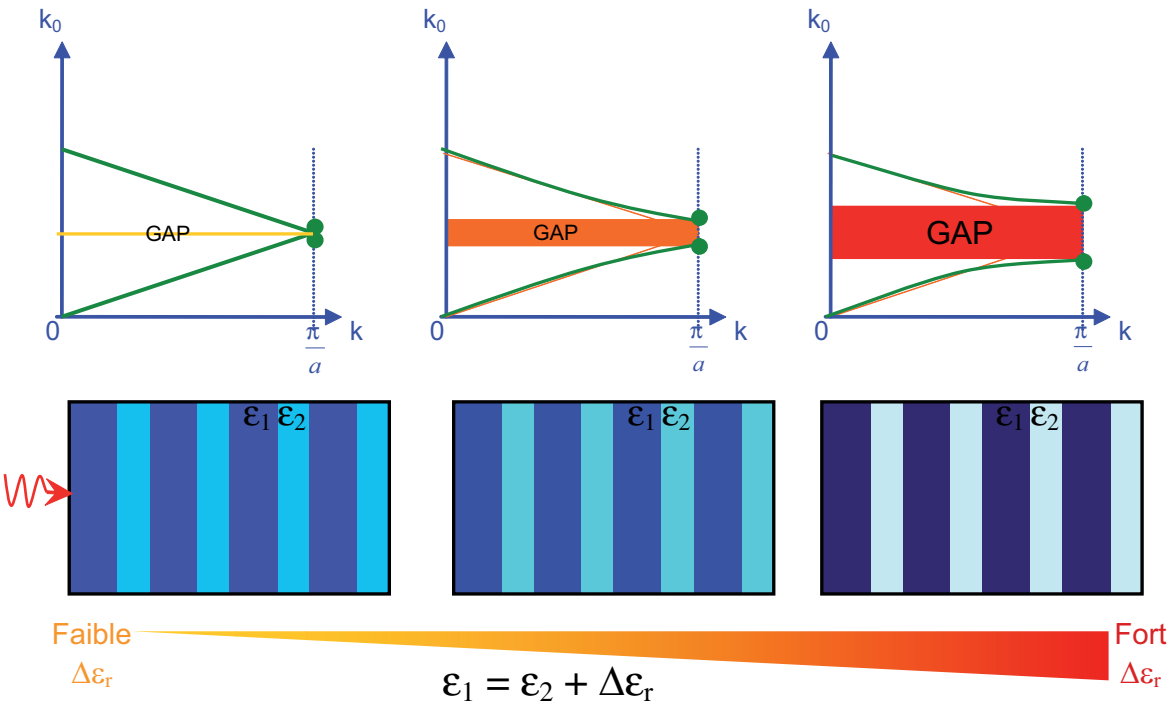


FIG. 1.11 – Influence de la différence de permittivité dans le gap

s'écrit en terme de fonction de Bloch :

$$\begin{aligned} \partial_z^2 E(z) + k^2(z)\, E(z) &= 0 \\ E(z+a) &= E(z) e^{iKz} \end{aligned} \tag{1.26}$$

- K est appelé le vecteur d'onde de Bloch.
- $k_0 = \frac{\omega}{c}$ est le nombre d'onde dans le vide.
- $k_1 = \sqrt{\varepsilon_r} k_0$ est le nombre d'onde dans le diélectrique [3].

La solution de l'équation 1.26 est donnée par l'équation transcendante suivante :

$$\cos(Ka) = \cos\left[k_0(a-d)\right]\cos(k_1 d) - \frac{1}{2}\left(\frac{k_0}{k_1} + \frac{k_1}{k_0}\right)\sin\left[k_0(a-d)\right]\sin(k_1 d) \tag{1.27}$$

Comme la fonction cosinus est bornée, la solution est visualisée par le tracé du second terme de l'équation 1.27 (figure 1.12). On dénombre trois bandes interdites photoniques dans cet exemple.

On peut se poser la question suivante :

N'y a-t-il pas de solutions de l'équation d'onde dans la bande interdite ?

[3] En micro-ondes, le nombre d'onde $-ik$ est appelé la constante de propagation et est noté $\gamma = \alpha + j\beta$.

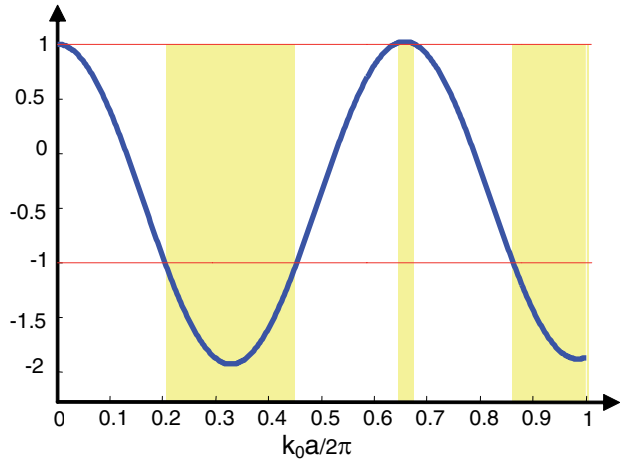


FIG. 1.12 – Résolution de l'équation transcendantale

En fait oui, si on prend le vecteur d'onde imaginaire pure, le premier terme de l'équation transcendantale est supérieur à 1. Seuls des modes évanescents peuvent donc exister. Ces modes ne se propagent pas dans le cristal parfait. Par contre, des défauts dans les cristaux permettront un couplage de ces modes du CPh avec des modes propagatifs extérieurs au CPh.

Les bandes interdites de notre exemple peuvent être représentées dans le diagramme de dispersion (figure 1.6). Les abscisses et les ordonnées du diagramme de bande sont normalisées par rapport à $a/2\pi$. Si on dessine le champ électrique des deux états situés en bord de zone de Brillouin de la première et de la deuxième bande, on obtient un déphasage de $\pi/2$ entre les deux champs. En fait, il s'agit de la combinaison entre les états $\exp\left(\frac{\pi}{a}z\right)$ et $\exp\left(-\frac{\pi}{a}z\right)$ (figure 1.13). En élevant au carré le champ électrique, on obtient l'énergie locale dans le cristal photonique. On s'aperçoit que l'énergie de la première bande est localisée dans le diélectrique (figure 1.13). Les états de la seconde bande ont leurs énergies localisées dans l'air. Dans les bandes interdites, le vecteur de Bloch est imaginaire (figure 1.13). A ces fréquences, il n'existe que des états évanescents dans le cristal photonique.

1.3.1 CPh fini

Jusqu'ici nous avons considéré un CPh 1D infini selon les trois directions de l'espace. En sélectionnant seulement quelques couches du CPh, nous sommes en mesure d'obtenir la transmission à travers la structure. Le nombre de couches retenu a pour effet d'approfondir les bandes interdites (figure 1.14). Entre deux bandes interdites successives, la transmission oscille et le nombre d'oscillations est égal au nombre de périodes de la structure moins une. Nous

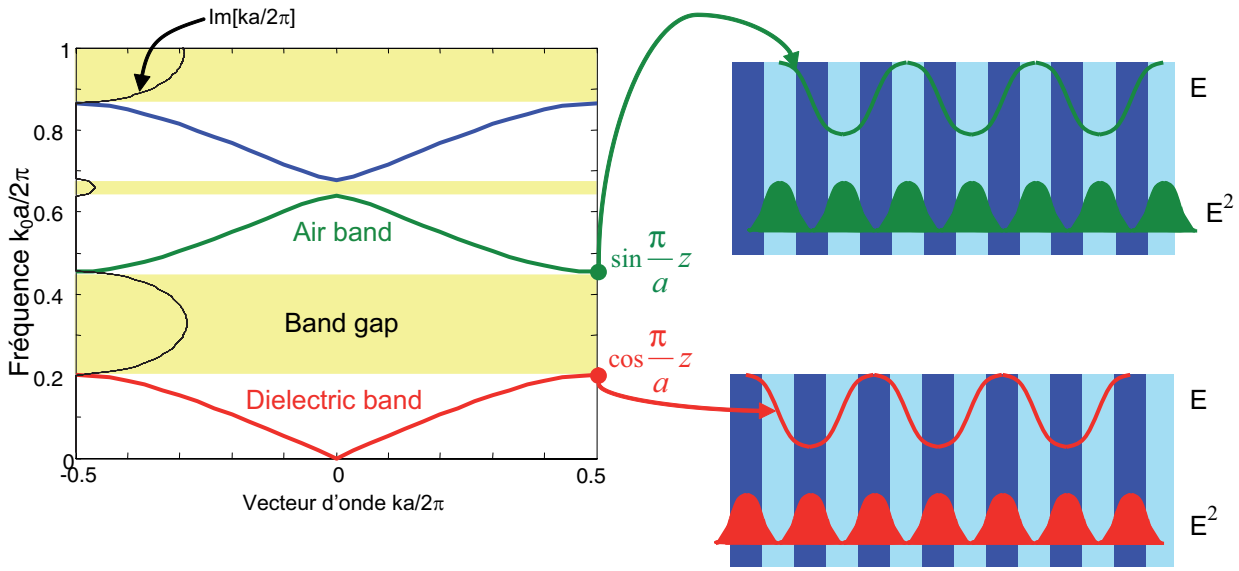


FIG. 1.13 – Champ électrique et énergie locale du CPh 1D

observons là, les oscillations de Fabry-Pérot entre les couches prises deux à deux. Lorsque l'on fait varier la fréquence, la valeur absolue du déphasage de la transmission augmente dans les matériaux classiques. Dans les bandes interdites du CPh de la figure 1.14, nous voyons que la valeur absolue du déphasage diminue. Ce comportement surprenant entraîne une diminution de l'indice de réfraction effectif du CPh 1D. Pour certaines configurations de CPhs, il devient même négatif. Nous reviendrons sur ce phénomène à la fin du chapitre.

La transmission met en lumière d'autres comportements classiques des CPhs. Dans la figure 1.15, l'augmentation de la permittivité de la couche diélectrique entraîne un élargissement du gap comme sur la figure 1.11, et un approfondissement du gap. La permittivité effective du CPh change avec la variation de la permittivité du diélectrique, cela a pour conséquence un déplacement de la bande interdite.

1.3.2 Les défauts

Nous avons vu que seul des modes évanescents pouvaient exister dans la bande interdite. Pour faire apparaître ces modes évanescents, nous allons rompre la périodicité du CPh 1D en créant un défaut. Au sens des CPhs, un défaut consiste à remplacer un matériau par un autre comme dans le cas des semi-conducteurs. On remplace une couche diélectrique par une couche d'air dans le CPh précédent. En fait, on réalise un Fabry-Pérot (figure 1.16). L'onde est localisée fréquentiellement et spatialement. Le mode est situé au niveau du défaut.

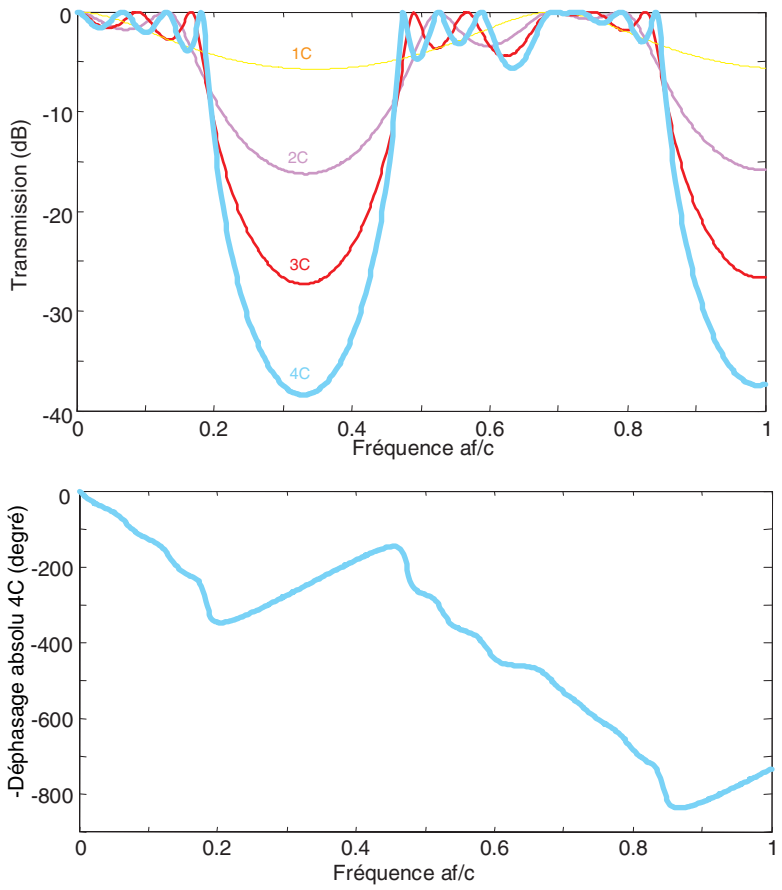


FIG. 1.14 – Courbe de transmission (module et phase) du CPh précédent

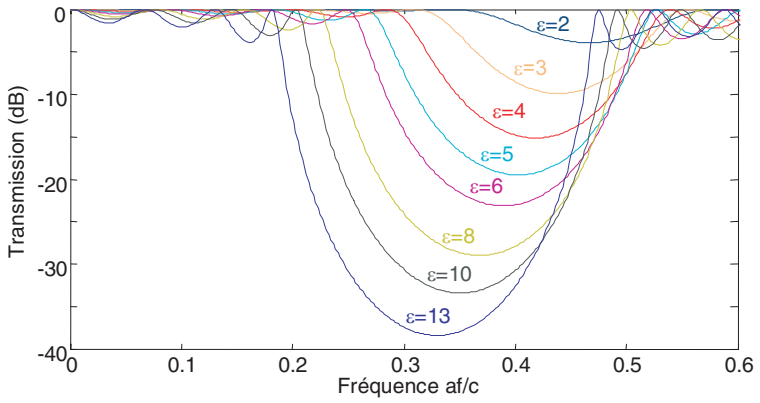


FIG. 1.15 – Variation de la permittivité de la couche diélectrique du CPh 1D

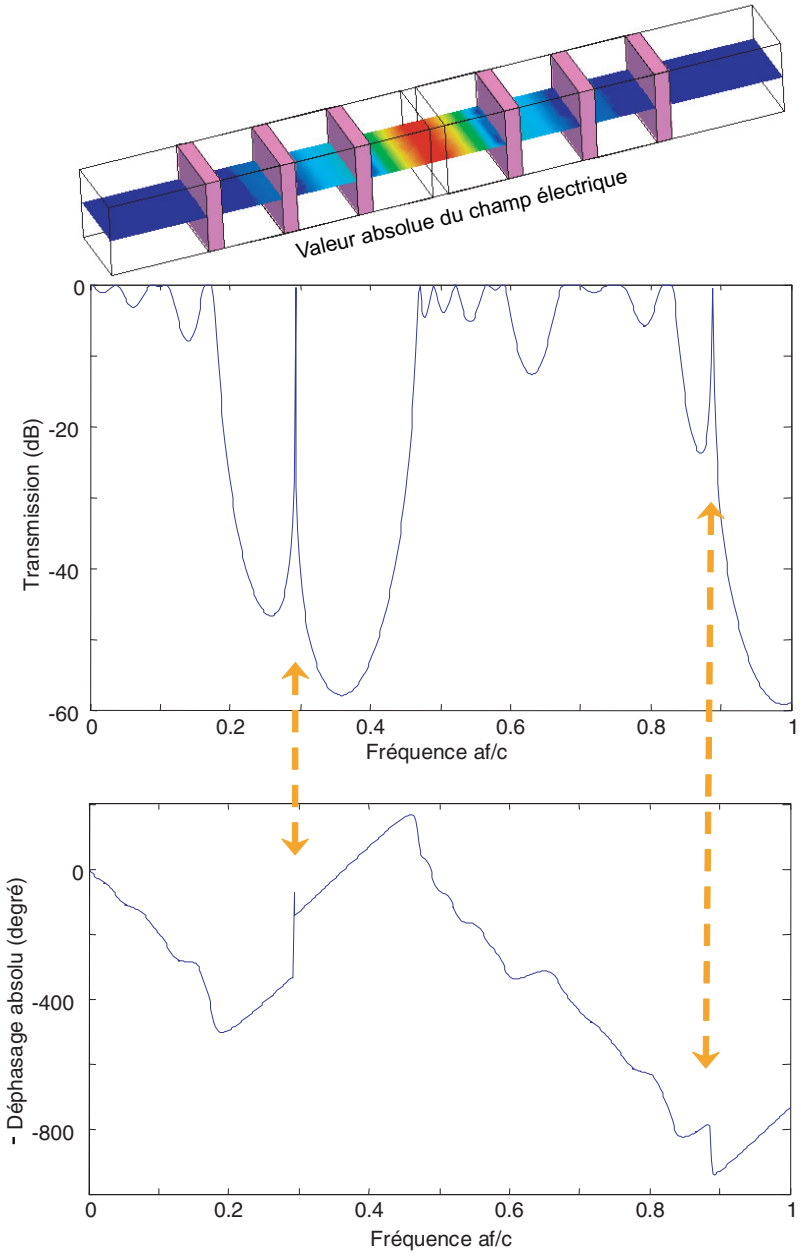


FIG. 1.16 – Transmission du Fabry-Pérot et visualisation du champ électrique à $af/c = 0.292685$

En traçant la transmission du CPh (figure 1.16), on s'aperçoit que les modes de défauts se situent dans les bandes interdites. Pour les deux modes de défaut, le signal est transmis sans pertes : il y a un excellent couplage entre le mode évanescent du CPh et le mode du défaut. Comme pour le CPh sans défaut, le déphasage remonte. De plus, il y a un saut de phase donc un saut de l'indice effectif au niveau du défaut. Nous n'apercevons pas de pic de défaut dans la seconde bande interdite. La bande interdite étant moins prononcée, le pic de transmission

peut être caché. Le diagramme de dispersion et la résolution analytique éclairciront le résultat.

Le cas du CPh avec un défaut est résolu analytiquement de façon analogue au CPh infini précédent. Si on considère des ondes évanescentes, une équation transcendante est obtenue à partir de l'équation d'onde.

$$\cosh(Ka) = \left|\cos\left[k_0(a-d)\right]\cos(k_1 d) - \frac{1}{2}\left(\frac{k_0}{k_1} + \frac{k_1}{k_0}\right)\sin\left[k_0(a-d)\right]\sin(k_1 d)\right| \tag{1.28}$$

Les états limites des systèmes 1D étant non dégénérés, le CPh avec le défaut a une symétrie de réflexion et les états du défaut doivent être symétrique ou antisymétrique. Si on considère que les états dans la région du défaut sont approximés par un cosinus pour les états symétriques et un sinus pour les états antisymétriques, on trouve une relation donnant les fréquences des modes du défaut.

$$\tan\left[k_0\left(d-a\right)\right] = -\frac{\tan\left(k_1 a\right)}{2}\left\{\left(\frac{k_0}{k_1} + \frac{k_1}{k_0}\right) \pm \left(\frac{k_0}{k_1} - \frac{k_1}{k_0}\right)\frac{\cos\left(k_0 d\right)}{\cos\left[k_0\left(d-a\right)\right]}\right\} \tag{1.29}$$

En traçant cette relation (figure 1.17), on décompte cinq fréquences de défaut.

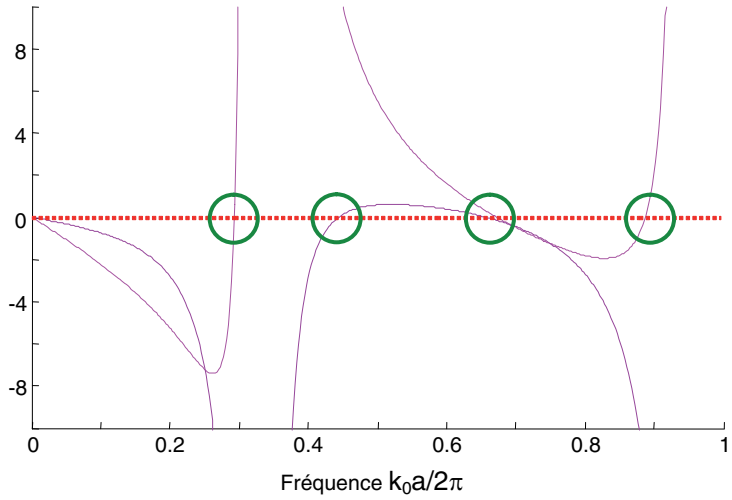


FIG. 1.17 – Fréquences du défaut

Deux fréquences sont relativement proches et difficiles à distinguer sur la figure 1.17 et une fréquence est située en haut de la première bande interdite. Ces fréquences ne sont pas visibles sur la courbe de transmission. Comme la transmission est élevée à ces fréquences, les pics des défauts sont noyés dans le signal. Si on augmentait le nombre de couches, les pics de ces défauts apparaîtraient. Les fréquences de défauts restantes correspondent bien aux pics de transmission observés.

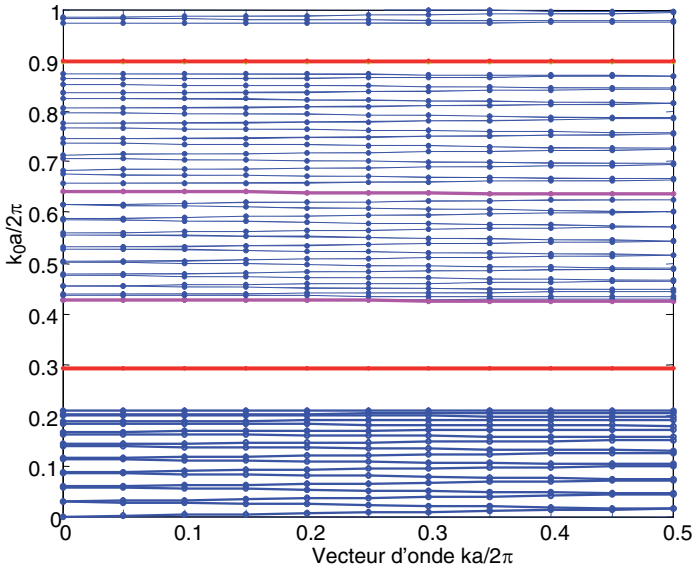


FIG. 1.18 – Diagramme de bande d'un CPh 1D moins une couche diélectrique

Pour confirmer nos résultats et comprendre plus en profondeur les modes de défauts, on trace le diagramme de bande (figure 1.18). Les états de chaque défaut sont constants en fréquence, quelque soit le vecteur d'onde. Les modes de défauts invisibles sur la courbe de transmission apparaissent sur le diagramme de bande.

Nous avons étudié jusqu'ici un CPh avec une lacune *i.e.* un accepteur. Nous allons comparer cette structure à un CPh qui a une plaque diélectrique supplémentaire. La transmission de cette structure (figure 1.19) nous indique que les BIPs sont situées aux mêmes fréquences que la structure précédente. Les courbes de transmission des deux structures sont relativement similaires sauf au niveau des modes de défauts, leurs fréquences diffèrent. Si on visualise le champ électrique du premier mode de défaut, on s'aperçoit que la distribution de champ est très différente au niveau de la cavité. On vérifie ici aussi que le champ est évanescent.

Nous allons comparer ce dernier défaut à un défaut donneur *i.e.* un CPh dont une couche d'air est remplacée par une plaque diélectrique supplémentaire (figure 1.20). Il existe davantage de modes attribués au défaut donneur qu'aux défauts précédents. La courbe de transmission du CPh et les courbes des parties réelle et imaginaire du vecteur de Bloch sont en adéquation (figure 1.20). La distribution de champ de deux modes de défauts n'est pas la même dans le CPh. Les minima et les maxi sont situés au niveau du défaut pour un mode défaut. La parités des deux modes diffèrent aussi, le premier mode est antisymétrique et le second est symétrique.

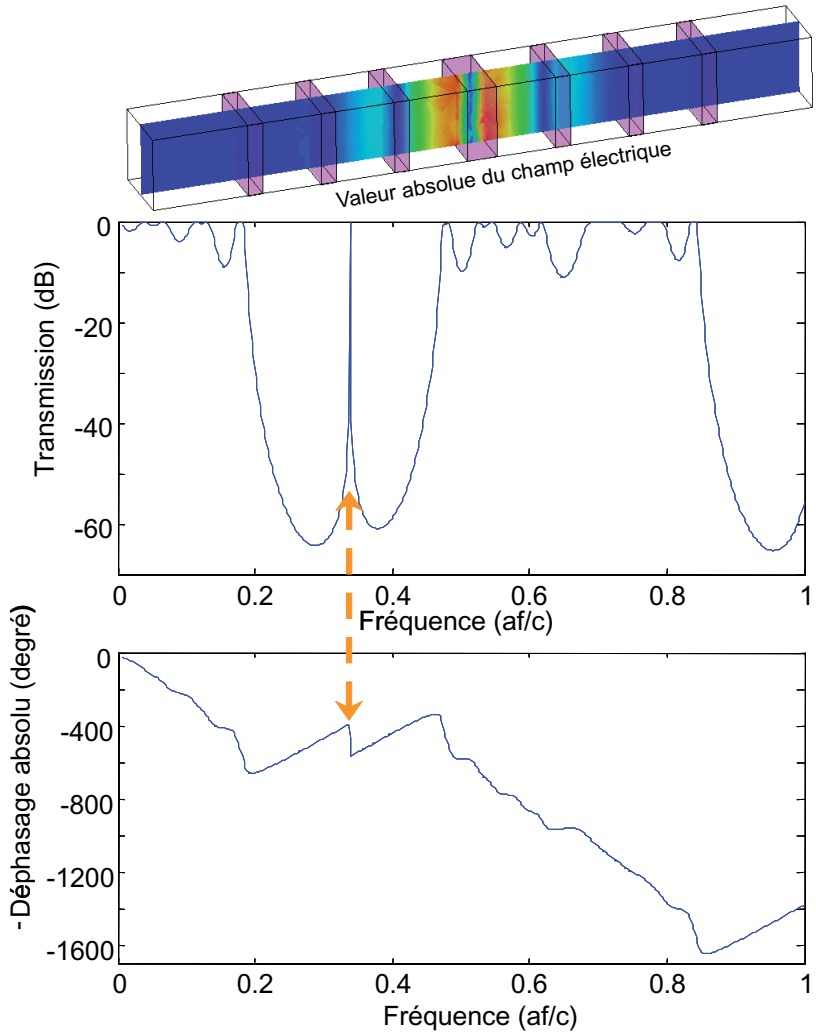


FIG. 1.19 – Etude d'un CPh ayant une couche diélectrique supplémentaire et visualisation du champ électrique au niveau du défaut

Des modes localisés apparaissent dans les CPhs finis à la jonction entre l'air et le CPh. Ces modes localisés n'existent pas en incidence normale. Pour des incidences obliques (off-plane), nous devons prendre en compte :

- la polarisation transverse magnétique (TM), appelée aussi polarisation P, le champ électrique est dans le plan d'incidence Π ($E_{\perp/\Pi} = 0, H_{\parallel/\Pi} = 0$), et
- la polarisation transverse électrique (TE), appelée aussi polarisation S, le champ électrique est perpendiculaire au plan d'incidence Π ($E_{\parallel/\Pi} = 0, H_{\perp/\Pi} = 0$).

Le diagramme de dispersion met en lumière les différents modes qui se propagent dans un CPh fini. Le diagramme de bande du CPh fini est la somme du diagramme d'une couche et du CPh infini. Le diagramme de dispersion d'une couche uniforme est séparé entre un continuum

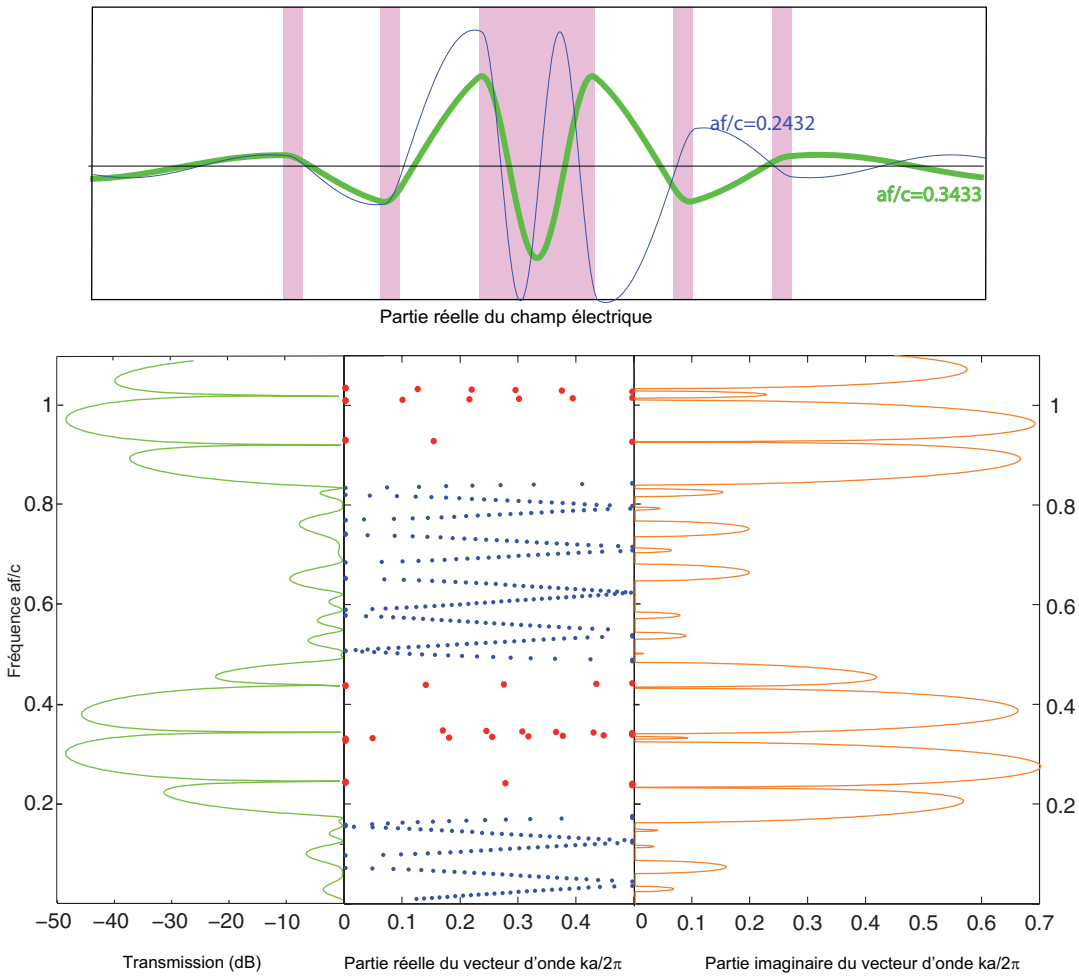


FIG. 1.20 – Etude d'un CPh dont une couche d'air est remplacée par une couche diélectrique

d'états propagatifs et des états évanescents en z dont certains sont guidés (figure 1.21). Le CPh 1D infini est composé d'un continuum d'états propagatifs et évanescents. Le CPh fini est plongé dans l'air. Les modes du CPh fini gardent le caractère propagatif et évanescent du matériau uniforme et du CPh infini. Les modes radiatifs du CPh fini se trouvent à la réunion du cône de lumière et des bandes propagatives du CPh infini. Des modes de surfaces (SEW) existent à la jonction de l'air et du CPh [14]. Ce sont les parties non coloriées de la structure de bande. Plus le mode est proche des états radiatifs du CPh, moins le mode est localisé (figure 1.21). Quelques dispositifs mettent à profit ces modes mais pour la plupart, comme par exemple dans le cas du miroir omnidirectionnel, ces modes ne doivent pas être activés.

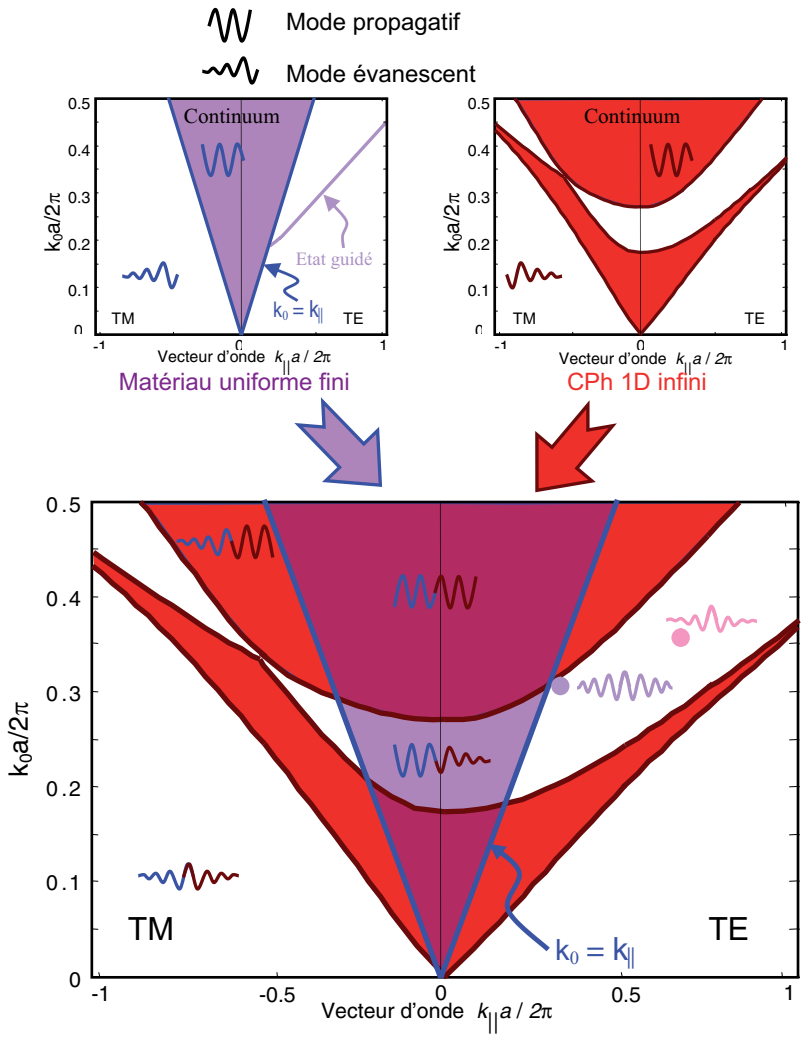


FIG. 1.21 – CPh 1D fini, état de surface

1.3.3 Le miroir omnidirectionnel

Le CPh 1D n'a pas de bande interdite 3D complète. Il existe toujours des modes de propagation selon certains angles d'incidences. Par contre, il est possible d'obtenir une réflexion externe omnidirectionnelle pour une certaine bande de fréquence [15, 16]. Il ne faut pas confondre la réflexion externe complète et la bande interdite complète. Un gap complet exige une réflexion externe et interne complète. Il existe encore des modes dans la réflexion externe complète mais ils sont plus difficiles à coupler. Pour obtenir une réflexion externe omnidirectionnelle, on combine deux procédés différents (figure 1.22).

Lors de l'étude d'une couche, nous avons précisé qu'au delà de la ligne de lumière ($k_{||} > k_0$), il n'y a plus de réfraction. Les angles au-delà de la réfraction limite ne peuvent pas être atteints

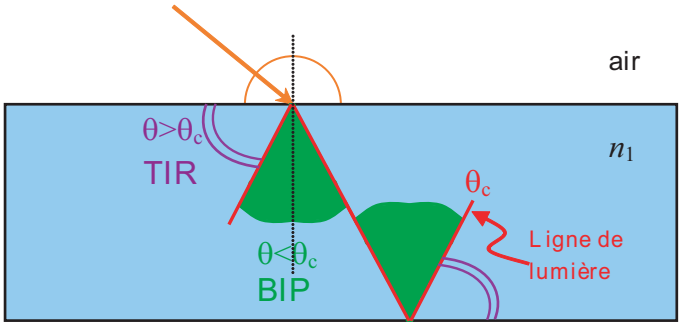


FIG. 1.22 – Procédés utilisé pour la réflexion externe omnidirectionnelle

par un faisceau incident. Cette réfraction limite peut être vue comme une TIR (Total Internal Reflection), si on inverse le sens du faisceau. Par contre au dessus de la ligne de lumière ($k_{\|} < k_0$), il y a un continuum d'états propagatifs que l'on élimine en utilisant un CPh 1D. Il est inutile d'ajouter une couche pour obtenir la TIR, la première couche du CPh joue ce rôle. En choisissant correctement les épaisseurs et les indices, on obtient une réflexion quelque soit l'angle d'indice, en prenant en compte les deux polarisations TE et TM (figure 1.23).

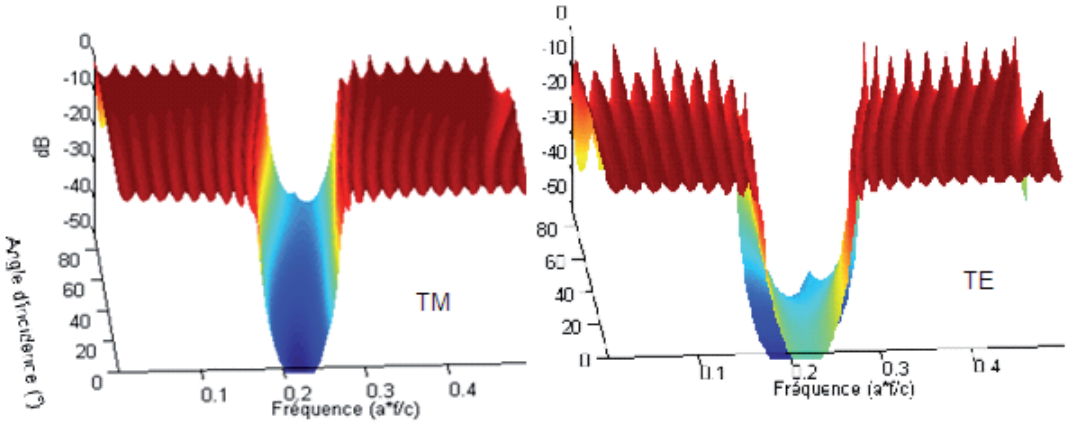


FIG. 1.23 – Transmission d'un miroir de Bragg d'indice $n_1 = 1.7$ et $n_2 = 3.4$

Le tracé du diagramme de dispersion nécessite la résolution de l'équation suivante [17] :

$$\begin{aligned}
&\frac{1+\Lambda}{2}\cos\left(k_{z,1}h_1 + k_{z,2}h_2\right) + \frac{1-\Lambda}{2}\cos\left(k_{z,1}h_1 - k_{z,2}h_2\right) + 1 = 0 \\
&k_{z,\alpha}^2 = n_\alpha^2 k_0^2 - k_{\|}^2 \qquad (\alpha = 1,2) \\
&\Lambda = \begin{cases} \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{k_{z,2}}{k_{z,1}} + \dfrac{k_{z,1}}{k_{z,2}}\right) & \text{(polarisation TE)} \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{n_1^2 k_{z,2}}{n_2^2 k_{z,1}} + \dfrac{n_2^2 k_{z,1}}{n_1^2 k_{z,2}}\right) & \text{(polarisation TM)} \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.30}$$

Sur la figure 1.24, nous avons représenté le diagramme de dispersion de l'exemple précédent

pour les deux polarisations. Une bande interdite photonique existe jusqu'à la ligne de lumière. Au-delà de la ligne de lumière, la TIR de la première couche prend le relais. L'angle de Brewster se situe à la jonction entre la deuxième et la troisième bande. L'angle de Brewster doit être au-delà de la ligne de lumière pour créer un gap.

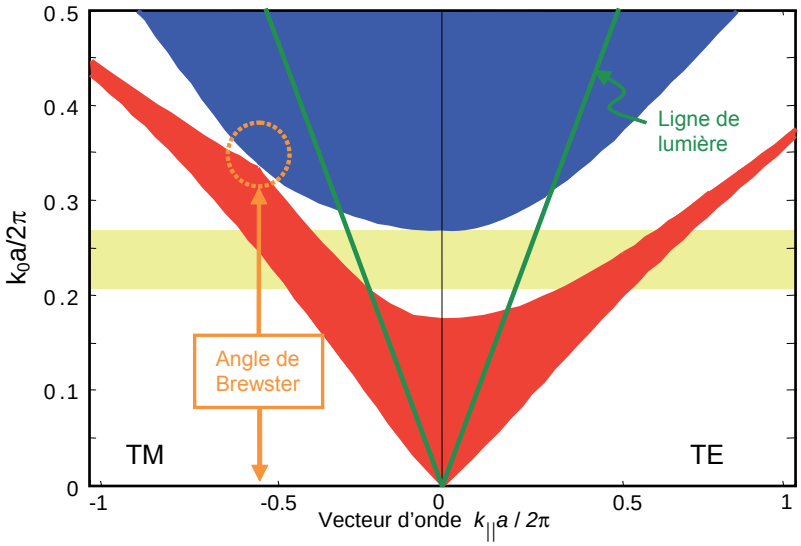


FIG. 1.24 – Structure de bande du miroir de Bragg d'indice $n_1 = 1.7$ et $n_2 = 3.4$

Un minimum d'indice ou de ratio d'indices est requis pour avoir une réflexion omnidirectionnelle. La figure 1.25, décrit pour différents indices le rapport $\Delta\omega$ entre la largeur du gap et le centre du gap.

$$\Delta\omega = \frac{\omega_2 - \omega_1}{1/2\,(\omega_2 + \omega_1)} \tag{1.31}$$

Pour un indice ou des ratios d'indices relativement faibles, il existe une réflexion omnidirectionnelle. L'absence de bande interdite complète et la finitude du CPh ont des conséquences physiques, l'existence d'états au-delà de la ligne de lumière. Ces états sont évanescents dans l'air et ils sont pour la plupart propagatifs dans le CPh. Si un tel état est lancé dans le CPh, il se propage jusqu'aux limites du CPh et est réfléchi comme une réflexion totale interne (TIR). Pour ne pas exciter ces états, il faut éviter de coupler des états évanescents de l'air avec des états dans le CPh, par exemple en s'éloignant de la source du matériau par un espaceur d'indice faible.

Nous avons obtenu une réflexion externe omnidirectionnelle grâce à un simple miroir de Bragg. On parle de réflexion *externe* pour les milieux ambiants à faibles indices comme l'air. Pour les réflexions dans les forts indices comme un semi-conducteur, la réflexion est qualifiée

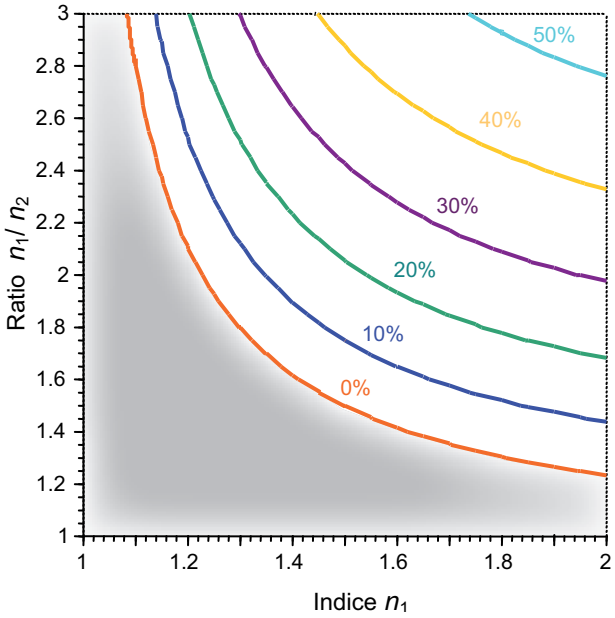


FIG. 1.25 – Contours de la réflexion omnidirectionnelle en $\Delta\omega$

d'*interne*. La réflexion interne omnidirectionnelle utilise les mêmes dispositifs (figure 1.26) :

- une couche pour la réflexion totale interne au-delà de la ligne de lumière,
- un CPh 1D au dessus de la ligne de lumière.

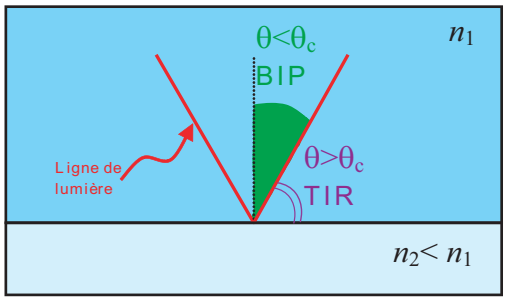


FIG. 1.26 – Procédés utilisé pour la réflexion interne omnidirectionnelle

La première couche du CPh ne pourra être utilisée pour la TIR. On doit ajouter une couche de faible indice (figure 1.27). Cette couche doit être suffisamment épaisse pour éliminer les modes évanescents et obtenir un bon TIR.

Au lieu d'utiliser de simples CPhs 1D dans les réflexions omnidirectionnelles, on peut réaliser une gradation dans la périodicité des couches [18]. Selon les gradations choisies, soit ce procédé diminue le contraste d'indice nécessaire, soit il améliore la bande en fréquence.

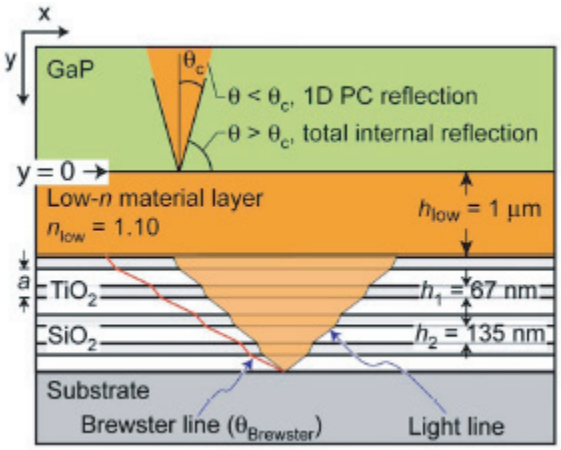


FIG. 1.27 – Dispositif réel [17]

1.4 Cristaux photoniques bidimensionnels

Nous avons vu que les cristaux photoniques 1D peuvent, à une fréquence donnée, empêcher l'ensemble des modes radiatifs de pénétrer quelque soit l'angle d'incidence. Par contre, certains modes évanescents peuvent encore pénétrer et se propager dans le CPh. La solution pour éliminer l'ensemble des modes est l'utilisation de structures périodiques tridimensionnelles. Cependant ces structures étant très difficiles à fabriquer, beaucoup d'études se sont portées sur les structures bidimensionnelles, plus faciles à fabriquer, et qui peuvent présenter des gaps photoniques complets sur un plan. Les CPhs 2D sont le plus souvent composés de tiges parallèles arrangées en un réseau carré, triangulaire, hexagonal, etc... Les propriétés dispersives des CPhs 2D dépendent bien évidement de ces arrangements.

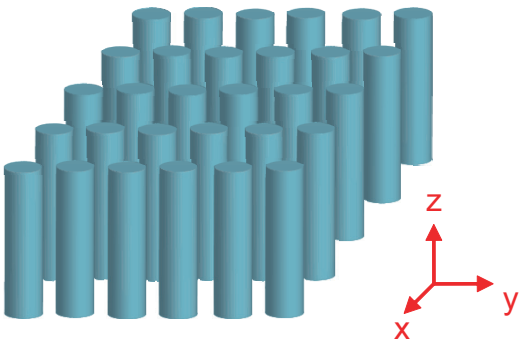


FIG. 1.28 – CPh 2D

La figure 1.28 représente une de ces structures. Il s'agit d'un réseau carré de tiges diélectriques plongées dans l'air. Le matériau inverse *i.e.* un matériau diélectrique percé par des trous

cylindriques réalise aussi un CPh 2D.

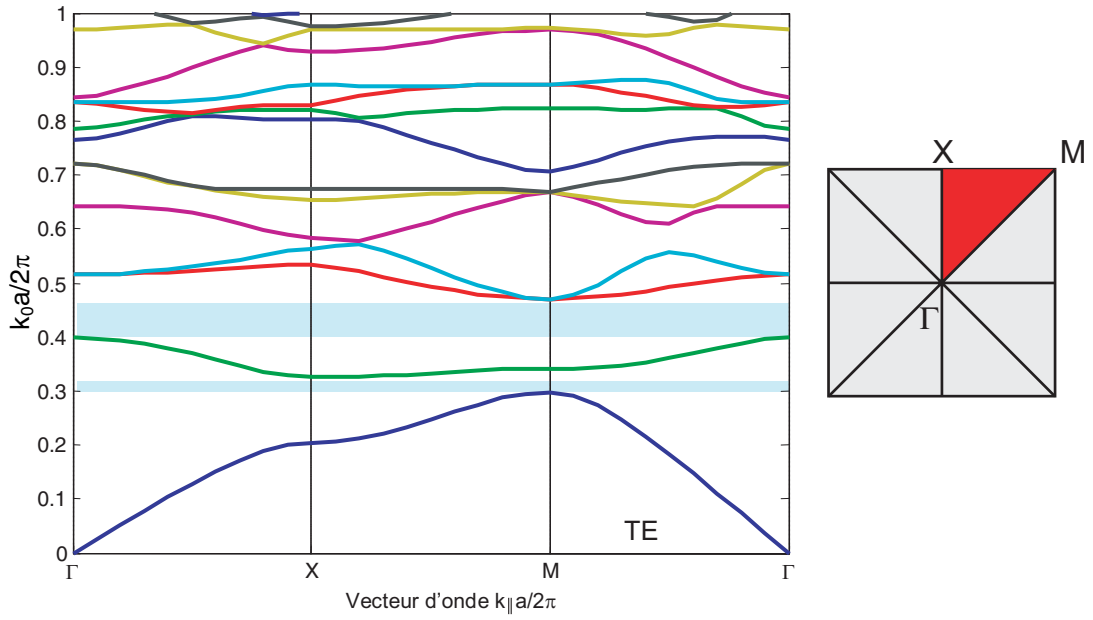


FIG. 1.29 – CPh 2D carré inverse de permittivité 13 et de rayon normalisé 0.45

La figure 1.29 représente le diagramme de bande en ΓXMΓ d'un réseau carré inverse. Ce réseau a une bande interdite "complète" pour chaque polarisation prise indépendamment. Mais les bandes interdites des deux polarisations ne se chevauchent pas. En 1992, deux équipes ont proposé indépendamment plusieurs solutions pour résoudre ce problème.

Villeneuve et Piché ont résolu l'équation d'onde 2D en **E** et ils ont obtenu une bande interdite complète pour le réseau carré inverse et le réseau triangulaire inverse [19]. Pour obtenir une bande interdite complète dans notre exemple, il suffisait d'augmenter l'indice du matériau et le rayon des cylindres.

Robert D. Meade et *al* ont résolu l'équation d'onde 2D en **H** [20]. Ils ont démontré que la structure triangulaire inverse a une bande interdite complète. La première zone de Brillouin du réseau triangulaire est un hexagone alors que pour le réseau carré, c'est un carré. Si la zone de Brillouin se rapproche d'un disque comme l'hexagone, les différents vecteurs d'onde du plan produisent une répartition des champs plus ou moins proches. Les vecteurs d'ondes éloignés de Γ où il était difficile de paramétrer les bandes se comportent comme les premiers vecteurs d'ondes du diagramme de bande. Cette similitude entre les comportements des vecteurs d'ondes simplifie énormément l'obtention d'une bande interdite complète pour les deux polarisations.

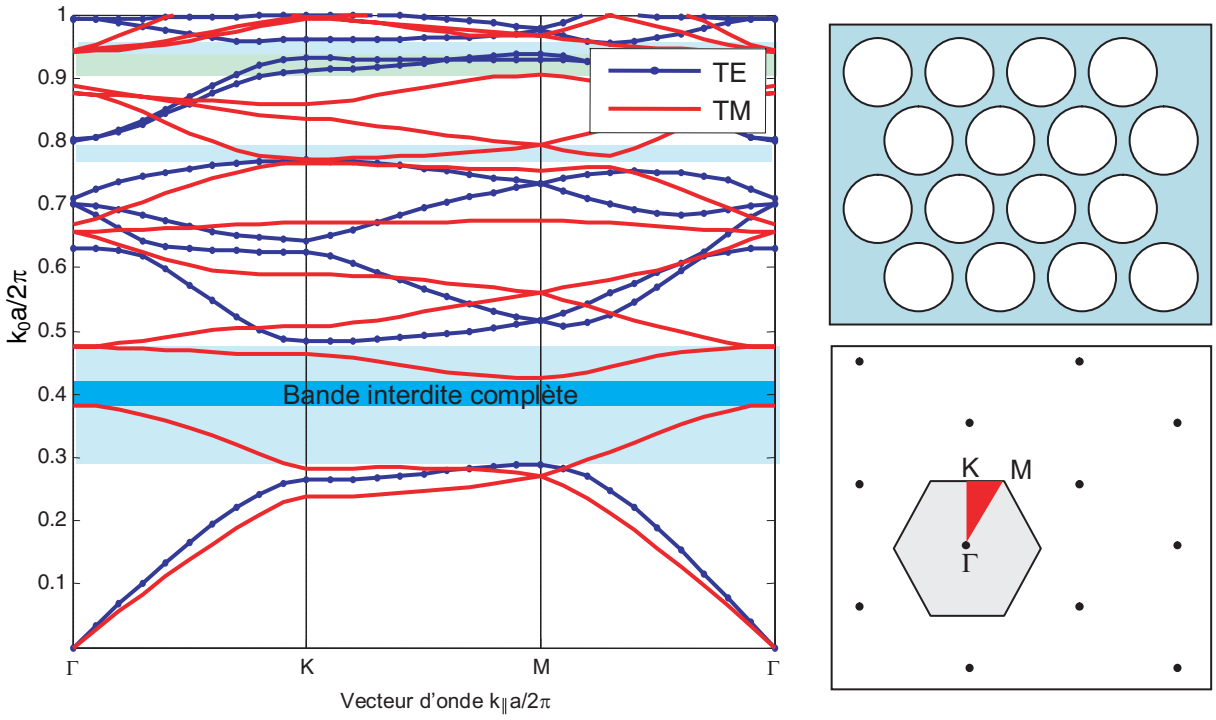


FIG. 1.30 – CPh 2D triangulaire inverse de permittivité 13 et de rayon normalisé 0.45

Pour les mêmes rayons et indices des cylindres que la structure carré, la structure triangulaire a une bande interdite complète (figure 1.30). Il est plus difficile d'avoir une bande interdite complète pour un réseau carré qui a une zone de Brillouin relativement différente du disque. La bande interdite du réseau triangulaire peut être étendue en augmentant l'indice ou le rayon des cylindres. Par contre, si on remplace les cylindres à sections circulaires par des cylindres à section carrée la bande interdite diminue [21]. La diminution de symétrie des cylindres en est la cause. Parfois, il peut être intéressant de supprimer quelques symétries pour lever une dégénérescence. Ainsi, un réseau carré composé d'un mélange ordonné de cylindre carré et circulaire améliore la largeur de la bande interdite [22].

1.4.1 Défauts

Nous avons vu que lorsque nous introduisons dans le CPh 1D un défaut, de nouveaux modes apparaissent dans la bande interdite. C'est le cas ici aussi. Les défauts peuvent être localisés ou étendus à toute la structure CPh. Dans un premier temps, nous allons étudier un défaut localisé *i.e.* un défaut de dimension 0.

La suppression d'une tige diélectrique dans un CPh composé de tiges plongées dans l'air

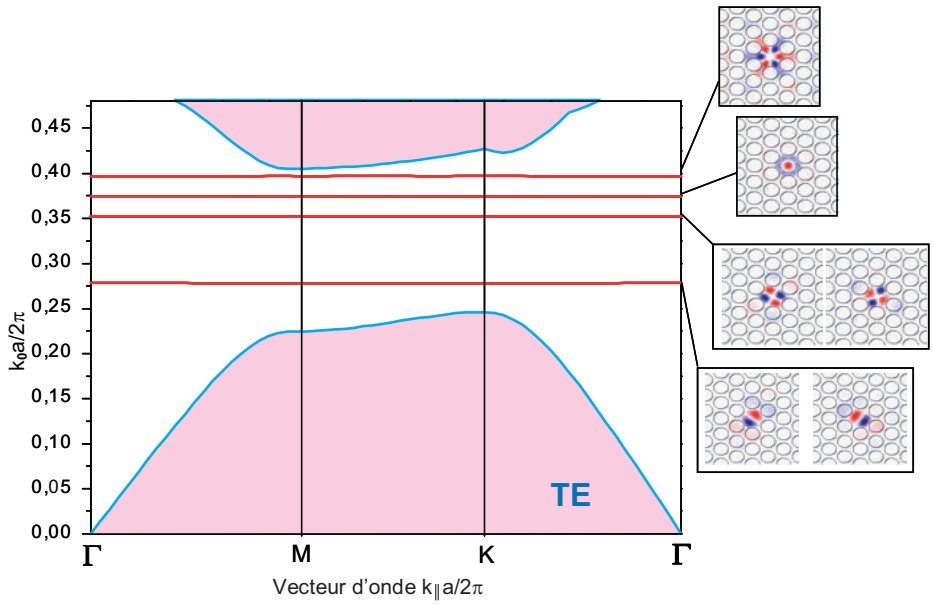


FIG. 1.31 – Diagramme de dispersion d'un CPh avec un défaut 0D

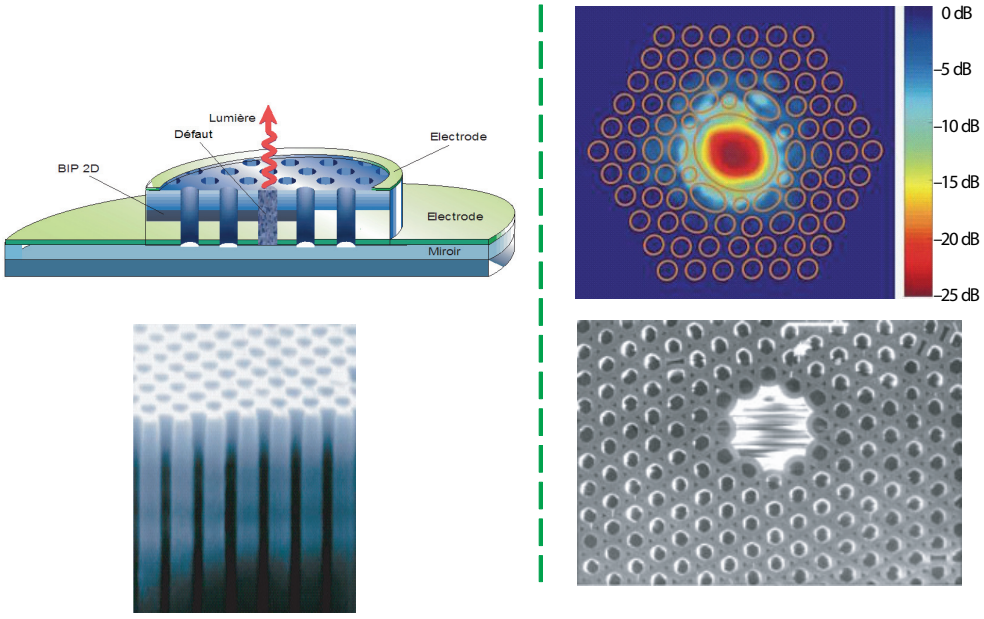


FIG. 1.32 – Diode Laser et fibre optique [23, 24]

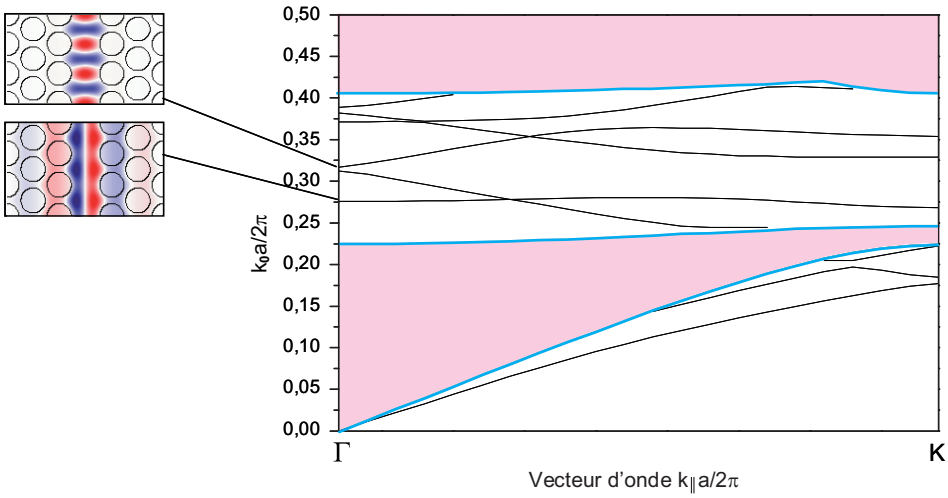
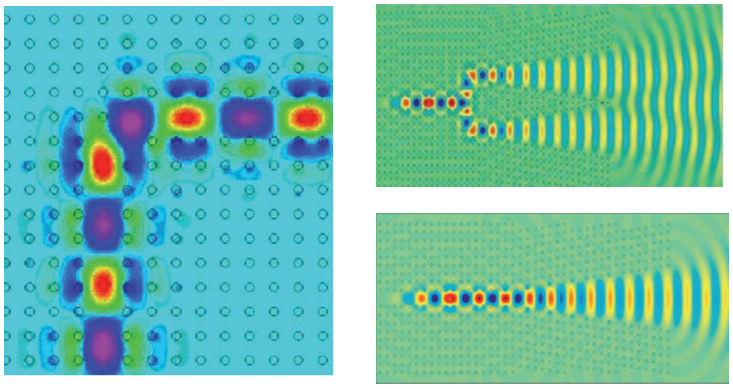
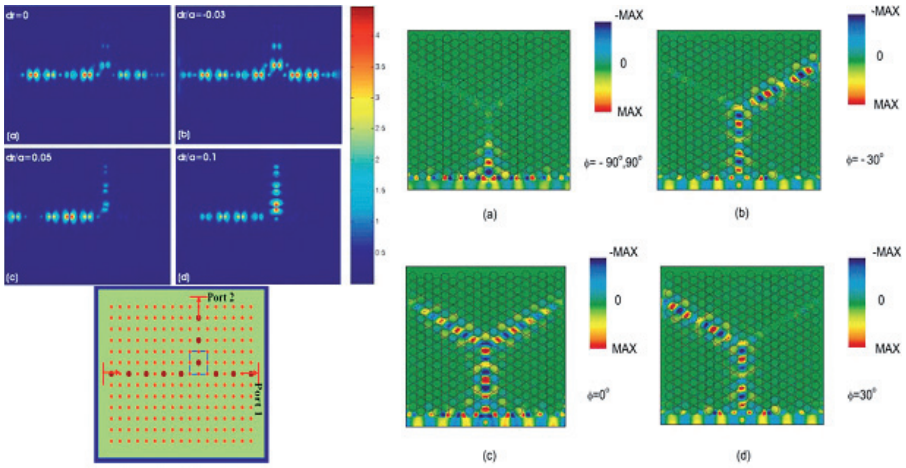


FIG. 1.33 – Diagramme de dispersion d'un CPh avec un défaut 1D



(a) Modélisation d'un guide 90° et d'un cornet [25]



(b) Jonction T et Y commandables [26, 27]

FIG. 1.34 – Exemples de réalisations de défauts 1D à partir de CPh 2D

forme une microcavité bidimensionnelle. Dans cette cavité, seuls certains modes peuvent exister avec des répartitions de champs bien spécifiques. Ces modes sont confinés dans le défaut (figure 1.31). Ce confinement de la lumière dans le défaut a été mis à profit pour réaliser des diodes LASER et des fibres optiques (figure 1.32). Le seuil en courant de ces diodes Laser est encore élevé 300 μA contre 40 μA pour les dispositifs classiques actuels. L'amélioration de la technologie, laisse espérer atteindre des seuils de 1μA.

Un défaut étendu dans un CPh 2D est un défaut de dimension 1 ou 2. Il s'agit de défauts qui ont une extension dans une ou plusieurs directions de la périodicité du cristal d'origine. L'exemple typique est une rangée de trous supprimée dans la direction ΓK dans un CPh 2D de type réseau triangulaire de trous. Ce type de défaut est appelé guide W1 (W pour waveguide et 1 pour la largeur du guide). La figure 1.33 représente le diagramme de dispersion de ce défaut. Les modes peuvent être séparés en modes pairs et impairs selon leur symétrie par rapport à l'axe du guide.

Ces défauts étendus sont très intéressants pour réaliser des guides d'ondes rectilignes, à 45°, à 90°... Les guides peuvent être évasé pour obtenir des cornets (figure 1.34(a)). Si on incorpore dans le guide un matériau dont la permittivité est commandable, on peut obtenir des jonctions de guide T et Y ajustables (figure 1.34(b)).

1.4.2 CPhs 2.5D

Dans la réalité, les CPhs 2D ont une taille finie dans la direction parallèle à l'axe des trous. Pour que le champ électromagnétique soit aussi confiné dans cette direction, le CPh 2D peut être associé à un guide planaire à saut d'indice. On appelle ces structures des CPhs 2.5D.

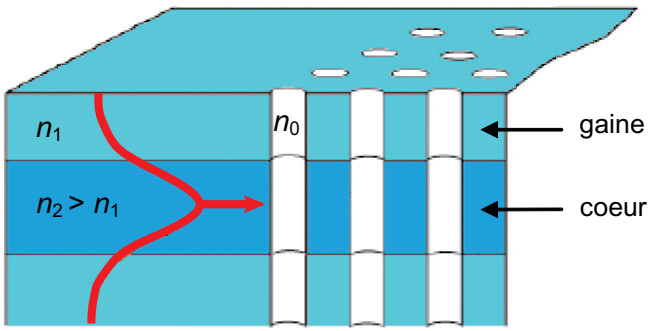


Fig. 1.35 – Exemple de CPh 2.5D

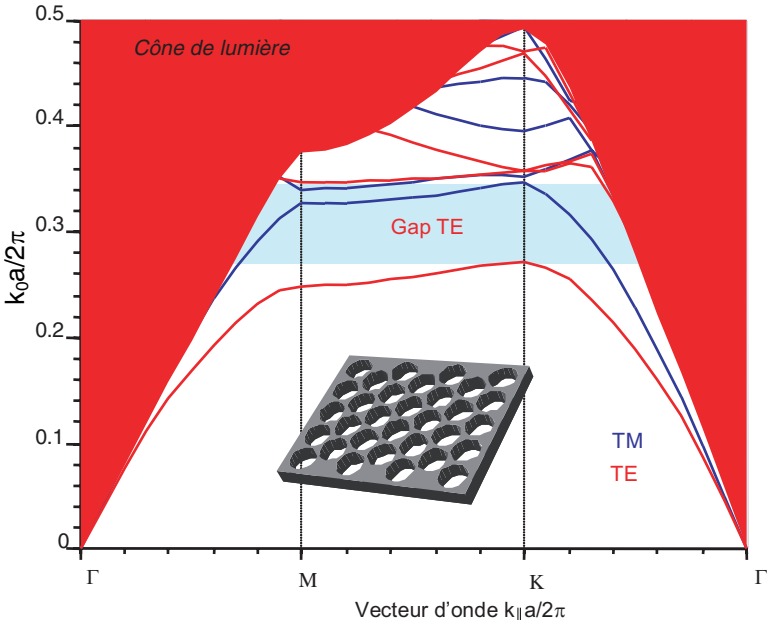
La figure 1.35 représente un exemple de CPh 2.5D. Il s'agit d'un réseau de trous cylindriques percé à l'intérieur d'un guide d'onde à saut d'indice défini par l'empilement des couches d'indices n_1, n_2 et n_1. Les modes pouvant se coupler aux modes radiatifs du guide d'onde, ne sont pas totalement confinés dans le guide d'onde. Dans ce genre de structure, le guidage dans la direction verticale est assuré par TIR.
La constante de propagation des modes guidés $k_{||}$ est supérieure à $n_1 k_0$ (n_1 indice de la gaine du guide planaire). Ces modes guidés se trouvent sous le cône de lumière du matériau d'indice n_1. La figure 1.36 représente le diagramme de dispersion d'un CPh 2.5D avec comme indice n_1 l'air.

Des modes quasi-guidés apparaissent au dessus du cône de lumière. L'onde provenant de la gaine d'indice n_1 traverse le coeur du guide en se réfléchissant sur les interfaces gaine/coeur et coeur/gaine puis se propage dans l'autre gaine jusqu'à l'infini. Ces modes ne sont pas visibles sur le diagramme de dispersion précédent. Ils sont noyés dans le continuum d'états. Le CPh inversé de la figure 1.36(a) permet d'obtenir une bande interdite complète que pour la polarisation TE. Si on choisit un CPh non inversé, on obtient un gap TM (figure 1.36(b)). Comme dans le cas 1D, on obtient une réflexion omnidirectionnelle pour chaque polarisation indépendamment. On obtient un gap complet pour les deux polarisations pour des angles d'incidences jusqu'à 85° en dehors du plan d'incidence [28]. Pour obtenir une bande interdite tridimensionnelle, il est donc nécessaire d'utiliser des structures qui ont une périodicité supplémentaire.

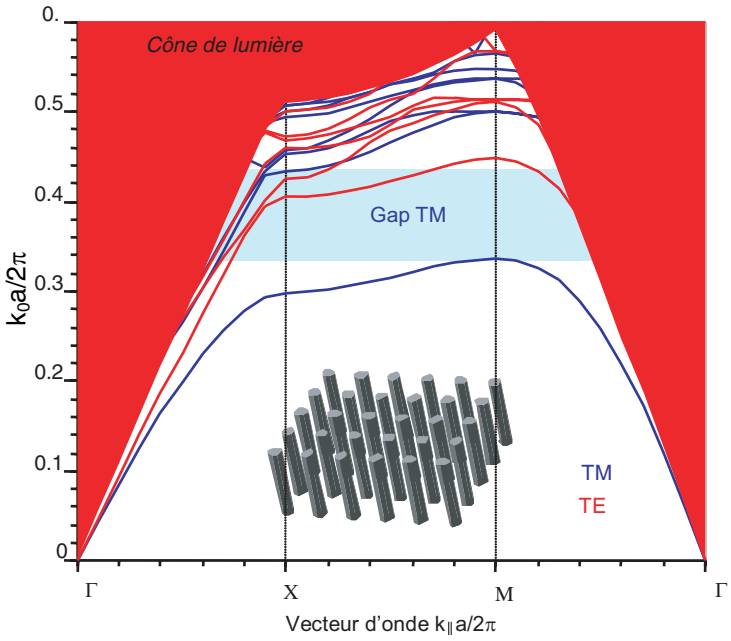
1.5 Cristaux photoniques tridimensionnels

1.5.1 Historique

L'avancée dans les cristaux photoniques tridimensionnels se comprend aisément au travers d'un historique. Avant la création du terme de cristaux photoniques en 1987, l'interaction entre une onde électromagnétique et les structures diélectriques tridimensionnelles avait déjà été étudiée. En 1915, le physicien William Laurence Bragg reçut le prix Nobel pour récompenser ses travaux sur la diffraction des rayons X par les cristaux. De ces observations, on a hérité des célèbres miroirs de Bragg précédemment cités. Au milieu du siècle dernier, des microsphères de polystyrène de diamètres proche de la longueur d'onde optique ont été commercialisées. Des analyses structurelles et des expériences de diffraction ont été réalisées sur



(a) $\varepsilon_r = 12$, $r = 0.3a$, $h = 0.5a$



(b) $\varepsilon_r = 12$, $r = 0.2a$, $h = 2a$

FIG. 1.36 – Diagramme de dispersion de deux CPh 2.5D [MIT]

des colloïdes formés par ces microsphères. Les résultats ont été attribués à la réflexion de Bragg de la lumière visible.

En mai 1979, Ohtaka a publié une théorie dynamique de la diffraction de la lumière visible et ultraviolette. Le but était de modéliser l'interaction de la lumière avec un système diélectrique composé de sphères identiques ordonnées en un réseau tridimensionnel. Elle prend en compte la nature vectorielle de l'équation de Helmholtz. Les équations présentées sont une extension du modèle de Mie par une application aux photons de la méthode de Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) et de la formulation de la diffraction électronique faible énergie (LEED). Ces deux derniers outils sont largement utilisés dans le calcul des bandes d'énergie des semiconducteurs. Ohtaka a adapté aux structures 3D les concepts de la physique du solide comme les bandes d'énergie, la densité d'états et les états localisés.

Les potentialités des cristaux photoniques ont été décrites pour la première fois par Eli Yablonovitch et Sajeev John en 1987. Eli Yablonovitch a proposé d'étendre le résonateur Fabry-Pérot utilisé pour les lasers semiconducteurs de une à trois dimensions. Il a proposé d'utiliser une structure cubique face centré (CFC) pour interdire une bande de fréquence. Cela permettrait de diminuer fortement l'émission spontanée et donc le seuil du laser. Cette idée peut être aussi utilisée dans les transistors bipolaires à hétérojonctions pour minimiser la recombinaison électron-trou dans la base. L'application de la suppression de l'émission spontanée est limitée au cas des faibles dopages de la base. Pour les forts dopages, la recombinaison non radiative de Auger devient prédominante. Sajeev John a proposé une structure CFC pour localiser l'onde électromagnétique. Cette structure, en effet, est celle qui se rapproche le plus de la zone de Brillouin sphérique pour laquelle l'ensemble des directions sont équivalentes. Les énergies interdites sont positionnées aux mêmes endroits.

En 1988, John montre théoriquement par la méthode scalaire KKR que la structure CFC à une bande interdite complète entre la deuxième et la troisième bande [29]. Un an plus tard, Yablonovitch construit des structures CFC à partir de billes d'Al_2O_3 d'indice 3.06 [30]. Il trouve une bande interdite expérimentale plus étroite que celle montré théoriquement et le comportement du point W pose problème. En 1990, l'équipe de Satpathy [31] et l'équipe de Leung [32] confirment par la méthode des ondes planes scalaire (PWM) l'existence de la bande interdite complète. Quelques mois plus tard, ces deux équipes améliorent leurs méthodes pour obtenir les PWM vectorielles en **D** et en **E** [33, 34]. Les deux méthodes sont en excellent accord. Ils trouvent que la structure CFC n'a pas de bandes interdites complètes

à cause de la dégénérescence des points W et U. Au vu de ces résultats, l'éditeur du célèbre journal Nature écrit *"Photonic Crystals bite the dust"* [35]. Mais deux semaines avant cette article, l'équipe de Ho, Chan et Soukoulis [36] a crée la PWM vectorielle en **H** et confirme la non existence de la bande interdite de la structure CFC et surtout démontre l'existence d'une bande interdite complète dans la structure diamant. Le diamant est un CFC avec deux atomes par cellule élémentaire. Les deux atomes permettent de lever la dégénérescence en W. Yablonovitch ayant pris connaissance de ce résultat, proposa quelques mois plus tard une structure CFC avec des atomes non sphériques à bande interdite complète facilement réalisable [37]. Elle a été construite pour la gamme de fréquence micro-onde par perçage d'un bloc de plexiglas selon trois angles différents de 35,26° par rapport à la verticale (figure 1.37). La structure est très proche d'une structure diamant.

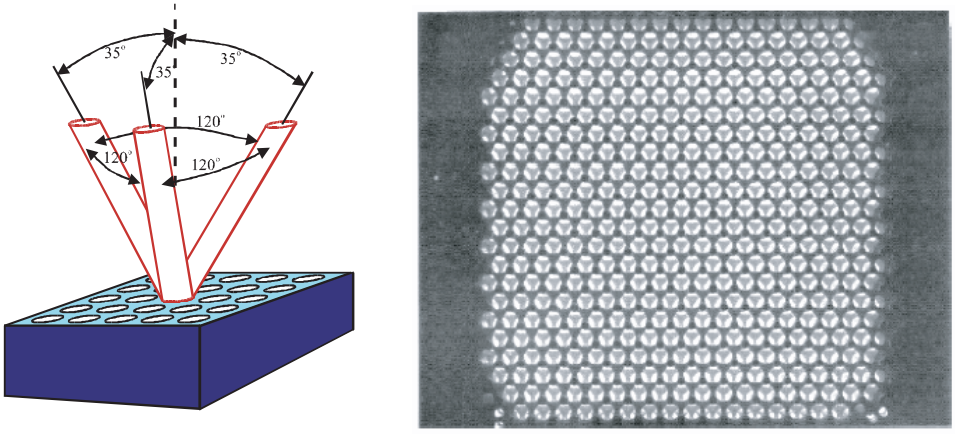


Fig. 1.37 – Photographie de la Yablonovite

En 1992, Sözuer *et al* [38] améliore la convergence de la PWM et ils obtiennent une bande interdite complète pour la structure CFC à un atome par maille entre la 8eme et 9eme bande. Finalement, cette structure qui a suscité temps de débats a une bande interdite complète mais pas où on l'attendait (figure 1.38).

En 1994, Deux équipes Sözuer *et al* [39] et Ho *et al* [40] ont proposé indépendamment une structure à bande interdite complète simple à réaliser. La structure est appelée tas de bois. Elle a la structure diamant et la bande interdite est entre la deuxième et troisième bande. Elle se construit couche par couche. Elle peut être construite en optique (figure 1.39). De nombreuses autres structures ont été créées ces dernières années (figure 1.40).

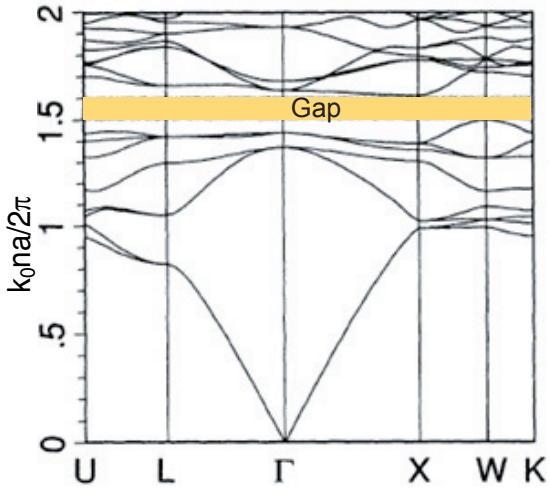


FIG. 1.38 – Bande interdite complète dans une structure CFC

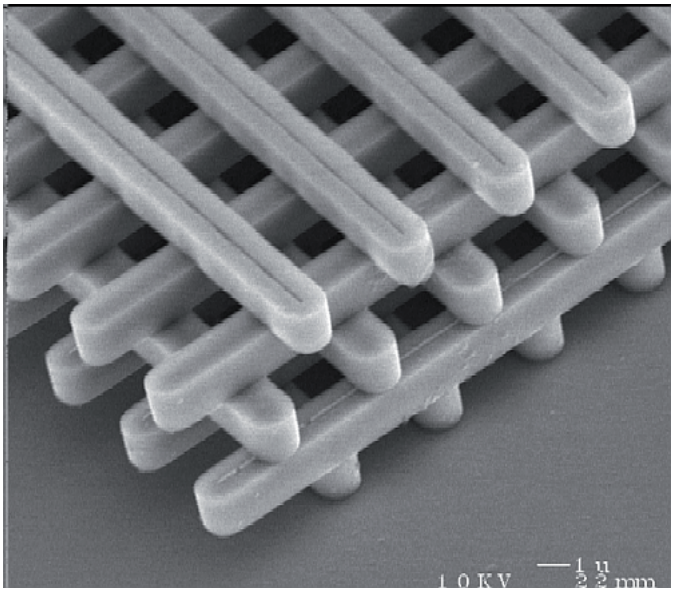


FIG. 1.39 – Structure tas de bois

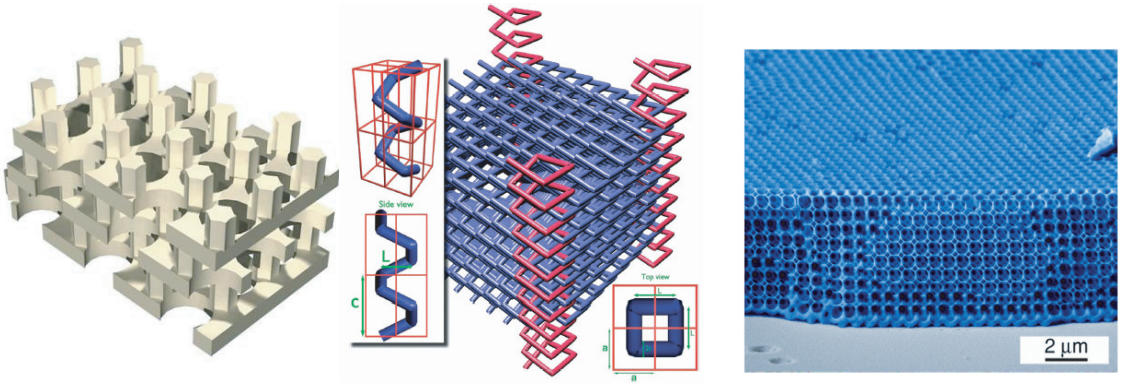


FIG. 1.40 – Diverses structures à bande interdite complète

1.5.2 Les défauts

Les défauts dans les CPhs tridimensionnels sont obtenus de la même manière que pour les CPhs 1D et 2D. Si on ajoute un élément dans le CPh, on obtient un défaut donneur ou défaut de diélectrique. Inversement si on supprime un élément, on réalise un défaut accepteur ou défaut d'air. Les défauts localisés dans les CPhs 3D permettent de localiser l'onde électromagnétique selon les trois directions de l'espace. On forme de cette manière une cavité. Cette structure présente un intérêt considérable en optique car il est impossible de réaliser des cavités métalliques faibles pertes comme en micro-onde. La figure 1.41 représente les modes localisés des deux types de défauts dans la Yablonovite.

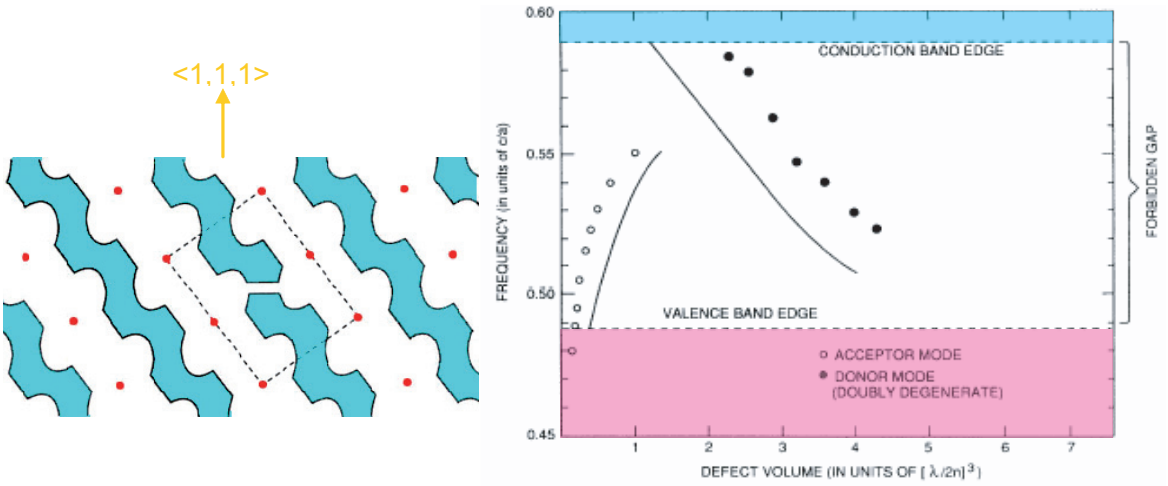


FIG. 1.41 – Défaut localisé dans la Yablonovite [41]

Comme dans le cas 1D, le degré de dégénérescence des modes donneurs est supérieur aux modes accepteurs. De plus, le défaut accepteur est centré dans la bande alors que les défauts donneurs se trouvent en bord de bande (figure 1.42).

1.6 Cristaux photoniques métalliques

Nous avons étudié dans les paragraphes précédents des cristaux photoniques composés uniquement de matériaux diélectriques. Ces CPhs diélectriques sont très bien adaptés pour les fréquences optiques car on peut négliger les problèmes dus à l'absorption. Si on remplace les matériaux diélectriques par des matériaux métalliques, on obtient des CPhs métalliques.

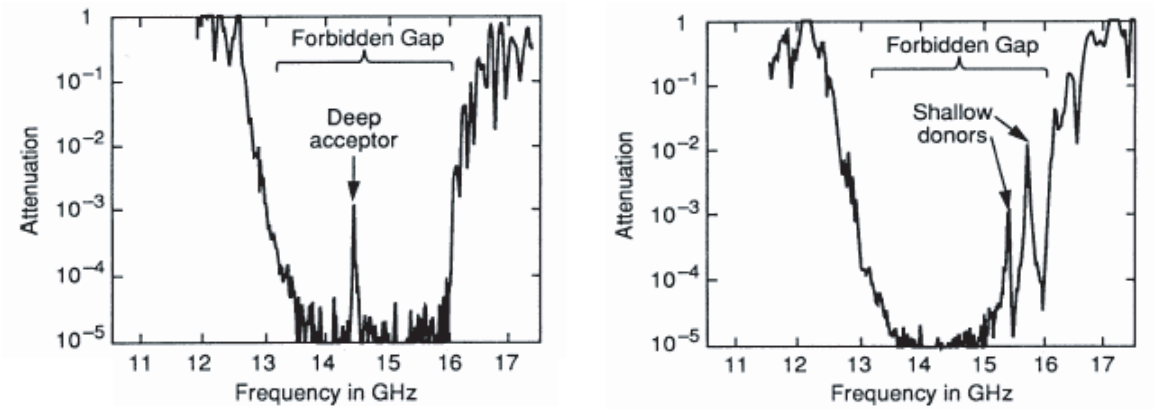


FIG. 1.42 – Transmission des défauts localisés [41]

On utilise le modèle de Drude pour exprimer la constante diélectrique du métal :

$$\begin{aligned} &\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \\ &\omega_p : \text{fréquence angulaire plasma} \\ &\gamma : \text{coefficient d'absorption} \end{aligned} \tag{1.32}$$

1.6.1 CPhs métalliques aux fréquences optiques

En utilisant le modèle précédent, on s'aperçoit d'une forte absorption du métal aux fréquences optiques. Une solution pour éviter ces pertes consiste à utiliser des plasmons de surface. Ebbesen et *al* ont montré l'existence d'une transmission optique singulière à travers un film métallique très fin percé par des trous de taille inférieure à la longueur d'onde [42]. On peut obtenir le même phénomène dans le cas d'un film métallique continu mais la transmission est très faible. Pour avoir un couplage fort entre l'onde incidente et l'excitation plasmon, le film métallique continu doit avoir une surface modulé périodiquement *i.e.* un réseau optique. Le couplage entre un champ électromagnétique oscillant et la distribution dans le métal d'une densité surfacique de charge est en fait un polariton issu d'un plasmon de surface (SPP). Ces modes SPP se propagent à l'interface entre un diélectrique et un métal. En utilisant cet effet, Barnes a proposé une structure permettant d'augmenter l'extraction de la lumière à partir d'un dispositif émetteur [43]. Il utilise un film métallique très fin pour extraire la lumière. Pour éviter les pertes dues à l'absorption, il propose d'utiliser les modes SPP. La figure 1.43 présente à partir du spectre de dissipation d'une interface diélectrique/métal, son diagramme de dispersion. Au-delà du cône de lumière, on retrouve le mode SPP. Utiliser le mode SPP peut paraître restrictif, en fait plusieurs techniques existent pour modifier sa dispersion. On

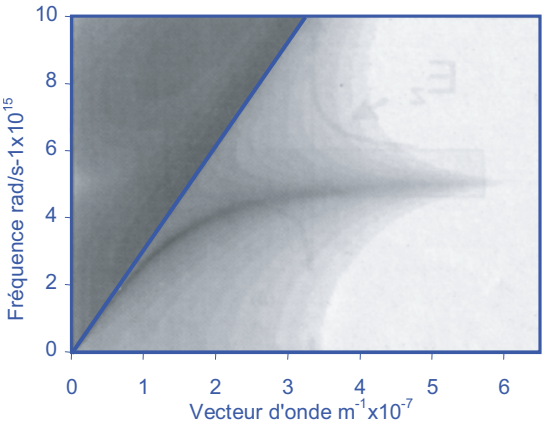


FIG. 1.43 – Spectre de dissipation de la puissance d'une interface diélectrique/métal [43]

peut par exemple corruguer le film métallique. Une autre solution consiste à utiliser plusieurs interfaces diélectrique/métal pour obtenir un couplage entre différents modes SPP.

1.6.2 CPhs métalliques aux fréquences micro-ondes

Nous avons vu comment surmonter l'absorption métallique aux fréquences optiques, maintenant nous allons changer de gamme de fréquence d'étude. Lorsque l'on diminue la fréquence et que l'on passe à la gamme micro-onde, nous sommes très loin de la fréquence plasma et la constante diélectrique s'exprime de la manière suivante :

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\sigma}{i\omega\varepsilon_0} \qquad (1.33)$$

σ : la conductivité réelle du métal

Nous allons considérer dans ce chapitre et les suivants que le métal se comporte comme un réflecteur parfait sauf mention contraire. Sur la figure 1.44, nous avons comparé deux types de CPhs qui sont composés respectivement de cylindres métalliques et de cylindres diélectriques [44]. Les cylindres sont placés dans un réseau cubique de 7 couches.

Pour la polarisation TE, les deux CPhs ont sensiblement le même comportement. La première bande interdite est située vers la fréquence normalisée 0.5. La position précise de cette bande interdite se détermine de la même façon que pour un miroir de Bragg [45, 46]. La bande interdite du CPh diélectrique est toujours décalée vers la gauche par rapport celle du CPh métallique. Cette bande interdite est plus forte dans le cas métallique. Un des avantages du CPh métallique est le moindre nombre de couches nécessaires pour obtenir la même profondeur de bande interdite que dans le cas diélectrique. A performances égales, le CPh métallique

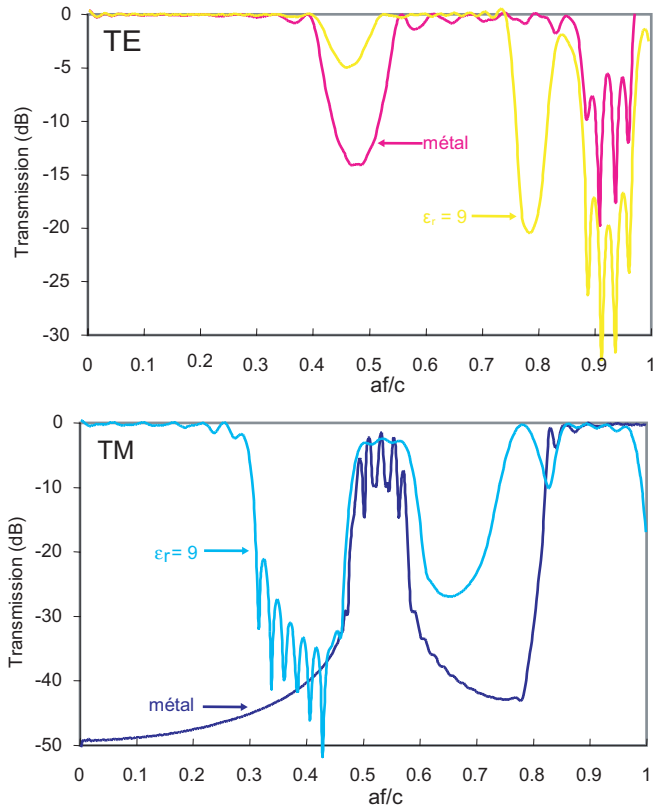


FIG. 1.44 – Comparaison des transmissions d'un CPh diélectrique et d'un CPh métal de mêmes rayons des cylindres $r = 1/6a$

est plus compact que son homologue diélectrique. Pour la polarisation TM, on obtient les courbes duales comparées à la polarisation TE. Avant et après la fréquence 0.5, on retrouve les oscillations de Fabry-Pérot dues aux interférences constructives et destructives entre les couches prises deux à deux. La seule grande différence de comportement est l'apparition de la fréquence plasma dans le cas TM métallique entre les fréquences 0.4 et 0.5. En dessous de cette fréquence plasma, le CPh métallique se comporte quasiment comme une plaque métallique parfaite. Les CPhs métalliques bidimensionnels ont donc une forte dépendance à la polarisation.

1.6.3 CPhs discrets et CPhs ultra-compacts

Dans le domaine des micro-ondes, les CPhs discrets sont connus depuis plusieurs décennies, sous le terme de ligne à obstacles [47, 48]. Ils sont réalisés à partir de lignes de transmission ou de guides d'onde périodiquement chargés. Les lignes de transmission sont étudiées à l'aide

des équations des lignes[4] (figure 1.45) :

$$\begin{aligned} \partial_z I(z) &= -jC\omega U(z) = -YU(z) \\ \partial_z U(z) &= -jL\omega I(z) = -ZI(z) \end{aligned} \tag{1.34}$$

L, C, Z et Y sont des inductances, des capacités, des impédances et des admittances linéiques.

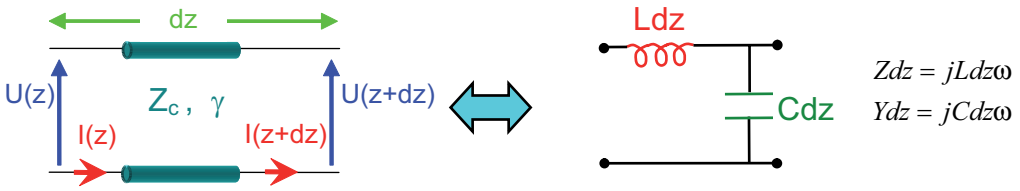


FIG. 1.45 – Ligne de transmission sans pertes

Les lignes de transmission périodiquement chargées sont découpées en n cellules élémentaires pour les étudier (figure 1.46). Les équations des lignes et les lois classiques de l'électrocinétique nous permettent de représenter une cellule élémentaire à partir d'une matrice chaîne. Il suffit de combiner les différentes matrices pour obtenir les propriétés de la ligne.

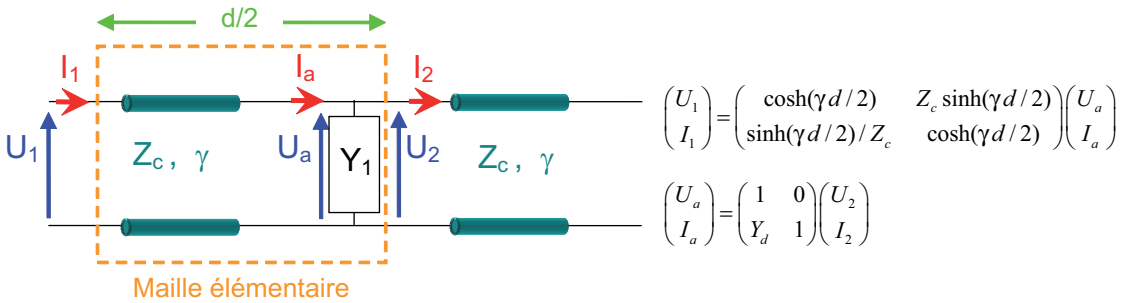


FIG. 1.46 – Étude par des matrices transferts d'une ligne de transmission sans pertes chargée périodiquement par une admittance en parallèle

En fait, nous avons déjà effectué l'étude de cette ligne dans les paragraphes précédents. Nous avions utilisé une approche légèrement différente. Si on combine les deux équations des lignes (équation 1.34), on obtient l'équation harmonique des télégraphistes :

$$\begin{aligned} \partial_z^2 U(z) &= -LC\omega^2 U(z) = ZYU(z) \\ \partial_z^2 U(z) &= \gamma^2 U(z) \end{aligned} \tag{1.35}$$

[4] On utilise ici la convention inverse $exp(j\omega t)$

Dans le cas de la ligne périodiquement chargée cette équation s'écrit :

$$\begin{aligned} \partial_z^2 U(z) &= Z(Y+Y_1)U(z) \\ \partial_z^2 U(z) &= -L(C+C_1)\omega^2 U(z) \end{aligned} \tag{1.36}$$

Cette équation est l'homologue discret de l'équation d'onde en E.

$$\partial_z^2 E(z) = -\varepsilon(z)\mu(z)\omega^2 E(z) \tag{1.37}$$

Il suffit d'effectuer les changements de variables suivants :

$$\begin{aligned} &E(z) \leftrightarrow U(z) \\ &\mu(z) \leftrightarrow L \\ &\varepsilon(z) \leftrightarrow C \\ &Z_c(z) = \sqrt{\tfrac{\mu(z)}{\varepsilon(z)}} \leftrightarrow Z_c = \sqrt{\tfrac{L}{C}} \\ &-ik \leftrightarrow \gamma \end{aligned} \tag{1.38}$$

En conséquence, nous obtiendrons des bandes interdites et des bandes passantes pour des lignes périodiquement chargées. La charge rajoutée périodiquement peut également être un tronçon de ligne.

Ces lignes sont utilisées dans le domaine du filtrage. Elles sont intéressantes aussi pour obtenir des structures à onde lente. Dans certains accélérateurs de particules et certains générateurs micro-ondes, on fait interagir un faisceau d'électron ou d'ions et une onde électromagnétique. Si on se place en bord de bande interdite, l'onde électromagnétique est considérablement ralentie ; ce qui permet d'optimiser considérablement l'interaction.

Ces lignes microstrip peuvent être généralisées au cas bidimensionnel et tridimensionnel [49]. Aux fréquences micro-ondes, les cristaux photoniques ont une taille suffisamment importante. On a diminué le nombre de couches en utilisant les CPhs métalliques. Le volume occupé peut être encore diminué en utilisant des structures appelées CPhs métalliques ultra-compacts (UCPBG). Ce sont des structures planaires aisément réalisables en technologie microstrip. Du fait de sa structure planaire, le CPh ultra-compact présente une bande interdite selon deux directions de l'espace. La période de ces structures est faible comparée à la longueur d'onde. L'idée de base de ces structures est de combiner des effets capacitifs et inductifs pour obtenir de fortes impédances de surface. La figure 1.47 représente un exemple de structure proposée par Sievenpiper [50].

Cette structure est équivalente à un circuit résonant LC parallèle. La structure se comporte différemment selon les fréquences :

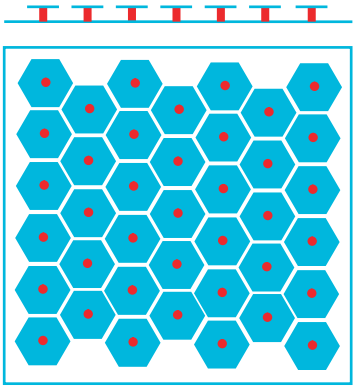


FIG. 1.47 – Vue en coupe et vue de dessus d'une surface haute impédance

- $\omega < 1/\sqrt{LC}$: Seules les modes TM sont propagatifs et la surface est inductive.
- $\omega = 1/\sqrt{LC}$: à la fréquence de résonance, l'impédance est très élevée, aucun mode ne se propage à cette fréquence.
- $\omega > 1/\sqrt{LC}$: Seules les modes TE sont propagatifs et la surface est capacitive.

En fait les différents cas sont progressifs, l'onde ne se propage pas sur une petite bande autour de la fréquence de résonance. Proche de la fréquence de résonance, le déphasage de la réflexion est nul. La surface se comporte comme un "conducteur magnétique" artificiel. Cette surface peut être mise à profit dans des applications antennaires. Si on étudie une antenne fil placée sur une plaque métallique, la plaque métallique produit une réflexion déphasée de 180° qui agit en interférence destructive avec le champ rayonné par le fil. Pour éviter cela, on place une surface haute impédance entre le fil et la plaque. Comme la surface se comporte comme un conducteur magnétique artificiel, la réflexion sur cette surface renforce le signal rayonné par l'antenne.

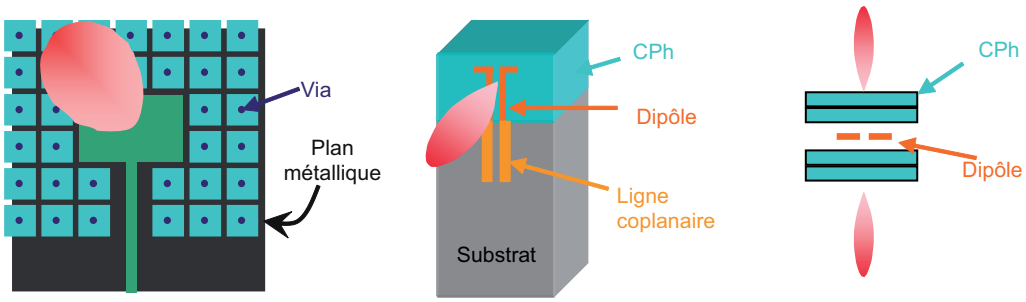


FIG. 1.48 – Exemples d'associations d'antennes patch et dipôles à un matériau CPh

Le premier schéma de la figure 1.48 représente une antenne patch classique entourée par

une surface haute impédance. La fréquence de fonctionnement de cette antenne se trouve dans la bande de fréquence interdite par la surface. Celle-ci permet de supprimer les ondes de surfaces. On obtient un meilleur diagramme de rayonnement. Il existe d'autres possibilités d'associer une antenne à un CPh [51, 52]. Dans le deuxième schéma, une antenne dipôle est associée à un CPh diélectrique classique. Si on utilise le CPh comme substrat et que l'on accorde la bande interdite et la fréquence de fonctionnement, on élimine les radiations sur une des faces du dipôle. Le dernier schéma de la figure 1.48 représente une cavité résonante formée à partir d'un CPh. Si on place à l'intérieur de la cavité une antenne dipôle, on obtient une antenne à ondes de fuites. Le CPh joue le rôle de "filtre spatial 3D". Le rayonnement de cette antenne sera beaucoup plus directif, son gain augmentera considérablement. On peut obtenir les mêmes effets si on utilise un métamatériau à indice négatif formé d'un arrangement de tiges métalliques très fines. Ces structures métalliques peuvent être mis à profit pour réaliser un plan magnétique parfait, un mur magnétique. En remplaçant les faces latérales métalliques d'un guide d'onde classique par ces murs magnétiques, on obtient un guide d'onde quasi-TEM (figure 1.49). La plage de fonctionnement de ce guide dépend de celle des murs magnétiques.

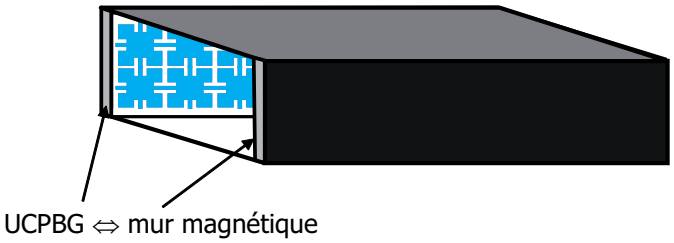


FIG. 1.49 – Guide d'onde quasi-TEM

1.7 Réfraction négative et indice de réfraction négatif

Les cristaux photoniques présentent dans certains cas bien déterminés une réfraction négative. Le terme *réfraction négative* signifie les faisceaux incidents sur la structure sont réfractés comme si l'onde traversait un matériau homogène d'indice de réfraction négatif. Avant d'aborder ces structures, nous allons étudier des structures discrètes.

1.7.1 Ligne de transmission inversée

Nous avons étudié page 43 une ligne de transmission L-C classique et une ligne de transmission périodiquement chargée. En traçant le diagramme de dispersion de cette dernière

ligne, on peut s'apercevoir que pour certaines fréquences la vitesse de groupe et la vitesse de phase sont inversées. Pour mieux comprendre, nous allons étudier une ligne inverse C-L (figure 1.50).

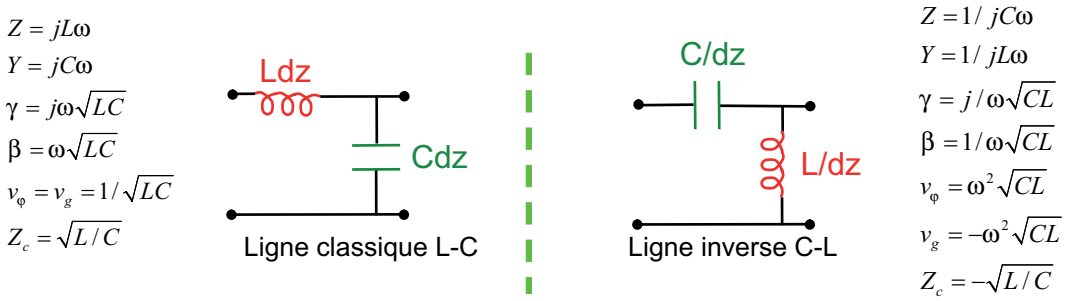


FIG. 1.50 – Comportement d'une ligne classique et d'une ligne inversée

En inversant la ligne, l'impédance $Z = jL\omega$ et l'admittance $Y = jC\omega$ deviennent respectivement $Z = 1/jC\omega$ et $Y = 1/jL\omega$. Sur le schéma de la ligne inversée, on divise l'inductance et la capacité par la longueur car ce sont les inverses de ces quantités qui s'ajoutent. La vitesse de groupe *i.e.* l'énergie ne change pas de sens de propagation dans les deux lignes. Par contre, la vitesse de phase est inversée. La vitesse de groupe et la vitesse de phase sont opposées sur la ligne C-L. Nous avons donc une inversion apparente du sens de propagation. Cela peut paraître étonnant. En fait, ce n'est pas le cas car la vitesse de phase n'a pas un sens physique aussi important que la vitesse de groupe. La vitesse de phase peut prendre des valeurs de vitesse aberrantes. La ligne de transmission C-L, tel qu'elle est décrite, n'est pas réalisable. Pour se rapprocher de cette ligne, nous allons étudier une ligne classique qui est périodiquement chargée par des capacités et des inductances (figure 1.51).

Cette ligne est simplifiée sous la forme d'une ligne L-C. L'impédance et l'admittance de la ligne ont les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned} Z &= jL\omega + 1/jC_1\omega = j\omega\left(L - 1/C_1\omega^2\right) \\ Y &= jC\omega + 1/jL_1\omega = j\omega\left(C - 1/L_1\omega^2\right) \end{aligned} \tag{1.39}$$

Les capacités linéiques C_1 et les inductances linéiques L_1 sont ramenées sous leur forme discrète :

$$\mathbf{C} = C_1 dz \ \mathbf{L} = L_1 dz \tag{1.40}$$

Si la périodicité dz de placement des inductances discrètes **L** et des capacités discrètes **C** est

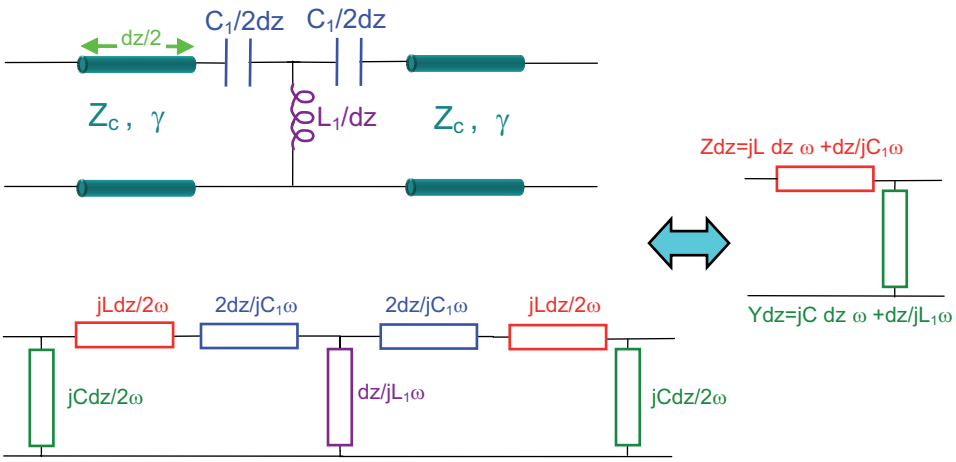


FIG. 1.51 – Schémas d'une ligne de transmission sans pertes chargée périodiquement par une inductance en parallèle et une capacité en série

suffisamment faible, l'impédances et l'admittance de la ligne se simplifient :

$$\begin{aligned} Z &= j\omega\left(L - 1/\mathbf{C}dz\omega^2\right) \overset{dz\to 0}{\to} -j\omega\left(1/\mathbf{C}dz\omega^2\right) \qquad Im\left(Z\right) < 0 \\ Y &= j\omega\left(C - 1/\mathbf{L}dz\omega^2\right) \overset{dz\to 0}{\to} -j\omega\left(1/\mathbf{L}dz\omega^2\right) \qquad Im\left(Y\right) < 0 \end{aligned} \tag{1.41}$$

La ligne ne voit que les composants discrets. Les inductances et les capacités équivalentes sont négatives. Nous obtenons pour un pas de répétition de composants et des fréquences suffisamment faibles, une ligne inversée. Cette structure a été réalisée en technologie microstrip par l'équipe de T. Itoh et C. Caloz (figure 1.52).

FIG. 1.52 – Photo de la ligne microstrip inversée

Cette ligne permet d'obtenir des déphasages inversés. Cette ligne inversée peut être implémenté dans de nombreux dispositifs micro-ondes : les coupleurs, les filtres, les déphaseurs... La ligne inversée peut être généralisée aux dimensions supérieures. Le cas 2D a été réalisé par l'équipe de V. Eleftheriades (figure 1.53). On obtient grâce à cette structure, une focalisation

de l'onde, une image sous la longueur d'onde et une réfraction négative.

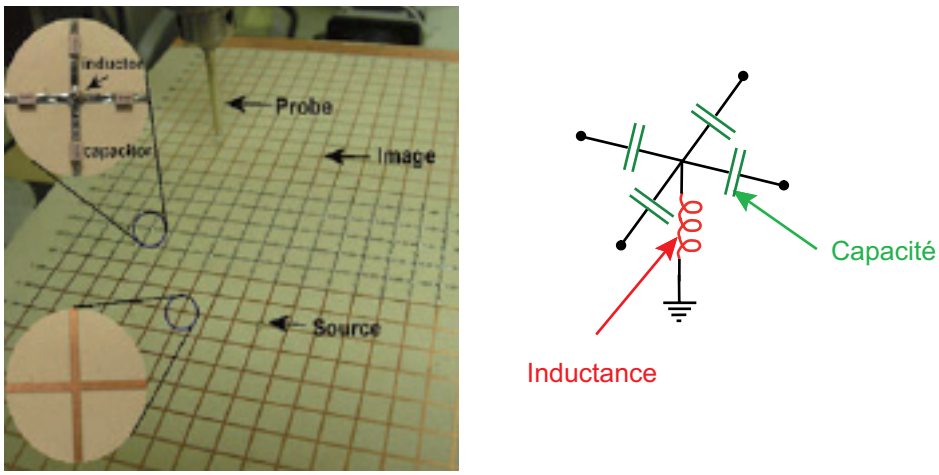


FIG. 1.53 – Photo du plan composé de lignes de transmission inversées

1.7.2 Indice négatif dans les métamatériaux

On sait depuis fort longtemps obtenir un permittivité négative [53]. En 1996, Pendry a montré qu'à partir de tiges métalliques très fines, on obtenait une permittivité négative pour des fréquences plasma très faibles [54]. En 1999, Pendry a montré que l'on pouvait obtenir aussi une perméabilité négative à partir de rouleaux suisses ou split-ring résonateurs [55]. En combinant ces deux matériaux (figure 1.54), on obtient un indice de réfraction négatif sur une faible plage de fréquence [56]. Cette structure a été réalisée expérimentalement par Smith [57]. On obtient effectivement un indice négatif. La période de ces structures est beaucoup plus faible que la longueur d'onde d'étude, donc on peut homogénéiser le matériau sous forme d'un indice négatif.

Un indice négatif signifie que le vecteur d'onde et le vecteur de Poynting sont inversés. La vitesse de groupe et la vitesse de phase ont donc des directions opposées. Si on obtient des métamatériaux à très faibles pertes, on pourra réaliser une lentille parfaite avec une résolution sous la longueur d'onde. Les lois de Snell-Descartes peuvent être appliquées avec un indice de réfraction négatif. Les nombreuses propriétés classiques des ondes électromagnétiques sont inversées comme l'effet Doppler, la réfraction, le rayonnement Cerenkov... la structure réalisée par Smith a été améliorée par Parazzoli (figure 1.55). Cette structure appelée le cube de Boeing, du fait de son origine, a été réalisée pour les longueurs d'ondes centimétriques. Les propriétés des métamatériaux, cités ici, peuvent être obtenues avec les cristaux photoniques.

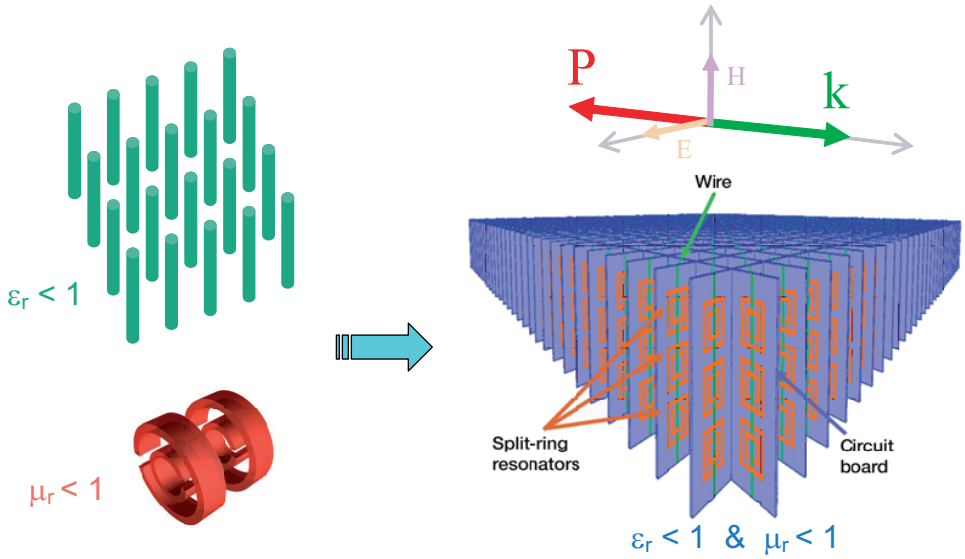


Fig. 1.54 – Schéma d'un métamatériau

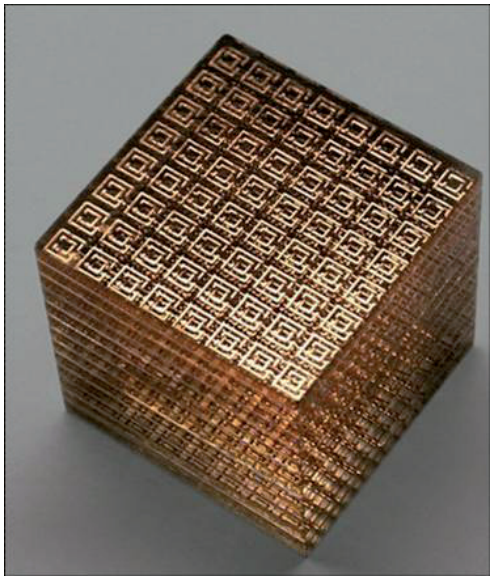


Fig. 1.55 – Photo d'un métamatériau

1.7.3 Réfraction négative dans les CPhs

Les cristaux photoniques représentent une autre classe de métamatériaux. Contrairement aux métamatériaux précédents, ils ont une période de l'ordre de la longueur d'onde. On ne peut donc pas homogénéiser aisément le matériau sous forme d'un indice de réfraction effectif. Cependant sous certaines conditions, on obtient avec les CPhs une réfraction négative, un indice de réfraction négatif. Celle-ci existe pour les CPhs métalliques, diélectriques et métallo-

diélectriques. Un indice de réfraction négatif est une condition suffisante mais non nécessaire pour obtenir une réfraction négative. Il existe deux types d'indices de réfraction : l'indice de groupe et l'indice de phase. Leurs définitions sont issues de la vitesse de groupe et de la vitesse de phase :

$$\begin{aligned} \vec{v}_p &= \frac{c}{|n_p|}\hat{k} \text{ avec } \hat{k} = \frac{\vec{k}}{\|k\|} \\ \|\vec{v}_g\| &= |\nabla_k \omega| = \frac{c}{|n_g|} \end{aligned} \tag{1.42}$$

Lorsque l'on utilise le terme indice de réfraction ou d'indice de réfraction effectif, on fait référence à l'indice de phase. La réfraction négative et l'indice de réfraction négatif n'apparaissent que pour certaines gammes fréquences. Pour mieux comprendre ces effets, on trace le diagramme de bande d'un CPh 2D (figure 1.56).

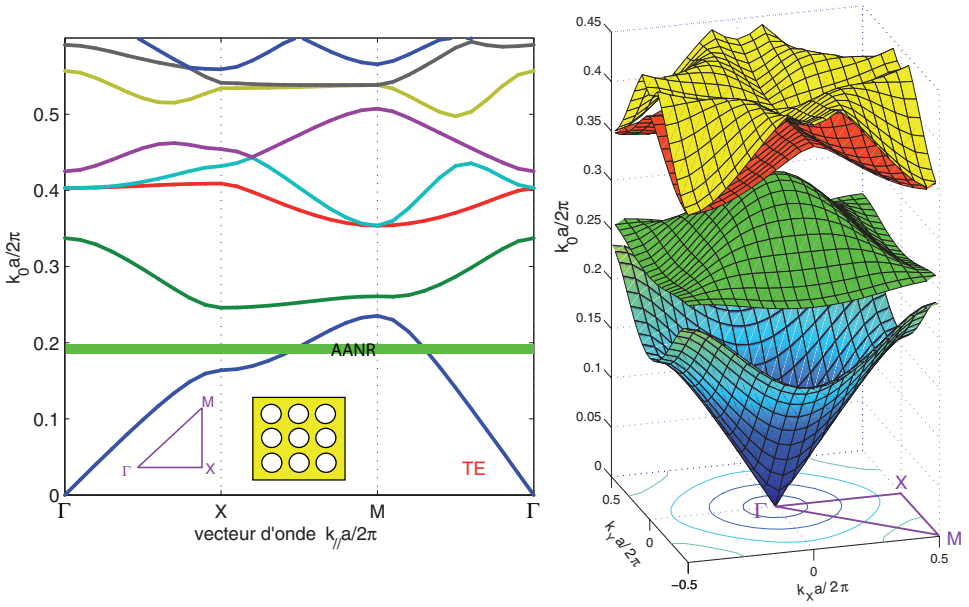


FIG. 1.56 – Diagramme de bande sur la première zone de Brillouin et Diagramme de bande 3D d'un CPh diélectrique 2D

A partir du diagramme de bande en trois dimensions, on trace le contour des vecteurs d'ondes à fréquences constantes (EFS). Les EFS sont une vue en coupe du diagramme de bande en trois dimensions (figure 1.57). Les contours des vecteurs d'ondes à fréquences constantes nous indique si la vitesse de groupe et la vitesse de phase sont opposées ou pas :

- le contour équifréquence est concave : la vitesse de groupe et la vitesse de phase sont opposées,
- le contour équifréquence est convexe : la vitesse de groupe et la vitesse de phase sont

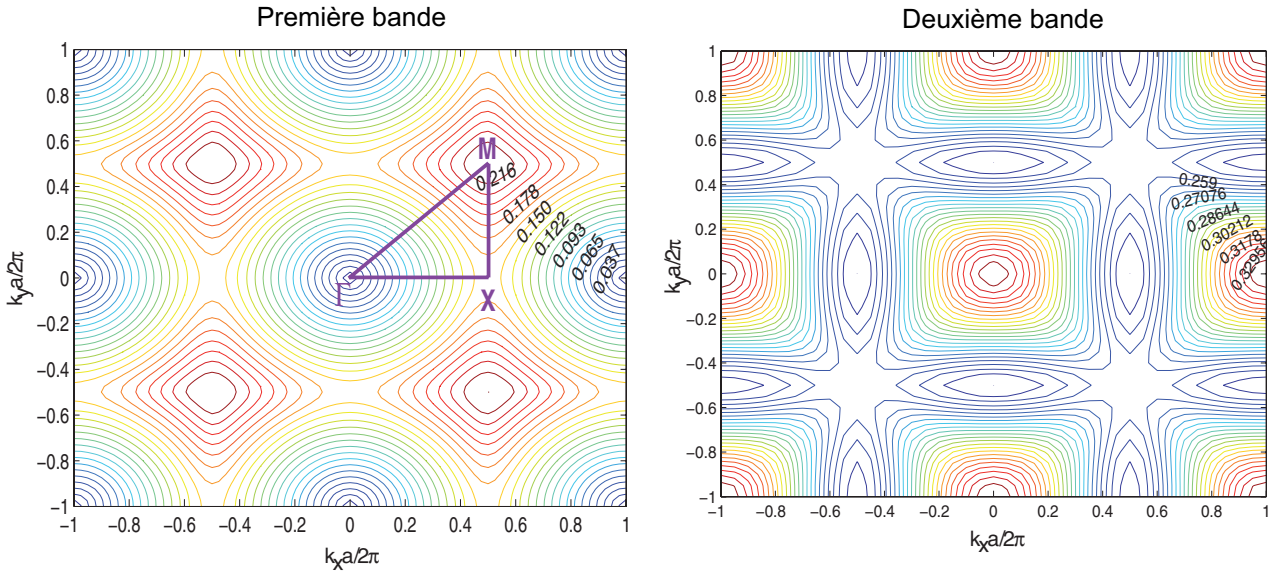


FIG. 1.57 – Contours équifréquences du CPh diélectrique 2D

de même sens.

Pour obtenir une réfraction négative avec un indice de réfraction négatif, nous devons nous placer sur la deuxième bande du diagramme (figure 1.56).Alors que pour obtenir une réfraction négative sans un indice de réfraction négatif, nous devons nous placer sur la première bande. Cette condition sur le contour ne garantie pas qu'il y ait qu'un seul rayon réfracté (figure 1.58). Le rayon réfracté classique est obtenu par un processus direct *i.e.* par un contour de la première zone de Brillouin. Les rayons réfractés d'ordre supérieur sont obtenus par un contour au-delà de la première zone de Brillouin. Dans un second temps le rayon est ramené sur la première zone de Brillouin. Ce processus est appelé *umklapp*.

Nous allons étudier les EFS de la première bande. Les EFS ont une forme circulaire autour du point Γ comme dans le cas du vide, et au fur et à mesure que l'on s'éloigne de ce point le contour devient carré. Proche du point M, la masse effective photonique devient négative :

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial k_i \partial k_j} < 0 \tag{1.43}$$

Pour obtenir une réfraction négative à une certaine fréquence sans indice négatif, le contour équifréquence du CPh doit être convexe et plus large que celui de l'air. Les EFS permettent de tracer le rayon réfracté par le CPh. On utilise la construction de la figure 1.59. La construction tient compte de la conservation du vecteur d'onde parallèle à la surface du CPh.

Dans la partie supérieure de la figure 1.60, on montre un exemple de simulation de réfraction négative et une expérimentation optique du phénomène d'ultraréfraction.

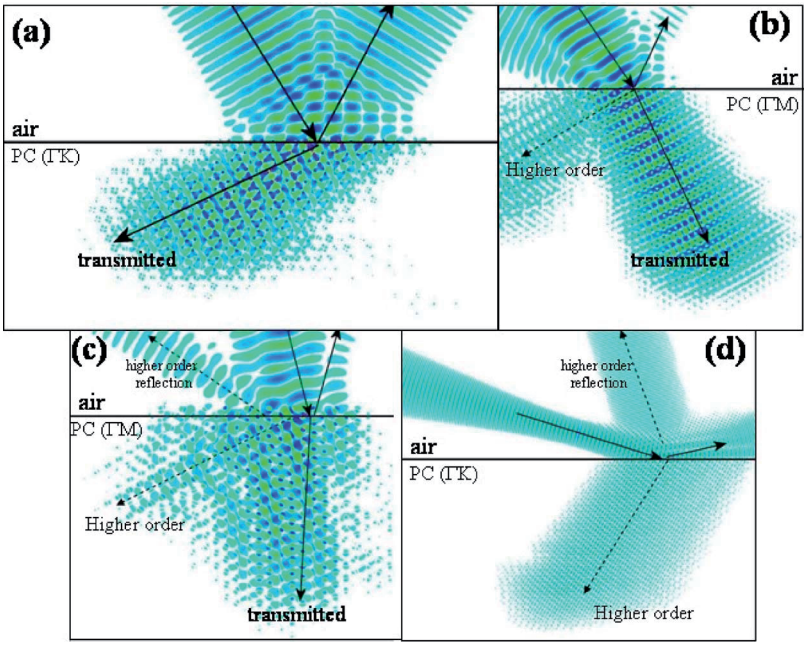


FIG. 1.58 – Quatre cas de rayons réfractés par des CPhs [58]

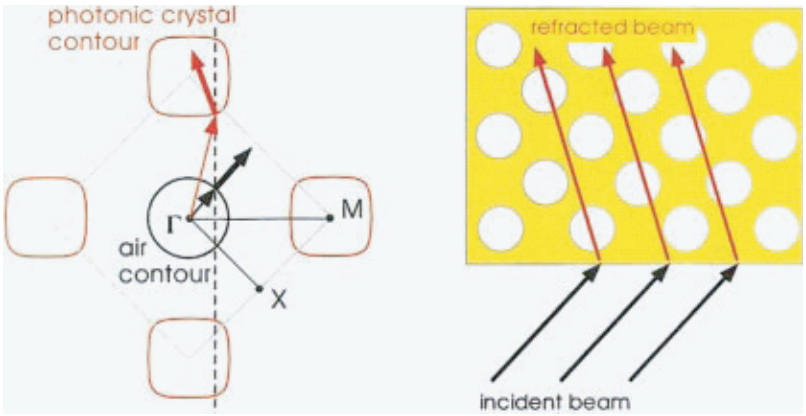


FIG. 1.59 – Rayons réfractés construit à partir de l'EFS [59] (les flèches fines et épaisses sont les vitesses de phase et de groupe respectivement)

La partie inférieure représente une simulation d'une lentille parfaite avec une résolution sous la longueur d'onde. La photographie est une cartographie micro-onde du champ crée par cette lentille. Les autres effets inversés obtenus par les métamatériaux peuvent être réalisés aussi par les CPhs. La réfraction négative a fait et fait l'objet d'un débat intense au sens de la communauté. On peut citer par exemple l'article "Directed diffraction without negative refraction" de Chien qui attribue les effets observés dans les CPhs à la diffraction et non à la réfraction négative [63]. La réfraction negative, l'ultraréfraction et les indices négatifs

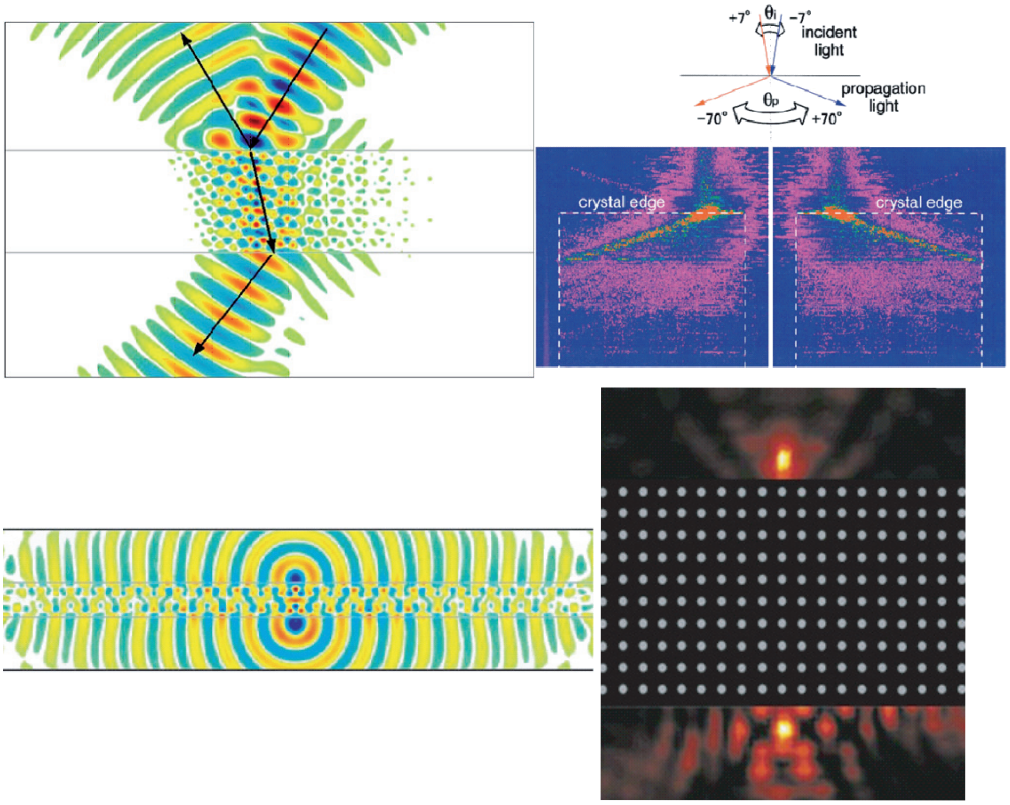


FIG. 1.60 – Ultraréfraction, réfraction négative et super lentille, simulation et expérience [60–62]

n'existent dans les CPhs que pour des plages de fréquences et des gammes d'angles d'incidence bien déterminées. Le but est d'obtenir une réfraction négative pour tous les angles (AANR) sur la plus large gamme de fréquences possible (figure 1.56). Tous ces effets réalisés par les cristaux photoniques et qui n'existent pas dans la nature conduiront, dans les années à venir, à de nombreuses applications.

1.8 Conclusion

Les cristaux photoniques sont un domaine de recherche très actif autant sur le plan fondamental, qu'appliqué. Récemment, il a été démontré que l'on pouvait obtenir une bande interdite complète dans un cristal photonique 1D composé de couches de métamatériaux à indice de réfraction négatif (figure 1.61). Les méthodes d'études issues de la physique du solide décrivent avec succès la propagation dans les CPhs. On a pu voir dans ce chapitre, que l'on obtenait les mêmes phénomènes de bandes interdites photoniques dans les CPhs 1D, 2D

et 3D. On peut séparer les CPhs en deux catégories. Les CPhs diélectriques sont davantage réservés pour des applications optiques alors que les CPhs métalliques deviennent intéressant pour des applications micro-ondes. Cependant, pour comprendre et utiliser les CPhs, il est nécessaire voire même obligatoire de disposer de plusieurs outils de modélisations complémentaires. Dans ce chapitre, nous avons utilisé les outils de modélisations présentés dans le chapitre suivant.

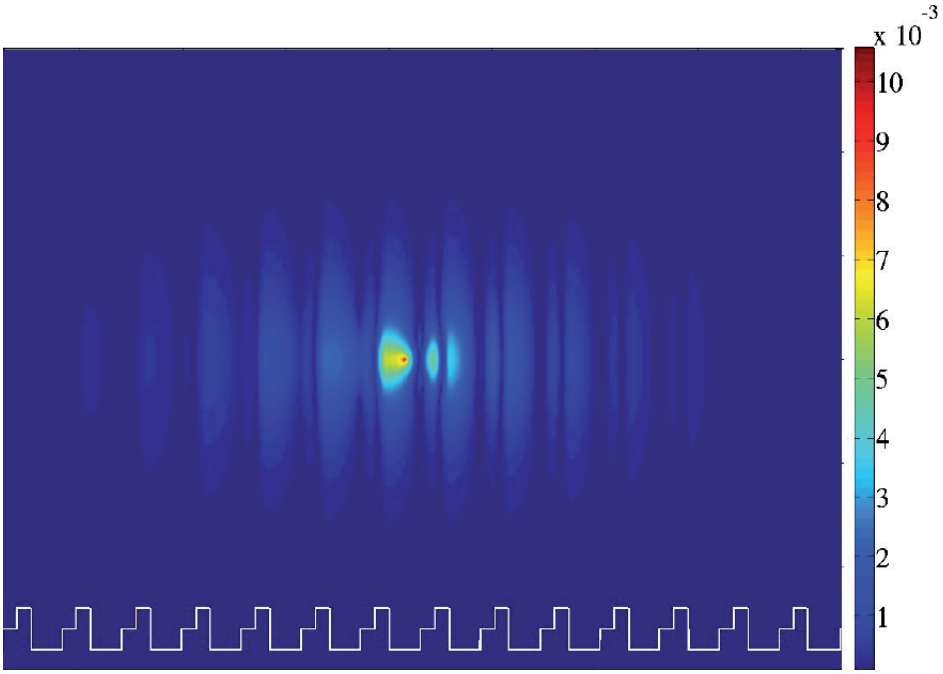


Fig. 1.61 – Visualisation de la fonction de Green dans un cristal photonique 1D composé de couches de métamatériaux [64]

Références

[1] E. Yablonovitch, *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987). 2

[2] S. John, *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987). 2

[3] E. M. Purcell, *Spontaneous emission probabilities at radio frequencies*, Phys. Rev. **69**, 681 (1946). 2

[4] P. W. Anderson, *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958). 3

[5] N. F. Mott, *Electrons in disordered structures*, Adv. Phys. **16**, 49 (1967). 3

[6] K. Ohtaka, *Energy band of photons and low-energy photon diffraction*, Phys. Rev. B **19**, 10 (1979). 3

[7] J. B. Pendry, *Photonic Gap Materials*, Current Science **76**, 1311 (1999). 4

[8] J. Lourtioz, H. Benisty, V. Berger, J. Gérard, D. Maystre, and A. Tchelnokov, *Les cristaux photoniques ou la lumière en cage*, Hermès et Lavoisier (2003). 4

[9] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic crystals*, Princeton University Press (1995). 5

[10] B. Gralak, thèse de doctorat, Faculté des Sciences et Techniques de Saint-Jérôme (2001). 7

[11] D. Kossel, *Analogies between thin-film optics and electron-band theory of solids*, J. Opt. Soc. Am. **56**, 1434 (1966). 14

[12] P. Yeh, A. Yariv, and C. S. Hong, *electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory*, J. Opt. Soc. Am. **67**, 423 (1977). 14

[13] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, Dunod (1998). 15

[14] W. M. Robertson, *Experimental Measurement of the Effect of Termination on Surface Electromagnetic Waves in One-Dimensional Photonic Bandgap Arrays*, J. Lightwave Tech. **17**, 2013 (1999). 24

[15] J. N. Winn, Y. Fink, S. Fan, , and J. D. Joannopoulos, *Omnidirectional reflection from a one-dimensional photonic crystal*, Opt. Lett. **23**, 1573 (1998). 25

[16] Y. Fink, J. N. Winn, S. Fan, C. Chen, J. Michel, J. D. Joannopoulos, , and E. L. Thomas, *A Dielectric Omnidirectional Reflector*, Science **282**, 1679 (1998). 25

[17] J. Q. Xi, M. Ojha, J. L. Plawsky, W. N. Gill, J. K. Kim, and E. F. Schuberta, *Internal high-reflectivity omni-directional reflectors*, Appl. Phys. Lett. **87**, 031111 (2005). 26, 29, 246

[18] E. Yablonovitch, *Engineered omnidirectional external-reflectivity spectra from one-dimensional layered interference filters*, Opt. Lett. **23**, 1648 (1998). 28

[19] P. R. Villeneuve and M. Piché, *Photonic band gaps in two-dimensional square and hexagonal lattices*, Phys. Rev. B **46**, 4969 (1992). 30

[20] R. Meade, K. Brommer, A. Rappe, and J. Joannopoulos, *Existence of a photonic band gap in two dimensions*, Appl. Phys. Lett. **61**, 495 (1992). 30

[21] P. R. Villeneuve and M. Piché, *Photonic band gaps in two-dimensional square lattices : Square and circular rods*, Phys. Rev. B **46**, 4973 (1992). 31

[22] L. F. Marsal, T. Trifonov, A. Rodriguez, J. Pallarés, and R. Alcubilla, *Larger absolute photonic band gap in two-dimensional air-silicon structures*, Physica E **16**, 580 (2002). 31

[23] J. C. Knight, *Photonic crystal fibres*, Nature **424**, 847 (2003). 32, 246

[24] R. D. L. Rue and C. Smith, *On the threshold of success*, Nature **408**, 653 (2000). 32, 246

[25] A. R. Weily, K. P. Esselle, and B. C. Sanders, *Photonic crystal horn and array antennas*, Phys. Rev. E **68**, 016609 (2003). 33

[26] N. Malkova and V. Gopalan, *Strain-tunable optical valves at T-junction waveguides in photonic crystals*, Phys. Rev. B **68**, 245115 (2003). 33

[27] H. Takeda and K. Yoshino, *Tunable light propagation in Y-shaped waveguides in two-dimensional photonic crystals utilizing liquid crystals as linear defects*, Phys. Rev. B **67**, 073106 (2003). 33

[28] M. M. Sigalas, R. Biswas, K. M. Ho, and C. Soukoulis, *Theoretical investigation of off-plane propagation of electromagnetic waves in two-dimensional photonic crystals*, Phys. Rev. B **58**, 6791 (1998). 35

[29] S. John and R. Rangarajan, *Optimal Structures for Classical Wave Localization - an Alternative to the Ioffe-Regel Criterion*, Phys. Rev. B **38**, 10101 (1988). 37

[30] E. Yablonovitch and T. J. Gmitter, *Photonic Band-Structure - the Face-Centered-Cubic Case*, Phys. Rev. Lett. **63**, 1950 (1989). 37

[31] S. Satpathy, Z. Zhang, and M. R. Salehpour, *Theory of Photon Bands in 3-Dimensional Periodic Dielectric Structures*, Phys. Rev. Lett. **64**, 1239 (1990). 37

[32] K. M. Leung and Y. F. Liu, *Photon Band Structures - the Plane-Wave Method*, Phys. Rev. B **41**, 10188 (1990). 37

[33] K. M. Leung and Y. F. Liu, *Full Vector Wave Calculation of Photonic Band Structures in Face-Centered-Cubic Dielectric Media*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2646 (1990). 37

[34] Z. Zhang and S. Satpathy, *Electromagnetic-Wave Propagation in Periodic Structures - Bloch Wave Solution of Maxwell Equations*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2650 (1990). 37

[35] J. Maddox, *Photonic Band-Gaps Bite the Dust*, Nature **348**, 481 (1990). 38

[36] K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis, *Existence of a Photonic Gap in Periodic Dielectric Structures*, Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990). 38

[37] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, and K. M. Leung, *Photonic Band-Structure - the Face-Centered-Cubic Case Employing Nonspherical Atoms*, Phys. Rev. Lett. **67**, 2295 (1991). 38

[38] H. S. Sözüer, J. W. Haus, and R. Inguva, *Photonic Bands : Convergence problems with the plane-wave method*, Phys. Rev. B **45**, 13 962 (1992). 38

[39] H. S. Sözüer and J. P. Dowling, *Photonic Band Calculations for Woodpile Structures*, J.Mod. Opt. **41**, 231 (1994). 38

[40] K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, R. Biswas, and M. Sigalas, *Photonic Band-Gaps in 3-Dimensions- New Layer-by-Layer Periodic Structures*, Solid State Commun. **89**, 413 (1994). 38

[41] E. Yablonovitch, *Photonic band-gap crystals*, J. Phys. : condensed Matter **5**, 2443 (1993). 40, 41, 246

[42] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff, *Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays*, Nature **391**, 667 (1998). 41

[43] W. L. Barnes, *Electromagnetic Crystals for Surface Plasmon Polaritons and the Extraction of Light from Emissive Devices*, J. Light. Tech **17**, 2170 (1999). 41, 42, 246

[44] J. M. Lourtioz and A. de Lustrac, *Metallic photonic crystals*, C.R. Phys. 3 , 79 (2002). 42

[45] D. Maystre, *Electromagnetic study of photonic band gap*, Pure Appl. Opt. **3**, 975 (1994). 42

[46] M. M. Sigalas, C. T. Chan, K. M. Ho, , and C. M. Soukoulis, *Metallic photonic band-gap materials*, Phys. Rev. B **52**, 11 744 (1995). 42

[47] F. Gardiol, *Traité d'électricité, électromagnétisme*, Presses polytechniques et universitaires romandes **3** (2004). 43

[48] E. Collin, *Foundations for microwave engineering, second edition*, McGraw-Hill (2001). 43

[49] L. L. Floc'h, V. Quintard, J.-F. Favennec, and Y. Boucher, *Spectral properties of a periodic N Œ N network of interconnected transmission lines*, Microwave Opt. Technol. Lett. **37**, 255 (2003). 45

[50] D. Sievenpiper, *Lijun Zhang*, R. F. J. **Broas**, . Alexópolous, E. Yablonovitch, High Impedance Electromagnetic Surfaces with a Forbidden Frequency Band, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. 47, pp. 2059 (1999). 45

[51] E. R. Brown, C. D. Parker, and E. Yablonovitch, *Radiation properties of a planar antenna on a photonic-crystal substrate*, J. Opt. Soc. Am. B **10**, 404 (1993). 47

[52] R. Biswas, E. Ozbay, B. Temelkuran, M. Bayindir, M. M. Sigalas, K. K. Sigalas, and K. M. Ho, *Exceptionally directional sources with photonic-bandgap crystals*, J. Opt. Soc. Am. B **18**, 1684 (2001). 47

[53] R. Ulrich, K. F. Renk, and L. Genzel, *Tunable Submillimeter Interferometers of the Fabry-Perot Type*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **11**, 363 (1963). 50

[54] J. B. Pendry, A. J. Holden, W. J. Stewart, , and I. Youngs, *Extremely low frequency plasmons in metallic structures*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4773 (1996). 50

[55] J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **47**, 2075 (1999). 50

[56] J. B. Pendry, *Negative Refraction Makes a Perfect Lens*, Phys. Rev. Lett. **85**, 3966 (1999). 50

[57] D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, *Theoretical investigation of off-plane propagation of electromagnetic waves in two-dimensional photonic crystals*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4184 (2000). 50

[58] S. Foteinopoulou and C. Soukoulis, *Electromagnetic wave propagation in two-dimensional photonic crystals : A study of anomalous refractive effects*, Phys. Rev. B **72**, 165112 (2005). 54, 247

[59] C. Luo, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and J. B. Pendry, *All-angle negative refraction without negative effective index*, Phys. Rev. B **65**, 201104 (2002). 54, 247

[60] R. Moussa, S. Foteinopoulou, L. Zhang, G. Tuttle, K. Guven, E. Ozbay, and C. M. Soukoulis, *Negative refraction and superlens behavior in a two-dimensional photonic crystal*, Phys. Rev. B **71**, 085106 (2005). 55, 247

[61] P. V. Parimi, W. T. Lu, P. Vodo, and S. Sridhar, *Imaging by flat lens using negative refraction*, Nature **426**, 404 (2003).

[62] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami, *Superprism phenomena in photonic crystals*, Phys. Rev. B **58**, 10 096 (1998). 55, 247

[63] H.-T. Chien, H.-T. Tang, C.-H. Kuo, C.-C. Chen, and Z. Ye, *Directed diffraction without negative refraction*, Phys. Rev. B **70**, 113101 (2004). 54

[64] I. Shadrivov, A. Sukhorukov, and Y. Kivshar, *Complete Band Gaps in One-Dimensional Left-Handed Periodic Structures*, Phys. Rev. Lett. **95**, 193903 (2005). 56, 247

Chapitre 2

Les méthodes de modélisation des cristaux photoniques

Contenu du chapitre

2.1 Introduction **64**

2.2 Équations et domaine de calcul dans les CPhs **66**

2.2.1 Équations mises en jeu 66

2.2.2 Formes et étapes de résolution des EDPs 68

2.2.3 Réduction du domaine de calcul 70

2.3 La multidiffusion unidimensionnelle (MST 1D) **71**

2.3.1 Formalisme des matrices transferts (TMM) 71

2.3.2 Modèle de Kronig-Penney 74

2.4 Théorie des modes couplés **75**

2.5 Approche par la fonction de Green unidimensionnelle **77**

2.6 La méthode des éléments finis (FEM) **79**

2.6.1 HFSS et la réflexion/transmission 82

2.6.2 FEM et diagramme de bande 86

2.7 La méthode des différences finies temporelles (FDTD) **88**

2.7.1 Architecture informatique du code FDTD 91

2.7.2 Modélisation des CPhs en transmission 92

2.7.3 Incidence oblique 94

2.7.4 Modélisation du diagramme de bande des CPhs 95

2.8 Méthode des volumes finis (FIT) **96**

2.8.1 Microwave Studio 98

2.8.2 Modélisation de la transmission et de la structure de bande des cristaux photoniques 99
2.9 Méthode des différences finies dans le domaine fréquentiel (FDFD / TMM) 100
2.9.1 Structure de bande 101
2.9.2 Réflexion/Transmission 102
2.10 Méthode des ondes planes (PWM) 105
2.10.1 Cas tridimensionnel 105
2.10.2 Cas unidimensionnel et bidimensionnel 107
2.11 Méthode des liaisons fortes (TB) 110
2.12 Méthode de la multidiffusion bidimensionnelle (MST 2D) 111
2.13 Conclusion : comparaison de l'ensemble des méthodes présentées 113
Références 119

2.1 Introduction

Pour étudier et comprendre la propagation des champs électromagnétiques dans les cristaux photoniques, des méthodes analytiques et numériques ont été implémentées. Ces méthodes permettent l'accès à des grandeurs réputées inaccessibles par des mesures expérimentales mais qui peuvent être nécessaire à la compréhension du comportement des CPhs. Toute la difficulté de la modélisation des cristaux photoniques réside dans le fait que ces matériaux ont une périodicité de l'ordre de la longueur d'onde d'étude et une taille de plusieurs longueurs d'onde. Plus on diminue la longueur d'onde d'étude, plus les phénomènes à prendre en compte deviennent complexes. Les ressources systèmes nécessaires pour effectuer le calcul augmentent de pair, et cela quelque soit le code numérique utilisé. La puissance de calcul des supercalculateurs voire même des PC est aujourd'hui suffisante pour modéliser les cristaux photoniques (figure 2.1). Ce n'était pas vrai, il y a seulement 10 ou 15 ans. Il n'existe pas une méthode unique pour modéliser les CPhs. Chaque méthode a ses avantages et ses inconvénients et est adaptée à certains cristaux photoniques.

La modélisation des dispositifs comme des lignes micro-rubans ou les antennes patchs ne nécessite pas autant de ressources systèmes, leur taille est beaucoup plus faible devant la longueur d'onde d'étude. Les méthodes usuelles des dispositifs micro-ondes peuvent être utilisées, moyennant quelques adaptations, pour les cristaux photoniques. On peut citer comme

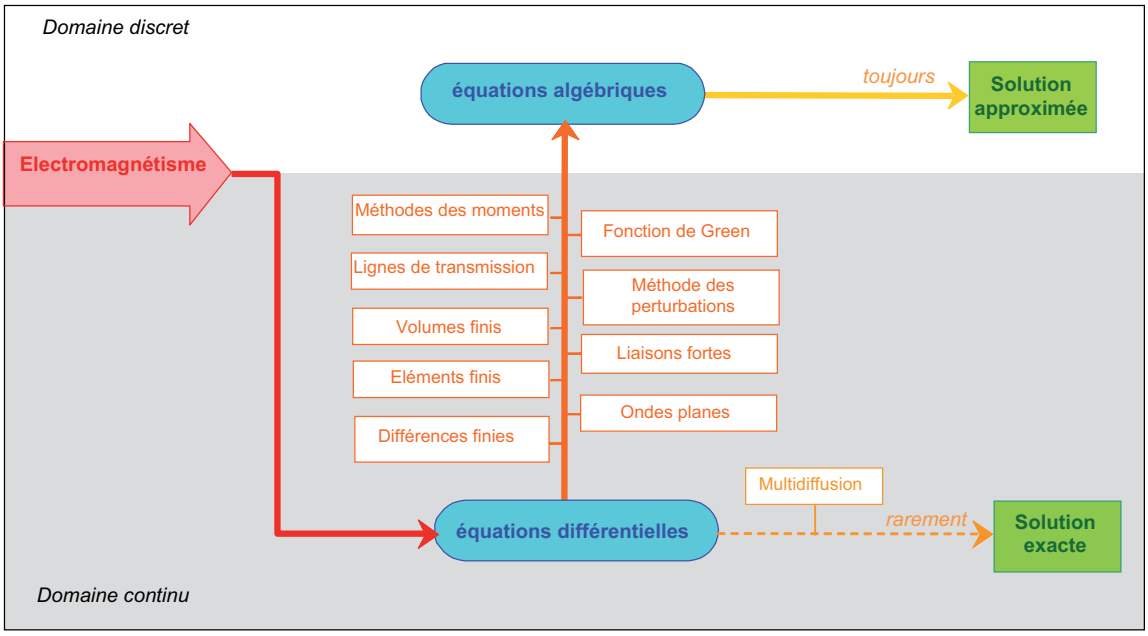


FIG. 2.1 – Résolution des équations de Maxwell

méthode couramment employée, la méthode des éléments finis, des différences finies et des volumes finis. Ces méthodes nous permettent de tracer la réflexion, la transmission et le diagramme de rayonnement. Au prix de quelques modifications, on obtient aussi la structure de bande du CPh, que l'on peut aussi obtenir en utilisant des méthodes issues de la physique du solide. Ces dernières ont subi quelques adaptations pour prendre en compte le caractère vectoriel des champs. La méthode la plus utilisée est la méthode des ondes planes. La méthode des liaisons fortes est adaptée pour l'étude des défauts. Il existe une dernière catégorie de méthodes qui ne sont pas numériques mais analytiques ou quasi-analytiques. Si pour des CPhs 1D, il est aisé d'utiliser des méthodes analytiques, pour les dimensions supérieures, il devient relativement difficile de le faire. Il en existe seulement pour des formes canoniques (ou relativement proches). Ce sont les méthodes de multidiffusion ou méthodes de Korringa-Kohn-Rostoker selon que l'on se place en optique ou en physique du solide. La méthode des matrices de lignes de transmissions (TLM) et la méthode des moments (MoM) sont utilisées pour des cristaux photoniques planaires UCPBG. Ces deux dernières méthodes ne seront pas détaillées dans ce chapitre. Les autres méthodes citées ont été utilisées, adaptées, développées ou créées pour une comparaison globale. Un CPh cubique 3D diélectrique et un CPh cubique 3D métallique seront étudiés par chacune des techniques 3D présentées. Le motif de base sera une sphère. On a choisi ce type de structure simple car elle peut être modélisée par l'ensemble

des méthodes et permet donc une comparaison à grande échelle. Chaque méthode est bien spécifique et utilise son propre jeu d'équations. Il est nécessaire dans un premier temps de les étudier.

2.2 Équations et domaine de calcul dans les CPhs

Les symétries jouent un rôle essentiel dans l'étude des cristaux photoniques. Ce sont elles qui sont à l'origine des propriétés remarquables des CPhs. Elles permettent de simplifier le problème à étudier.

2.2.1 Équations mises en jeu

Dans le premier chapitre, nous avons vu que les cristaux photoniques peuvent être 1D, 2D ou 3D. Le nombre d'équations à résoudre ne sera pas le même. Le problème sera considérablement simplifié dans le cas 1D. Nous allons étudier les différents cas et les simplifications mis en jeu.

Dans le cas des CPhs tridimensionnels nous devons résoudre les deux équations de Maxwell :

- l'équation de Maxwell-Faraday, et
- l'équation de Maxwell-Ampère.

Certaines méthodes ne résolvent pas directement ces équations mais des formes différentes de ces équations comme par exemple l'équation de Helmholtz, ou les équations intégrales. Nous rappelons sous leur forme harmonique et sans source les deux équations de Maxwell précédentes :

$$\nabla \times \mathbf{E}\left(\mathbf{r},\omega\right) = i\omega\mathbf{B}\left(\mathbf{r},\omega\right) \quad \nabla \times \mathbf{H}\left(\mathbf{r},\omega\right) = -i\omega\mathbf{D}\left(\mathbf{r},\omega\right) \tag{2.1}$$

Les rotationnels des équations peuvent être explicités :

$$\begin{cases} \partial_y E_z - \partial_z E_y = i\omega B_x \\ \partial_z E_x - \partial_x E_z = i\omega B_y \\ \partial_x E_y - \partial_y E_x = i\omega B_z \end{cases} \quad \begin{cases} \partial_y H_z - \partial_z H_y = -i\omega D_x \\ \partial_z H_x - \partial_x H_z = -i\omega D_y \\ \partial_x H_y - \partial_y H_x = -i\omega D_z \end{cases} \tag{2.2}$$

Nous avons 6 équations d'ordre 1 à résoudre dans le cas tridimensionnel. En pratique, ce nombre est réduit grâce aux propriétés des champs électriques et des champs magnétiques (élimination des modes longitudinaux). On utilise les relations constitutives classiques pour passer des champs **E** et **H** au déplacement électrique et à l'induction magnétique.

Dans le cas bidimensionnel, le problème se simplifie. On suppose que les matériaux modélisés sont uniformes selon z. Il en est de même des différents champs. Les deux équations de Maxwell se simplifient :

$$\begin{cases} \partial_y E_z = i\omega B_x \\ -\partial_x E_z = i\omega B_y \\ \partial_x E_y - \partial_y E_x = i\omega B_z \end{cases} \qquad \begin{cases} \partial_y H_z = -i\omega D_x \\ -\partial_x H_z = -i\omega D_y \\ \partial_x H_y - \partial_y H_x = -i\omega D_z \end{cases} \tag{2.3}$$

Le problème vectoriel peut être décomposé en deux problèmes :

– l'un appelé TE avec

$$E_{x,y} = 0 \text{ et } H_z = 0$$
$$\begin{cases} \partial_y E_z = i\omega B_x \\ -\partial_x E_z = i\omega B_y \\ \partial_x H_y - \partial_y H_x = -i\omega D_z \end{cases} \tag{2.4}$$

– et l'autre appelé TM avec

$$E_z = 0 \text{ et } H_{x,y} = 0$$
$$\begin{cases} \partial_y H_z = -i\omega D_x \\ -\partial_x H_z = -i\omega D_y \\ \partial_x E_y - \partial_y E_x = i\omega B_z \end{cases} \tag{2.5}$$

Dans les problèmes 2D stricts, la polarisation TE est découplée de la polarisation TM. Nous avons deux fois trois équations d'ordre 1 à résoudre qui dans la pratique se réduisent à deux équations scalaires en utilisant les propriétés des champs. Le temps de calcul diminue de manière exponentiel par rapport au cas 3D.

Dans le cas 1D, le problème se simplifie encore. On suppose que les matériaux modélisés sont uniformes selon x et y. Les deux équations de Maxwell se simplifient de la manière suivante :

$$E_z = 0 \text{ et } H_z = 0$$
$$\begin{cases} -\partial_z E_y = i\omega B_x \\ \partial_z E_x = i\omega B_y \end{cases} \qquad \begin{cases} -\partial_z H_y = -i\omega D_x \\ \partial_z H_x = -i\omega D_y \end{cases} \tag{2.6}$$

Les directions x et y sont équivalentes. Les quatre équations se réduisent à deux :

$$\partial_z E_x = i\omega B_y \qquad \partial_z H_y = i\omega D_x \tag{2.7}$$

Dans la pratique, on ne résout plus qu'une des deux équations. La résolution d'un problème 1D est analytique, alors que pour des problèmes 2D et 3D, la résolution est le plus souvent

Type de CPh	Nb. d'éq. d'ordre 1	Nb. d'éq. en pratique
Pb. 1D	2×1 éq. scalaires	1 éq. scalaire
Pb. 2D et 1D off-plane	2×3 éq. scalaires	2×1 éq. scalaires
Pb. 3D et 2D off-plane	6 éq. scalaires	2 à 4 éq. scalaires

TAB. 2.1 – Tableau récapitulatif du nombre d'équations à résoudre selon les différents CPhs

numérique. Le tableau 2.1 indique le nombre d'équations à résoudre par rapport au problème rencontré. En pratique, le nombre d'équations dans les différents problèmes peut être réduit en prenant en compte :

- la nature transverse du champ électromagnétique,
- en supposant la perméabilité égale à un, et
- en utilisant une équation d'onde au lieu des équations de Maxwell.

L'équation d'onde en $\mathbf{E}$ peut être écrite de la manière suivante :

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = -\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})) = \varepsilon_r(\mathbf{r}) k_0^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \tag{2.8}$$

Soit un mode longitudinal :

$$\mathbf{E}_l(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{k} \tag{2.9}$$

Ce mode annule le premier membre de l'équation d'onde. Ce mode est donc solution de l'équation d'onde pour des fréquences nulles :

$$k_{0,l}(\mathbf{k}) = 0 \tag{2.10}$$

Les modes longitudinaux peuvent poser parfois des soucis numériques. Souvent, on supprime ces modes pour simplifier le problème. Nous étudions seulement deux types de modes transverses S et P de polarisation :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_s &= \mathbf{k} \times \mathbf{n} \\ \mathbf{e}_p &= \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{n}] \end{aligned} \tag{2.11}$$

2.2.2 Formes et étapes de résolution des EDPs

Indépendamment de la dimension du problème, chaque méthode de modélisation utilise des EDPs différentes. La figure 2.2 résume les différentes solutions que nous avons pour résoudre un problème d'électromagnétisme ou plus précisément d'électrodynamique.

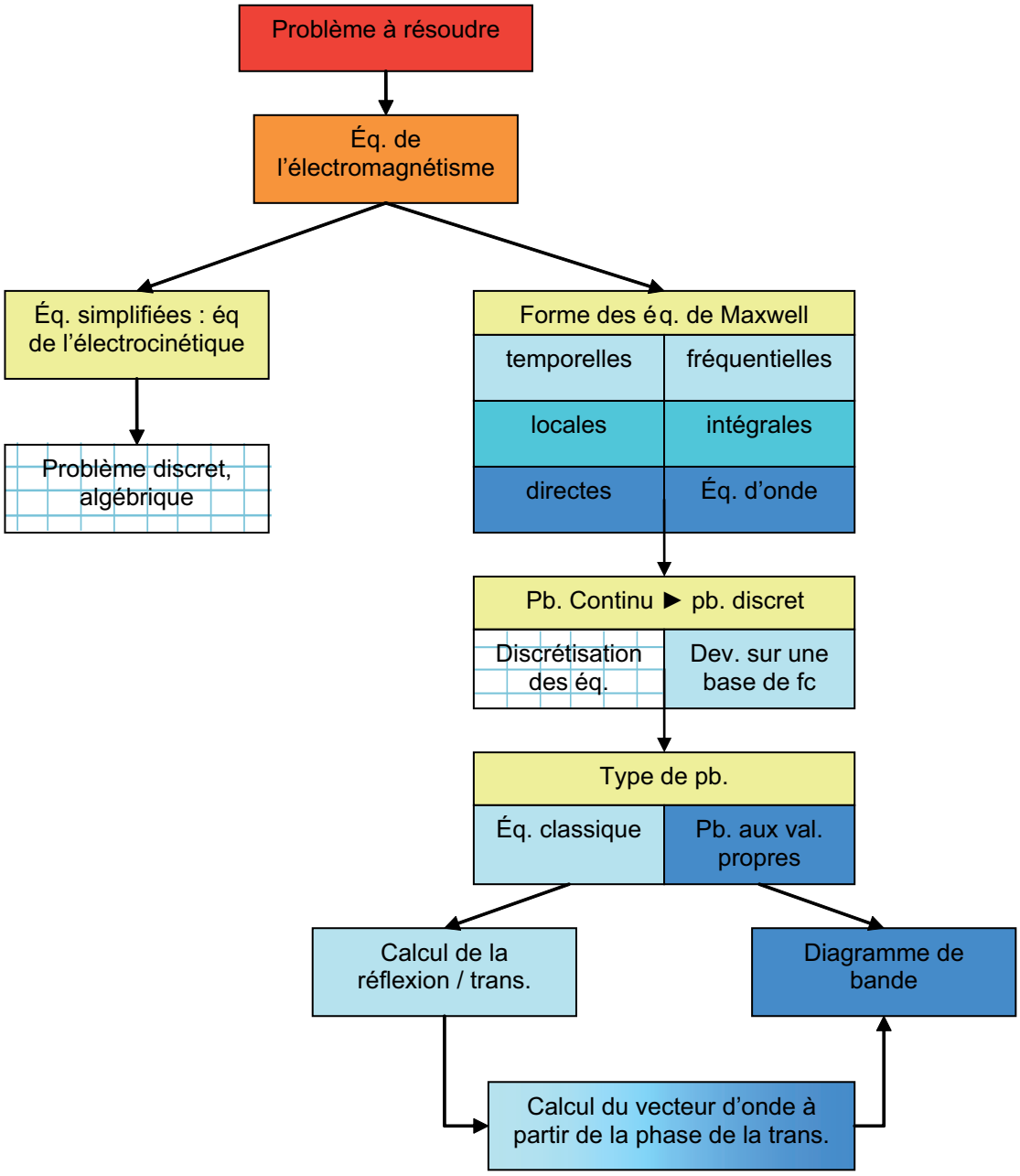


FIG. 2.2 – Choix de la forme des équations à résoudre et étapes de résolution du problème

Dans un premier temps, nous choisissons la forme des équations puis elles sont discrétisées ou développées sur une base de fonction. Nous obtenons soit une équation matricielle classique, soit une équation aux valeurs propres. La première permet d'obtenir la réflexion et la transmission d'un CPh. La seconde permet de tracer le diagramme de bande. Il existe deux autres possibilités pour calculer le diagramme de bande :

– en excitant des modes résonnants dans une cavité, et

– à partir de la phase de la transmission (Le détail de ce calcul est explicité dans le chapitre 4).

2.2.3 Réduction du domaine de calcul

Les cristaux photoniques sont des structures hautement symétriques. Il existe différentes techniques pour réduire le domaine de calcul. Nous étudierons et utiliserons au cours de ce chapitre deux techniques :

– Les conditions de Bloch-Floquet, et
– Les matrices transferts.

Les matrices transferts permettent de réduire le domaine selon $\mathbf{e}_z$ à une maille élémentaire (figure 2.3). Les conditions périodiques latérales *i.e.* des conditions de Bloch-Floquet 2D permettent de réduire le domaine de calcul à une maille élémentaire selon $\mathbf{e}_{\parallel}$ (dans le plan de l'interface d'un CPh). En combinant ces deux techniques, nous étudions seulement une maille élémentaire pour des problèmes 1D, 2D et 3D. Par ces techniques, nous obtenons la réflexion/transmission et indirectement le diagramme de bande.

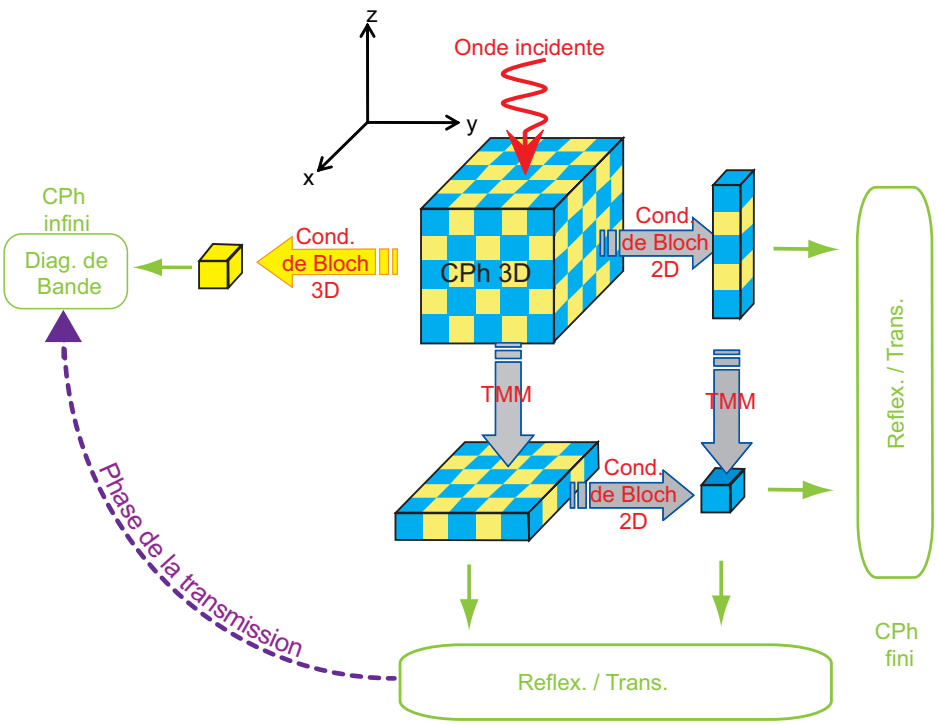


FIG. 2.3 – Réduction du domaine de calcul par différentes techniques

Une autre possibilité consiste à appliquer directement des conditions de Bloch 3D à une maille élémentaire. Nous obtenons directement le diagramme de bande (figure 2.3).

2.3 La multidiffusion unidimensionnelle (MST 1D)

La multidiffusion consiste à étudier l'interaction d'objets dont on connaît la solution analytique pour chaque objet pris individuellement. Dans ce chapitre et dans le chapitre suivant, nous appliquerons la MST aux cylindres et aux sphères. Avant d'étudier ces deux cas, nous allons établir la solution analytique d'un CPh 1D *i.e.* d'une structure multicouche. La MST 1D utilise le formalisme des matrices transferts. Elle permet d'obtenir la réflexion, la transmission et le diagramme de bande. Les résultats du chapitre 1 sur les CPhs 1D sont obtenus par cette méthode.

2.3.1 Formalisme des matrices transferts (TMM)

La technique des matrices transferts est connue depuis très longtemps [1]. Elle est essentielle pour l'étude des cristaux photoniques. La TMM permet de réduire le domaine selon l'axe perpendiculaire à l'interface air/CPh. Dans ce paragraphe, les matrices transferts seront étudiées et appliquées aux cristaux photoniques 1D. Les incidences obliques sont prises en compte aussi.

Pour obtenir la réflexion/transmission d'un CPh 1D, nous utilisons l'équation d'onde en **E** pour la polarisation TE et l'équation d'onde en **H** pour la polarisation TM. Les deux polarisations sont découplées. On utilise la même démarche de résolution pour les deux polarisations. Nous étudierons seulement l'équation d'onde en **E** :

$$\nabla^2 \mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right) = -k_0^2 \varepsilon_r\left(\mathbf{r}\right) \mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right) \tag{2.12}$$

Le système est uniforme selon x et y. Le champ **E** s'écrit sous la forme suivante :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel} E(z) \mathbf{e}_\parallel \times \mathbf{e}_z \tag{2.13}$$

L'équation d'onde se simplifie :

$$\begin{aligned} \partial_z^2 E(z) &= -k_z^2(z) E(z) \\ k_z^2(z) &= k_0^2 \varepsilon_r(z) - k_\parallel^2 \end{aligned} \tag{2.14}$$

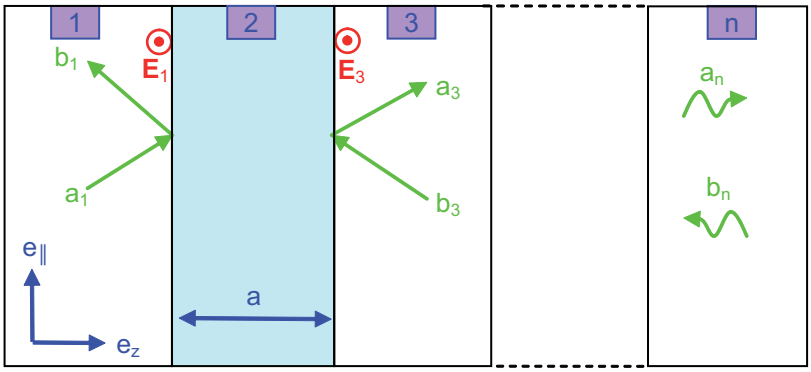


FIG. 2.4 – Décomposition en onde progressive et rétrograde

Pour résoudre l'équation précédente, nous utilisons le formalisme des matrices de transfert et les conditions aux limites d'une couche. Le champ E pour une couche n s'écrit sous forme d'une somme, d'une onde progressive et d'une onde rétrograde (figure 2.4) :

$$E_n(z) = a_n e^{ik_{z,n} \cdot z} + b_n e^{-ik_{z,n} \cdot z} \tag{2.15}$$

Les relations de passage d'une couche à une autre peuvent être écrites sous forme d'une matrice transfert :

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{2.16}$$

Les relations de continuité des champs tangentiels $\mathbf{E}$ et $\mathbf{H}$ permettent d'obtenir la matrice d'interface $\mathbf{\Lambda}_n^{n+1}$ entre deux couches :

$$\mathbf{\Lambda}_n^{n+1} = \begin{pmatrix} 1+\alpha & 1-\alpha \\ 1-\alpha & 1+\alpha \end{pmatrix} \text{ avec } \alpha = \frac{k_{z,n}}{k_{z,n+1}} \tag{2.17}$$

Le déphasage et l'atténuation entre le début d'une couche et la fin de cette même couche sont obtenus par la matrice de déphasage $\mathbf{\Phi}_n$:

$$\mathbf{\Phi}_n = \begin{pmatrix} \varphi & 0 \\ 0 & \varphi^* \end{pmatrix} \text{ avec } \varphi = e^{ik_{z,n}a} \tag{2.18}$$

La matrice transfert d'une couche à une autre est obtenue par le produit des matrices précédentes. Par exemple, la matrice transfert de la couche 1 à la couche 3 s'écrit (figure 2.4) :

$$\begin{pmatrix} a_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = [\mathbf{T}] \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{2.19}$$
$$[\mathbf{T}] = \left[\mathbf{\Lambda}_2^3\right] [\mathbf{\Phi}_2] \left[\mathbf{\Lambda}_1^2\right]$$

Pour éviter des instabilité dans le calcul de la réflexion/transmission, les matrices de déphasage et d'interface doivent être écrites de manière inversées et on écrit les relations de passage de la couche 3 à la couche 1 :

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \left[\mathbf{\Lambda}_1^2\right]^{-1} \left[\mathbf{\Phi}_2\right]^{-1} \left[\mathbf{\Lambda}_2^3\right]^{-1} \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix} \tag{2.20}$$

L'instabilité provient des deux termes d'atténuation dans la matrice de déphasage : $\exp(\alpha z)$ et $\exp(-\alpha z)$. On peut penser que le sens des relations de passage n'a pas d'influence sur la stabilité car la matrice de déphasage est symétrique. En fait, le calcul de la réflexion/ transmission n'est pas le même selon le sens de passage et entraîne donc une instabilité dans le sens direct et pas dans le sens inverse.

Enfin, il suffit d'écrire la relation de passage précédente sous forme de matrice de dispersion [1] pour obtenir la réflexion/ transmission :

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{2.21}$$

La réflexion et la transmission sont définies sur la figure 2.5 Elles sont positionnées aux niveaux des interfaces extérieures de la couche.

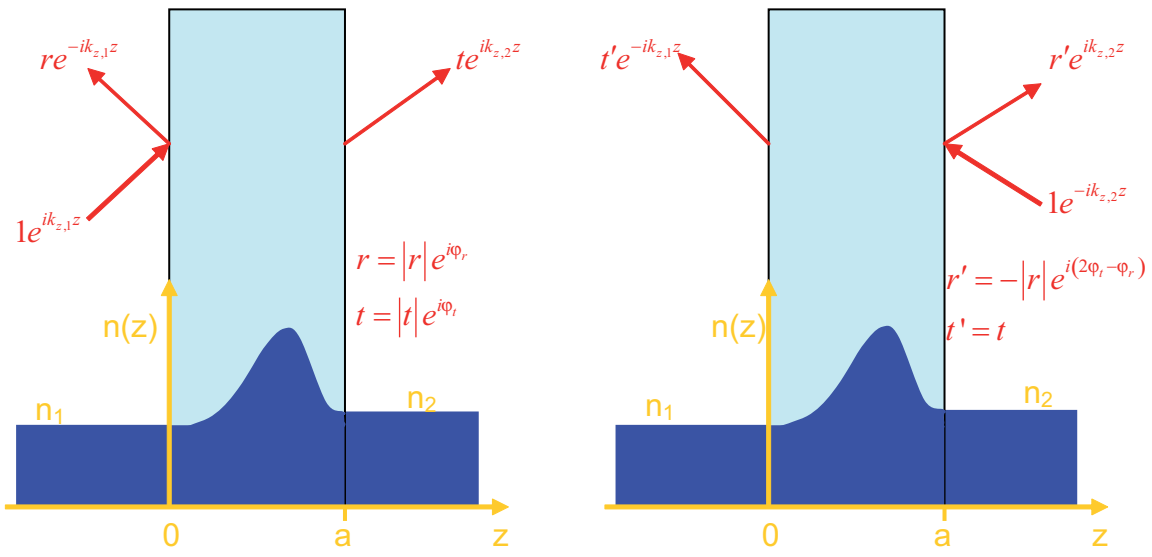


FIG. 2.5 – Coefficient de réflexion et de transmission

[1] La matrice de dispersion est normalisée différemment des paramètres S utilisés en mesures micro-ondes.

La réflexion et la transmission sont obtenues à partir des paramètres S définies à l'équation 2.21 :

$$\begin{aligned} r &= S_{11} \\ t &= S_{21} e^{-ik_0 d} \end{aligned} \tag{2.22}$$

2.3.2 Modèle de Kronig-Penney

Le modèle de Kronig-Penney évalue les niveaux électroniques d'une structure cristalline dans un potentiel périodique unidimensionnel [2]. Ce modèle prend en compte les incidences obliques. Il a été adapté aux cristaux photoniques en 2003, sous une forme analogue au modèle électronique [3]. Pour écrire ce modèle, nous utilisons le développement du paragraphe précédent. Le système est uniforme selon x et y et périodique selon z (figure 2.6).

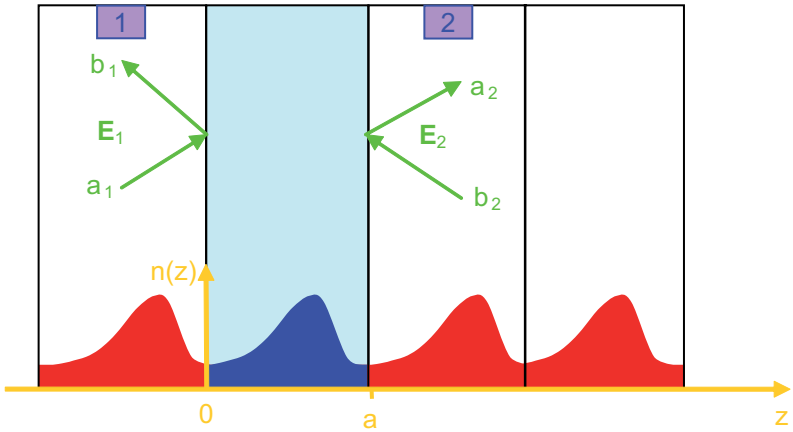


FIG. 2.6 – Indice de réfraction du CPh 1D

Le champ $E(z)$ du paragraphe précédent est une fonction de Bloch en z. Les relations de continuité des champs et le théorème de Bloch, nous donnent les deux relations suivantes :

$$\begin{cases} E_2(a) = e^{iKa} E_1(0) \\ \left.\frac{dE_2}{dz}\right|_a = e^{iKa} \left.\frac{dE_1}{dz}\right|_0 \end{cases} \tag{2.23}$$

K est le vecteur d'onde de Bloch appelé aussi moment de Bloch.

Dans la cellule élémentaire, la permittivité n'est pas uniforme selon z : elle est découpée en sous-cellules dont chacune à une permittivité constante. En appliquant le formalisme du paragraphe précédent, on obtient la matrice de transfert de la cellule élémentaire entière :

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{2.24}$$

On écrit l'équation 2.23 sous forme d'ondes progressive et rétrograde :

$$\begin{cases} a_2 e^{ik_z a} + b_2 e^{-ik_z a} = e^{iKa}\left(a_1 + b_1\right) \\ a_2 e^{ik_z a} - b_2 e^{-ik_z a} = e^{iKa}\left(a_1 - b_1\right) \end{cases} \tag{2.25}$$

Connaissant la matrice de transfert de la cellule élémentaire, on obtient la relation suivante :

$$\begin{pmatrix} T_{11} e^{ik_z a} & T_{12} e^{ik_z a} \\ T_{21} e^{-ik_z a} & T_{22} e^{-ik_z a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = e^{iKa} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{2.26}$$

Le facteur de Bloch e^{iKa} est une valeur propre de la matrice précédente. D'après la structure de l'équation, le facteur de Bloch conjugué est aussi une valeur propre. Comme la trace est inchangée par une diagonalisation, on obtient la relation suivante :

$$T_{11} e^{ik_z a} + T_{22} e^{-ik_z a} = 2\cos\left(Ka\right) \tag{2.27}$$

Pour se rapprocher du modèle de Kronig-Penney électronique, on écrit la relation précédente en fonction de la transmission. La réflexion et la transmission sont définies sur la figure 2.5. La matrice de transfert s'écrit à partir des coefficients de réflexion et de transmission :

$$\begin{aligned} T &= \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \text{ avec } T_{11} = T_{22}^*,\ T_{12} = T_{21}^* \\ T &= \tfrac{1}{1-|r|^2} \begin{pmatrix} t & -tr^* \\ -t^* r & t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/t'^* & r'/t' \\ r'^*/t'^* & 1/t' \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.28}$$

Grâce à cette dernière relation, on obtient l'équation transcendante du modèle de Kronig-Penney dans le cas général :

$$\frac{\cos\left(k_z + \varphi_{t,\gamma}\right)}{|t_\gamma|} = \cos\left(Ka\right) \tag{2.29}$$

Le coefficient de transmission n'est pas le même dans le cas TE et TM. On obtient la même équation que dans le cas électronique à la différence que la polarisation est prise en compte ici. Cette équation nous permet d'obtenir la structure de bande sous la forme :

$$f\left(k_\parallel, K, k_0\right) = 0 \tag{2.30}$$

L'équation transcendantale est simplifiée en incidence normale (chapitre 1).

2.4 Théorie des modes couplés

La théorie des modes couplés a été mise en place par Yariv en 1991 [4] pour les CPhs unidimensionnels. Elle utilise les mêmes principes que la théorie des électrons quasi-libres. Elle est

appelée aussi méthode des perturbations. La variation périodique de la permittivité du CPh est considérée comme une perturbation. Dans le cas d'une perturbation unidimensionnelle *i.e.* un CPh 1D, la permittivité peut s'écrire de la manière suivante :

$$\varepsilon_r(\mathbf{r}) = \varepsilon_r(x, y) + \Delta\varepsilon_r(x, y, z) \tag{2.31}$$

La permittivité varie périodiquement selon z. Le premier terme ε_r de la permittivité est la partie non perturbée *i.e.* homogène selon z. Le champ électrique peut être écrit sous la forme suivante :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_i\,(x, y)\, e^{ik_i z} \tag{2.32}$$

où l'indice i est continu ou discret. Dans le premier cas, il s'agit d'un état non lié appartenant au continum d'état, par exemple une onde plane. Dans le second cas, c'est un mode confiné, tel un mode guidé. Le champ $\mathbf{E}$ peut s'écrire aussi, sous forme d'une combinaison linéaire de ces modes.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_i A_i \mathbf{E}_i\,(x, y)\, e^{ik_i z} \tag{2.33}$$

L'équation de propagation pour le modèle non perturbé s'écrit :

$$\left[\partial_x^2 + \partial_y^2 + k_0^2 \varepsilon_r(x, y) - k_i^2\right] \mathbf{E}_i\,(x, y) = 0 \tag{2.34}$$

La perturbation modifie les intensités des modes précédents. Cette perturbation est analogue à la transition entre les états propres d'un atome sous l'influence d'une perturbation dépendante du temps. Lorsque une quantité d'énergie est échangée entre les modes, il y a un couplage entre ces modes. L'amplitude de chaque mode varie en fonction de z.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_l A_l\,(z)\, \mathbf{E}_l\,(x, y)\, e^{ik_l z} \tag{2.35}$$

L'équation d'onde complète s'écrit :

$$\left[\nabla^2 + k_0^2\,(\varepsilon_r(x, y) + \Delta\varepsilon_r(x, y, z))\right] \mathbf{E}\,(\mathbf{r}) = 0 \tag{2.36}$$

En faisant l'hypothèse des faibles perturbations : $\left|\partial_z^2 A_i\,(z)\right| \ll |k_i \partial_z A_i\,(z)|$, l'équation 2.36 se simplifie en utilisant l'équation 2.34 :

$$2i \sum_i k_i \partial_z A_i\,(z)\, \mathbf{E}_i\,(x, y)\, e^{ik_i z} = k_0^2 \sum_l \Delta\varepsilon_r(x, y, z) A_l\,(z)\, \mathbf{E}_l\,(x, y)\, e^{ik_l z} \tag{2.37}$$

La perturbation est développée en série de Fourier :

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_r(x, y, z) &= \sum_{m \neq 0} \varepsilon_m\,(x, y)\, e^{iG_m z} \\ G_m &= m\tfrac{2\pi}{a} \end{aligned} \tag{2.38}$$

Le premier terme est nul, du fait de la définition de la permittivité. Si on effectue le produit scalaire de l'équation 2.37 par $\mathbf{E}_i^*(x,y)$, l'équation se simplifie encore :

$$\begin{aligned}
&\partial_z A_i(z) = \tfrac{i\omega}{4}\tfrac{k_i}{|k_i|}\sum_{l,m}\langle i|\,\varepsilon_m\,|l\rangle\, A_l(z)\, e^{i(k_i-k_l-G_m)z} \\
&\langle i|\,\varepsilon_m\,|l\rangle = \int \mathbf{E}_i^*(x,y)\cdot\varepsilon_m(x,y)\mathbf{E}_l(x,y)\,dxdy \\
&\langle i \mid i\rangle = \tfrac{2\omega\mu_0}{|k_i|}
\end{aligned} \tag{2.39}$$

On obtient une simple équation différentielle. L'intégrale représente un coefficient de couplage entre deux modes non perturbés. Le couplage est important si les deux modes vérifient la condition de résonance suivante :

$$k_i - k_l - G_m = 0 \tag{2.40}$$

Si on considère seulement deux modes, une onde incidente de vecteur d'onde $k_i = k\cdot\cos\theta$ et une onde réfléchie $k_l = -k\cdot\cos\theta$. On retrouve la condition de diffraction de Bragg.

$$2a\cos\theta = m\lambda_0 \tag{2.41}$$

2.5 Approche par la fonction de Green unidimensionnelle

L'approche de la fonction de Green permet de prendre en compte dans un CPh 1D en incidence normale, les défauts localisés. Cette méthode est l'application de la méthode des perturbations utilisée en mécanique quantique. Comme dans le cas de la théorie des modes couplés, la permittivité est décomposée en deux parties.

$$\varepsilon_r(z) = \varepsilon_{per}(z) + \varepsilon_{def}(z) \tag{2.42}$$

La première partie de la permittivité est la partie périodique sans défauts. La solution de l'équation d'onde pour cette partie est supposée connue.

$$\partial_z^2 E_{K,n}(z) + k_{0,per}^2\varepsilon_{per}(z)E_{K,n}(z) = 0 \tag{2.43}$$

La solution du CPh périodique est écrite en terme d'onde de Bloch $E_{K,n}(x)$ pour chaque fréquence. K est le vecteur d'onde de Bloch et n l'indice de la bande.

La seconde partie de la permittivité représente le défaut localisé. L'équation 2.43 devient :

$$\partial_z^2 E(z) + k_{0,def}^2\varepsilon_{per}(z)E(z) = -k_{0,def}^2\varepsilon_{def}(z)E(z) \tag{2.44}$$

Nous allons développer la solution de l'équation complète sur la base d'onde de Bloch :

$$E(z) = \sum_{K,n} f_{K,n} E_{K,n}(z) \tag{2.45}$$

Cette base vérifie la relation d'orthogonalité suivante :

$$\langle K,n| \varepsilon_{per}(z) |K',n'\rangle = \int E^*_{K,n}(z)\, \varepsilon_{per}(z) E_{K',n'}(z)\, dz = C_{K,n}\delta_{n,n'}\delta_{K,K'} \tag{2.46}$$

En insérant les ondes de Bloch et en appliquant la relation d'orthogonalité sur l'équation d'onde complète, nous obtenons une équation aux valeurs propres :

$$\sum_{K',n'} f_{K',n'} \langle K,n| \varepsilon_{def}(z) |K',n'\rangle = \frac{k^2_{0,per} - k^2_{0,def}}{k^2_{0,def}} f_{K,n} \tag{2.47}$$

Le champ E est développé en terme de vecteurs du réseau réciproque :

$$E_{K,n}(z) = \sum_{G} e^{iGz} E^G_{K,n} \tag{2.48}$$

L'intégrale est convertie aisément en une double somme de fonctions simples sur l'espace réciproque. On peut choisir comme défaut celui de la figure 2.7.

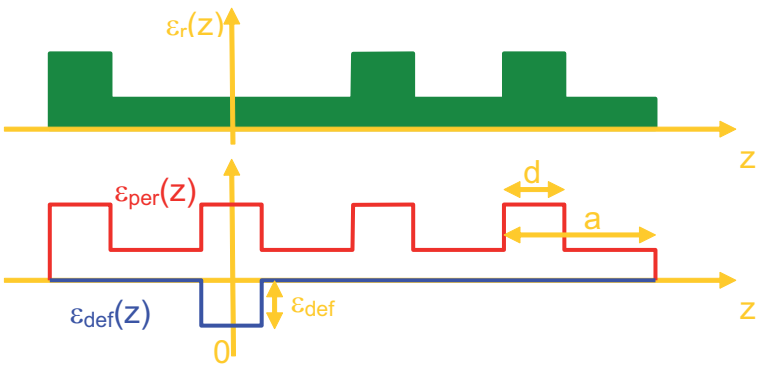


FIG. 2.7 – Défaut dans un CPh 1D

L'équation aux valeurs propres devient :

$$\sum_{K',n'} \sum_{G,G'} E^{*G}_{K,n} E^{G'}_{K',n'} \frac{2\varepsilon_{def} \sin\left[(G'-G)d/2\right]}{G'-G} f_{K',n'} = \frac{k^2_{0,per} - k^2_{0,def}}{k^2_{0,def}} f_{K,n} \tag{2.49}$$

Cette formulation peut être généralisée au cas 2D et 3D, mais malheureusement des problèmes de convergences apparaissent.

2.6 La méthode des éléments finis (FEM)

La méthode des éléments finis est très populaire en mécanique et en génie civil. Elle a été développée initialement dans les années 40, pour résoudre des problèmes de mécanique de structures. Quelques années plus tard, elle a été appliquée à l'électromagnétisme. Depuis, la méthode des éléments finis s'étend à tous les domaines de la physique et de l'ingénierie, où il existe des équations aux dérivées partielles à résoudre.

La méthode des éléments finis résout des problèmes avec des conditions aux limites. Elle est séparée en différentes parties. En premier lieu, on définit la géométrie du problème. Celle-ci est divisée en un grand nombre de petites régions élémentaires dont l'ensemble est appelé maillage. Pour des géométries planes, on utilise le plus souvent des triangles comme éléments de base. Pour des problèmes tridimensionnels, ce sont des tétraèdres la plupart du temps. Ces éléments bi- et tri-dimensionnels sont très utilisés parce qu'ils permettent de réaliser des maillages à pas variable (figure 2.8). Le maillage s'adapte aux structures courbes.

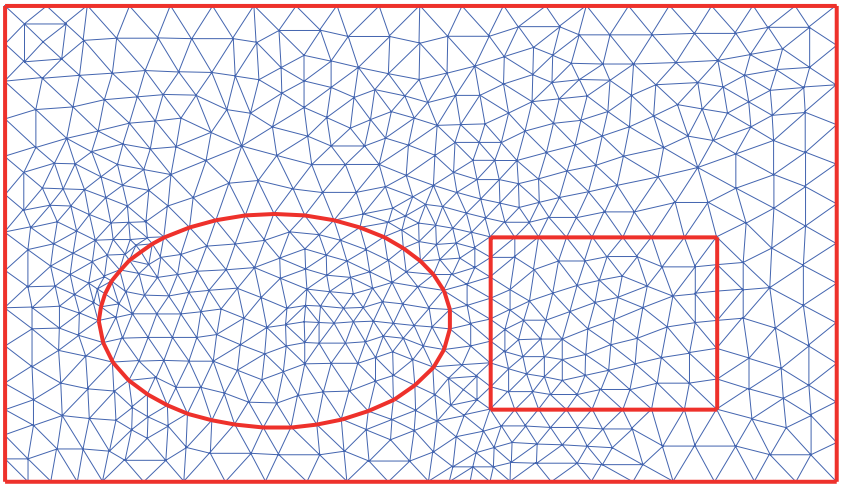


Fig. 2.8 – Maillage triangulaire adaptatif

L'équation aux dérivées partielles (EDP) ne peut pas être résolue directement dans le maillage décrit précédemment. Elle doit pour cela être écrite sous une forme variationnelle. Cette forme contient les informations de l'EDP et les conditions aux limites. Lorsque l'EDP est un problème de Laplace ou de Poisson, les formules de Green permettent d'écrire la formulation variationnelle des EDPs. Pour des EDPs plus complexes, on utilise la méthode des résidus pondérés. Soit $\Im$ un opérateur différentiel d'ordre n appliqué à une fonction à plusieurs

variables. On considère le problème suivant :

$$\begin{aligned} \Im(u) &= f \text{ dans le domaine } \Omega \\ C(u) &= g \text{ sur la frontière } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.50}$$

On cherche une solution approximée u_0 de ce problème. Cette solution produit un résidu :

$$r(u_0) = \Im(u_0) - f \neq 0 \tag{2.51}$$

La meilleure solution approximée u_0 est obtenue lorsque le résidu est le plus faible sur l'ensemble des points du domaine Ω. La méthode des résidus pondérés impose la condition suivante :

$$R_i = \int_{\Omega} w_i r(u)\, d\Omega = 0 \tag{2.52}$$

Les w_i représentent les fonctions de poids qui sont choisies.

Nous avons décrit deux parties de la FEM : la formulation variationnelle continue et le maillage discret. Un système d'équations discrètes ne peut pas être écrit avec ces deux seuls éléments. Des fonctions d'interpolation α_m sont utilisées pour approximer la solution continue sur un élément du maillage. A chaque nœud d'un élément correspond une fonction d'interpolation. La somme de ces fonctions d'interpolation pondérées par des coefficients ψ_i nous donne la solution sur un élément.

$$u_1 = \sum_{i=1}^{N} \psi_i \alpha_i \tag{2.53}$$

On utilise la même base de fonctions d'interpolation pour tous les éléments. On choisit très souvent une famille de fonctions polynômes. Pour simplifier, les fonctions d'interpolation d'un élément sont nulles au-delà de cet élément (figure 2.9).

La dernière étape consiste à réunir les différents éléments décrits précédemment pour obtenir un système matriciel et le résoudre (figure 2.10). On remplace la solution u dans la formulation variationnelle par la solution approximée. On se fixe les fonctions de poids. Si on utilise la méthode de Galerkin, les fonctions de poids sont les fonctions d'interpolations précédentes. Comme la solution approximée est développée sur une base discrète de fonctions d'interpolation, l'intégrale de la formulation variationnelle est calculée directement. On obtient un système d'équation dont les variables sont les coefficients ψ_i de chaque élément. La matrice du système est très souvent creuse et on utilise des méthodes spécifiques de résolution. La solution approximée est continue, et connue sur l'ensemble du domaine.

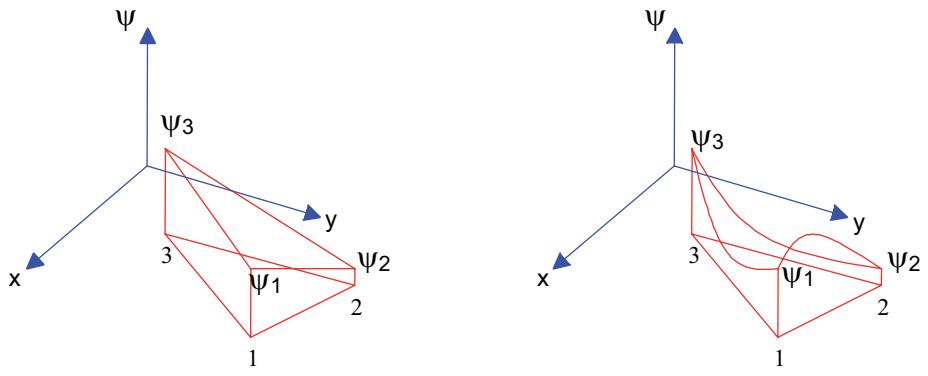


FIG. 2.9 – Fonctions d'interpolation linéaire et quadratique

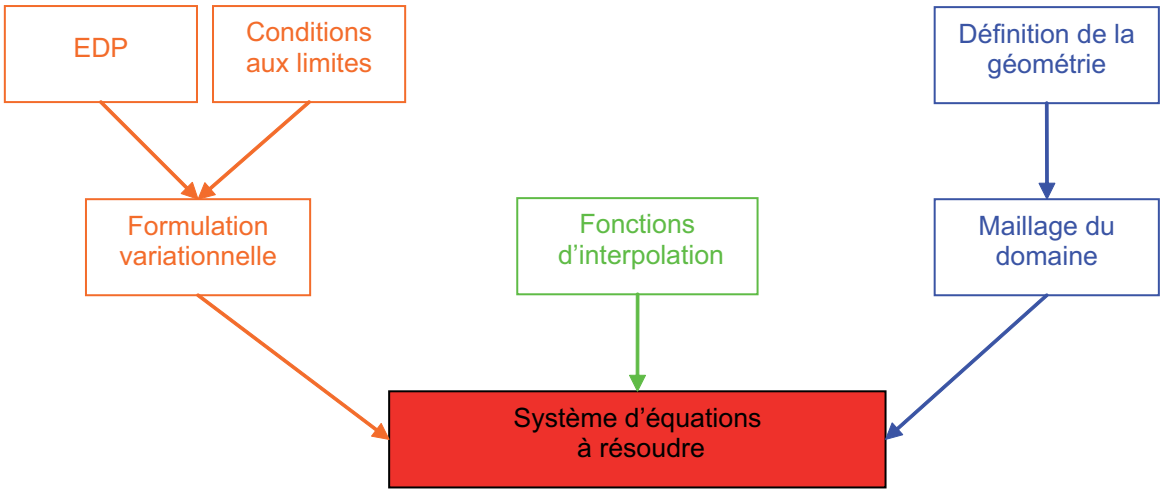


FIG. 2.10 – Les différentes étapes de la méthode des éléments finis

Il existe une très grande variété de codes d'éléments finis. On peut les classer en deux catégories : les codes généralistes et les codes spécialisés. Si les premiers permettent de résoudre un très grand nombre d'EDPs, ils ne sont par contre pas optimisés en temps de calcul et en mémoire. On peut citer comme exemple FEMLAB (Comsol) qui est un module qui s'intègre sous MATLAB. En électromagnétisme, il permet des simulations de propagation et des simulations DC-AC en deux et trois dimensions. On peut aussi utiliser des bibliothèques de modules d'éléments finis et développer seulement les parties qui nous intéressent. Cela est particulièrement intéressant pour le maillage. FreeFem++ est un code généraliste qui possède un code de maillage 2D réutilisable. A la différence des codes généralistes, les codes spécialisés sont optimisés pour une seule EDP. Dans le cas de l'électromagnétisme, les codes ne sont pas les mêmes selon que l'on soit à basses ou hautes fréquences. EMAP est un code libre pour la

modélisation de la propagation. Mais il est difficile de créer des structures complexes et de visualiser les champs. Nous lui préférerons HFSS, un logiciel commercial très populaire dans le domaine des micro-ondes. Dans le cas de modélisations DC et AC, on peut citer de la même société que le précédent, le logiciel Maxwell 2D et Maxwell 3D pour les structures 2D et 3D simulées à de faibles fréquences. Des codes encore plus spécifiques peuvent être réalisés : par exemple pour une seule condition aux limites et une seule source. Il faut trouver en fait un compromis entre le temps de réalisation d'un code et le temps gagné en exploitant ce code.

2.6.1 HFSS et la réflexion/transmission

HFSS (High Frequency Structure Simulator) est un logiciel créé par la société Agilent et qui est exploité maintenant par la société Ansoft. Il permet de modéliser des dispositifs propagatifs. L'EDP résolue est l'équation d'onde en $\mathbf{E}$:

$$\nabla \times \left[\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}\right] - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = \mathbf{0} \tag{2.54}$$

Au vu de l'équation, c'est un code fréquentiel : l'équation d'onde doit être résolue pour chaque fréquence. La fréquence est fixée et on cherche le champ électrique. Ce code 3D crée un maillage tétraédrique adaptatif. Les formules usuelles d'électromagnétisme permettent à partir du champ **E,** la visualisation du champ **H**, du vecteur de Poynting, de la densité de courant...

HFSS modélise aisément des dispositifs comme des antennes patchs, des lignes microruban. Ces dispositifs ont une longueur caractéristique très inférieure à la longueur d'onde d'étude. Les cristaux photoniques ont une périodicité proche de la longueur d'onde d'étude. Il est beaucoup plus difficile d'étudier les CPhs car plus la taille de l'objet à étudier augmente, plus la matrice à inverser devient grande. Nous ne pourrons étudier que des CPhs infinis selon au moins deux directions de l'espace. Les directions où le CPh est infiniment périodique ne nécessitent l'étude que d'une période selon cette direction, avec des conditions aux limites spécifiques. HFSS modélise les CPhs de plusieurs façons différentes.

Dans la première méthode, on impose une onde plane comme source (figure 2.11). On modélise un CPh cubique de quatre couches dont le motif est une sphère métallique. Comme le CPh est infini selon les directions latérales, une sphère latéralement suffit. Cinq sphères modélisent donc le CPh infini de cinq couches. On applique des conditions périodiques sur les faces latérales (Master/Slave). Sur les faces avant et arrière, on utilise des conditions

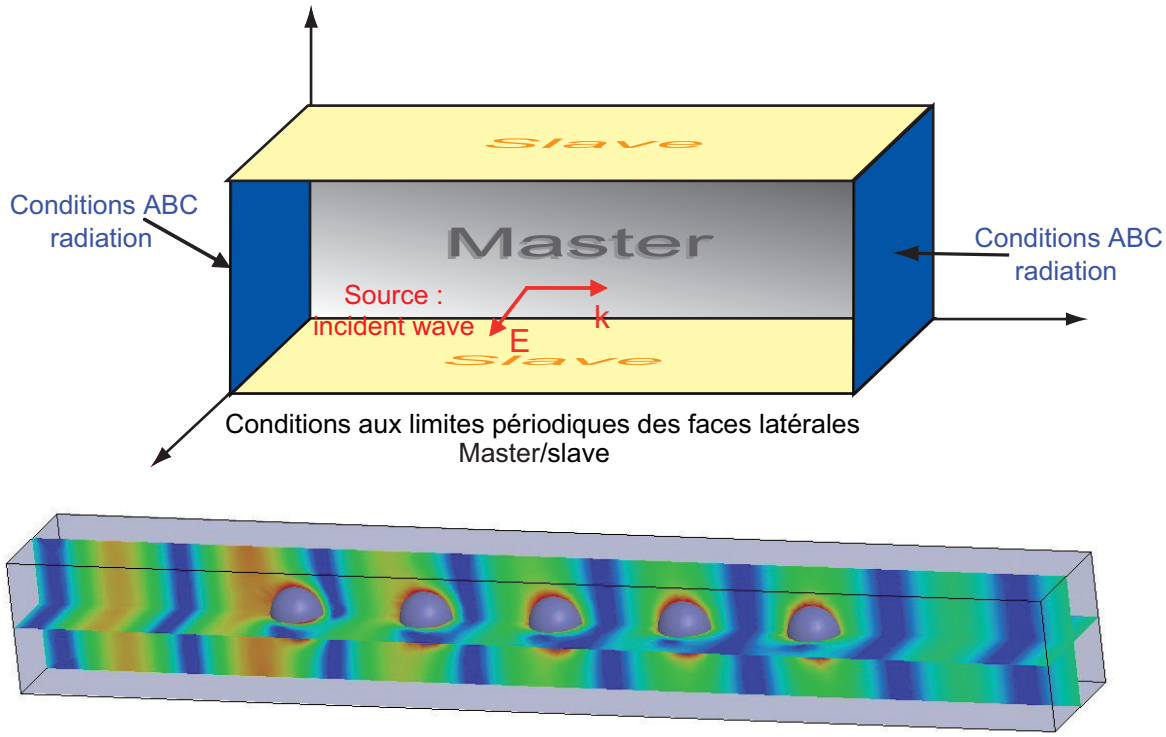


FIG. 2.11 – Modélisation d'un CPh par des conditions périodiques

absorbantes. Deux choix sont possibles soit les PML (Perfect Matched Layer) soit une condition analytique. La condition de radiation analytique utilisée par HFSS est une condition du second ordre suivante :

$$\begin{aligned} &(\nabla \times \mathbf{E})_{\parallel} = -ik_0\mathbf{E}_{\parallel} + ik_0^{-1}\nabla_{\parallel} \times \left(\nabla_{\parallel} \times \mathbf{E}_{\parallel}\right) - ik_0^{-1}\nabla_{\parallel}\left(\nabla_{\parallel} \cdot \mathbf{E}_{\parallel}\right) \\ &\mathbf{E}_{\parallel} \ : \ \text{composante tangentielle à la surface} \end{aligned} \tag{2.55}$$

Pour des ondes qui atteignent la surface absorbante avec un grand angle d'incidence, les PML sont beaucoup plus efficace que la condition analytique. Les PML sont adaptées pour des objets qui ont un rayonnement isotrope. Dans ce cas, on pourra rapprocher la condition absorbante de l'objet et réduire le domaine de calcul. Sur la figure 2.11, on a représenté le champ E pour des conditions analytiques. Nous avons choisi une incidence normale, si ce n'est pas le cas, un déphasage doit être ajouté sur les conditions périodiques. Ce déphasage est très aisé à ajouter car les grandeurs de champs utilisés dans la FEM sont complexes. La figure 2.12 représente la transmission d'un CPh cubique dont le motif est une sphère. On s'aperçoit qu'il y a deux bandes interdites en incidence normale.

La seconde méthode utilisée dans HFSS impose une source très différente. La répartition du champ de la source est déterminée par le logiciel. On dessine une surface plane en bord du

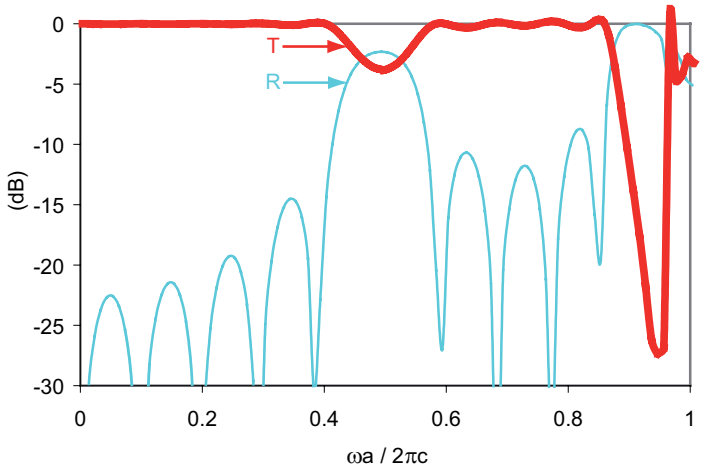


FIG. 2.12 – Transmission du CPh composé de 5 couches de sphères infiniment conductrices de rayon $r = 0.2a$

domaine de calcul et on lui assigne la source “waveport” [5]. Cette source est connectée à un guide d’onde semi-infini dont la section transversale est la surface dessinée. HFSS calcule les modes propagatifs dans ce guide fictif. Ce champ 2D calculé est appliqué à la surface dessinée et fait office de source pour le problème 3D. Chaque port est résolu indépendamment. La source est dimensionnée en puissance (Watt) alors que dans la première méthode c’était en champ (V/m). Cette source est très utilisée pour la modélisation des dispositifs micro-ondes. Pour étudier les CPhs, nous devons exciter la structure par une onde plane. Les surfaces latérales des guides d’ondes métalliques classiques sont modélisées par la condition “perfect E” *i.e.* le champ électrique tangentiel à la surface métallique est supprimé. Les guides classiques ne sont pas TEM. Pour rendre un guide TEM, on combine la condition précédente et la condition “perfect H” (figure 2.13). Dans cette dernière condition, le champ magnétique tangentiel sur la surface est supprimé. Cette condition forme artificiellement un conducteur magnétique parfait. L’onde plane a une incidence normale. Il n’est pas possible de changer l’angle d’incidence car les conditions aux limites des faces latérales ne seraient plus valables.

La structure CPh étudiée par la première méthode peut être réduite. Les sphères deviennent des quarts de sphères. Le domaine de calcul est divisé en proportion et le temps de calcul et la mémoire occupée sont fortement réduits. La symétrie des sphères permet cette division du domaine de calcul. En fait, le plan passant par la demi-sphère et parallèle aux plans métalliques a un champ électrique tangentiel nul. Le plan passant par la demi-sphère et parallèle aux plans magnétiques parfaits a un champ magnétique tangentiel nul. Ce sont ces

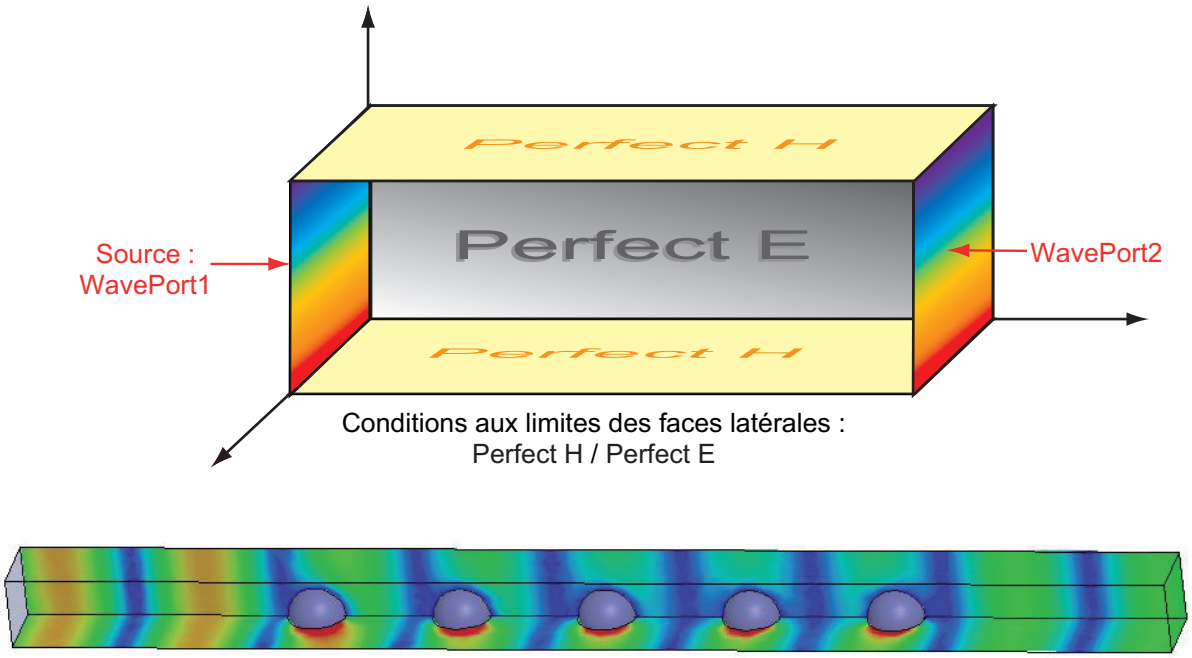


FIG. 2.13 – Modélisation d'un CPh par des plans E et H

symétries qui permettent de réduire par quatre le domaine de calcul. Par les deux méthodes, on obtient la même répartition de champ (figure 2.11 et figure 2.13). Ces répartitions de champ nous permettent de remonter à la réflexion et à la transmission (figure 2.14). Le premier pic se trouve à une fréquence normalisée de 0.5. Son positionnement nous indique qu'il s'agit d'une réflexion de Bragg.

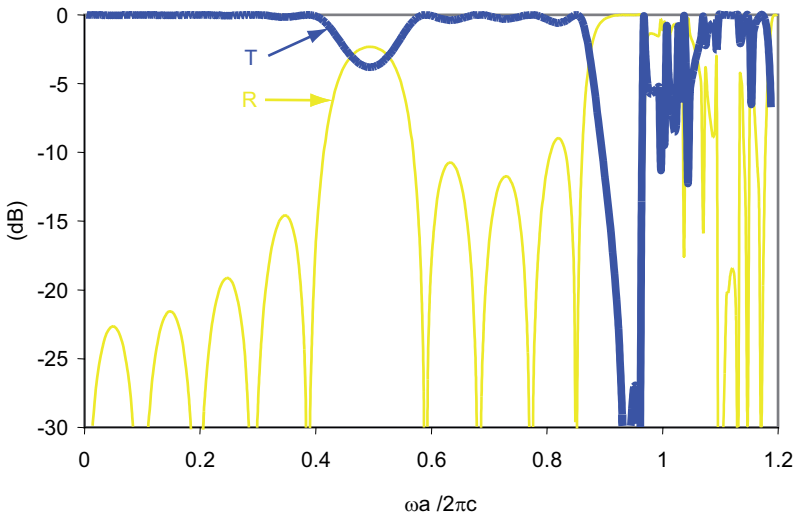


FIG. 2.14 – CPh métallique 5 couches de sphères $r = 0.2a$

Ce CPh cubique métallique se comporte quasiment comme un réflecteur de Bragg avec son lobe principal et ses lobes secondaires. Le nombre de lobes secondaires situés avant et après le pic principal correspond exactement au réflecteur de Bragg (voir chapitre 1). Au-delà de la fréquence normalisée de 0.9, la diffraction prend place sur le comportement précédent (voir chapitre 3). Le diagramme de bande peut être déduit de la réflexion/transmission mais il sera entaché de quelques imprécisions à cause du faible nombre de période du CPh (voir chapitre 4).

2.6.2 FEM et diagramme de bande

Le diagramme de bande nous indique les états se propageant dans la structure. Ces états sont différenciés par leur fréquence et leur vecteur d'onde. À un vecteur d'onde correspond plusieurs fréquences où le signal se propage. Si l'on fixe le vecteur d'onde, les inconnues sont les fréquences ou le nombre d'onde à vide dans l'équation d'onde. Nous devons résoudre une équation aux valeurs propres. Un code d'éléments finis 2D et 3D a été développé à partir de l'équation d'onde en $\mathbf{H}$ [6]. Dans le cas 3D, le champ $\mathbf{H}$ est projeté sur une base d'ondes de Bloch :

$$\begin{aligned} &\nabla \times \left[\varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r})\nabla \times \mathbf{H}\left(\mathbf{r}\right)\right] = k_0^2\mathbf{H}\left(\mathbf{r}\right) \\ &\mathbf{H}_k\left(\mathbf{r}\right) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}_k\left(\mathbf{r}\right) \end{aligned} \tag{2.56}$$

En combinant ces deux équations, on obtient l'équation suivante :

$$\left(i\mathbf{k} + \nabla\right) \times \left[\varepsilon_r^{-1}\left(\mathbf{r}\right)\left(i\mathbf{k} + \nabla\right) \times \mathbf{u}_k\left(\mathbf{r}\right)\right] = k_0^2\left(\mathbf{k}\right)\mathbf{u}_k\left(\mathbf{r}\right) \tag{2.57}$$

En appliquant la FEM à cette équation aux valeurs propres, on retrouve les fréquences propres et la répartition du champ. Ce code a été développé spécifiquement pour les CPhs. Il fonctionne correctement pour les structures 2D. Le code 3D est infiniment plus complexe puisque l'équation d'onde reste vectorielle. Ce code 3D présente quelques problèmes. Une autre solution consiste à utiliser un code commercial adapté pour les structures résonnantes micro-onde [7]. Nous allons reprendre le code commercial précédent. L'équation aux valeurs propres utilisée est l'équation d'onde en $\mathbf{E}$. Il n'y a pas de source à fixer seulement des conditions aux limites. Dans le cas d'une cavité résonnante, on choisit des conditions aux limites métalliques parfaites. Dans le cas des cristaux photoniques, on choisit des conditions de Bloch pour modéliser à partir d'une maille le CPh infini. Sur la figure 2.15, nous avons modélisé un CPh cubique diélectrique de rayon normalisé 0.4 et de permittivité 5.1.

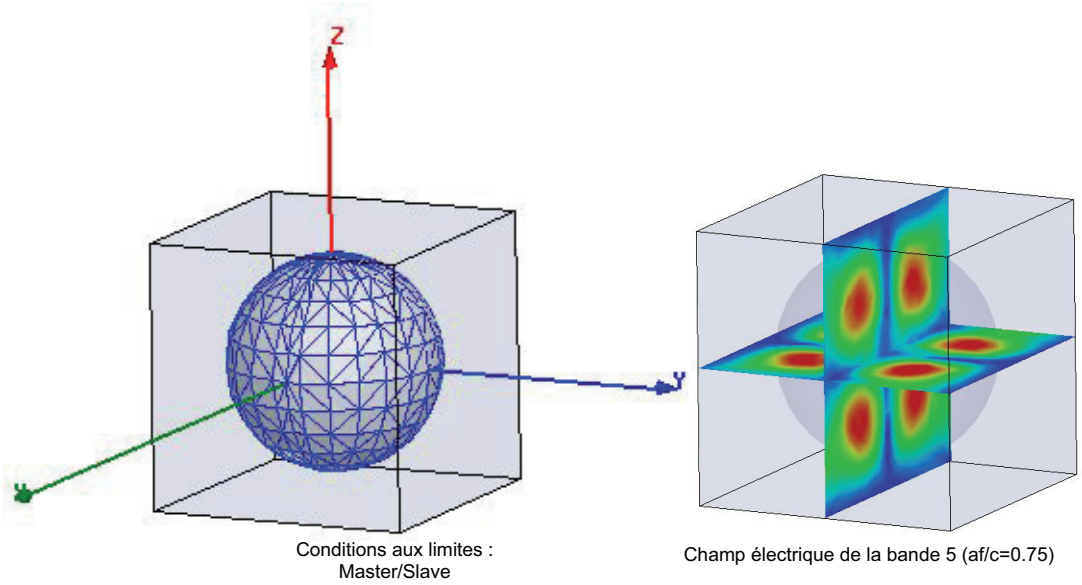


FIG. 2.15 – Maillage et visualisation de la solution du CPh en X

Une maille élémentaire non cubique peut aussi être modélisée. Le vecteur d'onde est fixé par les déphasages entre les faces parallèles de la maille. Les champs étant complexes les déphasages sont aisés à rajouter. Le diagramme de bande de ce CPh cubique est représenté sur la figure 2.16. Nous avons étudié le diagramme de bande d'un CPh diélectrique pour vérifier cette méthode. Grâce à cette méthode, on peut obtenir le diagramme de bandes des CPhs métalliques, métallo-diélectrique et diélectrique à pertes.

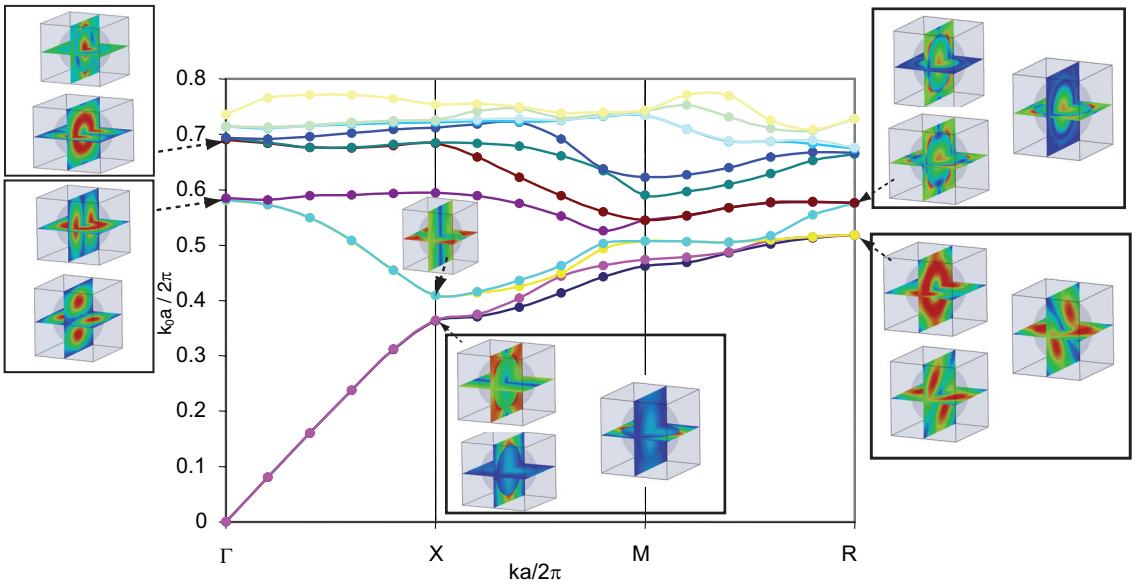


FIG. 2.16 – Diagramme de bande du CPh cubique

N'importe quel matériau peut être modélisé par cette méthode. Cela en constitue le principal avantage. L'étude des défauts nécessite l'utilisation d'une supercellule. Lorsque l'on augmente le nombre de sphères, la taille de la mémoire occupée augmente exponentiellement. De plus, les temps de calculs deviennent rédhibitoires. Il devient nécessaire d'optimiser ce code généraliste pour ce type de structure. Dans ce cas, c'est le code spécifique précédent qui devient intéressant.

2.7 La méthode des différences finies temporelles (FDTD)

La méthode des différences finies est une méthode générale de résolution des EDPs. Elle est d'une très grande simplicité de mise en œuvre. Elle est appelée aussi méthode ordre N du fait de son faible coût de calcul [8]. La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées apparaissant dans le problème continu par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets. Le principal inconvénient, qui fait d'ailleurs sa simplicité, c'est la limitation de la géométrie des domaines de calculs.

En 1966, Yee proposa un schéma de différences finies temporelles appliqué à l'électromagnétisme ; la FDTD était né. Elle est devenue rapidement un moyen incontournable de modélisation. On peut citer comme domaines d'utilisation celui des effets des téléphones portables sur le corps humain, la conception des antennes, les circuits imprimés et la connectique. Le succès de cette méthode réside pour partie sur la robustesse d'un algorithme basé sur un développement de Taylor du second ordre.

La FDTD utilise les deux équations structurelles de Maxwell dans un milieu conducteur, isotrope et homogène :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{H} &= -\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E} \\ \partial_t \mathbf{E} &= \varepsilon^{-1} \nabla \times \mathbf{H} - \sigma \varepsilon^{-1} \mathbf{E} \end{aligned} \tag{2.58}$$

La FDTD repose sur une approximation des dérivées par des différences divisées centrées :

$$u'(x_i) = \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h} + o\left(h^2\right) \tag{2.59}$$

Ce développement de Taylor de la dérivée première a une précision du second ordre. C'est ce degré de précision qui fait l'intérêt de la méthode. Le schéma de Yee applique cette approximation aux dérivées spatiales et temporelles des équations structurelles de Maxwell (figure 2.17). Les champs **E** sont évalués avec un décalage d'une demi incrémentation temporelle par rap-

port aux instants où sont calculés les champs **H**, ceci pour conserver les différences centrées. Le schéma de Yee est entièrement explicite et d'ordre N où N est proportionnel à la taille du système à modéliser. Alors que les algorithmes traditionnels sont d'ordre N^3 comme la FEM présentée précédemment.

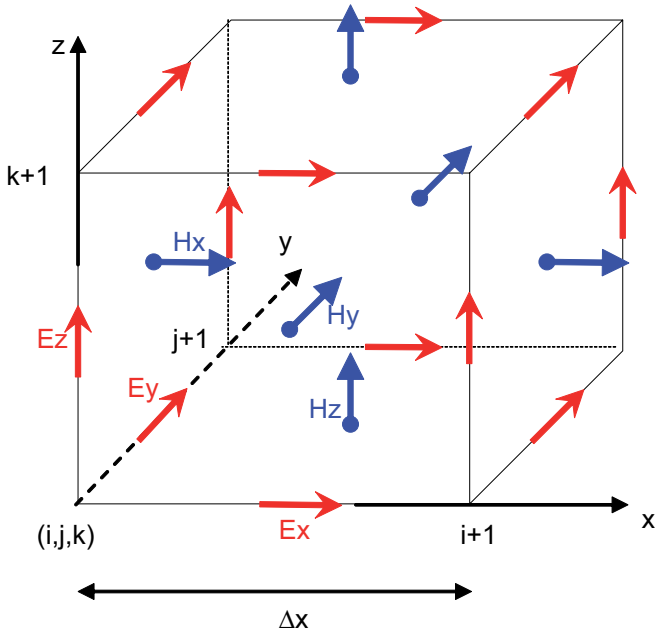


FIG. 2.17 – Cellule de Yee et position des champs

Le schéma de Yee est appliqué à un maillage cubique. Des sous maillage peuvent être réalisés sur des parties du domaine nécessitant plus de précision. La FDTD peut être aussi appliquée à des maillages conformes [9]. Le schéma de Yee appelé aussi *saute-mouton* (leapfrog en anglais) est stable s'il vérifie la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) dans le vide :

$$c\Delta t \leqslant \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \tag{2.60}$$

Cette condition signifie que l'onde ne peut pas se propager d'une cellule à l'autre à une vitesse supérieure à celle de la lumière. On retrouve numériquement le principe physique. Si cette condition CFL est trop restrictive, on peut recourir à la méthode ADI-FDTD dont le schéma est inconditionnellement stable [10, 11]. Ce schéma est intéressant pour des temps de simulation relativement long que l'on peut rencontrer en bioélectromagnetisme. Mais il est partiellement implicite. Nous choisirons le pas de temps suivant $c\Delta t = \Delta x/2$. La FDTD introduit une dispersion du signal (figure 2.18). Pour un signal source de longueur d'onde donnée, plus on diminue le pas spatial moins il y aura de dispersion. La simulation de la

figure 2.18 est réalisée avec une FDTD bidimensionnelle. Il n'est pas étonnant que l'erreur soit minimale à 45°. Nous avons choisi 20 points par longueur d'onde. Pour diminuer l'erreur sur la vitesse de phase, on peut artificiellement diminuer la vitesse de la lumière. Pour un certain angle d'incidence choisi, on aura une dispersion numérique nulle.

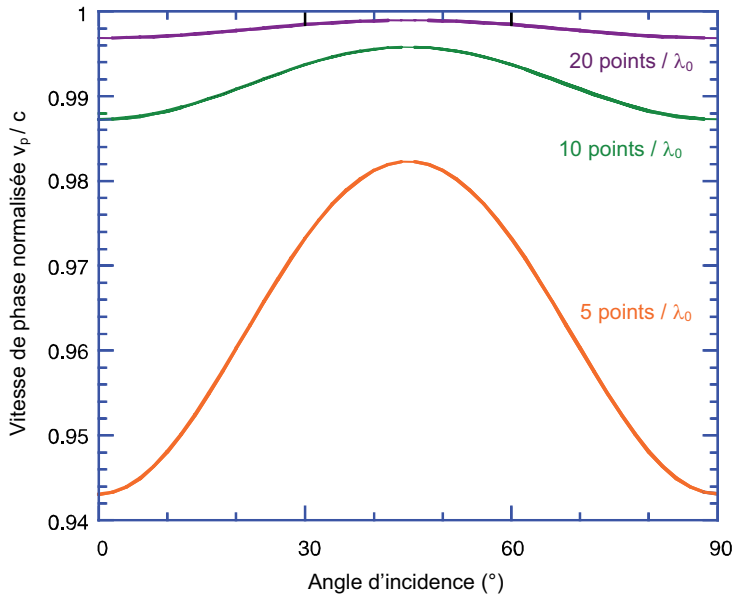


FIG. 2.18 – Variation de la vitesse de phase numérique (FDTD 2D)

Il existe trois types de formulation de la FDTD :

- La formulation champ total (TF),
- La formulation champ diffracté pure (SF),
- La formulation champ total/champ diffracté (TF/SF).

La formulation TF est un cas d'école mais en pratique elle n'est jamais utilisée. Il n'y a pas séparation entre le champ incident et le champ diffracté par l'objet. La formulation SF supprime le champ incident directement dans les équations de Maxwell [12]. Les conditions absorbantes (ABC) voient seulement le champ diffracté sans le champ incident. Les conditions absorbantes sont donc plus efficaces. Comme le champ incident ne se propage pas dans la structure de calcul, on n'introduit pas d'erreur de vitesse de phase sur ce champ. Les conditions métalliques deviennent plus complexes avec cette formulation. La troisième formulation est un mixte des deux formulations précédentes [13, 14]. Le domaine de calcul est divisé en deux parties : une partie avec la formulation SF et une partie avec la formulation TF (figure 2.19).

Les objets diffractants sont dans la partie TF et les absorbants dans la partie SF. Le

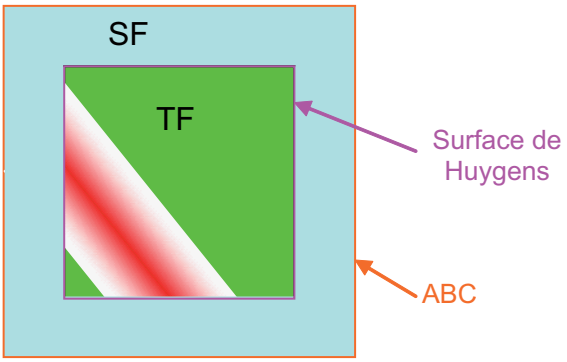


FIG. 2.19 – Formulation TF/SF

passage d'un domaine à l'autre est réalisé par les surfaces de Huygens. Un champ total faible résulte d'un équilibre entre le champ incident et le champ diffracté. Les bruits des deux derniers champs se soustraient dans cette formulation. Ce n'est pas le cas dans la formulation SF. Les formulations SF et TF/SF sont toutes les deux très utilisées.

Les champs sont calculés dans le domaine temporel. Le passage dans le domaine fréquentiel peut être effectué de trois façons différentes :

- Source sinusoidale,
- Source gaussienne + FFT,
- Source gaussienne + transformée de Fourier.

La première solution consiste à appliquer une source sinusoïdale et recommencer la simulation pour chaque fréquence. En pratique, cette méthode n'est jamais utilisée excepté si on travaille à une seule fréquence. La seconde solution consiste à appliquer une source gaussienne ou un pulse et de réaliser une FFT pour passer dans le domaine fréquentiel. Une seule simulation suffit pour une plage de fréquence mais on doit garder l'ensemble du signal temporel en mémoire pour effectuer la FFT. La dernière solution consiste à utiliser la même source que précédemment tout en calculant en même temps que la FDTD, la transformée de Fourier. Cela évite d'enregistrer le signal temporel des champs.

2.7.1 Architecture informatique du code FDTD

Le code FDTD repose sur une architecture un peu particulière (figure 2.20). Le code FDTD en lui même est écrit en Fortran. Il est compilé sur un micro-ordinateur PC et sur un supercalculateur UNIX. La définition et la visualisation des structures sont obtenues par des fonctions prédéfinies sous Matlab. Ce dernier ne pouvant être installé sur notre supercalcu-

lateur, les parties visualisation du champ et définition des paramètres de la simulation sont réalisées sur un PC. Lorsque les structures à simuler sont simples, on utilise le code FDTD sur PC. La communication entre Fortran et Matlab est réalisée par fichier. Il existe d'autres systèmes de communications plus performants mais qui ne sont pas compatibles avec le supercalculateur. Si les structures deviennent plus complexes, le code FDTD est basculé sur le supercalculateur. La communication entre les deux systèmes est réalisée par fichiers et FTP.

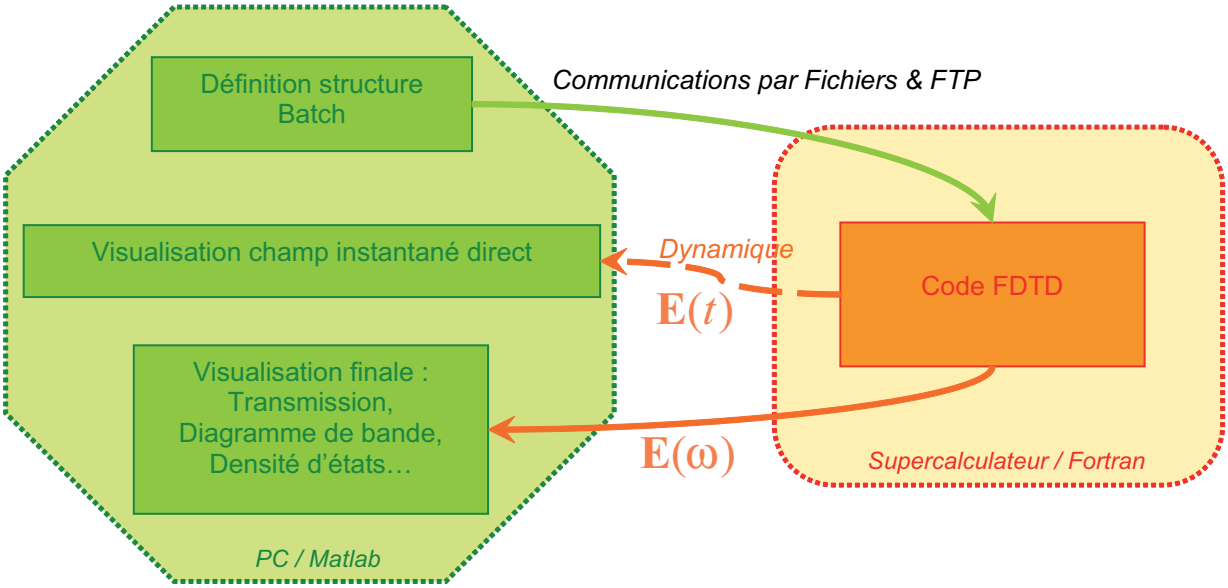


Fig. 2.20 – Architecture du code FDTD sur supercalculateur et PC

2.7.2 Modélisation des CPhs en transmission

Le code FDTD permet la modélisation de CPhs finis et infinis. Pour éviter des temps de calcul prohibitifs, les CPhs finis sont modélisés sur le supercalculateur. Des conditions absorbantes entourent le domaine de calcul des CPhs finis. On utilise des PML et des conditions de Mur. Quelque soit le CPh étudié, la source est une gaussienne dont le spectre s'étend sur la plage de fréquence à étudier. La modélisation des CPhs infinis utilise des conditions périodiques sur les faces latérales (figure 2.21). Le CPh métallique simulé par la FEM est modélisé en FDTD (figure 2.22). Le module de la transmission et de la réflexion est en adéquation avec les modélisations précédentes. En incidence normale, les conditions de Mur suffisent pour modéliser les CPhs. La phase est obtenue de la même manière que les mesures expérimentales en faisant une mesure de référence à vide. La phase de la transmission du CPh décroît en fréquence. Au niveau de la première bande interdite, le déphasage est inversé, la phase remonte.

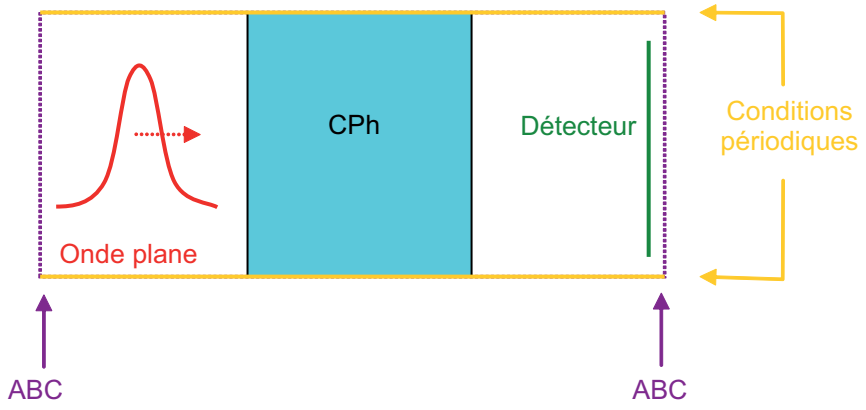


FIG. 2.21 – Source, sonde et conditions aux limites pour les CPhs infinis

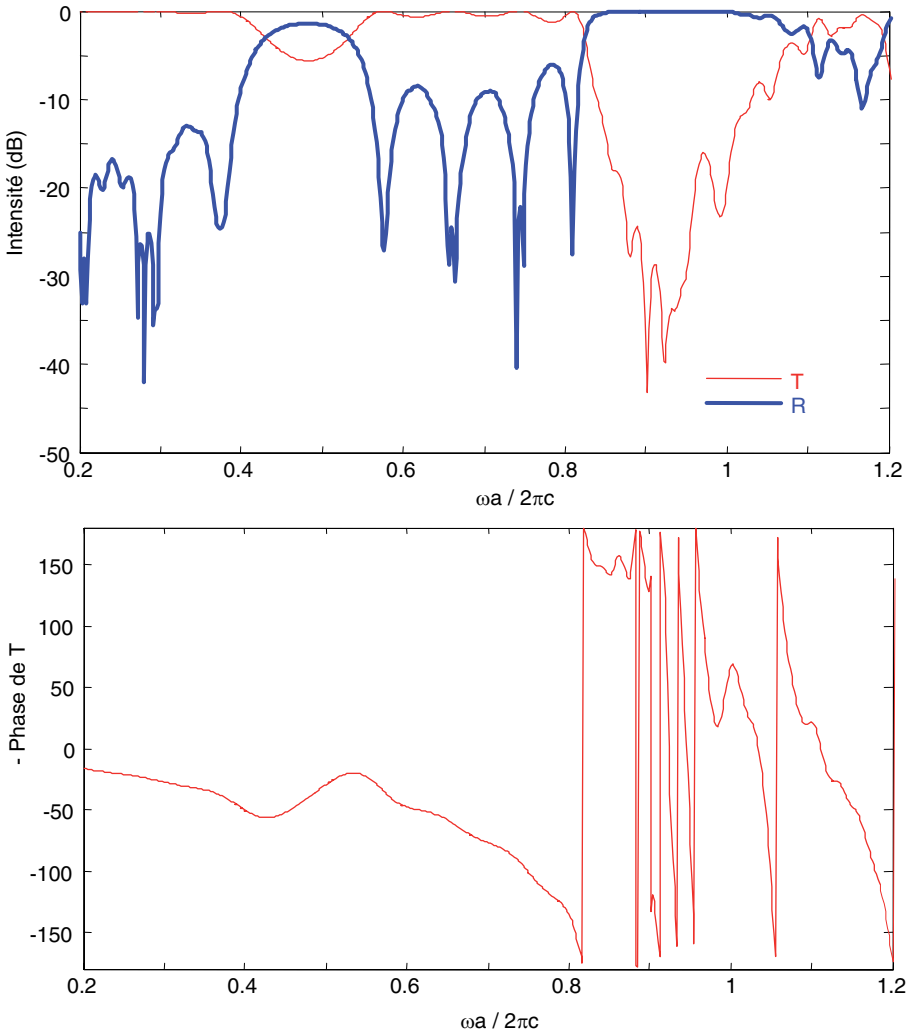


FIG. 2.22 – Intensité et déphasage du CPh métallique

Le même comportement a été rencontré pour les CPhs 1D (voir chapitre 1). Au niveau de la seconde bande interdite vers 0.9, il n'y a pas cette remontée. Le CPh se comporte à cette fréquence et au-delà comme un réseau diffractant et non comme un réflecteur de Bragg.

2.7.3 Incidence oblique

Nous avons étudié jusqu'ici une propagation en incidence normale. Si nous ne sommes pas dans ce cas, une simple condition périodique ne suffira pas. De nombreuses méthodes existent pour résoudre ce problème. Une première méthode consiste à ajouter à une condition périodique un décalage temporel qui est fonction de l'angle d'incidence. Ces conditions ne sont appliquées que sur le champ **H** donc sur une des deux faces parallèles, sur l'autre face on applique une condition absorbante. Le critère de causalité ne nous permet pas d'appliquer ces conditions sur le champ **E**. On modélise plusieurs périodes latéralement pour éviter l'interaction de l'onde incidente avec les ABC (figure 2.23).

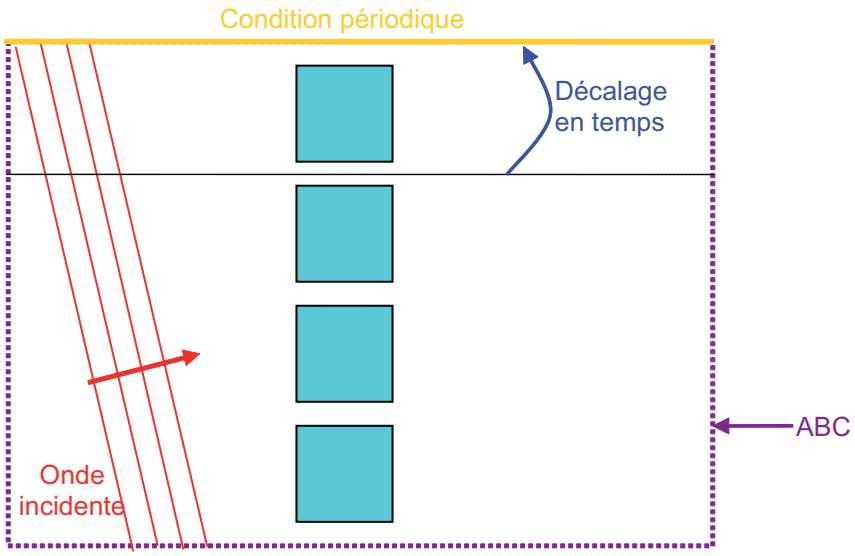


FIG. 2.23 – Modélisation en incidence oblique

Une autre méthode consiste à simuler le problème deux fois en changeant seulement les sources (figure 2.24). Si on utilise une source avec une dépendance en $\cos(\omega t)$ et une source en $\sin(\omega t)$, on peut combiner les deux simulations pour obtenir la solution de la source en $\exp(-i\omega t)$.

Grâce à cette source, on obtient des champs complexes et on peut appliquer les conditions de Bloch. Cette méthode est simplifiée pour l'étude du diagramme de bande.

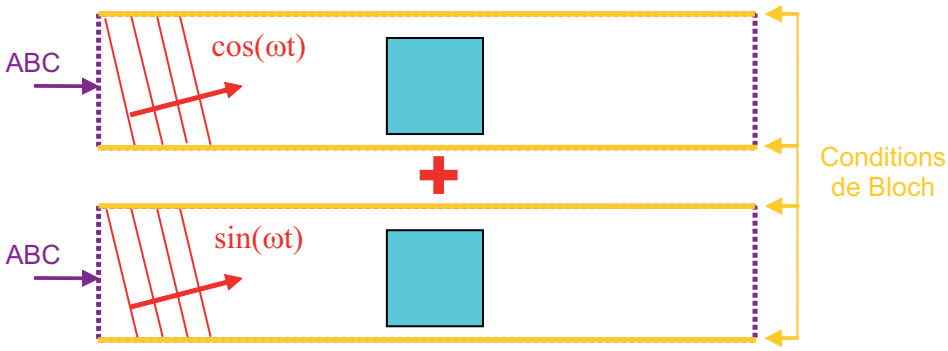


FIG. 2.24 – Application des conditions de Bloch

2.7.4 Modélisation du diagramme de bande des CPhs

La méthode FDTD est un schéma explicite. Il n'y a pas de matrices à inverser. Le calcul du diagramme de bande est une recherche de modes propres. Ici, ce calcul ne peut pas être traduit en un problème aux valeurs propres. Nous sélectionnons seulement une maille du CPh [8, 15, 16], sur les frontières de laquelle on applique des conditions de Bloch (figure 2.25). Pour exciter la structure, on utilise plusieurs gaussiennes simultanément. Une seule modélisation suffit pour appliquer les conditions de Bloch. On simule la structure pendant 100 000 pas de temps.

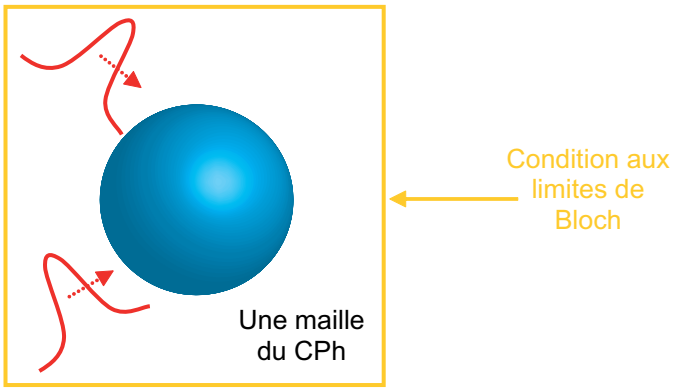


FIG. 2.25 – Type de structure utilisée pour le diagramme de bande

Au cours de la simulation les modes propagatifs restent et sont mêmes amplifiés. Les modes évanescents au contraire s'atténuent. Si le nombre de pas de temps est trop faible, les pics de transmission sont élargis donc imprécis. Pour diminuer le nombre de pas de temps sans diminuer la précision, on peut utiliser une approximation de Padé ou la formulation ADI-FDTD. Si la source n'excite pas tous les modes propagatifs possibles, ils ne se retrouveront

pas dans la structure. Sur la figure 2.26, nous avons représenté l'amplitude des modes du CPh cubique diélectrique modélisé précédemment par la FEM.

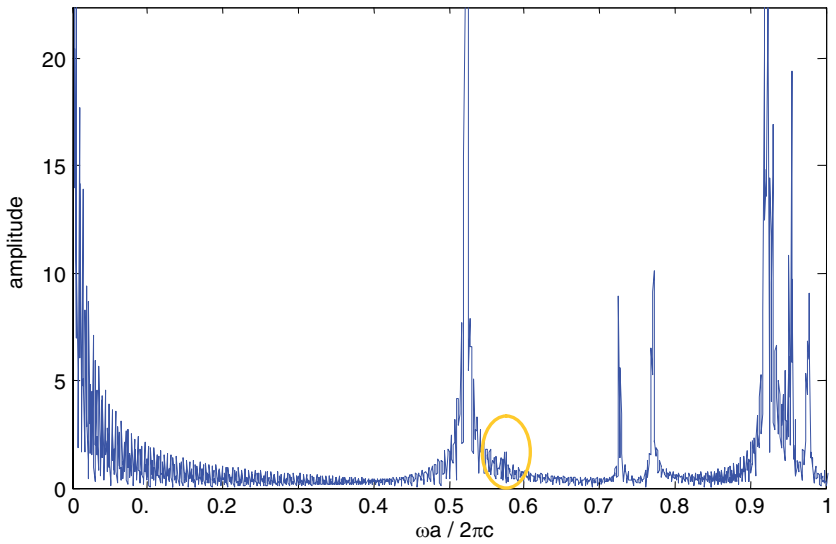


FIG. 2.26 – Amplitude du CPh diélectrique au point R de la zone de Brillouin

Cette courbe est l'analogue du diagramme de diffraction en physique du solide. Cette courbe doit être tracé pour l'ensemble des points de la zone réduite pour obtenir le diagramme de bande complet. L'ensemble de ces points peut être regroupé sur un graphique 3D. Cela permet de faire l'étude du CPh dans l'espace réciproque [17]. Si on compare la courbe de la figure 2.26 au diagramme de bande obtenu par la FEM, on s'aperçoit que le mode à 0.57 est très atténué et que le mode suivant obtenu par la FEM n'existe pas. En fait, la source n'a pas été choisie correctement pour exciter ces modes. Il faut donc veiller à ce que la source excite tous les modes possibles.

2.8 Méthode des volumes finis (FIT)

La méthode des volumes finis intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de lois de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives. Elle est adaptée pour les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie... Sa mise en œuvre est simple si les volumes élémentaires sont des rectangles. Cependant, elle peut être utilisée sur des volumes élémentaires de forme quelconque.

La méthode des volumes finis utilise une formulation intégrale des EDPs. En 1977, Wei-

land propose un schéma de discrétisation spatial pour les équations intégrales de Maxwell [18]. Ce schéma appelé Finite Integration Theory (FIT) peut être appliqué à de nombreux problèmes d'électromagnétisme, du statique aux hautes fréquences, dans le domaine temporel et fréquentiel. Le domaine de calcul est découpé par une grille orthogonale (maillage cubique). Sur chaque cellule élémentaire, on applique les équations intégrales de Maxwell pour obtenir des équations intégrales locales. Le procédé de discrétisation est appliqué sur la forme intégrale de la loi de Faraday :

$$\oint_{\partial S} \mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{l} = -\iint_{S} \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{S} \qquad \forall S \in \Re^3 \tag{2.61}$$

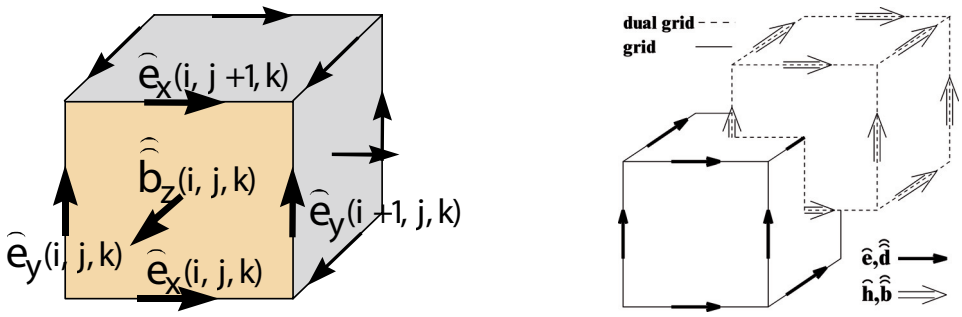


FIG. 2.27 – Placement dans le maillage des composantes de tensions et de flux

Cette équation est discrétisée en utilisant le schéma de la figure 2.27. On utilise une grille duale comme en FDTD. On obtient une équation différentielle discrétisée :

$$\begin{aligned}
&\widehat{e}_x(i,j,k) + \widehat{e}_y(i+1,j,k) - \widehat{e}_x(i,j+1,k) - \widehat{e}_y(i,j,k) = -\partial_t \widehat{\widehat{b}}_z(i,j,k)\\
&\widehat{e}_x(i,j,k) = \textstyle\int_{(x_i,y_j,z_k)}^{(x_{i+1},y_j,z_k)} \mathbf{E}\cdot d\mathbf{l}\\
&\widehat{\widehat{b}}_z(i,j,k) = \textstyle\int_{S_z(i,j,k)} \mathbf{B}\cdot d\mathbf{S}
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Cette discrétisation est appliquée aux trois autres équations de Maxwell sous forme intégrale. On obtient les équations discrètes suivantes :

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{e}} = -\partial_t \widehat{\widehat{\mathbf{b}}} \quad \tilde{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{h}} = \partial_t \widehat{\widehat{\mathbf{d}}} + \widehat{\widehat{\mathbf{j}}}\\
&\tilde{\mathbf{S}}\widehat{\widehat{\mathbf{d}}} = \mathbf{0} \quad \tilde{\mathbf{S}}\widehat{\widehat{\mathbf{d}}} = \mathbf{q}
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Cette description est une représentation exacte et ne contient aucune erreur d'approximation. Les matrices $\tilde{\mathbf{C}}$ et $\tilde{\mathbf{S}}$ sont les homologues discrets des opérateurs rotationnels et divergence. Le tilde des opérateurs indique que l'opérateur est exécuté sur l'espace dual. Les e, b, h, d et j sont les homologues des champs **E**, **B**, **H**, **D** et **J** sous forme de circulation ($\widehat{\square}$) et

de flux($\widehat{\widehat{\square}}$). Ces équations respectent les propriétés de conservation de charge et d'énergie. Elles assurent donc une stabilité et une bonne convergence du code. Ces équations discrètes peuvent être appliquées soit dans le domaine temporel, soit dans le domaine fréquentiel. Pour simplifier, nous avons décrit la FIT sur un maillage cubique mais elle peut s'étendre aux maillage non-orthogonaux comme c'est le cas dans le logiciel MAFIA de CST (Computer Simulation Technology).

2.8.1 Microwave Studio

Microwave Studio [19] de CST est un code de calcul basé sur le schéma FIT. Il utilise un maillage cubique pour limiter les coûts de calcul. La FIT est appliquée dans le domaine temporel. La discrétisation des dérivées temporelles est faite par le schéma leap-frog utilisé aussi en FDTD. Le schéma est stable s'il vérifie la condition CFL. A la différence de la FDTD, l'utilisation ici de la forme intégrale locale permet d'appliquer la technique des Perfect Boundary Approximation (PBA) [20]. Cette technique découpe une cellule élémentaire en deux et assigne à chacune des parties un matériau différent (figure 2.28). La frontière entre les deux matériaux peut être une surface de forme quelconque. Pour des structures relativement complexes géométriquement ou contenant des singularités, les PBA diminuent significativement le nombre de mailles nécessaires. Grâce à cette technique de maillage, Microwave Studio peut prendre par exemple en compte les épaisseurs des feuilles métalliques sans avoir besoin de les mailler directement.

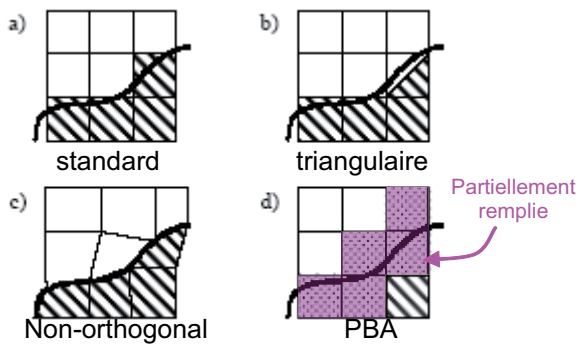


Fig. 2.28 – Différents maillages et approximations

2.8.2 Modélisation de la transmission et de la structure de bande des cristaux photoniques

Les cristaux photoniques infinis et finis peuvent être simulés par cette méthode. Grâce aux PBA, le maillage est diminué. On peut donc augmenter le nombre d'objets simulés. Un CPh de 180 sphères métalliques est modélisable par cette méthode. La figure 2.29 présente la réflexion et la transmission de ce CPh composé de 5 couches.

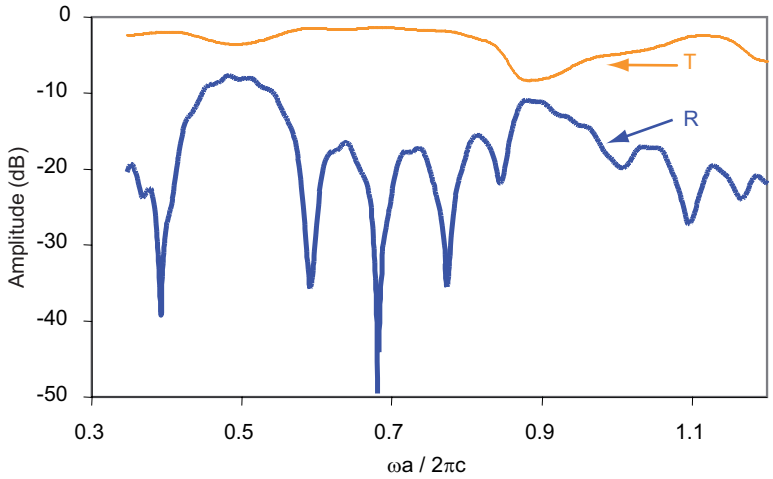


FIG. 2.29 – CPh métallique 5 couches de sphères $r = 0.2a$

On retrouve une bande interdite aux fréquences normalisées 0.5 et 0.9 mais elles sont atténuées. Les résonances Fabry-Pérot sont visibles sur la réflexion. Cette méthode permet l'étude d'un réseau de sphères *i.e.* un CPh fini. Les autres méthodes demande beaucoup plus de mémoire et de temps de calcul pour simuler de telles structures. La méthode FIT place correctement les bandes interdites mais des imprécisions existent sur leurs niveaux.

Microwave Studio contient aussi un solver dans le domaine fréquentiel. Les CPhs sont étudiés sur des plages de fréquences et donc ce solver ne présente pas d'intérêt pour les CPhs. Les CPhs infinis peuvent être étudiés grâce aux conditions périodiques et aux conditions "perfect electric conductor" (PEC) et "perfect magnetic conductor" PMC comme sur HFSS. Microwave Studio a un solver de modes propres. Ce solver est utilisé pour déterminer les modes résonnants d'une cavité. Il peut être utilisé aussi pour tracer le diagramme d'un CPh comme pour la FDTD et la FEM. Les conditions de Bloch sont obtenues par l'ajustement des phases des conditions périodiques.

2.9 Méthode des différences finies dans le domaine fréquentiel (FDFD / TMM)

Nous allons étudier une méthode de différences finies couplées aux matrices transferts et à une transformée de Fourier spatiale. La méthode des différences finies discrétise les EDPs. Contrairement à la FDTD, les EDPs sont résolues dans l'espace fréquentiel. En électromagnétisme, La FDFD utilise les équations structurelles de Maxwell dans l'espace ($\mathbf{k}$, ω) :

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \times \mathbf{E} &= \omega \mu_0 \mathbf{H} \\ \mathbf{k} \times \mathbf{H} &= -\omega \varepsilon \mathbf{E} \end{aligned} \tag{2.64}$$

Aux deux équations de Maxwell, on applique respectivement les approximations suivantes :

$$\begin{cases} k_x \approx \left(e^{ik_x a} - 1\right)/ia \\ k_y \approx \left(e^{ik_y b} - 1\right)/ib \\ k_z \approx \left(e^{ik_z c} - 1\right)/ic \end{cases} \qquad \begin{cases} -k_x \approx \left(e^{-ik_x a} - 1\right)/ia \\ -k_y \approx \left(e^{-ik_y b} - 1\right)/ib \\ -k_z \approx \left(e^{-ik_z c} - 1\right)/ic \end{cases} \tag{2.65}$$

a, b, c : pas du maillage selon x, y et z

On obtient des équations discrétisées. En 1992, Pendry et MacKinnon [21–23] ont couplé cette méthode à des matrices transferts. Cette méthode appelée méthode des matrices transfert (TMM) a été développée pour les cristaux photoniques. Elle calcule le champ électromagnétique d'une couche et la solution de cette couche est étendue par une matrice transfert à la structure toute entière. Le calcul d'une couche est réalisé par les équations discrétisées précédentes sur un maillage cubique. Pour appliquer les matrices transferts, les équations discrétisées doivent être écrites sous une forme particulière. Si on transforme ces équations dans l'espace réel, on obtient un jeu d'équations où la composante z des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{H}$ peut être supprimée. On a réduit le nombre d'équations de six à quatre. Les quatre équations restantes sont écrites sous une forme matricielle :

$$F(\mathbf{r} + c) = \sum_{r'} \hat{\mathbf{T}}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'\right) F\left(\mathbf{r}'\right) \text{ où } F(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} E_x(\mathbf{r}) \\ E_y(\mathbf{r}) \\ H_x(\mathbf{r}) \\ H_y(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \tag{2.66}$$

Le passage d'une couche à l'autre se fait par le produit de cette matrice.

2.9.1 Structure de bande

La structure de bande est obtenue en fixant la fréquence et en calculant les vecteurs d'onde se propageant dans la structure. Le théorème de Bloch s'applique au vecteur F :

$$\begin{aligned} &F(\mathbf{r}+a') = e^{ik_x a'} F(\mathbf{r}) \\ &F(\mathbf{r}+b') = e^{ik_y b'} F(\mathbf{r}) \\ &F(\mathbf{r}+c') = e^{ik_z c'} F(\mathbf{r}) \\ &a' = \alpha a,\ b' = \beta b,\ c' = \gamma c : \text{ taille de la maille selon } x,\ y, \text{ et } z \end{aligned} \tag{2.67}$$

La matrice de transfert de la maille entière s'écrit à partir de celle d'une cellule :

$$\begin{aligned} &F(\mathbf{r}+c') = \sum_{r'} \hat{\mathbf{T}}(c',0)\, F(\mathbf{r}') \\ &\text{avec } \hat{\mathbf{T}}(c',0) = \prod_{j=1}^{N} \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{j-1}) \end{aligned} \tag{2.68}$$

Si on réunit les équations précédentes, on obtient un problème aux valeurs propres :

$$\sum_{r'} \hat{\mathbf{T}}(c',0)\, F(\mathbf{r}') = e^{ik_z c'} F(\mathbf{r}) \tag{2.69}$$

On fixe le vecteur d'onde $k_{||}$ et la fréquence ω *i.e* k_0. Les solutions du problème aux valeurs propres sont les vecteurs d'ondes k_z. Les valeurs propres ayant une partie imaginaire sont éliminées car elles ne correspondent pas à des ondes propagatives.

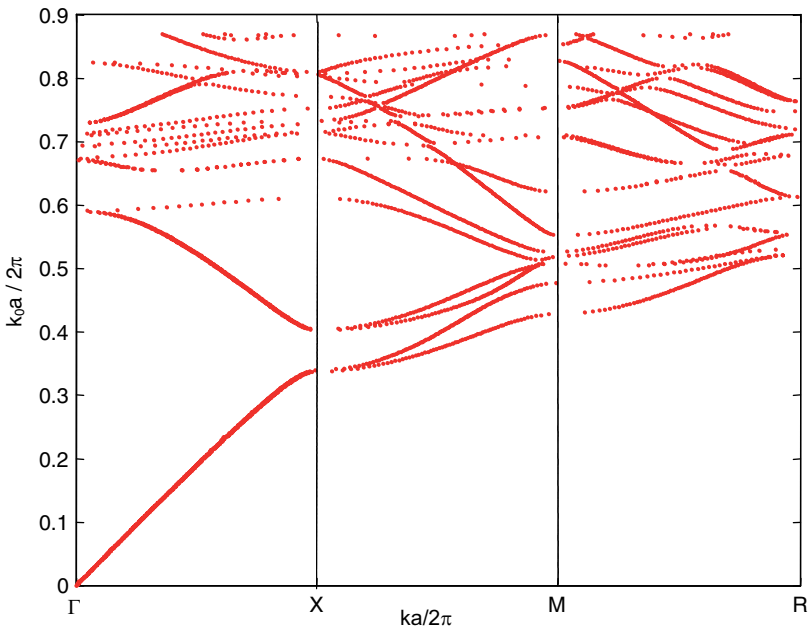


FIG. 2.30 – Structure de bande du CPh diélectrique

L'ensemble des valeurs propres restantes nous donne la structure de bande $k_z(k_0)$. La figure 2.30 représente ce diagramme pour le CPh diélectrique modélisé par cette méthode. Les premières bandes sont en adéquation avec les autres méthodes de modélisation. Les erreurs sur les bandes supérieures sont dues au faible maillage (7x7x7).

2.9.2 Réflexion/Transmission

Le calcul de la réflexion et de la transmission est réalisé aussi à l'aide des matrices transferts. Il est plus intéressant de calculer les éléments de la matrice de transmission que l'intensité du champ transmis en différents points. Les ondes incidentes, réfléchies et transmises sont développées sur une base d'onde plane. Heureusement, nous pouvons utiliser la matrice transfert pour définir cette base. Soit $\hat{\mathbf{T}}_\mathbf{0}$, la matrice transfert d'une couche vide $\varepsilon_r(\mathbf{r}) = 1$. Les vecteurs propres de $\hat{\mathbf{T}}_\mathbf{0}$ définissent une base d'ondes planes :

$$\hat{\mathbf{T}}_\mathbf{0} \left|r_i\right\rangle = e^{ik_i c} \left|r_i\right\rangle \tag{2.70}$$

Comme $\hat{\mathbf{T}}_\mathbf{0}$ n'est pas un opérateur hermitique, les vecteurs propres de droite et de gauche sont distincts.

$$\left\langle l_i\right| \hat{\mathbf{T}}_\mathbf{0} = e^{ik_i c} \left\langle l_i\right| \tag{2.71}$$

Les vecteurs propres étant orthogonaux entre eux, nous pouvons normaliser les vecteurs propres à un.

$$\langle l_i \mid r_i \rangle = \delta_{ij} \tag{2.72}$$

Comme nous sommes dans une couche vide, k_z est retrouvé aisément. Les vecteurs propres de droite forme une base d'ondes planes développées seulement sur $k_{||}$ (figure 2.31).

La polarisation et le sens de propagation sont aussi pris en compte dans le développement en ondes planes. Les vecteurs propres de droite et de gauche sont développés dans l'espace réciproque. La matrice transfert est connue dans l'espace direct. Nous devons utiliser des transformées de Fourier directe et inverse pour rendre compatible, les vecteurs propres et la matrice transfert (figure 2.32).

La matrice de transfert $\hat{\mathbf{T}}$ n'est pas utilisée directement dans le calcul de la réflexion / transmission. On effectue un changement de base de cette matrice de transfert pour quelle soit compatible avec la nouvelle base d'onde plane.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{T}} \left|r_i\right\rangle &= \sum_\alpha \tilde{T}_{\alpha i} \left|r_\alpha\right\rangle \\ \left\langle l_j\right| \hat{\mathbf{T}} \left|r_i\right\rangle &= \sum_\alpha \tilde{T}_{\alpha i} \left\langle l_j \mid r_\alpha\right\rangle = \tilde{T}_{ji} \end{aligned} \tag{2.73}$$

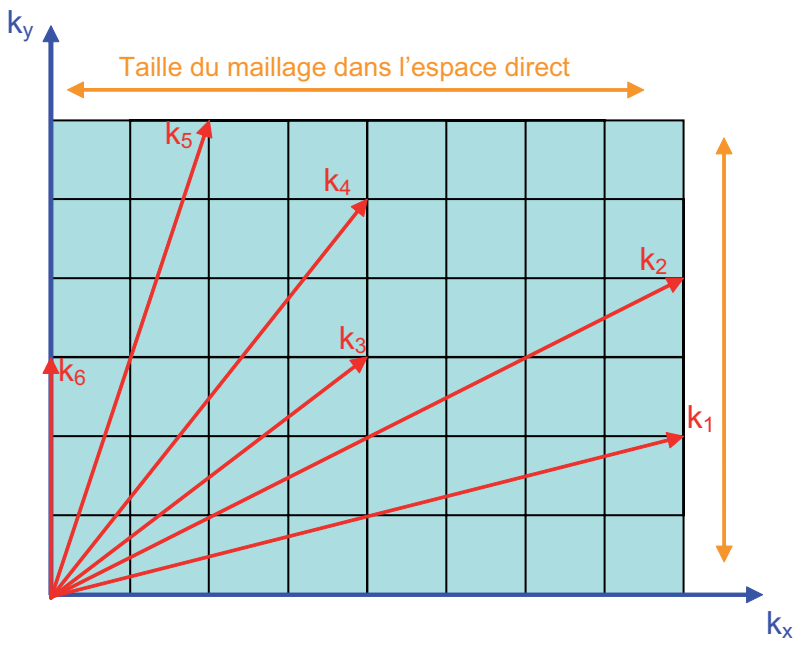


FIG. 2.31 – Développement sur une base d'onde plane

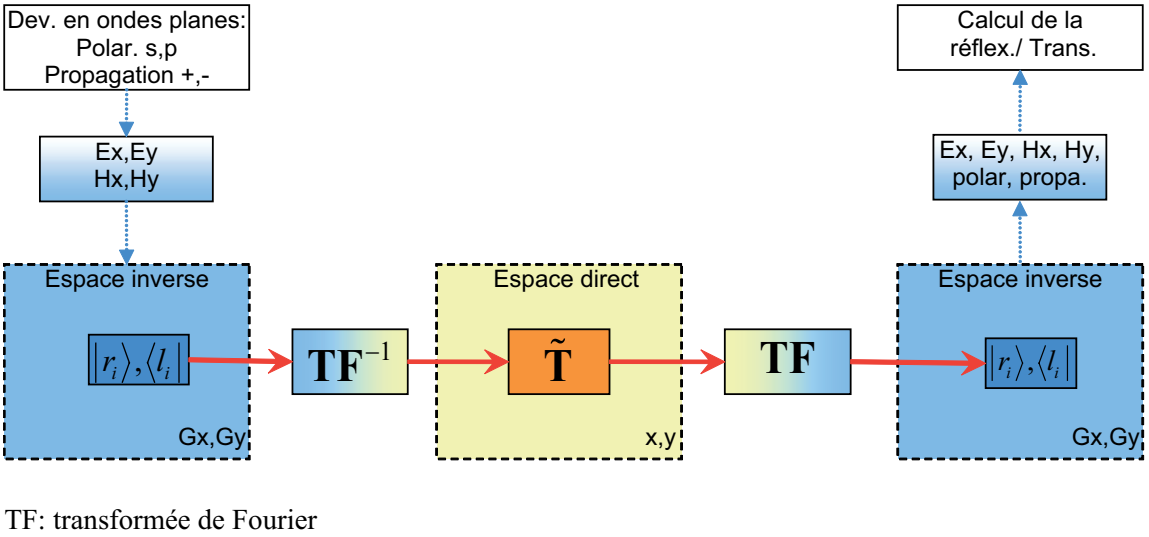


FIG. 2.32 – les différentes étapes de calcul de la réflexion/transmission

Cette matrice est réordonnée de façon à regrouper les vecteurs propres ayant le même sens de propagation. Cette matrice est donc divisée en quatre blocs.

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{T}}_{11} & \tilde{\mathbf{T}}_{12} \\ \tilde{\mathbf{T}}_{21} & \tilde{\mathbf{T}}_{22} \end{pmatrix} \tag{2.74}$$

Pour obtenir la matrice transfert de plusieurs couches, il suffit de les multiplier. Mais ce

procédé ne sera pas retenu car les vecteurs d'ondes peuvent être imaginaires et donc entraîner un mauvais rayon spectral de la matrice $\tilde{\mathbf{T}}$. Une autre solution consiste à utiliser la technique de multidiffusion entre les plaques. Il n'y aura plus de problèmes de convergences car la multidiffusion est numériquement stable. Soit **t** et **r** les matrices de réflexion et de transmission pour une onde incidente se propageant à partir du coté gauche de la couche et **t'** et **r'** à partir du coté droit (voir MST 1D pour les notations). La matrice $\tilde{\mathbf{T}}$ peut s'exprimer à partir de ces matrices :

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} \mathbf{t} - \mathbf{r}'\mathbf{t}'^{-1}\mathbf{r} & \mathbf{r}'\mathbf{t}'^{-1} \\ -\mathbf{t}'^{-1}\mathbf{r} & \mathbf{t}'^{-1} \end{pmatrix} \tag{2.75}$$

Si on applique le principe de multidiffusion à deux couches, les matrices de réflexion et de transmission deviennent :

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{2c'} &= \mathbf{t}_{1c'}\left(1 - \mathbf{r}'_{1c'}\mathbf{r}_{1c'}\right)^{-1}\mathbf{t}_{1c'} & \mathbf{r}_{2c'} &= \mathbf{r}_{1c'} + \mathbf{t}'_{1c'}\mathbf{r}_{1c'}\left(1 - \mathbf{r}'_{1c'}\mathbf{r}_{1c'}\right)^{-1}\mathbf{t}_{1c'} \\ \mathbf{t}'_{2c'} &= \mathbf{t}'_{1c'}\left(1 - \mathbf{r}_{1c'}\mathbf{r}'_{1c'}\right)^{-1}\mathbf{t}'_{1c'} & \mathbf{r}'_{2c'} &= \mathbf{r}'_{1c'} + \mathbf{t}_{1c'}\mathbf{r}'_{1c'}\left(1 - \mathbf{r}_{1c'}\mathbf{r}'_{1c'}\right)^{-1}\mathbf{t}'_{1c'} \end{aligned} \tag{2.76}$$

Le processus est répété jusqu'à obtenir le nombre de couches désiré. La TMM permet la simulation des CPhs ayant un nombre de couches très important sans augmenter les ressources informatiques.

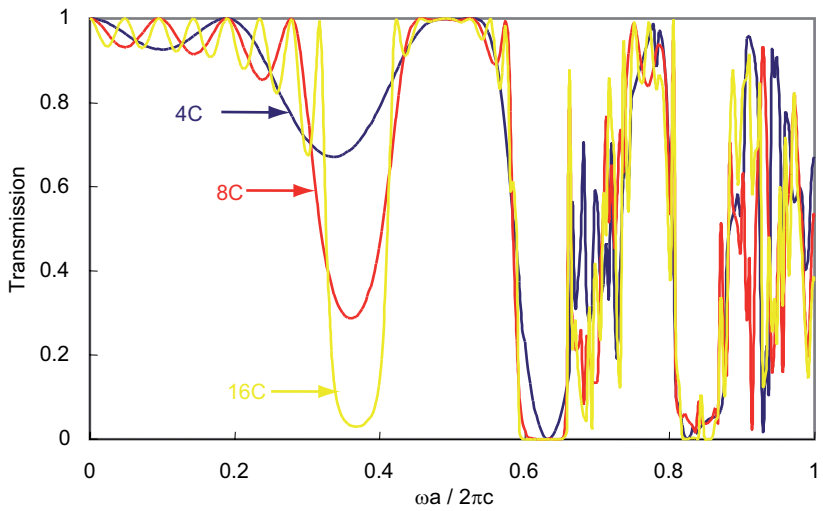


FIG. 2.33 – Transmission du CPh diélectrique

La figure 2.33 présente la transmission du CPh diélectrique de la figure précédente. Les pics de réflexions correspondent aux bandes interdites de la structure de bande. La première bande interdite correspond à la réflexion de Bragg. Elle s'approfondit avec le nombre de couches. La seconde bande interdite est déjà proche de 0 pour un nombre très faible de couches. Sur

la figure précédente, on s'aperçoit que les bandes s'aplatissent à partir de la seconde bande interdite. Ces bandes sont moins structurées que les premières, une forte diffraction apparaît à partir de la fréquence normalisée 0.6. Nous avons un comportement très similaire au CPh métallique. La seule vraie différence est dans la position et l'amplitude de la première bande interdite.

2.10 Méthode des ondes planes (PWM)

La méthode des ondes planes est la méthode la plus couramment utilisée pour étudier la structure de bande des cristaux photoniques. Elle est issue de la physique du solide. Les fonctions d'ondes électroniques sont scalaires alors que les champs électromagnétiques sont par nature vectoriels. Une approximation scalaire des champs ne suffit pas pour décrire correctement la structure de bande (chapitre 1). Cette méthode a subi quelques modifications pour prendre en compte la nature vectorielle des champs. En 1990, les trois variantes de la PWM vectorielle ont été créées quasi simultanément :

- La méthode à partir du champ **E** [24],
- La méthode à partir du champ **D** [25],
- La méthode à partir du champ **H** [26].

C'est d'ailleurs cette dernière méthode qui a permis de prouver l'existence d'une bande interdite complète dans des structures périodiques diélectriques.

2.10.1 Cas tridimensionnel

Nous avons vu au chapitre précédent que les champs **D** et **H** étaient continus dans les CPhs contrairement au champ **E**. De plus, seuls les opérateurs différentiels de l'équation d'onde en **E** et en **H** sont hermitiques. Du fait de ces propriétés d'hermiticité et de continuité, nous avons choisi d'appliquer la PWM à l'équation d'onde en **H**. Comme son nom l'indique, la méthode des ondes planes utilise un développement en onde plane du champ et de la permittivité. Comme la permittivité est une grandeur périodique, le théorème de Bloch s'applique au champ **H** :

$$\begin{aligned} &\mathbf{H}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}.\mathbf{r}}\mathbf{h}(\mathbf{r}) \\ &\mathbf{h}(\mathbf{r}) = \mathbf{h}(\mathbf{r}+\mathbf{T}) \\ &\mathbf{T} : \text{ vecteur de translation du réseau} \end{aligned} \tag{2.77}$$

Toutes les fonctions périodiques peuvent être développées en séries de Fourier sur l'espace réciproque :

$$\begin{aligned}\varepsilon_r(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}.\mathbf{r}} \\ \varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon_{\mathbf{G}}^{-1} e^{i\mathbf{G}.\mathbf{r}} \\ \mathbf{h}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}.\mathbf{r}}\end{aligned} \tag{2.78}$$

Le champ $\mathbf{H}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G},\lambda=1,2} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda}\end{aligned} \tag{2.79}$$

Comme le champ $\mathbf{H}$ est transverse, chaque onde plane peut être décomposée à son tour sur le plan transverse au vecteur de propagation $\mathbf{K}+\mathbf{G}$. Le plan est décrit par les vecteurs unitaires $\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}$ et $\hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}$. Il suffit de deux vecteurs de base au lieu de trois. Cela diminuera la taille de la matrice à placer en mémoire. La base $\left(\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}, \hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}, \mathbf{K}+\mathbf{G}\right)$ forme un trièdre direct. Les développements en séries de Fourier sont placés dans l'équation d'onde en $\mathbf{H}$:

$$\begin{aligned}&\nabla \times \left[\varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r}) \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = k_0^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ &\nabla \times \left[\sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}'}^{-1} e^{i\mathbf{G}'.\mathbf{r}} \nabla \times \sum_{\mathbf{G},\lambda} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda}\right] = k_0^2 \sum_{\mathbf{G},\lambda} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda}\end{aligned} \tag{2.80}$$

Nous allons simplifier cette équation au prix de quelques manipulations algébriques. Dans un premier temps, on élimine les opérateurs rotationnels :

$$\nabla \times \left[\sum_{\mathbf{G},\lambda,\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}'}^{-1} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}+\mathbf{G}').\mathbf{r}} i\,(\mathbf{K}+\mathbf{G}) \times \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda}\right] = k_0^2 \sum_{\mathbf{G},\lambda} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \tag{2.81}$$

$$-\sum_{\mathbf{G},\lambda,\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}'}^{-1} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}+\mathbf{G}').\mathbf{r}} \left(\mathbf{K}+\mathbf{G}+\mathbf{G}'\right) \times \left[(\mathbf{K}+\mathbf{G}) \times \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda}\right] = k_0^2 \sum_{\mathbf{G},\lambda} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \tag{2.82}$$

On effectue deux changements de variables :

$$\sum_{\mathbf{G}',\lambda,\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^{-1} h_{\mathbf{G}'}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} (\mathbf{K}+\mathbf{G}) \times \left[\hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'}^{\lambda} \times \left(\mathbf{K}+\mathbf{G}'\right)\right] = k_0^2 \sum_{\mathbf{G},\lambda} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \tag{2.83}$$

Soit l'identité suivante :

$$(\mathbf{K}+\mathbf{G}) \times \mathbf{A} = \sum_{\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \cdot \left[(\mathbf{K}+\mathbf{G}) \times \mathbf{A}\right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} = \sum_{\lambda} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \times (\mathbf{K}+\mathbf{G})\right] \cdot \mathbf{A} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \tag{2.84}$$

On applique cette identité à l'équation précédente :

$$\sum_{\mathbf{G}-\mathbf{G}',\lambda}\sum_{\mathbf{G}',\lambda'}\varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}h^{\lambda'}_{\mathbf{G}'}e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}}\left[(\mathbf{K}+\mathbf{G})\times\hat{\mathbf{e}}^{\lambda}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}\right]\cdot\left[(\mathbf{K}+\mathbf{G}')\times\hat{\mathbf{e}}^{\lambda'}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'}\right]\hat{\mathbf{e}}^{\lambda}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}$$
$$=k_0^2\sum_{\mathbf{G},\lambda}h^{\lambda}_{\mathbf{G}}e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}}\hat{\mathbf{e}}^{\lambda}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}} \tag{2.85}$$

Pour tout vecteur G, l'équation centrale des cristaux photoniques s'écrit :

$$\sum_{\mathbf{G}',\lambda'}\varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}\left[(\mathbf{K}+\mathbf{G})\times\hat{\mathbf{e}}^{\lambda}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}\right]\cdot\left[(\mathbf{K}+\mathbf{G}')\times\hat{\mathbf{e}}^{\lambda'}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'}\right]h^{\lambda'}_{\mathbf{G}'}=k_0^2h^{\lambda}_{\mathbf{G}} \tag{2.86}$$

Cette équation est un problème aux valeurs propres qui est résolu avec des méthodes standards. La convergence du problème dépend du nombre de vecteurs du réseau réciproque pris en compte. Un nombre minimum de vecteur **G** est nécessaire pour décrire correctement la permittivité du cristal. Comme le champ **H** est transverse, le nombre d'équations a pu être diminué de 3N à 2N, N étant le nombre de vecteurs **G**.

2.10.2 Cas unidimensionnel et bidimensionnel

L'équation centrale se simplifie si l'on considère des CPhs 2D et 1D. Nous commençons par écrire l'équation centrale sous une autre forme.

$$\sum_{\mathbf{G}'}\varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}\left|\mathbf{K}+\mathbf{G}\right|\left|\mathbf{K}+\mathbf{G}'\right|\begin{pmatrix}\hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'} & -\hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'}\\ -\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'} & \hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}\cdot\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}h^1_{\mathbf{G}'}\\ h^2_{\mathbf{G}'}\end{pmatrix}=k_0^2\begin{pmatrix}h^1_{\mathbf{G}}\\ h^2_{\mathbf{G}}\end{pmatrix} \tag{2.87}$$

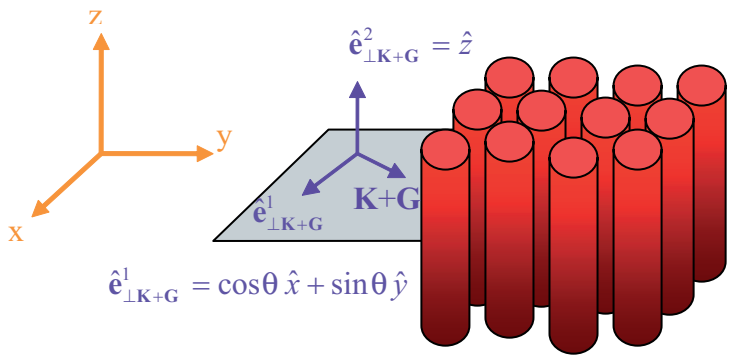


FIG. 2.34 – Définition des vecteurs de l'équation centrale

Dans le cas 2D, on choisit la permittivité constante selon z. Les vecteurs **K** et **G** se retrouvent dans le plan xy. Le choix des vecteurs de l'équation centrale est indiqué sur la figure 2.34. La

matrice des produits scalaires de l'équation centrale se simplifie :

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'} & -\hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'} \\ -\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^2_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'} & \hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos(\theta - \theta') \end{pmatrix} \tag{2.88}$$

Les 2N équations sont découplées en deux groupes selon leur polarisation TE et TM. Dans le cas TM, le champ $\mathbf{H}$ est nul dans le plan xy et l'équation centrale s'écrit :

$$\sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \left|\mathbf{K}+\mathbf{G}\right| \left|\mathbf{K}+\mathbf{G}'\right| h^1_{\mathbf{G}'} = k_0^2 h^1_{\mathbf{G}} \tag{2.89}$$

Dans le cas TE, le champ $\mathbf{H}$ est nul selon l'axe z et l'équation s'écrit :

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \left|\mathbf{K}+\mathbf{G}\right| \left|\mathbf{K}+\mathbf{G}'\right| \left(\hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}} \cdot \hat{\mathbf{e}}^1_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}'}\right) h^2_{\mathbf{G}'} = k_0^2 h^2_{\mathbf{G}} \\ &\sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \left(\mathbf{K}+\mathbf{G}\right) \cdot \left(\mathbf{K}+\mathbf{G}'\right) h^2_{\mathbf{G}'} = k_0^2 h^2_{\mathbf{G}} \end{aligned} \tag{2.90}$$

Dans le cas 1D, les équations des polarisations TE et TM deviennent semblables. Il suffit de résoudre N équations.

Quelque soit la dimension du CPh étudié, le vecteur de Bloch $\mathbf{K}$ est fixé et l'on recherche les valeurs propres k_0. La convergence du problème est assez lente. Le calcul des coefficients de la permittivité inverse peut être effectué de la manière suivante :

$$\varepsilon_r(\mathbf{r}) \xrightarrow{1/} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{r})} \xrightarrow{FFT} \varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}} \tag{2.91}$$

Une autre possibilité consiste à inverser les deux opérations. L'inverse d'une fonction deviendra l'inverse d'une matrice :

$$\varepsilon_r(\mathbf{r}) \xrightarrow{FFT} \varepsilon_{\mathbf{G}} \xrightarrow{1/} \varepsilon^{-1}_{\mathbf{G}} \tag{2.92}$$

Cette opération est correcte car l'opérateur d'inversion et l'opérateur de Fourier commutent. Lorsqu'on tronque la base d'onde plane les opérateurs ne commutent plus. La convergence est grandement améliorée par cette méthode. La plupart du temps, la fonction permittivité ne prend que deux valeurs. Les jonctions entre les deux valeurs sont donc abruptes. Une fonction poids peut être ajoutée à la permittivité pour adoucir ces jonctions [27]. Cela permet de diminuer le nombre d'ondes planes nécessaire pour décrire la permittivité. Les coefficients de Fourier de la permittivité sont obtenus analytiquement pour des formes simples comme

les sphères, les cylindres et les plaques.

$$\begin{aligned}
&\varepsilon_{\mathbf{G}}^{plaque} = \varepsilon_b \delta(G) + (\varepsilon_a - \varepsilon_b)\,\beta \tfrac{\sin(GR)}{GR} \\
&\varepsilon_{\mathbf{G}}^{cylindre} = \varepsilon_b \delta(G) + 2(\varepsilon_a - \varepsilon_b)\,\beta \tfrac{J_1(GR)}{GR} \\
&\varepsilon_{\mathbf{G}}^{sphere} = \varepsilon_b \delta(G) + 3(\varepsilon_a - \varepsilon_b)\,\beta \tfrac{\sin(GR) - GR\cos(GR)}{(GR)^3} \\
&\varepsilon_a, \varepsilon_b : \text{ permittivité du matériau et hors matériau} \\
&R : \text{ rayon du cylindre, de la sphère ou demi-epaisseur de la plaque} \\
&\beta : \text{facteur de remplissage}
\end{aligned} \tag{2.93}$$

S'il y a plus d'une sphère ou d'un cylindre dans la maille élémentaire, il suffit d'utiliser les propriétés de translations de la transformée de Fourier.

$$\varepsilon_r(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0) \rightleftharpoons e^{i\mathbf{G}.\mathbf{r}_0} \varepsilon_{\mathbf{G}} \tag{2.94}$$

Ces propriétés peuvent être utilisées pour étudier les défauts à partir de supercellules. Si la maille élémentaire n'est pas orthogonale, on peut utiliser la FFT mais on ne peut pas appliquer directement les formules analytiques. La maille doit être convertie en une maille orthogonale par un tenseur métrique (figure 2.35).

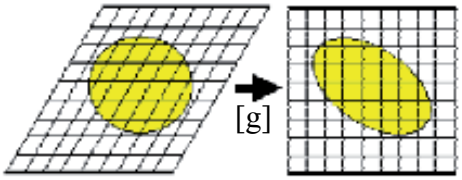


Fig. 2.35 – Transformation de la maille

La PWM est difficilement applicable aux matériaux dont la permittivité dépend de la fréquence comme les métaux. La formulation de la PWM a été modifiée pour prendre en compte les métaux et les semiconducteurs [28]. Elle utilise comme fonction diélectrique :

$$\begin{aligned}
&\varepsilon_r(\omega) = 1 - \tfrac{\omega_p^2}{\omega^2} \\
&\omega_p \ : \text{fréquence plasma du matériau}
\end{aligned} \tag{2.95}$$

La visualisation des champs est effectuée en calculant les vecteurs propres et les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
&\mathbf{H}_{K,k_0}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G},\lambda=1,2} h_{\mathbf{G}}^{\lambda} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp\mathbf{K}+\mathbf{G}}^{\lambda} \\
&\mathbf{E}_{K,k_0}(\mathbf{r}) = \tfrac{-1}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}_{K,k_0}(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{2.96}$$

La phase de ces champs complexes doit être fixées par des critères énergétiques. Sur la figure 2.36, nous avons représenté le diagramme de bande du CPh diélectrique.

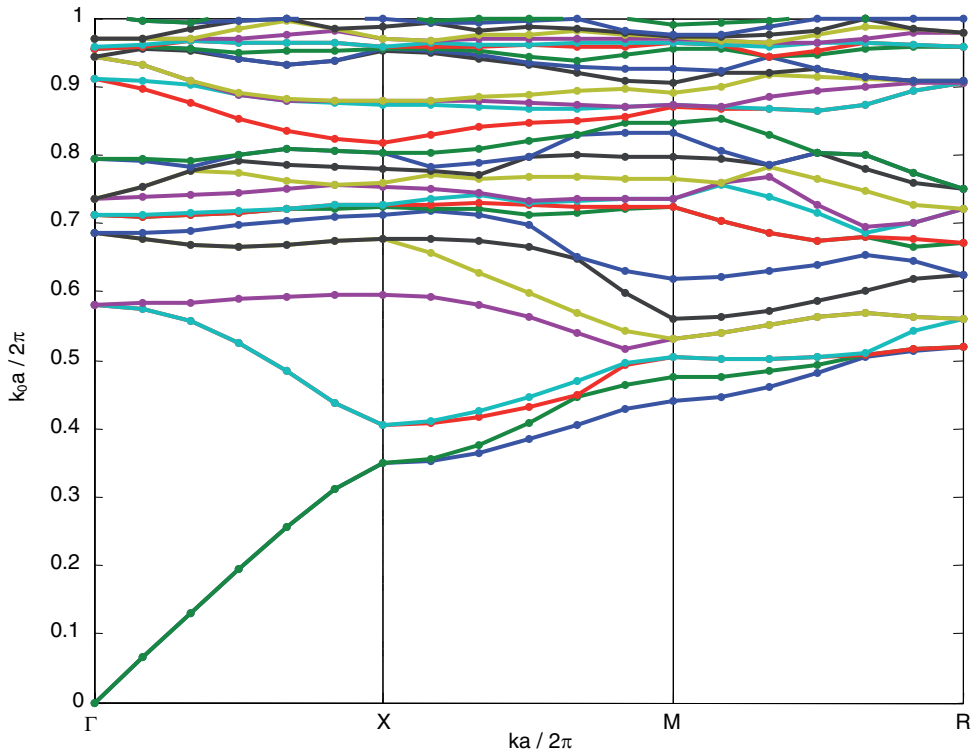


FIG. 2.36 – Diagramme de bande du CPh diélectrique précédent

2.11 Méthode des liaisons fortes (TB)

La méthode des liaisons fortes [29, 30] est beaucoup moins utilisée que la PWM. Cette méthode semble pourtant particulièrement rapide pour la détermination des états liés à des défauts dans le cristal. On développe ici le champ électromagnétique sur une base de fonctions d'ondes localisées, par analogie avec la description des liaisons fortes pour les orbitales électroniques des solides cristallins. La base des fonctions d'ondes localisées est déterminée en calculant les fonctions de Wannier $\mathbf{a}_n(\mathbf{R},\mathbf{r})$ du cristal photonique parfait :

$$\mathbf{a}_n\left(\mathbf{R},\mathbf{r}\right) = \frac{\Omega^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \int_{BZ} \mathbf{H}_n(\mathbf{k},\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{k} \tag{2.97}$$

La relation inverse est définie de la manière suivante :

$$\mathbf{H}_n(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \frac{\Omega^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{a}_n\left(\mathbf{R},\mathbf{r}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tag{2.98}$$

Les fonctions $\mathbf{H}_n(\mathbf{k},\mathbf{r})$ sont les vecteurs propres de l'équation centrale en $\mathbf{H}$ sans défaut. La permittivité est périodique et sans défaut dans cette équation. On utilise la PWM pour établir cette base de fonctions. Les fonctions $\mathbf{H}_n(\mathbf{k},\mathbf{r})$ sont des fonctions de Bloch orthonormées. Les

fonctions de Wannier sont donc aussi orthonormées. Une fonction de Wannier est définie pour chaque bande et chaque cellule unitaire. Elles ont une dépendance en (**r**-**R**).

Pour étudier un défaut, on développe le champ **H** de l'équation d'onde avec le défaut sur cette base là :

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_n \sum_{\mathbf{R}} c_n(\mathbf{R})\, \mathbf{a}_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \tag{2.99}$$

On utilise l'approche des fonctions de Green pour établir le problème aux valeurs propres. La démarche est la même que dans le cas 1D que nous avons décrit. Cette méthode a déjà été appliquée au cas des CPhs 2D [31].

2.12 Méthode de la multidiffusion bidimensionnelle (MST 2D)

La multidiffusion est une théorie analytique qui permet de trouver la diffusion de n objets à partir de la diffusion de ces n objets pris indépendamment. Dans le cas bidimensionnel, les objets utilisés sont des cylindres dont la section est prise circulaire ou arbitraire. Le cas 3D sera étudié en détail au chapitre suivant. Les grandes de lignes de la méthode sont les mêmes dans les deux cas. Par contre dans le cas 3D, les expressions deviennent beaucoup plus complexes, notamment la formule d'addition des multipôles.

La multidiffusion 2D est obtenue à partir du théorème de Green [32]. L'équation d'onde scalaire s'écrit :

$$\nabla^2 E(\mathbf{r}) + k_0^2 E(\mathbf{r}) = k_0^2 \left[1 - \varepsilon_r(\mathbf{r})\right] E(\mathbf{r}) \tag{2.100}$$

L'équation d'onde peut être séparée en deux équations à l'extérieur des cylindres, une pour le champ incident E_0 et une pour le champ diffracté E_s.

$$\begin{aligned} &E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) + E_s(\mathbf{r}) \\ &\nabla^2 E_0(\mathbf{r}) + k_0^2 E_0(\mathbf{r}) = 0 \\ &\nabla^2 E_s(\mathbf{r}) + k_0^2 E_s(\mathbf{r}) = k_0^2 \left[1 - \varepsilon_r(\mathbf{r})\right] E(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{2.101}$$

L'onde incidente est développée en harmoniques cylindriques en utilisant la formule classique :

$$e^{ir\sin\theta} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n J_n(r) e^{in\theta} \tag{2.102}$$

En utilisant le théorème de Green, le champ diffracté à l'extérieur des cylindres s'écrit de la manière suivante :

$$E_s(\mathbf{r}) = -\frac{ik^2}{4} \iint H_0^{(1)}\left(k \left\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right\|\right) \left[1 - \varepsilon_r(\mathbf{r})\right] E\left(\mathbf{r}'\right) dS' \tag{2.103}$$

La fonction H est une fonction de Hankel. L'intégrale de surface peut être restreinte aux cylindres C_j. Le champ diffracté s'écrit sous forme d'une somme :

$$\begin{aligned} E_s(\mathbf{r}) &= \sum_j E_s^j(\mathbf{r}) \\ E_s^j(\mathbf{r}) &= \frac{ik_0^2\left(\varepsilon_r^j(\mathbf{r})-1\right)}{4} \iint_{C_j} H_0^{(1)}\left(k_0 \|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\|\right) E(\mathbf{r}')\, dS' \end{aligned} \tag{2.104}$$

En utilisant le théorème d'addition de Graf sur les fonctions de Hankel, les vecteurs **r** et **r'** se séparent [2] :

$$\begin{aligned} E_s^j(\mathbf{r}) &= \sum_m b_{jm} H_m^{(1)}(k_0 r)\, e^{im.\widehat{\mathbf{r}}} \\ b_{jm} &= \frac{ik_0^2\left(\varepsilon_r^j(\mathbf{r})-1\right)}{4} \iint_{C_j} J_m^{\left(k_0 r_j'\right)} e^{-im.\widehat{\mathbf{r}}_\mathbf{j}'} E(\mathbf{r}')\, dS' \end{aligned} \tag{2.105}$$

En développant en multipôle le champ $E(\mathbf{r})$ et en faisant les bonnes translations, on obtient l'équation de la multidiffusion. Elle peut être écrite sous forme matricielle :

$$\mathbf{E_0} = [\mathbf{I} - [\mathbf{G}]\,[\mathbf{S}]]\,.\mathbf{E} \tag{2.106}$$

G et **S** sont les matrices de translation et de diffusion. En développant le champ incident en multipôle et en utilisant cette équation, on trouve le champ total dans la structure. Cette équation sera beaucoup plus détaillée dans le cas tridimensionnel. Cette méthode n'impose aucune condition sur la position et la nature des cylindres. Donc, elle est adaptée pour l'étude des défauts dans les cristaux photoniques [33]. Nous avons étudié un CPh 2D composé de 80 cylindres (figure 2.37).

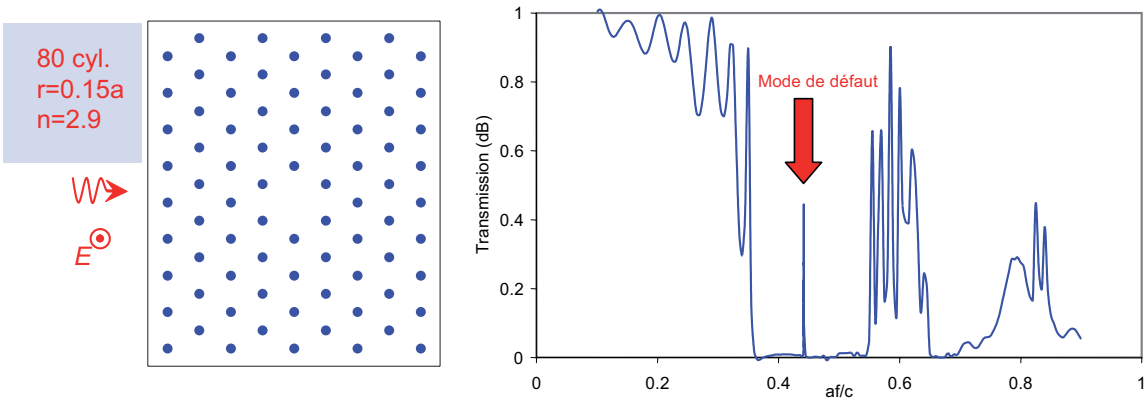


FIG. 2.37 – transmission d'un CPh 2D triangulaire avec un défaut

En se plaçant à la fréquence de défaut, on visualise la répartition de champ du mode de défaut (figure 2.38).

[2] $r = \|\mathbf{r}\|$ $\widehat{\mathbf{r}} = angle(\mathbf{r})$ $\tan(\widehat{\mathbf{r}}) = r_y/r_x$

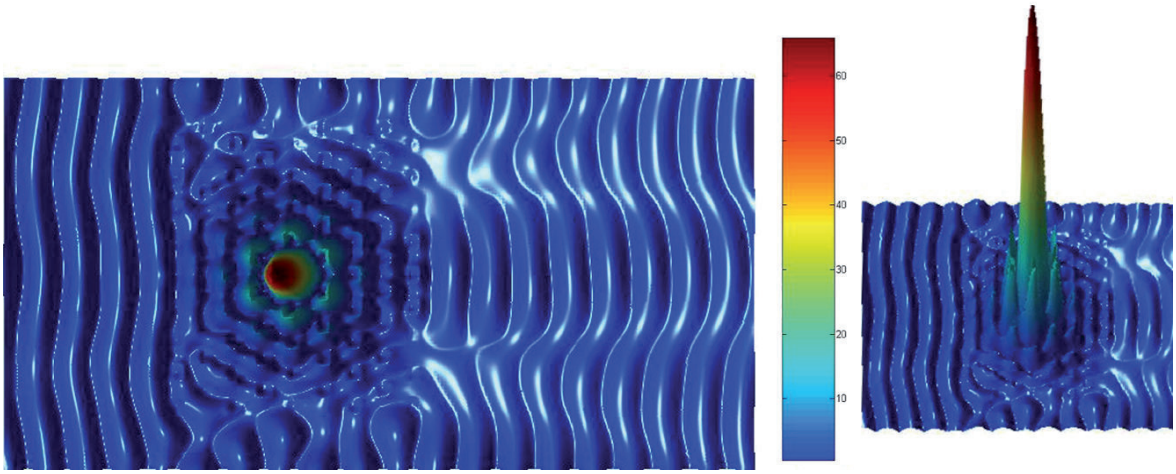


FIG. 2.38 – Visualisation du champ électrique au niveau de la fréquence de défaut

2.13 Conclusion : comparaison de l'ensemble des méthodes présentées

L'ensemble des méthodes est comparé dans le tableau de la tableau 2.2. Les deux premières méthodes sont issues de la physique du solide et elles sont adaptées pour des structures 1D. Elles nécessitent un temps de calcul très faible. En suite, nous avons quatre méthodes utilisées en électromagnétisme. Ce sont des méthodes numériques 3D. La FEM donne des résultats très précis mais elle nécessite beaucoup de ressources systèmes. La FDTD est l'une des méthodes les plus utilisée pour modéliser les CPhs. Grâce à sa formulation, elle converge vite vers un résultat assez précis, sans un maillage excessif. Lorsque nous désirons des résultats très précis, le maillage devient vite très lourd. La FIT est l'une des seules méthodes qui étudie numériquement des CPhs finis avec un nombre élevé d'objets, sans réserver des ressources systèmes excessives. La TMM permet d'étudier des CPhs avec un nombre élevé de couches en modélisant une seule couche. Ces quatre dernières méthodes modélisent les CPhs diélectriques et métalliques. On peut obtenir la réflexion/transmission et le diagramme de bande. Elles sont très polyvalentes. La PWM et la TB calculent seulement la structure de bande. Elles ont été adaptées de leur homologue scalaire de la physique du solide. La PWM est la méthode la plus utilisée dans le domaine des cristaux photoniques. Par contre, la TB est très peu utilisée. La dernière catégorie de méthodes étudiées est la multidiffusion. La MST est utilisée dans le domaine de l'optique. Elle permet d'étudier analytiquement des CPhs finis de très grandes tailles. Elle est limitée à des motifs de forme canonique ou quasi-canonique. Elle

prend en compte aisément les défauts dans les cristaux photoniques. La multidiffusion 3D sera développée dans le chapitre suivant.

	modes couplés	fc de Green	FEM	FDTD	FIT	FDFD	PWM	TB	MST 1D	MST 2D	MST 3D
Méthode issue de	M.Q.	M.Q.	Méca.	E.M.	E.M.	E.M.	M.Q.	M.Q.	E.M. M.Q.	E.M.	E.M.
Equations de Maxwell	Fréq.	Fréq.	Fréq.	Temp.	Temp.	Fréq.	Fréq.	Fréq.	Fréq.	Fréq.	Fréq.
Type de résolution	Numé.	Numé	Numé.	Numé.	Numé.	Numé.	Numé.	Numé.	Analyt.	Analyt.	Analyt.
Type de code	1D	1D	1D à 3D	1D à 3D	3D	3D	1D à 3D	1D à 3D	1D	2D	3D
Prise en compte géométries 1D	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓		
Prise en compte géométries 2D			✓	✓	✓	✓	✓	✓		✓	
Prise en compte géométries 3D			✓	✓	✓	✓	✓	✓			✓
Adapté pour les formes canoniques	✓	✓							✓	✓	✓
Matrice transfert						✓			✓	✓	✓
Discrétisation EDP				✓	✓	✓					
Développ. modal	O. planes	O. planes	polynôme			O. planes	O. planes	O. planes	1 o. plane	O. cyl.	O. sph.
Espace libre CPh fini			✓	✓	✓				✓	✓	✓
Périodique CPh infini	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Diag. de bande : éq. aux v.p.	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Diag. de bande : intensité des modes				✓	✓						
Réflexion transmission	✓		✓	✓	✓	✓			✓	✓	✓
Off-plane			✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
CPh métallique, cond. perfect E			✓	✓	✓				✓	✓	✓
Défaut unique dans un CPh fini			✓	✓	✓				✓	✓	✓
Défaut unique dans un CPh infini		✓						✓			
Défaut périodique (supercellule)	✓		✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Vitesse de calcul	très rapide	très rapide	lent	rapide	rapide	moyen	moyen	moyen	très rapide	rapide	rapide
Taille espace mémoire occupé	très faible	très faible	grand	très faible	faible	faible	faible	faible	très faible	faible	moyen
Convergence rapide			✓	✓		✓	✓		✓	✓	✓
Existence d'un code commercial			✓	✓	✓		✓				
Existence d'un code libre			✓	✓		✓	✓			✓	✓

TAB. 2.2 – Tableau comparant l'ensemble des méthodes

Abréviation du tableau 2.2

O. : onde

M.Q. : mécanique quantique et physique du solide

E.M. : électromagnétisme

Fréq. : fréquentiel

Temp. : temporel

Analyt. : analytique

Numé. : numérique

v.p. : valeurs propres

Diag. : diagramme

Off-plane : calcul d'un CPh 1D avec des vecteurs d'ondes 2D, de même pour les CPh 2D

Références

[1] M. Born and E. Wolf, *Principles of optics*, Cambridge Press (1999). 71

[2] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Physique des solides*, EDP sciences (2002). 74

[3] S. Mishra and S. Satpathy, *One-dimensional photonic crystal : the Kronig-Penney model*, Phys. Rev. B **68**, 045121 (2003). 74

[4] A. Yariv and P. Yeh, *Optical Waves in Crystals*, Wiley (2003). 75

[5] *HFSS 10 User's guide*, Ansoft Corporation (2005). 84

[6] B. Hiett, *Photonic Crystal Modelling using Finite Element Analysis*, thèse de doctorat (2002). 86

[7] R. T. Remski, *Analysis of photonic bandgap surfaces using Ansoft HFSS*, Microwave Journal **43**, 190 (2000). 86

[8] C. T. Chan, Q. L. Yu, and K. M. Ho, *Order-N spectral method for electromagnetic waves*, Phys. Rev. B **51**, 16635 (1995). 88, 95

[9] A. J. Ward and J. B. Pendry, *Calculating photonic Green's functions using a nonorthogonal finite-difference time-domain method*, Phys. Rev. B **58**, 7252 (1998). 89

[10] T. Namiki, *a new FDTD algorithm based on alternation-direction implicit method*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **47**, 2003 (1999). 89

[11] F. Zheng, Z. Chen, and J. Zhang, *Towards the development of a three-dimensional unconditionally stable finite-difference time-domain*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **48**, 1550 (2000). 89

[12] K. Kunz and R. J. Luebbers, *Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics*, CRC Press (1993). 90

[13] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics : The Finite Difference Time-Domain Method*, Artech House (2000). 90

[14] K. R. Umashankar and A. Taflove, *A novel method to analyse electromagnetic scattering of complex objects*, IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility **24**, 397 (1982). 90

[15] S. Fan, P. R. Villeneuve, and J. D. Joannopoulos, *Large omnidirectional band gaps in metallodielectric photonic crystals*, Phys. Rev. B **54**, 11245 (1996). 95

[16] S. Xiao and S. He, *FDTD method for computing the off-plane band structure in a two-dimensional photonic crystal consisting of nearly free-electron metals*, Physica B **324**, 403 (2002). 95

[17] M. Thèvenot, A. Reineix, and B. Jecko, *FDTD to analyse complex PBG structures in the reciprocal space*, Micro. Opt. Tech. Lett. **21**, 25 (1999). 96

[18] T. Weiland, *A Discretization Method for the Solution of Maxwell's Equations for Six-Component Fields*, Electronics and Communication **31**, 116 (1977). 97

[19] CST, *Microwave studio 4 User Manual*, (Version 4.0 2002). 98

[20] B. Krietenstein, R. Schuhmann, P. Thoma, and T. Weiland, *The Perfect Boundary Approximation Technique facing the big challenge of High Precision Field Computation*, Proc. of the XIX International Linear Accelerator Conference Chicago , 860 (1998). 98

[21] J. B. Pendry and A. MacKinnon, *Calculation of Photon Dispersion Relations*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2772 (1992). 100

[22] J. B. Pendry, *Calculating photonic band structure*, J. Phys. Condens. Matter **8**, 1085 (1996).

[23] A. J. Ward, *Photonic Bands and Related Quantities*, thèse de doctorat (1996). 100

[24] K. M. Leung and Y. F. Liu, *Full Vector Wave Calculation of Photonic Band Structures in Face-Centered-Cubic Dielectric Media*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2646 (1990). 105

[25] Z. Zhang and S. Satpathy, *Electromagnetic-Wave Propagation in Periodic Structures-Bloch Wave Solution of Maxwell Equations*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2650 (1990). 105

[26] K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis, *Existence of a Photonic gap in Periodic Dielectric Structures*, Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990). 105

[27] S. G. Johnson and J. D. Joannopoulos, *Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis*, Optics Express **8**, 173 (2001). 108

[28] A. R. McGurn and A. A. Maradudin, *Photonic band structures of two- and three-dimensional periodic metal or semiconductor arrays*, Phys. Rev. B **48**, 17576 (1993). 109

[29] K. M. Leung, *Defect modes in photonic band structures : a Green's function approach using vector Wannier functions*, J. Opt. Soc. Am. B **10**, 303 (1993). 110

[30] E. Lidorikis, M. M. Sigalas, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Tight-Binding Parametrization for Photonic Band Gap Materials*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1405 (1998). 110

[31] J. P. Albert, C. Jouanin, D. Cassagne, and D. Bertho, *Generalized Wannier function method for photonic crystals*, Phys. Rev. B **61**, 4381 (2000). 111

[32] D. Felbacq, G. Tayeb, and D. Maystre, *Scattering by a random set of parallel cylinders*, J. Opt. Soc. Am. A **11**, 2526 (1994). 111

[33] G. Tayeb and D. Maystre, *Rigourous theoretical study of finite-size two-dimensional photonic crystals doped by microcavities*, J. Opt. Soc. Am. A **14**, 3323 (1997). 112

Chapitre 3

Théorie de la multidiffusion appliquée aux cristaux photoniques

Contenu du chapitre

3.1 Introduction 122

3.2 Formalisme des fonctions d'ondes vectorielles sphériques 124

3.3 Développement multipolaire de l'onde plane 126

3.4 Champ diffracté par une sphère - théorie de Mie 128

3.5 La multidiffusion d'une onde électromagnétique par une collection de diffuseurs 132

3.5.1 Procédé itératif 132

3.5.2 Théorie 133

3.6 Structure de bande à partir de l'équation de la multidiffusion . 136

3.7 La multidiffusion appliquée aux CPhs finis 137

3.7.1 Calcul des Coefficients de translations 138

3.7.2 Résolution du système d'équations 142

3.8 Architecture du code MST 144

3.9 Post-traitement - visualisation de différents paramètres 146

3.9.1 Matrice de l'amplitude de diffraction 146

3.9.2 Calcul de la transmission et de la réflexion 150

3.10 Du CPh Infini au CPh fini : étude paramétrique et vérification de la méthode 153

3.10.1 Surface sélective en fréquence (FSS) 153

3.10.2 CPh cubique métallique 156

3.10.3 CPh cubique diélectrique 158
3.11 Du CPh parfait au CPh aléatoire : étude de défauts dans les CPhs 161
3.11.1 Variations arbitraires de la position des couches 161
3.11.2 Suppression de une ou deux couches : effet Fabry-Pérot 163
3.11.3 Variations aléatoires des rayons et des positions des sphères 165
3.11.4 Influence de la forme du motif 166
3.12 Conclusion et perspectives 167
Références 172

3.1 Introduction

La diffusion et la diffraction d'une onde électromagnétique sont des phénomènes intimement liés. Les approches diffèrent en fonction des échelles de longueurs d'ondes étudiées. Lorsque les dimensions de la cible sont grandes devant la longueur d'onde, une approche géométrique ou semi-géométrique suffit pour décrire le problème. Dans le cas inverse, une méthode perturbative de la diffusion, à l'aide des premiers multipôles induits est suffisante. Cette approche a été étudiée pour la première fois par Lord Rayleigh [1] en 1871, pour expliquer quantitativement le bleu du ciel. Quelques décennies plus tard, les travaux de Lorenz, Mie et Debye [2–4] ont permis d'établir sous forme d'un développement multipolaire, la solution générale de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule sphérique homogène. Cette solution est valide quelque soit les dimensions de la particule et la longueur d'onde d'étude. Cette solution a été étendue au cas d'une sphère homogène enrobée par une couche d'épaisseur uniforme [5]. Aujourd'hui, cette solution est généralisée à la sphère stratifiée par plusieurs couches. Si on utilise d'autres systèmes de coordonnées, on peut réaliser des développements multipolaires d'objets non sphériques. Le problème de la diffusion par un sphéroïde homogène a été résolu par Asano et Yamamoto [6]. La solution complète pour un cylindre circulaire, homogène et infiniment long a été donnée pour des incidences normales et obliques par Lord Rayleigh [7] et Wait [8] respectivement. Cette solution a été présentée rapidement au chapitre précédent. Elle a été étendue aux cylindres elliptiques par Yeh [9]. Les objets cylindriques de section arbitraire peuvent être aussi étudié dans une base cylindrique. D. Maystre, P. Vincent et R. Petit [10, 11] ont utilisé une méthode d'équation intégrale pour obtenir cette généralisation. Waterman [12] a réalisé la même généralisation dans le cas sphérique.

Le développement d'un champ sous forme de multipôles est très intéressant pour un traitement systématique de la diffusion dans le cas où la dimension des cibles est comparable à la longueur d'onde. Les cristaux photoniques qui ont un pas de réseau proche de la longueur d'onde peuvent être étudiés par un développement multipolaire. A la différence de la diffusion de Rayleigh, les CPhs ont une diffusion cohérente. C'est d'ailleurs tout l'intérêt d'un CPh. Cette diffusion cohérente est obtenue par l'interaction des diffusions de chaque sphère. Elle est appelée la multidiffusion (MST). Ces interactions ont été prises en compte pour la première fois dans le cas cylindrique par Twersky en 1952 [13–15]. Il a fallu attendre la mise en place du théorème d'addition pour les harmoniques sphériques [16–18] pour que la multidiffusion débute dans le cas sphérique [19]. Au départ, elle prenait en compte seulement deux sphères. Progressivement, on est passé à un nombre supérieur de sphères [20–23]. Des méthodes ont été mise en place pour augmenter la rapidité des calculs et donc augmenter le nombre de sphères. Une méthode récursive appelée ordre de diffusion évite l'inversion d'une matrice [24, 25]. Les coefficients de translation peuvent être obtenus par récurrence [26]. Pour diminuer l'espace mémoire occupé par ces coefficients, les translations sont décomposées en deux rotations et une translation selon une direction privilégiée [26].

La diffusion de la lumière peut être utilisée pour caractériser des particules, déterminer l'évaporation d'une substance, sa condensation, des concentrations d'espèces chimiques... La théorie de la multidiffusion est nécessaire pour ces études là. Cette théorie est appliquée aussi à la compréhension de plusieurs phénomènes environnementaux. L'étude des aérosols atmosphériques permet d'évaluer les transferts radiatifs dans l'atmosphère. Il en découle une prédiction des changements climatiques. L'effet des poussières interstellaires sur la propagation de radiations stellaires, l'arc en ciel, le transfert radiatif des flammes sont d'autres exemples d'applications.

Au laboratoire, les matrices formées d'inclusions sont étudiées depuis de nombreuses années [27–30]. Des calculs théoriques et des mesures expérimentales micro-ondes ont été effectués (mesure de la SER, de la rétrodiffusion). Dans ce chapitre, nous ne ferons pas intervenir ces grandeurs mais plutôt des notions plus explicites pour les cristaux photoniques : la réflexion/transmission et des grandeurs utilisées en optique comme la matrice d'amplitude de diffraction. Nous avons développé un code de multidiffusion *ab initio*. Dans notre cas, nous appliquerons cette méthode à l'étude de cristaux photoniques. Avant de l'appliquer, nous rappellerons les grandes lignes de cette théorie. La formulation choisie pour la MST est quelque

peu différente de ce qui est montré classiquement. Nous justifions ce choix par la simplicité et la symétrie des expressions qu'elle engendre. La méthode de la multidiffusion nécessite quelques adaptations pour être appliquée aux CPhs. Les grandeurs étudiées ne sont pas les mêmes dans le cas des CPhs et de la multidiffusion. Une fois réalisées ces adaptations, on pourra étudier des variations paramétriques et des défauts dans les CPhs.

3.2 Formalisme des fonctions d'ondes vectorielles sphériques

L'équation d'onde est résolue analytiquement par la méthode classique de séparation de variables. Elle permet de ramener une équation aux dérivées partielles à n variables à un système de n équations différentielles liées entre elles par $n-1$ constantes. Cette méthode n'est applicable que sur certains systèmes de coordonnées. De plus les conditions aux limites et l'équation d'onde doivent s'exprimer sur le même système de coordonnées. Comme dans ce chapitre, on s'intéresse seulement aux particules sphériques, on utilise un système de coordonnées sphériques. L'équation d'onde est en premier lieu résolue sous sa forme scalaire. Sa solution permet d'établir les solutions de l'équation vectorielle. Dans le système de coordonnées sphériques, l'équation d'onde est séparable en une équation différentielle de Bessel et en une autre EDP séparable qui a pour solution des harmoniques scalaires sphériques. De cette dernière EDP, dépend la base de fonctions d'ondes vectorielles sphériques que l'on choisit comme solution de l'équation d'onde vectorielle.

On a le choix entre trois bases. La première s'écrit de la manière suivante [31–33] :

$$\begin{aligned}
&\psi_{\substack{e\\o}mn}(r,\theta,\phi) = \begin{matrix}\cos m\phi\\ \sin m\phi\end{matrix}\; P_n^m(\cos\theta) z_n(kr)\\
&\mathbf{M} = -\mathbf{r}\times\nabla\psi\\
&\mathbf{N} = \tfrac{\nabla\times\mathbf{M}}{k}
\end{aligned} \tag{3.1}$$

$z_n^1 \equiv j_n$ et $z_n^3 \equiv h_n$ sont respectivement les fonctions de Bessel et de Hankel sphériques. Le polynôme de Legendre $P_l^m(\cos\theta)$ est choisi avec la convention suivante :

$$P_l^{-m}(\cos\theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos\theta) \tag{3.2}$$

Cette base est très intéressante dans le cas où l'on a une seule sphère. L'expression de l'onde plane incidente est simplifiée si on choisit sa polarisation selon un des axes du repère cartésien. Seul l'indice n subsiste. Comparée aux autres bases, cette base divise par deux le nombre

d'harmoniques nécessaire pour décrire une onde plane. Mais cette simplification ne fonctionne que dans le cas d'une sphère.

Un autre choix de base consiste à remplacer les fonctions trigonométriques par des exponentielles complexes [16, 18, 20, 22]. Les expressions des champs deviennent plus compactes. Si on développe les expressions, on obtient la base suivante :

$$\begin{aligned}
&\mathbf{M}_{mn} = \left[i\pi_{mn}\left(\cos\theta\right)\hat{\mathbf{e}}_\theta - \tau_{mn}\left(\cos\theta\right)\hat{\mathbf{e}}_\phi\right] z_n\left(\rho\right) e^{im\phi} \quad \rho = kr \\
&\mathbf{N}_{mn} = \left[\tau_{mn}\left(\cos\theta\right)\hat{\mathbf{e}}_\theta + i\pi_{mn}\left(\cos\theta\right)\hat{\mathbf{e}}_\phi\right] \tfrac{\left[\rho z_n(\rho)\right]'}{\rho} e^{im\phi} + n\left(n+1\right) P_n^m\left(\cos\theta\right) \tfrac{z_n(\rho)}{\rho} e^{im\phi}\hat{\mathbf{e}}_\mathbf{r} \\
&\pi_{mn}\left(\cos\theta\right) = \tfrac{m}{\sin\theta} P_n^m\left(\cos\theta\right) \\
&\tau_{mn}\left(\cos\theta\right) = \tfrac{d}{d\theta} P_n^m\left(\cos\theta\right)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Pour simplifier les expressions, on peut utiliser une base normalisée qui fait appel au formalisme de la physique quantique [34–36]. Dans ce formalisme, on utilise l'expression du moment cinétique quantique en coordonnées sphériques ainsi que son opérateur associé, à un facteur $\hbar^{-1}$ près. Toutes les propriétés de cet opérateur sont bien connues et elles peuvent être réutilisées en électromagnétisme. Pour définir cette base, on doit en premier lieu indiquer les différentes conventions choisies. On utilise une harmonique scalaire sphérique avec la convention de Condon-Shortley sur la phase :

$$Y_{lm}\left(\theta,\phi\right) = Y_{lm}\left(\widehat{\mathbf{r}}\right) = \langle\widehat{\mathbf{r}} \mid l,m\rangle = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{3.4}$$

L'opérateur moment cinétique orbital permet de définir l'harmonique sphérique vectorielle angulaire utilisé par Jackson [36]

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{L}} = \tfrac{1}{i}\left(\mathbf{r}\times\nabla\right) \\
&\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = \tfrac{1}{\sqrt{l(l+1)}}\hat{\mathbf{L}} Y_{lm}\left(\widehat{\mathbf{r}}\right)
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Comme le vecteur $\mathbf{X}$ est normalisé, on utilise la notation bra-ket. Elle permettra de simplifier les écritures :

$$\begin{aligned}
&|\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle = \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}), \quad \langle\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})| = \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \\
&\langle\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \mid \mathbf{X}_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \\
&\langle\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})|\, \mathbf{r}\times|\mathbf{X}_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle = 0
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Le vecteur $\mathbf{X}$ ne dépend que des variables angulaires et n'a pas de composante selon $\hat{\mathbf{e}}_\mathbf{r}$:

$$|\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle = |X_{-1lm}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle\,\hat{\mathbf{e}}_\theta + |X_{1lm}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle\,\hat{\mathbf{e}}_\phi \tag{3.7}$$

Nous allons définir les harmoniques sphériques vectorielles magnétique et électrique. Elles prennent en compte l'équation différentielle de Bessel :

$$\begin{aligned} |\mathbf{Z}_{M=-1,l,m}(\mathbf{r})\rangle &= z_l(kr)\,|\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\rangle \\ |\mathbf{Z}_{E=1,l,m}(\mathbf{r})\rangle &= -\tfrac{i}{k}\nabla\times|\mathbf{Z}_{M,l,m}(\mathbf{r})\rangle \end{aligned} \tag{3.8}$$

Lorsque l'harmonique sphérique vectorielle passe du ket au bra, la fonction de Hankel ne doit pas être conjuguée. Si on veut obtenir une base complète, on doit définir une troisième harmonique orthogonale aux deux premières. On peut écrire cette harmonique ainsi que les précédentes à partir d'opérateurs :

$$\begin{aligned} &|\mathbf{Z}_{\sigma,l,m}\rangle = \hat{\mathbf{Z}}_\sigma\,|l,m\rangle \\ &\hat{\mathbf{Z}}_{M=-1} = \hat{\mathbf{U}}_{-1}\tfrac{\hat{\mathbf{L}}}{\sqrt{l(l+1)}} \text{ avec } \hat{\mathbf{U}}_{-1} = z_l(kr) \\ &\hat{\mathbf{Z}}_{E=1} = \hat{\mathbf{U}}_{1}\tfrac{\hat{\mathbf{L}}}{\sqrt{l(l+1)}} \text{ avec } \hat{\mathbf{U}}_{1} = -\tfrac{i}{k}\nabla\times z_l(kr) \\ &\hat{\mathbf{Z}}_0 = \nabla\left(z_l(kr)\right) \end{aligned} \tag{3.9}$$

L'harmonique $|\mathbf{Z}_{0,l,m}\rangle$ est une onde purement longitudinale. On utilise uniquement une onde plane incidente transverse dans ce chapitre. Dans ce cas, ce champ multipolaire ne peut pas être couplé par une onde incidente. Par la suite, on utilisera que les champs multipolaires électriques et magnétiques pour effectuer le développement des différents champs.

3.3 Développement multipolaire de l'onde plane

La base multipolaire que nous avons développée précédemment a une portée très générale. Elle peut être appliquée pour décrire le champ rayonné par une antenne, ou pour le développement de la fonction de Green en espace libre. Dans ce chapitre nous l'appliquerons à la diffusion d'une onde électromagnétique par une sphère. Quelle que soit l'onde que l'on considère, elle peut être développée sur cette base. Nous nous limitons à une onde plane. Un faisceau Gaussien aurait pu être choisi en utilisant la formulation de Bromwich [37] mais les temps de calculs ne nous permettraient pas de prendre en compte un nombre suffisant de sphères. Dans le cas d'une onde scalaire, on utilise la formule de Rayleigh pour effectuer le développement de l'onde plane en harmoniques sphériques :

$$e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} = 4\pi\sum_{l,m} i^l\,\langle\mathbf{r}|\,\hat{\mathbf{U}}^{(1)}_{-1}\,|l,m\rangle\left\langle l,m\,\middle|\,\widehat{\mathbf{k}}\right\rangle \tag{3.10}$$

Dans le cas vectoriel, on utilise les vecteurs $\mathbf{X}$ pour effectuer ce développement. Si on choisit une onde plane polarisé TE, on obtient :

$$e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}\hat{\varsigma}^{TE} = 4\pi \sum_{\sigma,l,m} i^l \left\langle \mathbf{r} \right| \hat{\mathbf{U}}_{\sigma}^{(1)} \left| \mathbf{X}_{l,m} \right\rangle \left\langle X_{-\sigma,l,m} \middle| \widehat{\mathbf{k}} \right\rangle \tag{3.11}$$

Le vecteur $\hat{\varsigma}^{TE}$ est perpendiculaire au plan d'incidence formé par les vecteurs $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{z}}$et $\mathbf{k}$. On constate avec cette formulation, une grande similitude entre le cas scalaire et vectoriel. Les vecteurs $\mathbf{X}$ remplacent les harmoniques sphériques scalaires. Cette formulation exige très peu de coefficients supplémentaires comparés aux autres bases. Le champ incident où est plongé la sphère est une onde plane TE ou TM selon les cas d'étude. Le développement précédent peut être étendu au cas TM et aux champs magnétiques :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_0^{TE} = 4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} i^l \left| \mathbf{Z}_{\sigma,l,m}^{(1)} \right\rangle \left\langle X_{-\sigma,l,m} \middle| \widehat{\mathbf{k}} \right\rangle \\ c\mathbf{B}_0^{TE} = 4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} \sigma i^l \left| \mathbf{Z}_{\sigma,l,m}^{(1)} \right\rangle \left\langle X_{\sigma,l,m} \middle| \widehat{\mathbf{k}} \right\rangle \end{cases} \\ \begin{cases} \mathbf{E}_0^{TM} = -c\mathbf{B}_0^{TE} \\ c\mathbf{B}_0^{TM} = \mathbf{E}_0^{TE} \end{cases} \tag{3.12}$$

C'est grâce à la rapidité de convergence de ce développement multipolaire que l'on peut étudier la multidiffusion d'un grand nombre de sphères. La précision où plutôt l'étendue de l'onde plane obtenue par ce développement dépend du nombre de modes pris en compte.

Sur la figure 3.1 et pour le reste du chapitre, on reprend la même normalisation que le premier chapitre en ce qui concerne les fréquences et les rayons des sphères. Si on augmente le nombre de modes pour une fréquence donnée, l'onde plane augmente en précision autour de la sphère et elle est plus étendue en partant du centre de cette sphère. Le même raisonnement peut être fait en variant la fréquence au lieu du nombre de modes. La figure 3.1 nous montre un développement pour deux fréquences différentes. Si on augmente la fréquence, l'étendue de l'onde plane diminue drastiquement. Même en rajoutant 8 modes de plus, l'étendue de l'onde plane de la figure de droite n'atteint pas celui de la figure de gauche. Autant pour des fréquences faibles le développement multipolaire nécessite peu de modes, autant pour des fréquences élevées le nombre de modes à prendre en compte devient très grand. On retrouve la règle observée pour tous les codes d'électromagnétisme *i.e.* plus la longueur d'onde d'étude est faible par rapport aux dimensions de l'objet à modéliser, plus les ressources systèmes requises pour effectuer le calcul augmentent. En fait, lorsque la longueur d'onde diminue, on comprend aisément que le problème se complexifie.

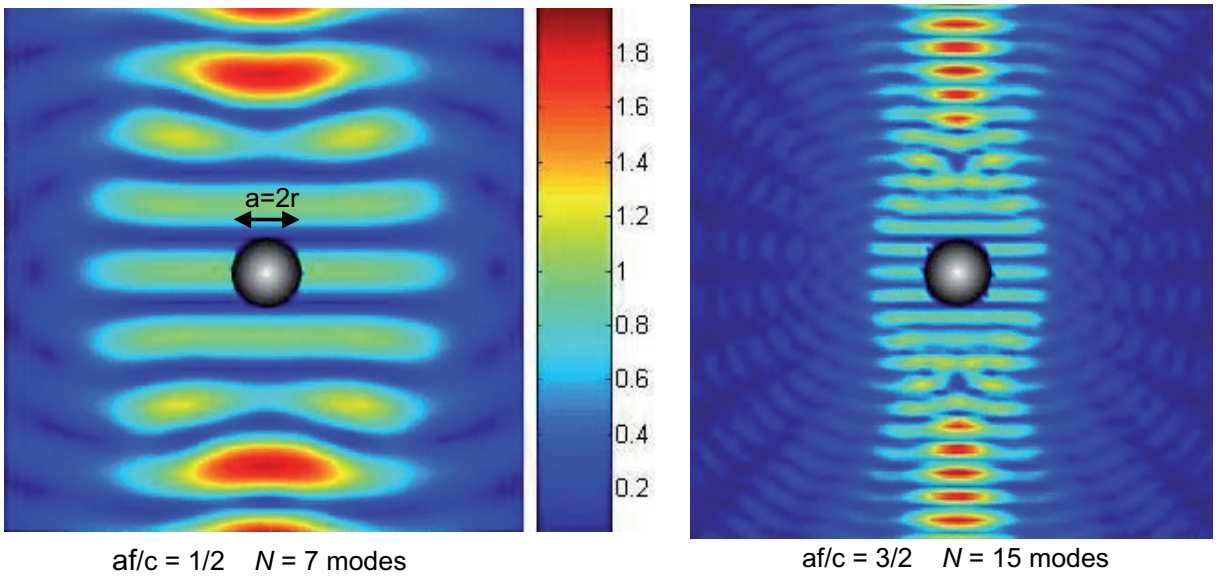


FIG. 3.1 – Photographie à la même échelle du développement multipolaire de l'onde plane pour 2 fréquences différentes

3.4 Champ diffracté par une sphère - théorie de Mie

Nous avons formé une base d'harmoniques solution de l'équation d'onde vectorielle sphérique. Le champ diffracté par une particule sphérique se calcule aisément dans un système de coordonnées sphériques. Il suffit d'appliquer la continuité des champs tangentiels aux frontières de la sphère :

$$\begin{aligned}
&(\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_s - \mathbf{E}_{in}) \times \hat{\mathbf{e}}_\mathbf{r} = 0 \\
&(\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_s - \mathbf{H}_{in}) \times \hat{\mathbf{e}}_\mathbf{r} = 0 \\
&\mathbf{E}_0 \text{ : champ électrique incident} \\
&\mathbf{E}_s \text{ : champ électrique diffracté} \\
&\mathbf{E}_{in} \text{ : champ électrique interne}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Nous sommes ici en formalisme champ diffracté : le champ total externe à la sphère est la somme du champ incident et du champ diffracté et le champ total interne à la sphère est donné directement par le vecteur $\mathbf{E}_{in}$. Cette séparation entre les champs est très intéressante car les champs incidents et diffractés ne sont pas de même nature. C'est ce formalisme qui est utilisé en FDTD et FEM. Si on applique les conditions aux limites, on obtient les développements

des champs diffractés et interne :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_s^{TE} = 4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} i^l S_{-\sigma l} \left| \mathbf{Z}_{\sigma,l,m}^{(3)} \right\rangle \left\langle X_{-\sigma,l,m} \right| \widehat{\mathbf{k}}_i \rangle \\ c\mathbf{B}_s^{TE} = 4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} \sigma i^l S_{\sigma l} \left| \mathbf{Z}_{\sigma,l,m}^{(3)} \right\rangle \left\langle X_{\sigma,l,m} \right| \widehat{\mathbf{k}}_i \rangle \\ \mathbf{E}_{in}^{TE} = 4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} i^l In_{-\sigma l} \left| \mathbf{Z}_{\sigma,l,m}^{(1)} \right\rangle \left\langle X_{-\sigma,l,m} \right| \widehat{\mathbf{k}}_i \rangle \\ c\mathbf{B}_{in}^{TE} = 4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} \sigma i^l In_{\sigma l} \left| \mathbf{Z}_{\sigma,l,m}^{(1)} \right\rangle \left\langle X_{\sigma,l,m} \right| \widehat{\mathbf{k}}_i \rangle \end{cases} \tag{3.14}$$

S_{-1l}, S_{1l}, In_{1l} et In_{-1l} sont les coefficients de Mie classiques. Ces coefficients se simplifient si on considère une sphère métallique parfaite. Le champ diffracté peut être écrit aussi sous forme matricielle :

$$\mathbf{E}_s = [\mathbf{S}]\, \mathbf{E}_0 \tag{3.15}$$

D'après les relations précédentes, la matrice $\mathbf{S}$ est diagonale. Sur la figure 3.2, on a représenté le champ diffracté par une sphère diélectrique de rayon r et son champ incident correspondant. Sur ces représentations, on s'aperçoit de la différence de comportement entre le champ incident et le champ diffracté. On utilise des fonctions de Hankel sphériques pour représenter la variation du champ diffracté en fonction de r. Cette série de fonctions respecte la condition de rayonnement de Sommerfeld du champ diffracté (seule subsiste une onde sortante à l'infini). La variation selon r des champs incident et interne ne peut pas être décrite par cette fonction car la partie imaginaire de cette fonction *i.e.* la fonction de Neumann sphérique a une singularité en zéro. Donc pour décrire ces champs, on utilise seulement la partie réelle *i.e.* la fonction de Bessel sphérique.

Comme on applique une condition aux limites, la condition nécessaire et suffisante pour obtenir un champ diffracté correct est que le développement de l'onde plane incidente soit une onde quasi-plane ou plane aux frontières de la particule. On comprend aisément que si les sphères ont un diamètre élevé par rapport à la longueur d'onde, on devra prendre en compte un nombre élevé de multipôles. Malheureusement, le temps de calcul augmentera de pair. Cette méthode vérifie bien la règle énoncée précédemment. Pour déterminer le nombre de modes nécessaires de façon systématique, on utilisera le critère de Wiscombe (figure 3.3). Sur les figures précédentes, nous avons visualisé les champs en valeurs réelles. Comme nous avons cherché des solutions harmoniques de l'équation d'onde, l'oscillation temporelle en $\exp(-i\omega t)$ n'est pas présente. On peut aussi supprimer l'oscillation spatiale *i.e.* $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ dans le cas d'une onde plane. Il suffit de prendre la valeur absolue des champs. On obtient une meilleure visualisation des champs diffractés et des champs totaux. La figure 3.4 présente

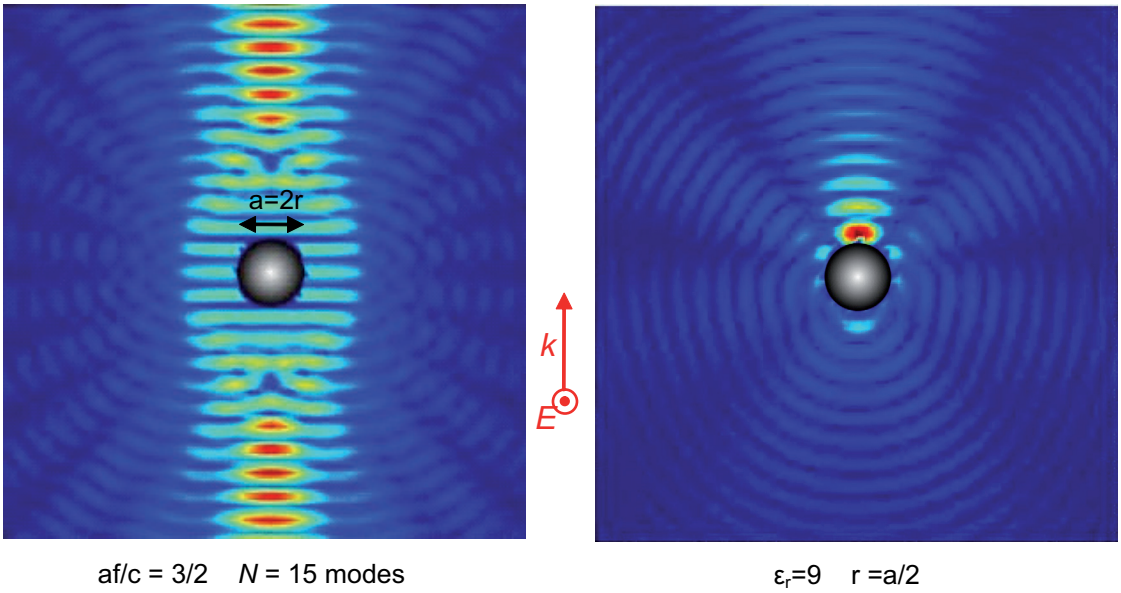


FIG. 3.2 – Photographie à la même échelle du champ incident et du champ diffracté correspondant

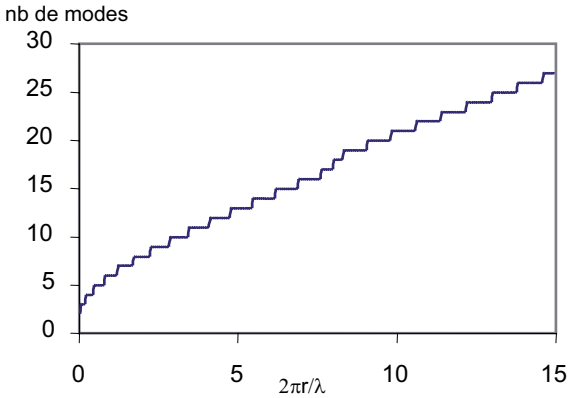


FIG. 3.3 – Critère de Wiscombe [38]

la valeur absolue du champ diffracté de la sphère diélectrique précédente. Le champ total nous permet de visualiser les ondes stationnaires qui sont situées derrière la sphère et aussi celles situées latéralement (figure 3.5). Devant la sphère, l'onde incidente et l'onde diffractée s'associent destructivement. En fait, on voit "l'ombre" créée par la sphère.

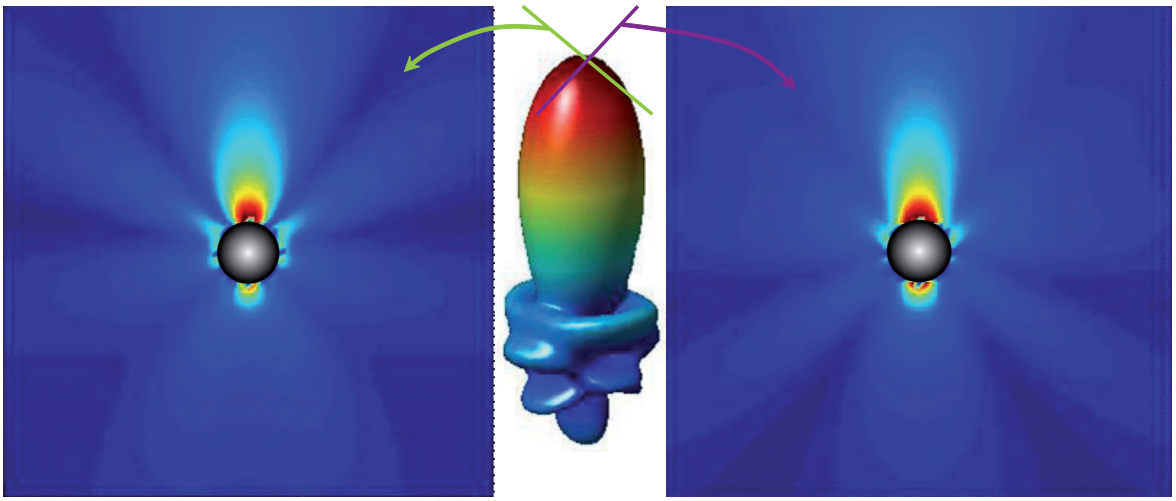


FIG. 3.4 – Photographie du champ diffracté en valeur absolu selon deux directions perpendiculaire et du diagramme de rayonnement de ce champ

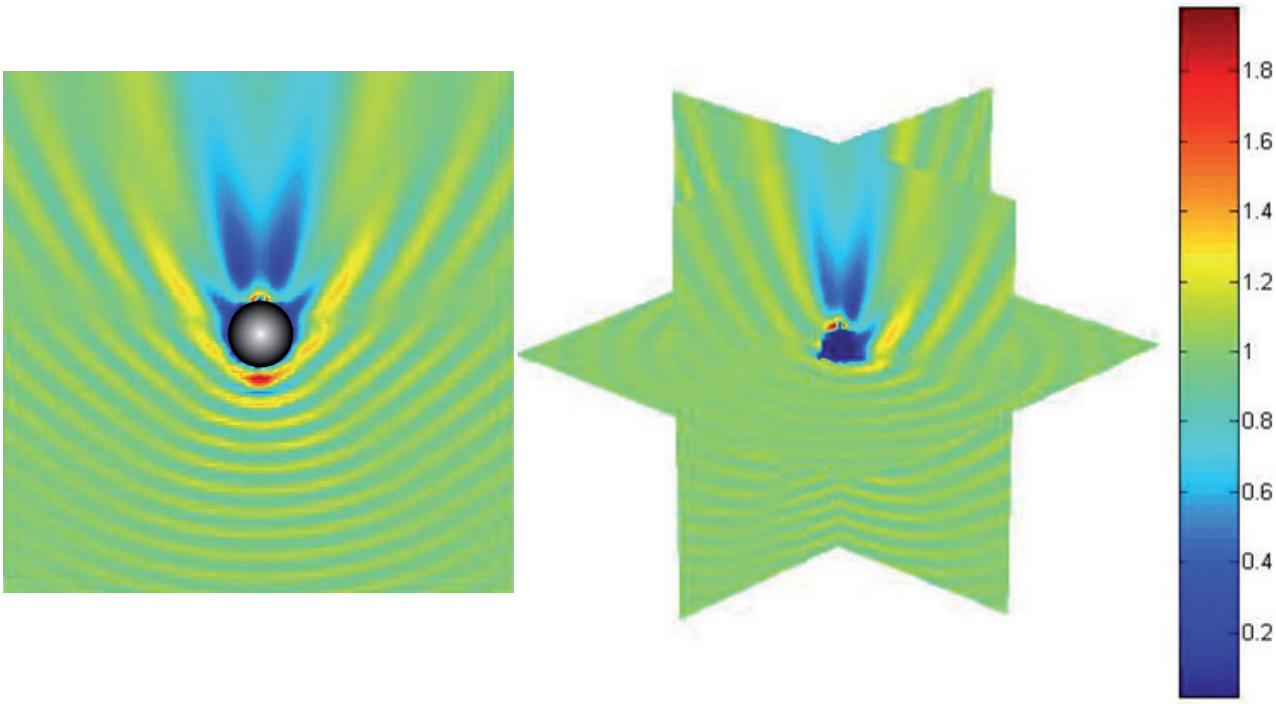


FIG. 3.5 – Photographie du champ total

3.5 La multidiffusion d'une onde électromagnétique par une collection de diffuseurs

Le procédé de la multidiffusion est utilisé dans de nombreux domaines de la physique comme l'acoustique et la physique du solide. Dans notre cas, la multidiffusion est la théorie qui permet de passer du calcul du champ diffracté par une sphère au champ diffracté par n sphères. La nature et la taille de ces n sphères peuvent être différentes. De plus, les sphères peuvent être placées aléatoirement, il n'y a pas de conditions de symétrie sur la position des sphères. Ces deux dernières remarques montrent tout l'intérêt de cette méthode dans le calcul de CPhs avec des défauts et dans le calcul des structures aléatoires. La méthode a été développée pour des objets cylindriques et sphériques. La multidiffusion peut être vu comme une récurrence, mais aussi d'une façon plus théorique.

3.5.1 Procédé itératif

La multidiffusion est décrite sur la figure 3.6 comme un algorithme itératif.

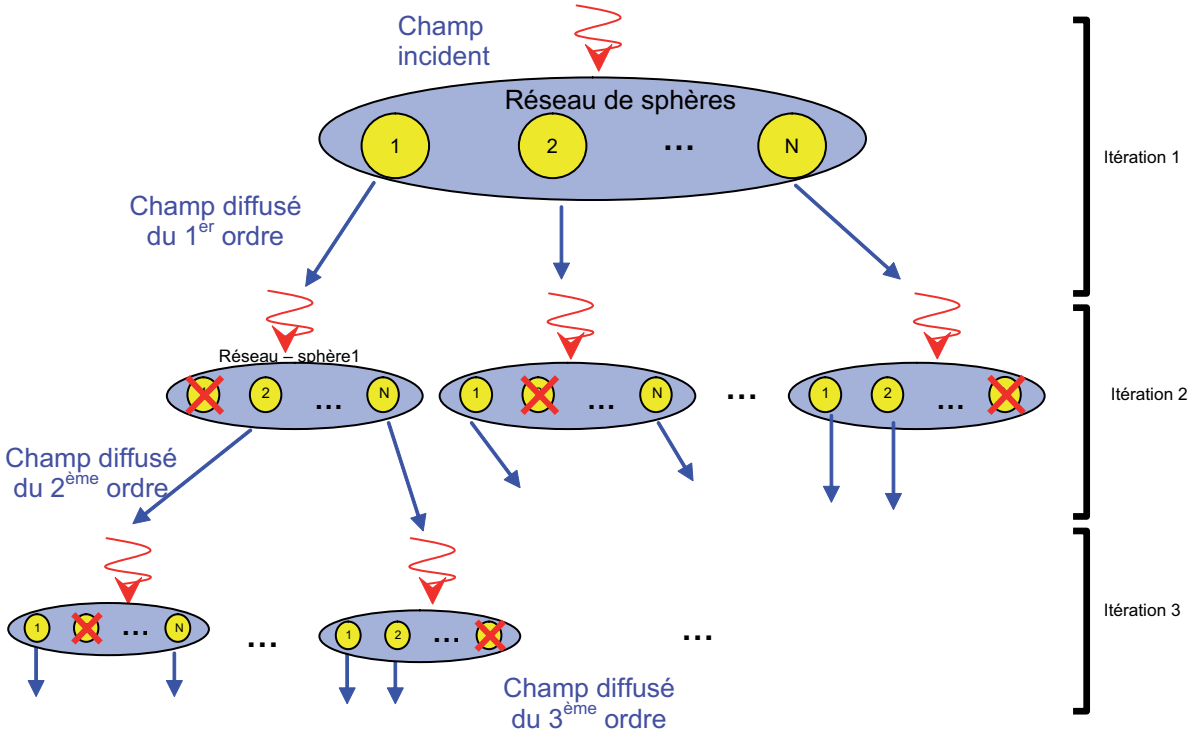


FIG. 3.6 – Diagramme de la méthode de multidiffusion

Au premier ordre, on calcule la diffraction du champ incident pour chaque sphère :

$$\begin{aligned} &\mathbf{E_{S1}} = [\mathbf{S}]\,\mathbf{E_0} \\ &[\mathbf{S}] \ : \text{matrice de diffraction} \end{aligned} \tag{3.16}$$

Au deuxième ordre, le champ diffracté du premier ordre par une sphère est translaté pour devenir le champ incident pour les $n-1$ autres sphères. Avec ce nouveau champ incident, on calcule le champ diffracté comme au premier ordre :

$$\begin{aligned} &\mathbf{E_{i1}} = [\mathbf{G}]\,\mathbf{E_{S1}} \\ &\mathbf{E_{S2}} = [\mathbf{S}]\,\mathbf{E_{i1}} \\ &[\mathbf{G}] \ : \text{matrice de translation} \end{aligned} \tag{3.17}$$

On continue de la même manière pour les ordres supérieurs. Ce procédé itératif s'arrête lorsque la solution ne varie plus suffisamment d'un ordre à l'autre. Le champ diffracté total est la contribution de toutes les sphères et de tous les ordres employés :

$$\mathbf{E_S} = \mathbf{E_{S1}} + \mathbf{E_{S2}} + \mathbf{E_{S3}} + ... \tag{3.18}$$

On pourrait se poser la question : Pourquoi ce procédé itératif fonctionne ?
Pour un nombre déterminé de modes sphériques, plus les sphères sont éloignées entre elles, moins la translation des multipôles est correcte. Mais dans le même temps, il y a moins d'interaction entre les sphères. Les termes ayant le plus d'erreur sont les plus faibles, donc le processus converge.

3.5.2 Théorie

L'équation d'onde ne peut pas être résolue directement pour un problème à plusieurs sphères. La méthode de Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) utilisée pour établir le diagramme de bande électronique résout ce problème pour l'équation de Schrödinger. Le problème se complexifie en électromagnétisme car les champs sont vectoriels. Nous allons établir l'équation de la multidiffusion en réalisant un développement de la fonction de Green tensorielle. L'équation d'onde en $\mathbf{E}$ s'écrit :

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] - k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = k^2 [\varepsilon_r(\mathbf{r}) - 1]\,\mathbf{E}(\mathbf{r}) \tag{3.19}$$

Le tenseur de Green en espace libre vérifie l'équation suivante :

$$\nabla \times \left[\nabla \times \mathbf{\Gamma}_0\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'\right)\right] - k^2 \mathbf{\Gamma}_0\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'\right) = \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right)\mathbf{I} \tag{3.20}$$

D'après Newton [39], le tenseur de Green en espace libre vérifiant la condition de rayonnement de Sommerfeld s'écrit :

$$\mathbf{\Gamma}_0\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right)=\left(\mathbf{I}+\frac{1}{k^2}\nabla\otimes\nabla\right)\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{3.21}$$

En utilisant les deux EDPs précédentes et la condition de rayonnement, on obtient l'homologue de l'équation de Lippmann-Schwinger du cas scalaire :

$$\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right)=\mathbf{E}_0\left(\mathbf{r}\right)+\int d^3\mathbf{r}'\mathbf{\Gamma}_0\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right)k^2\left[\varepsilon_r\left(\mathbf{r}\right)-1\right]\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right) \tag{3.22}$$

Si on effectue quelques manipulations algébriques en utilisant les deux EDPs, l'équation précédente se ramène à :

$$\begin{aligned}&\mathbf{E}_0\left(\mathbf{r}\right)=\left[\mathbf{\Gamma}_0\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right),\mathbf{E}\left(\mathbf{r}'\right)\right]_{S'_\infty}\\&\left[\mathbf{A},\mathbf{B}\right]_S=\oint d\mathbf{S}.\left[\mathbf{A}\left(\mathbf{r}\right)\times\left[\nabla\times\mathbf{B}\left(\mathbf{r}\right)\right]+\left[\nabla\times\mathbf{A}\left(\mathbf{r}\right)\right]\times\mathbf{B}\left(\mathbf{r}\right)\right]\end{aligned} \tag{3.23}$$

Pour effectuer la multidiffusion, le domaine de calcul doit être découpé en cellules qui ne se recouvrent pas :

$$\mathbf{E}_0\left(\mathbf{r}\right)=\sum_j\left[\mathbf{\Gamma}_0\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right),\mathbf{E}\left(\mathbf{r}'\right)\right]_{S'_j} \tag{3.24}$$

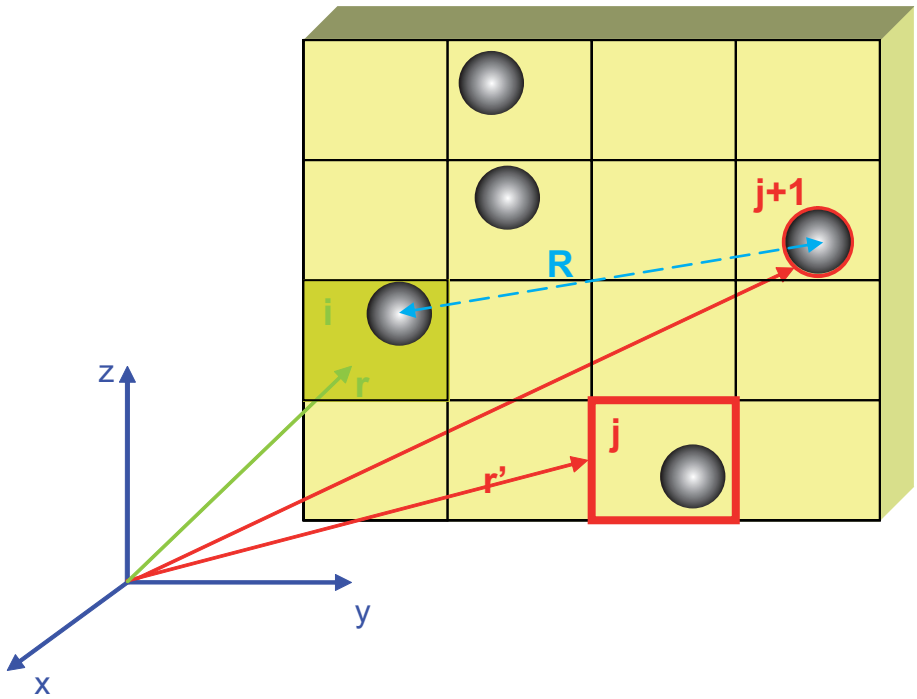


FIG. 3.7 – Découpage du domaine de calcul

Par souci de clarté, nous avons placé au maximum une sphère par cellule. En réalité, une cellule peut contenir plus d'une sphère. Chaque cellule peut être réduite à la surface entourant

la sphère qu'elle contient (figure 3.7). L'équation intégrale va être développée en harmoniques sphériques. Au préalable les fonctions intervenant dans cette équation doivent aussi être développées en harmoniques sphériques :

$$\begin{cases} \mathbf{\Gamma}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}') = ik \sum_{\sigma,l,m} \left|\mathbf{Z}^{(1)j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle \left\langle\mathbf{Z}^{(3)j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r}')\right| \text{ si } r' > r \\ \mathbf{\Gamma}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}') = ik \sum_{\sigma,l,m} \left|\mathbf{Z}^{(3)j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle \left\langle\mathbf{Z}^{(1)j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r}')\right| \text{ si } r > r' \end{cases}$$
$$\begin{aligned} &\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma,l,m} \left|\mathbf{Z}^{(1)j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle a^{(0)j}_{\sigma,l,m} \\ &\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma,l,m} \left|\mathbf{P}^{j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle a^{j}_{\sigma,l,m} \\ &\left|\mathbf{P}^{j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle = \left|\mathbf{Z}^{(1)j}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle + \sum_{\sigma',l',m'} {}^{j}S^{\sigma',l',m'}_{\sigma,l,m} \left|\mathbf{Z}^{(3)j}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r})\right\rangle \ (r > r') \\ &{}^{j}S^{\sigma',l',m'}_{\sigma,l,m} \text{ : coefficients de Mie} \end{aligned} \tag{3.25}$$

Si on remplace les développements multipolaires dans l'équation intégrale du champ incident et que l'on compare les harmoniques sphériques de première espèce, on obtient :

$$a^{(0)i}_{\sigma,l,m} = \sum_{j,\sigma',l',m'} a^{j}_{\sigma',l',m'} \left[\left\langle\mathbf{Z}^{(3)i}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r}_i)\right|, \left|\mathbf{P}^{j}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}_j)\right\rangle\right]_{S_j} \tag{3.26}$$

Nous avons supposé que chaque cellule contient une sphère, donc les indices i, j représentent chaque sphère. Pour calculer l'intégrale, le vecteur $\mathbf{Z}$ doit être translaté :

$$\left\langle\mathbf{Z}^{(3)}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r}_i)\right| = \sum_{\sigma,l,m} {}^{ij}G^{\sigma',l',m'}_{\sigma,l,m} \left\langle\mathbf{Z}^{(1)}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}_j)\right| \tag{3.27}$$

On obtient une intégrale où seuls apparaissent les vecteurs $\mathbf{Z}$, les coefficients de Mie et les coefficients de translation. En la résolvant, on obtient l'équation de la MST :

$$a^{(0)i}_{\sigma,l,m} = \sum_{j,\sigma,l,m} \left[\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} - \sum_{\sigma'',l'',m''} \left({}^{ij}G^{\sigma,l,m}_{\sigma'',l'',m''}\right)\left({}^{j}S^{\sigma'',l'',m''}_{\sigma',l',m'}\right)\right] a^{j}_{\sigma',l',m'} \tag{3.28}$$

La sommation des coefficients de translation est faite pour tout $j \neq i$. L'équation de la MST peut être écrite sous forme matricielle :

$$\begin{aligned} \mathbf{E_0} &= [\mathbf{I} - [\mathbf{G}][\mathbf{S}]].\mathbf{E} \\ \mathbf{E} &= \tfrac{1}{\mathbf{I}-[\mathbf{G}][\mathbf{S}]}\mathbf{E_0} \end{aligned} \tag{3.29}$$

Nous allons montrer que cette équation est équivalente à celle obtenue par le procédé itératif. Le champ diffracté s'écrivait :

$$\begin{aligned} \mathbf{E_S} &= \mathbf{E_{S1}} + \mathbf{E_{S2}} + \mathbf{E_{S3}} + ... \\ \mathbf{E_S} &= \mathbf{E_{S1}} + [\mathbf{S}][\mathbf{G}]\mathbf{E_{S1}} + [\mathbf{S}][\mathbf{G}]\mathbf{E_{S2}} + ... \\ \mathbf{E_S} &= [\mathbf{S}]\mathbf{E_0} + [\mathbf{S}][\mathbf{G}][\mathbf{S}]\mathbf{E_0} + [\mathbf{S}][\mathbf{G}][\mathbf{S}][\mathbf{G}][\mathbf{S}]\mathbf{E_0} + ... \end{aligned} \tag{3.30}$$

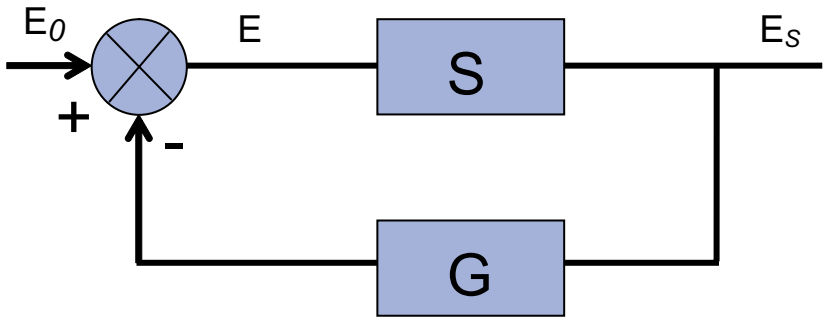


FIG. 3.8 – Boucle fermée représentant le calcul du champ incident et du champ diffracté

On peut le voir comme une simple boucle fermée d'automatique (figure 3.8). Le champ incident total s'écrit :

$$\mathbf{E} = \left[\mathbf{I} + [\mathbf{G}]\,[\mathbf{S}] + ([\mathbf{G}]\,[\mathbf{S}])^2 + ([\mathbf{G}]\,[\mathbf{S}])^3 + ...\right]\mathbf{E_0} \tag{3.31}$$

On obtient la même équation que celle calculée théoriquement.

3.6 Structure de bande à partir de l'équation de la multidiffusion

Pour calculer le diagramme de bande, on modifie l'équation de la MST [34, 35]. Pour des états stationnaires, le champ incident initial, excitant la structure est nul. On obtient une équation séculaire qui a la même forme que son homologue scalaire :

$$\det\left(\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} - \sum_{\sigma'',l'',m''}\left({}^{ij}G^{\sigma,l,m}_{\sigma'',l'',m''}\right)\left({}^{j}S^{\sigma'',l'',m''}_{\sigma',l',m'}\right)\right) = 0 \tag{3.32}$$

En utilisant le théorème de Bloch et en effectuant une transformée de Fourier, l'équation séculaire devient :

$$\begin{aligned}&\det\left(\delta_{ss'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} - \sum_{\sigma'',l'',m''}\left({}^{ss'}G^{\sigma,l,m}_{\sigma'',l'',m''}\right)\left({}^{s'}S^{\sigma'',l'',m''}_{\sigma',l',m'}\right)\right) = 0\\ &{}^{ss'}G^{\sigma,l,m}_{\sigma'',l'',m''} = \sum_{\mathbf{R_i}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{R_i}}\left({}^{ij}G^{\sigma,l,m}_{\sigma'',l'',m''}\right)\end{aligned} \tag{3.33}$$

Pour chaque fréquence, on trouve les différents états de Bloch. Sur la figure 3.9, nous avons calculé la structure de bande du CPh diélectrique du chapitre précédent. Les premières bandes sont correctes. Mais au-delà, le nombre de modes choisis est trop faible pour donner des résultats précis.

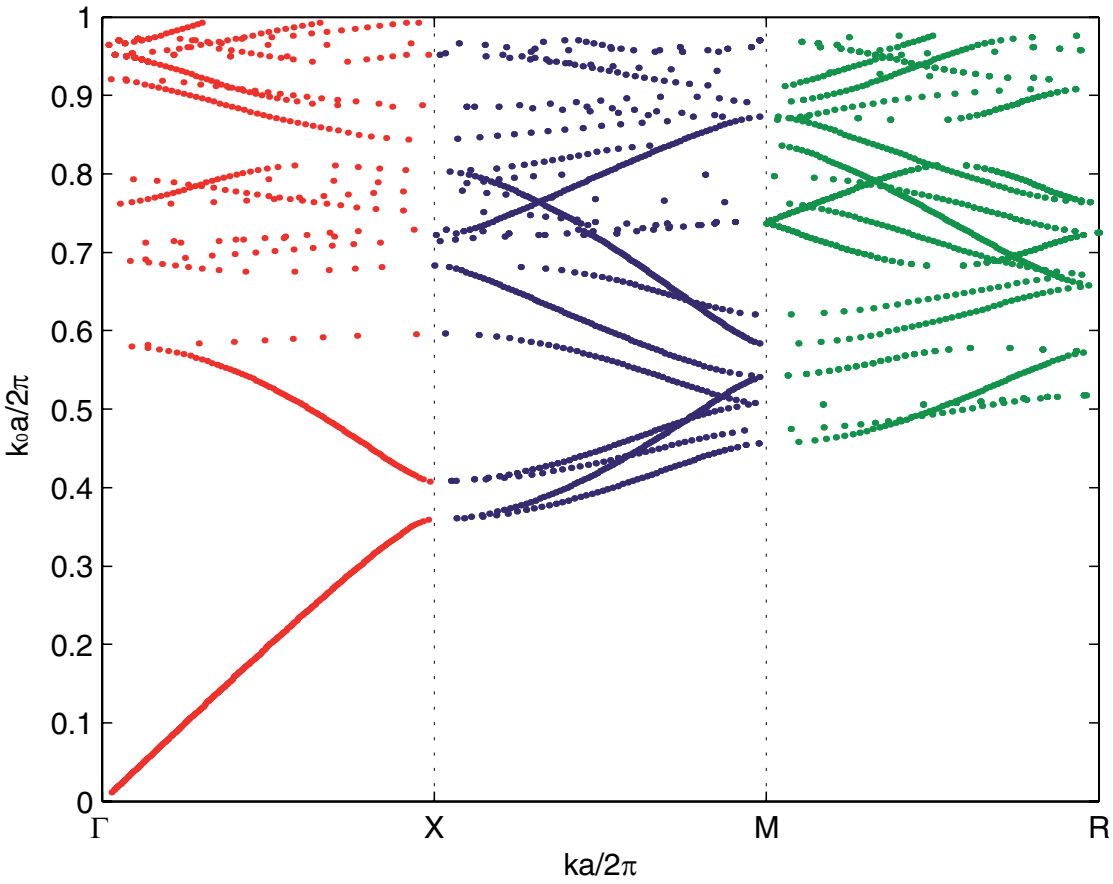


FIG. 3.9 – Diagramme de bande du CPh diélectrique calculé à partir de la multidiffusion

Pour calculer le diagramme de bande, le CPh est infini. Pour ces CPhs, il suffit de calculer une seule période. Le cas des CPhs finis est beaucoup plus complexe.

3.7 La multidiffusion appliquée aux CPhs finis

Les CPhs finis doivent prendre en compte un nombre d'objets suffisants pour représenter la structure. En conséquence, le code doit être optimisé en mémoire et en temps de calcul. Le code que nous avons développé, est séparé en plusieurs fonctions (figure 3.10). Après avoir choisi la structure à étudier et le vecteur d'onde d'étude, on développe le champ incident en multipôle. En prenant en compte les déphasages de l'onde incidente entre les différentes sphères, on obtient un développement multipolaire de l'onde incidente pour chaque sphère. On calcule analytiquement les coefficients de translations, les coefficients de rotations et les

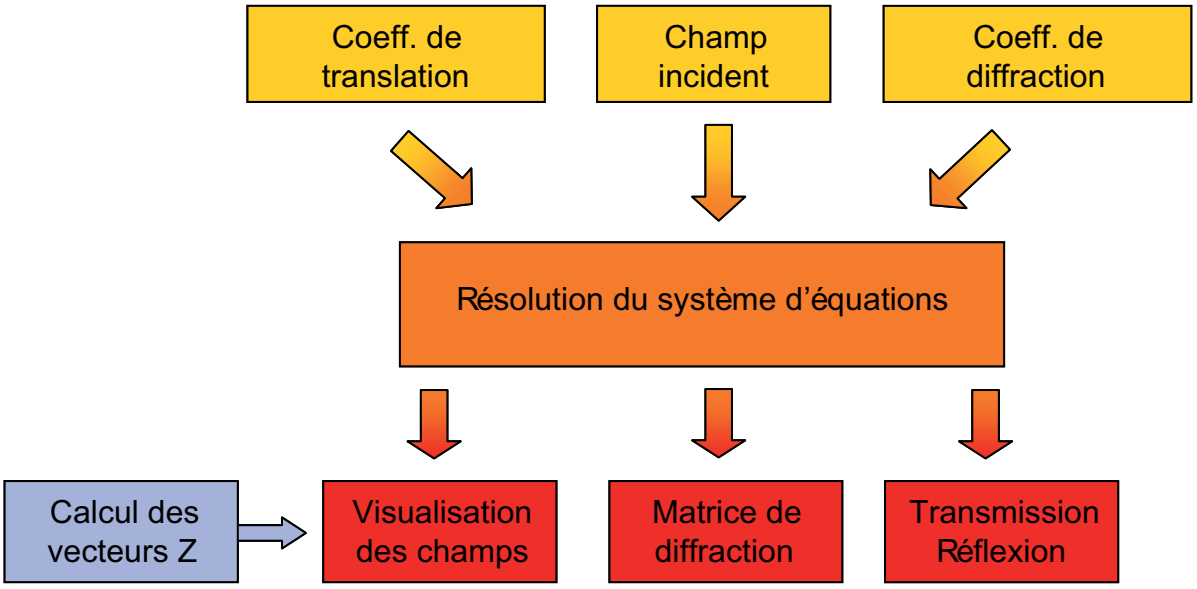


FIG. 3.10 – Diagramme des différentes étapes du code

coefficients de diffraction. L'ensemble de ces coefficients est placé dans l'équation de la MST. On obtient un système d'équations à résoudre qui a pour solution le champ électrique dans la structure. Le développement du champ incident et le calcul des coefficients de diffraction ont été déjà expliqués dans les paragraphes précédents. Ces calculs nécessitent très peu de ressources systèmes pour l'étude des CPhs. Les coefficients de diffraction font intervenir des grands nombres. Il faut veiller à ne pas dépasser la plage de précision des variables. Le calcul de ces coefficients doit être effectué avec des réels écrits sur 64 bits (double en langage C) voir même sur 128 bits. Les deux parties du code qui exigent le plus d'attention sont le calcul des coefficients de changements de repères et la résolution du système d'équations. L'essentiel du temps de calcul est passé dans ces parties.

3.7.1 Calcul des Coefficients de translations

Pour transformer un champ diffracté par une sphère i en un champ incident sur une sphère j, on translate les multipôles par des coefficients de translations. Les harmoniques du troisième ordre sont développées en harmoniques du premier ordre. Il peut être intéressant parfois de translater des harmoniques du premier ordre *i.e.* des champs incidents ou des champs internes

aux sphères. Les différents types de translations sont résumés par les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
\left|\mathbf{Z}^{(J)}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle &= \sum_{\sigma,l,m} {}^{(J)}G^{\sigma,l,m}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}_0)\left|\mathbf{Z}^{(1)}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}')\right\rangle \quad r < r' \\
\left|\mathbf{Z}^{(J)}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\right\rangle &= \sum_{\sigma,l,m} {}^{(1)}G^{\sigma,l,m}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}_0)\left|\mathbf{Z}^{(J)}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}')\right\rangle \quad r > r'
\end{aligned} \tag{3.34}$$

On retrouve les différents cas du développement de la fonction de Green tensorielle. Ce partage est dû à la fonction de Hankel qui a une singularité à l'origine. Les coefficients de translations s'expriment à partir des coefficients de Clebsch-Gordan :

$$\begin{aligned}
&{}^{(J)}G^{\sigma,l,m}_{\sigma',l',m'}(\mathbf{r}_0) = (-1)^m\, i^{l'-l}\sqrt{\pi\,\tfrac{2l+1}{l(l+1)}\tfrac{2l'+1}{l'(l'+1)}}\sum_{p=|l'-l|}^{|l'+l|}\alpha^{\sigma}_{\sigma'}\, i^p C^{l',l,p}_{-m',m}\, z^{(J)}_p Y_{p\ m-m'}(\widehat{\mathbf{r}}) \\
&\alpha^{\sigma}_{\sigma} = \left[l(l+1)+l'(l'+1)-p(p+1)\right]C^{l',l,p}_{0,0}/\sqrt{2p+1} \\
&\alpha^{-\sigma}_{\sigma} = -i\sigma\left[\left(p^2-(l'-l)^2\right)\left((l'+l+1)^2-p^2\right)\right]^{1/2} C^{l',l,p-1}_{0,0}/\sqrt{2p-1}
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Les coefficients C sont les coefficients de Clebsch-Gordan :

$$\begin{aligned}
&C^{l_1,l_2,l_3}_{m_1,m_2} = \langle l_1,l_2;m_1,m_2 \mid l_3, m_1+m_2\rangle \\
&|L,M\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1}\sum_{m_2=-l_2}^{l_2}|l_1,l_2;m_1,m_2\rangle\,\langle l_1,l_2;m_1,m_2 \mid L,M\rangle
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Les coefficients de translations ont été obtenus dans les années 60 à partir des coefficients scalaires [16–18]. Il n'y a pas une grande symétrie entre les coefficients. On peut utiliser les constantes de structures scalaires g de la physique du solide pour symétriser ces coefficients. D'ailleurs les coefficients G sont appelés aussi les constantes de structures vectorielles :

$$\begin{aligned}
&{}^{(J)}G^{\sigma,l,m}_{\sigma,l',m'}(\mathbf{r}_0) = \sum_p C^{l,1,l}_{m-p,p}\,{}^{(J)}g^{l',m'-p}_{l,m-p}(\mathbf{r}_0)\,C^{l',1,l'}_{m'-p,p} \\
&{}^{(J)}G^{-\sigma,l,m}_{\sigma,l',m'}(\mathbf{r}_0) = \sigma\sqrt{\tfrac{2l'+1}{l'+1}}\sum_p C^{l,1,l}_{m-p,p}\,{}^{(J)}g^{l',m'-p}_{l,m-p}(\mathbf{r}_0)\,C^{l'-1,1,l'}_{m'-p,p}
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Il existe des formules de récurrences performantes pour calculer les coefficients de Clebsch-Gordan, Gaunt, Wigner et les coefficients de translations complets [26, 40]. Pour améliorer encore la rapidité des calculs mais surtout pour diminuer la place mémoire occupée, on peut décomposer la translation en deux rotations et une translation selon un axe privilégié (figure 3.11). On utilise l'abréviation RTR pour nommer cette décomposition.

La rotation des harmoniques sphériques est donnée par des coefficients plus simples que les G. Ce sont les mêmes que pour les harmoniques scalaires :

$$\begin{aligned}
&Y_{lm'}(\widehat{\mathbf{r}}) = \sum_{m'} Y_{lm'}(\widehat{\mathbf{r}}')D^l_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) \\
&|\mathbf{Z}_{\sigma,l,m}(\mathbf{r})\rangle = \sum_{m'}\left|\mathbf{Z}_{\sigma,l,m'}(\mathbf{r}')\right\rangle D^l_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)
\end{aligned} \tag{3.38}$$

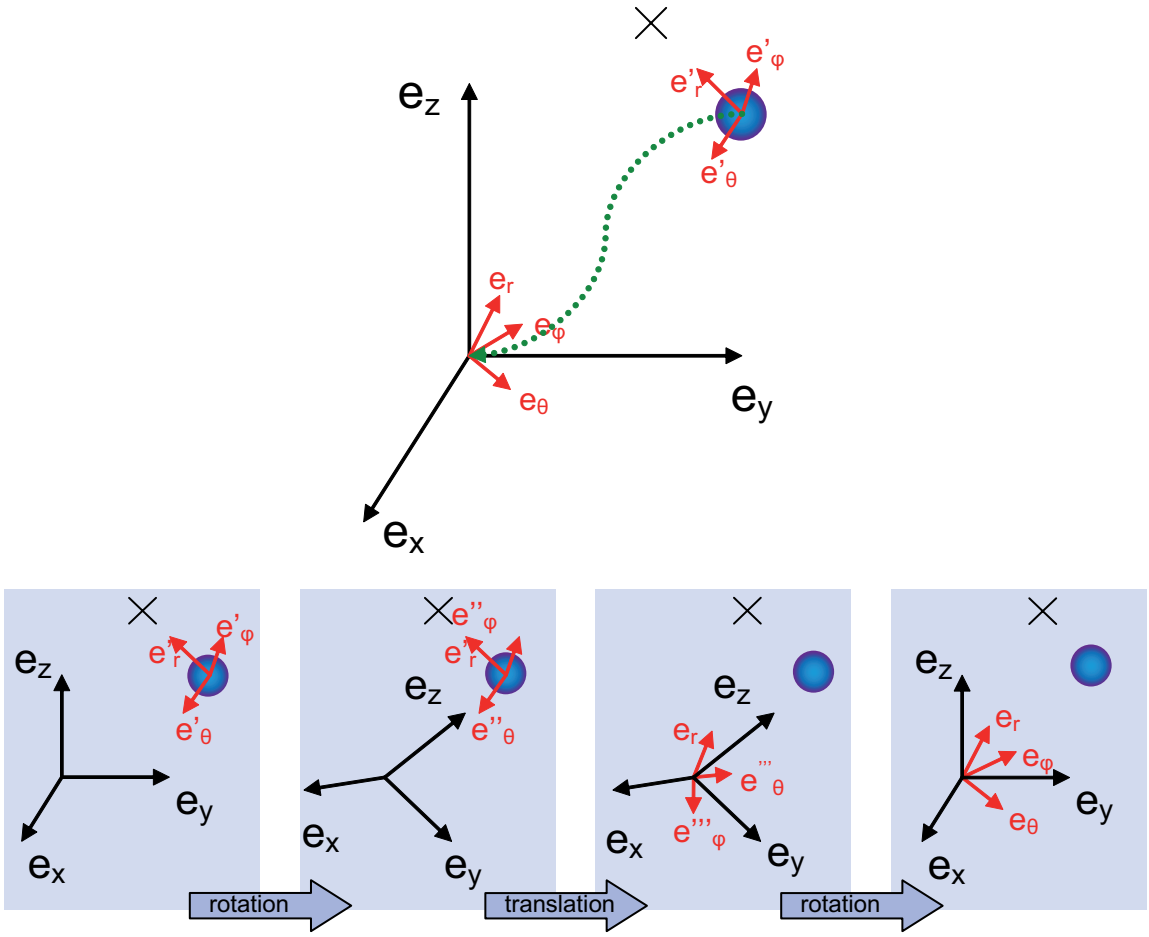


FIG. 3.11 – Procédé de calcul des coefficients de translations

Les coefficients sont donnés par Stein [18] avec la convention d'Edmonds pour les angles [41]. Pour effectuer une translation des multipôles, on effectue une rotation du repère cartésien afin que l'axe z pointe vers la sphère. La translation que l'on fait par la suite est simplifiée puisque la sommation sur les m disparaît. On effectue une dernière rotation pour ramener le repère cartésien à sa position initiale. Soit N le nombre de modes utilisés. Le nombre de coefficients de diffraction nécessaire pour caractériser le champ diffracté d'une sphère est de l'ordre de N^2 et le nombre de coefficients de translation N^4. Si N_s est le nombre de sphères, il y a $(N_s - 1)N_s$ paires d'interactions entre les sphères. Donc la mémoire nécessaire pour résoudre le problème est de l'ordre de $O(N^4 N_s^2)$. Les rotations prennent très peu de place en mémoire et une seule des deux rotations est sauvegardée. En utilisant l'algorithme de décomposition de la translation, le nombre de coefficients de translation passe de N^4 à N^3. Le temps de calcul des coefficients est divisé par N/3 car on passe à un nombre d'étapes de l'ordre de $O(N^3)$.

Sur la figure 3.12, nous avons comparé les temps de calculs et l'espace mémoire réservé des algorithmes de calcul des coefficients de translations. On s'aperçoit que la place mémoire occupée par les coefficients de l'algorithme RTR est encore plus faible que celle prédite théoriquement. Dans ces algorithmes, on prend en compte les symétries du problème. La décomposition RTR a plus de symétries que la translation directe, donc moins de coefficients à calculer, ce qui diminue le temps de calcul de la même manière.

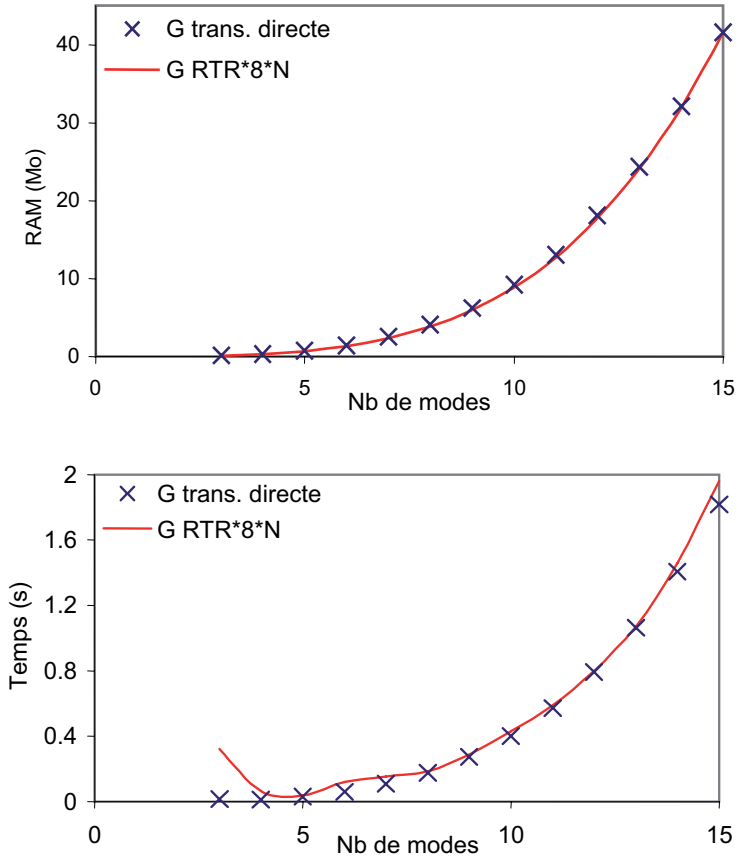


FIG. 3.12 – Comparaison des simulations avec deux algorithmes différents

Lorsque le nombre de coefficients à calculer est grand, les variables intermédiaires de calcul peuvent être stockées dans plusieurs mémoires différentes selon l'algorithme comme par exemple la mémoire cache, la RAM, le disque dur. Cela a pour effet de diminuer encore le temps de calcul dans l'algorithme optimisé. Ces optimisations sont nécessaires pour pouvoir prendre en compte un maximum de sphères.

3.7.2 Résolution du système d'équations

L'ensemble des coefficients présentés précédemment est placé dans l'équation de la MST. On obtient un système d'équations à résoudre. Plusieurs familles de techniques classiques existent pour résoudre ce système. La première est la résolution analytique *i.e.* l'inversion de la matrice, la décomposition LU... Bien que rapide, cette famille nécessite le stockage de la matrice entière. Soit pour nos problèmes près de 500 Go de place mémoire occupée. Malheureusement, la matrice n'est pas assez creuse (10% de termes non nuls) pour utiliser des méthodes analytiques appropriées à ce type de matrice. Il est donc impossible d'utiliser cette famille de méthodes.

Nous devons utiliser des méthodes récurrentes qui ne nécessitent pas nécessairement le stockage de la matrice. La première des méthodes récurrentes est appelée ordre de diffusion. C'est le processus itératif que l'on a décrit sur la figure 3.6. En fait, cette méthode est la méthode élémentaire de Jacobi. On décompose la matrice en deux ou trois matrices particulières. On obtient un système d'équations où apparaît plusieurs fois le vecteur inconnu. A l'un d'eux, on applique une solution initiale et on résout le système. On obtient un nouveau vecteur qui devient le vecteur initial et on continue le processus jusqu'à ce que la solution ait convergé. On utilise un critère énergétique comme critère d'arrêt de l'algorithme. La figure 3.13 représente le calcul par plusieurs méthodes itératives du champ diffracté par 5 sphères diélectriques.

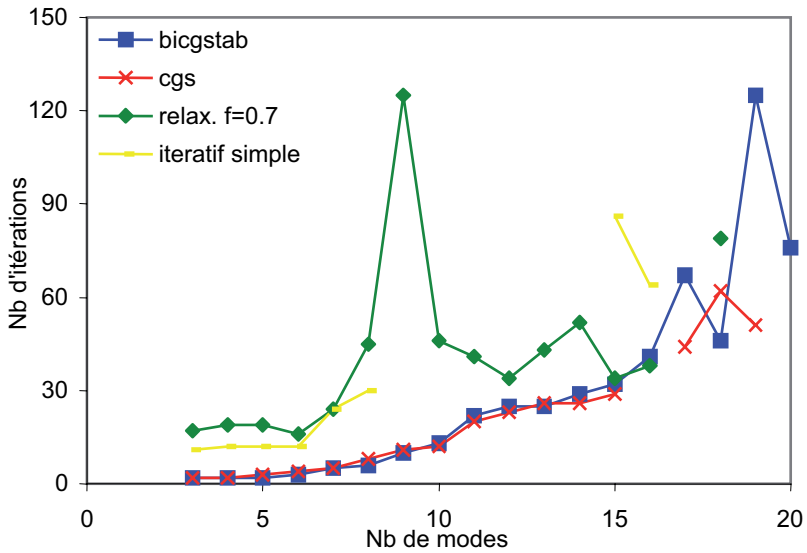


FIG. 3.13 – Comparaison du nombre d'itérations nécessaires pour chacune des méthodes pour une structure de 5 sphères

Les points manquants correspondent aux points où la méthode n'a pas convergé en moins de 200 itérations. On s'aperçoit que lorsque le nombre de modes pris en compte augmente, la méthode de Jacobi ne converge plus. De plus si les sphères sont rapprochées ou la permittivité de celles-ci est élevée, cette méthode a des difficultés à converger. Une petite amélioration de cette méthode consiste à utiliser la méthode de Gauss-Seidel associée à une sur- ou sous-relaxation. La méthode Gauss-Seidel met à jour le vecteur initial après chaque équation alors que dans la méthode Jacobi, la mise à jour était effectuée après avoir calculé tout le système d'équations. Avec la sur- ou sous-relaxation, le champ diffracté du premier ordre ne devient pas le nouveau champ incident, seulement une fraction du champ diffracté. Bien souvent, on utilise 0.7 comme fraction car elle donne les meilleurs résultats. Cette amélioration permet d'augmenter le facteur de convergence. Cette méthode donne des temps de calculs raisonnables (figure 3.14).

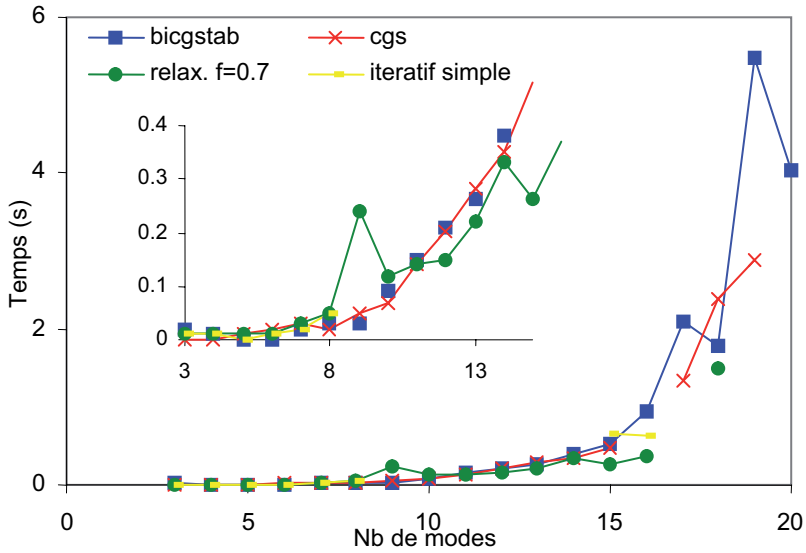


FIG. 3.14 – Comparaison des temps de calcul des différentes méthodes pour une structure de 5 sphères

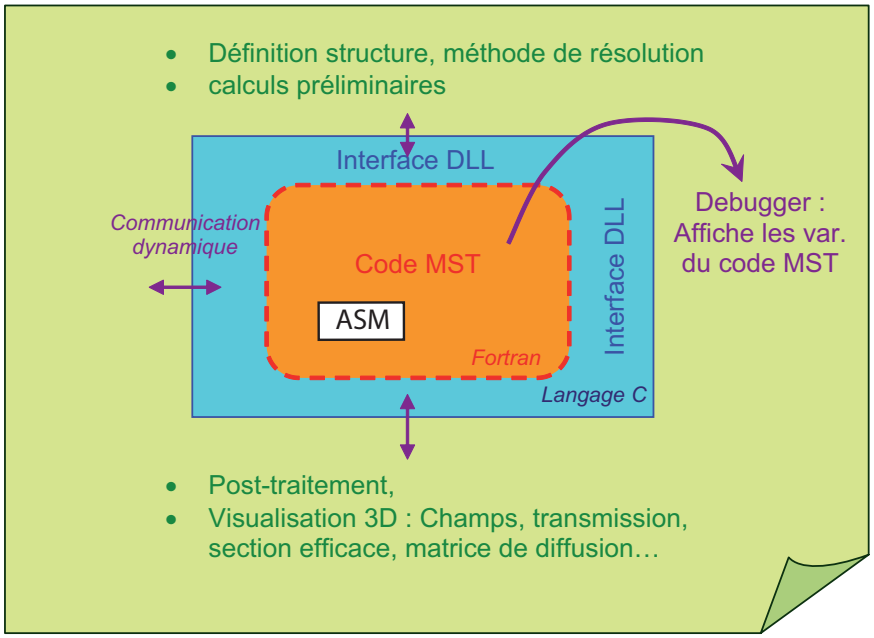
La convergence ou non du système par des méthodes itératives dépend du rayon spectral de la matrice. La rapidité de convergence des ces méthodes dépend du conditionnement de la matrice. Le conditionnement mesure la sensibilité du système d'équations aux erreurs intervenant dans la solution approximée. Dans le cas de la relaxation, le système est mieux conditionné que dans le cas de la méthode itérative simple. Pour obtenir un bon conditionnement à partir de ces méthodes, on peut avoir recourt soit à des méthodes particulières de remplissage de la matrice soit utiliser un préconditionneur. Une autre solution pour les

systèmes mal conditionnés consiste à utiliser des méthodes de gradients. Elles prennent en compte la variation de la solution entre deux itérations. Elles minimisent une fonctionnelle prédéfinie. Sur la figure 3.13 et la figure 3.14, nous avons étudié aussi les méthodes de gradients conjuguées (CGS et BiCGStab). Avec la BiCGStab, nous avons rencontré que de très rares cas où le système ne convergeait pas. On s'aperçoit que les temps de calcul et le nombre d'itérations augmentent exponentiellement avec le nombre de modes. Ce nombre de modes devra être extrêmement bien choisi si on veut garder une bonne rapidité dans les calculs.

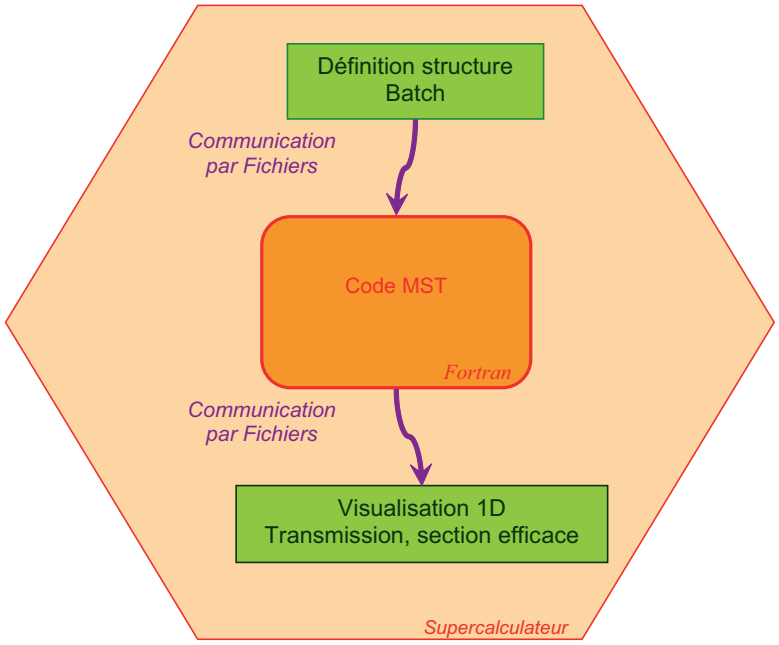
3.8 Architecture du code MST

Le code MST est complexe et long : plusieurs milliers de lignes. Le code a été créé sur PC pour permettre de le débugger facilement (figure 3.15(a)). Il a été écrit en fortran 90 pour pouvoir le transmettre sur le supercalculateur sans le réécrire. Sur PC, le code MST est exécuté comme une fonction DLL (bibliothèque dynamique) à partir du logiciel Matlab. On allie la vitesse du langage fortran et les fonctions prédéfinies de Matlab (les fonctions de visualisation). Le même principe a été utilisé pour le code FDTD. Ici l'architecture est un peu différente du code FDTD. L'algorithme de résolution du système d'équation est écrit en assembleur (MASM). Cela permet d'accélérer notablement la vitesse de calcul. La masse de données à échanger entre le code MST et Matlab est très grande. On utilise un lien dynamique plutôt que lien par fichier pour échanger les données entre fonctions. Comme exemple de données échangées, on peut citer les coefficients de diffractions, de translations et de rotations. Grâce à la décomposition des coefficients de translations, les données échangées et stockées ont diminués énormément mais elles sont encore très grandes.

Les visualisations 3D des champs et de la matrice de diffraction ont été obtenues par une adaptation des fonctions prédéfinies sous Matlab. Après avoir débuggé le code, nous avons transféré le code sur le supercalculateur (figure 3.15(b)). Débugger le code sur le supercalculateur est difficile car la visualisation graphique des matrices de données est impossible. Pour des structures de faibles tailles, le temps de calcul sur un supercalculateur n'a pas diminué énormément par rapport à un PC car le code a été optimisé en mémoire. Lorsque le nombre de modes ou le nombre de sphères pris en compte devient grand, il devient intéressant d'utiliser un supercalculateur. Pour une étude sur une plage de fréquence, ce code est par nature parallèle. Donc on peut exploiter toute la puissance d'une architecture multiprocesseurs, sans perte due à la parallélisation du code et aux échanges de données. Sur le supercalculateur,



(a) Architecture sur PC



(b) Architecture sur supercalculateur

FIG. 3.15 – Architecture du code MST

les champs et la matrice de l'amplitude de diffraction ne sont pas visibles.

Pour un CPh de plusieurs centaines de sphères, les temps de calcul pour une fréquence peuvent varier de quelques secondes à quelques minutes. Cela dépend du calculateur que l'on utilise, du nombre de modes et du conditionnement de la matrice. Notre supercalculateur permet de diviser le temps de calcul par deux par rapport en un PC pour des structures de plusieurs centaines de sphères. La diminution n'est pas très grande car notre code est optimisé pour des très grandes structures non calculables sur PC. Comme dans le chapitre précédent, les structures présentées ici sont toutes calculables sur PC.

3.9 Post-traitement - visualisation de différents paramètres

La visualisation du champ diffracté et de la matrice de diffraction permet de mieux comprendre les structures que l'on étudie. La réflexion et la transmission sont les résultats finaux de notre étude. Ces coefficients nous renseignent sur les positions et les niveaux des différentes bandes interdites d'un cristal photonique.

3.9.1 Matrice de l'amplitude de diffraction

Il existe plusieurs matrices pour décrire le champ diffracté en zone lointaine comme par exemple la matrice de Mueller, la matrice de l'amplitude de diffraction. Certaines sont plus proches des grandeurs obtenues expérimentalement. Nous choisirons la matrice de l'amplitude de diffraction car elle est proche de notre formulation de la MST. Obtenir une expression explicite de cette matrice est très intéressant car cela permet d'éviter de calculer les harmoniques vectorielles sphériques, très coûteuses en temps de calcul. On considère un ensemble de particules placées arbitrairement et illuminées par une onde plane (figure 3.16). La direction de propagation de la lumière incidente définit l'axe z. Nos expressions sont générales mais on choisit cette orientation particulière pour simplifier l'explication. Le plan de diffraction est défini par le vecteur $\mathbf{e}_z$ et le vecteur $\mathbf{e}_r$ (figure 3.16). Ce plan est analogue au plan d'incidence. D'après Van de Hulst et Bohren et Huffman [31, 32], la relation entre les amplitudes du champ diffracté et du champ incident en zone lointaine s'écrivent par convention, de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel sca} \\ E_{\perp sca} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel inc} \\ E_{\perp inc} \end{pmatrix} \tag{3.39}$$

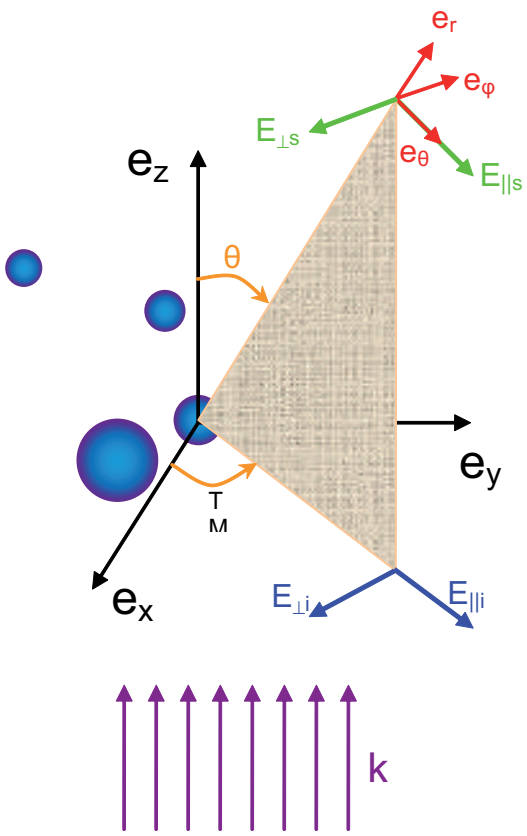


FIG. 3.16 – définition du plan de diffraction

Dans la littérature, la matrice d'amplitude de diffraction est sous une forme légèrement différente :

$$\begin{pmatrix} S_2^{\parallel} & S_3^{\perp} \\ S_4^{\parallel} & S_1^{\perp} \end{pmatrix} \tag{3.40}$$

S_2 et S_4 sont associés à une onde plane incidente polarisée linéairement dans le plan de diffraction et pour S_1 et S_3 la polarisation rectiligne est perpendiculaire au plan de diffraction. En champ lointain, les fonctions de Hankel sphériques se simplifient :

$$h_n^{(1)}(kr) \sim (-1)^n \frac{e^{ikr}}{ikr} \tag{3.41}$$

Les éléments de la matrice d'amplitude de diffraction pour un seul développement multipolaire s'écrivent à partir de l'expression du champ diffracté :

$$\begin{cases} S_2 = -4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} \sigma S_{\sigma l} \left\langle \widehat{\mathbf{k}}_s \,\middle|\, X_{\sigma,l,m} \right\rangle \left\langle X_{\sigma,l,m} \,\middle|\, \widehat{\mathbf{k}}_i \right\rangle e^{-i(\varphi_s - \varphi_i)} \\ S_4 = -4\pi \sum\limits_{\sigma,l,m} S_{-\sigma l} \left\langle \widehat{\mathbf{k}}_s \,\middle|\, X_{-\sigma,l,m} \right\rangle \left\langle X_{\sigma,l,m} \,\middle|\, \widehat{\mathbf{k}}_i \right\rangle e^{-i(\varphi_s - \varphi_i)} \\ S_3 = iS_2 \\ S_1 = iS_4 \end{cases} \tag{3.42}$$

ϕ_s et ϕ_i correspondent respectivement à la troisième coordonnée sphérique du champ diffracté et à la polarisation du champ incident. Lorsqu'on a qu'une seule sphère et que l'on utilise une base d'harmoniques particulière, deux termes de la matrice sont nuls.

Lorsque la lumière atteint une matrice de sphères, deux choix sont possibles pour écrire le champ diffracté :

– Soit on utilise un seul développement multipolaire en une seule origine,

– soit plusieurs développements avec chacun leur propre origine dans le repère cartésien.

Le premier choix paraît plus simple mais plus les sphères sont espacées plus le nombre de modes nécessaires augmente. Nous avons vu précédemment que quand le nombre de modes augmente, les temps de calcul et l'espace mémoire augmentent exponentiellement. Donc même dans le cas d'un agrégat de sphères, on utilisera le deuxième choix. Pour ce choix, un développement multipolaire sera effectué pour chaque sphère dont l'origine sera le centre de chaque sphère. Le nombre de modes proposé par le critère de Wiscombe sera suffisant. Parfois même, il surévalue le nombre de modes nécessaires.

En zone lointaine, le champ diffracté se simplifie et il peut être écrit en un développement sur une seule origine. Le développement multipolaire du champ diffracté par chaque sphère peut être additionné en ajoutant les déphasages entre chaque sphère. On obtient un seul développement multipolaire. On obtient pour S_2 l'expression suivante :

$$S_2 = -4\pi \sum_{n}^{nbsph} e^{-ik\varphi_n} \sum_{\sigma,l,m} \sigma S_{\sigma l} \left\langle \widehat{\mathbf{k}}_s \,\middle|\, X_{\sigma,l,m} \right\rangle \left\langle X_{\sigma,l,m} \,\middle|\, \widehat{\mathbf{k}}_i \right\rangle e^{-i(\varphi_s - \varphi_i)} \tag{3.43}$$

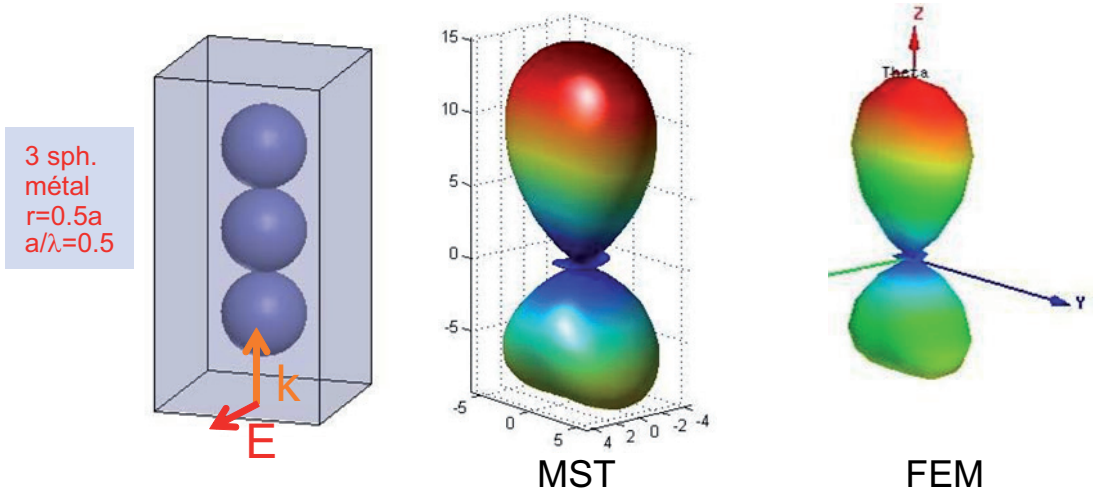
Cette expression est beaucoup plus simple que celle obtenue dans la littérature [42]. On peut remarquer la symétrie de l'expression sur les vecteurs d'ondes. Aucun coefficient annexe n'est nécessaire. De la même manière, on peut obtenir les sections efficaces totales et différentielles d'absorption, d'extinction, de diffusion arrière, le paramètre d'asymétrie...

On peut s'aider du théorème optique pour trouver certains paramètres. Grâce à la base que nous avons choisie, tous ces paramètres ont des expressions simplifiées et n'utilisent pas de coefficients annexes. Ces calculs ne seront pas développés ici. En pratique, on visualisera

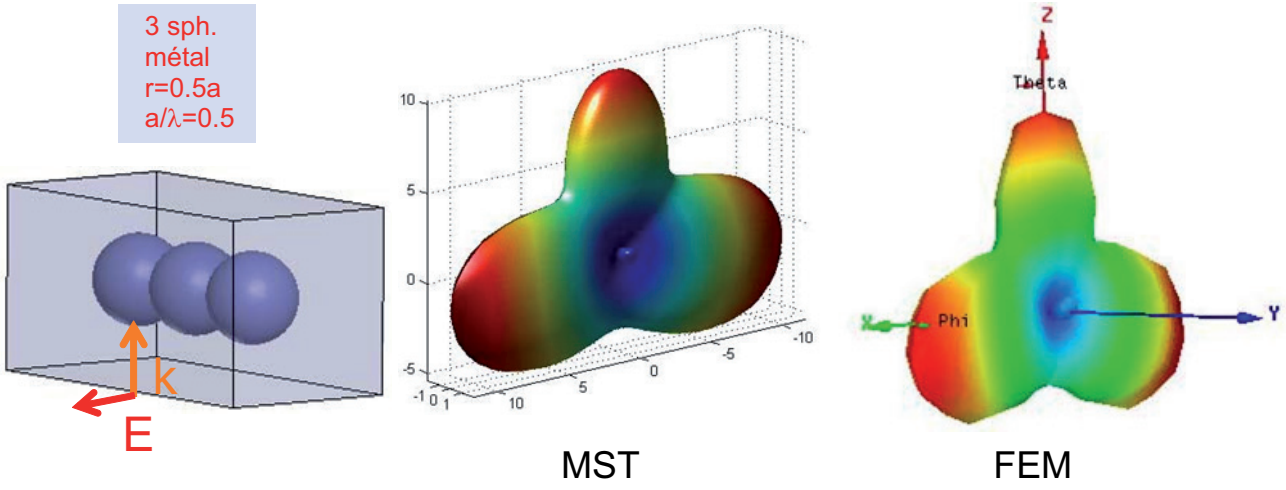
la somme des intensités de diffraction i_1 et i_2 :

$$\begin{aligned} i_1 &= |S_1|^2 \\ i_2 &= |S_2|^2 \end{aligned} \tag{3.44}$$

Cette intensité de diffraction peut être assimilée à un facteur près à la section équivalente radar.



(a) Trois sphères verticales



(b) Trois sphères horizontales

FIG. 3.17 – Comparaison de la matrice de diffraction obtenu par MST et FEM

Sur la figure 3.17, Les intensités de diffraction de trois sphères sont étudiées par deux méthodes différentes. On a une très bonne adéquation entre les méthodes. Lorsque l'on change l'orientation des sphères le diagramme de rayonnement change radicalement (figure 3.17(b)). Nous avons toujours une très bonne concordance entre les méthodes. Les intensités de diffrac-

tion peuvent être mesurées expérimentalement sur la gamme micro-onde. Elles sont réalisées à partir d'une sphère de référence.

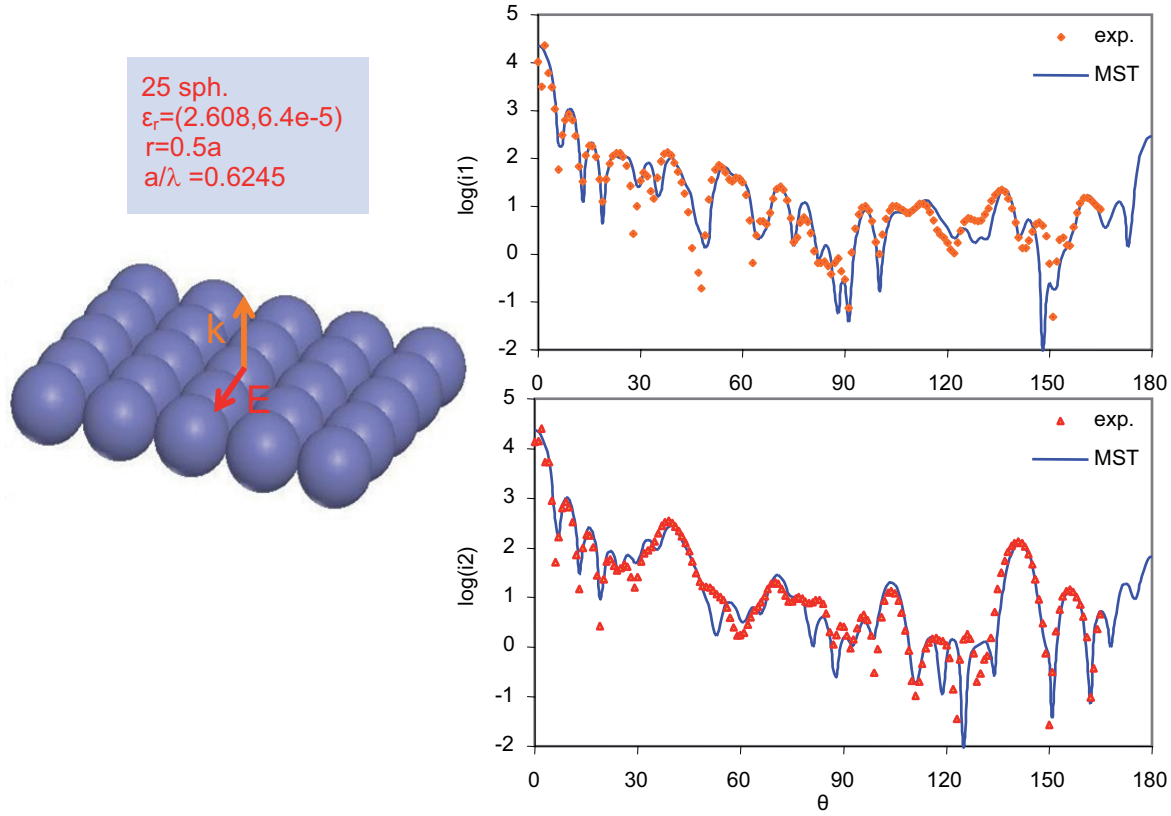


FIG. 3.18 – Comparaison de l'intensité de diffraction expérimentale et théorique d'un agrégat de 25 sphères

Sur la figure 3.18, les mesures expérimentales de l'intensité de diffraction ont une différence de moins de 10% avec la théorie [42, 43].

3.9.2 Calcul de la transmission et de la réflexion

Dans le cas d'une structure infinie, il existe une seule définition de la transmission et de la réflexion. Par contre lorsque l'on étudie une structure finie, le calcul n'est pas aussi aisé. Il faut trouver une définition de la réflexion et de la transmission qui soit la plus indépendante de sa propre définition. On cherche une définition proche de celle de la structure infinie. Comme nous sommes en coordonnées sphériques, une première idée est de calculer le flux d'énergie à travers une demi-sphère derrière et devant la structure (figure 3.19). Le calcul est effectué analytiquement sans calculer explicitement les harmoniques sphériques vectorielles [44]. Malheureusement, la transmission obtenue ne se rapproche pas assez rapidement de

celle de la structure infinie. Une autre idée consiste à utiliser la matrice de diffraction et à normaliser la valeur obtenue sur l'axe. Là non plus, cela ne fonctionne pas. En fait, on obtient les mêmes valeurs en transmission que pour la première idée et cela en vertu du théorème optique pour le cas des sphères non-absorbantes. Une autre possibilité consiste à translater selon le vecteur d'onde la demi-sphère de la première idée. On peut aussi diminuer sa taille. Mais aucune de ces variations ne donne l'effet escompté.

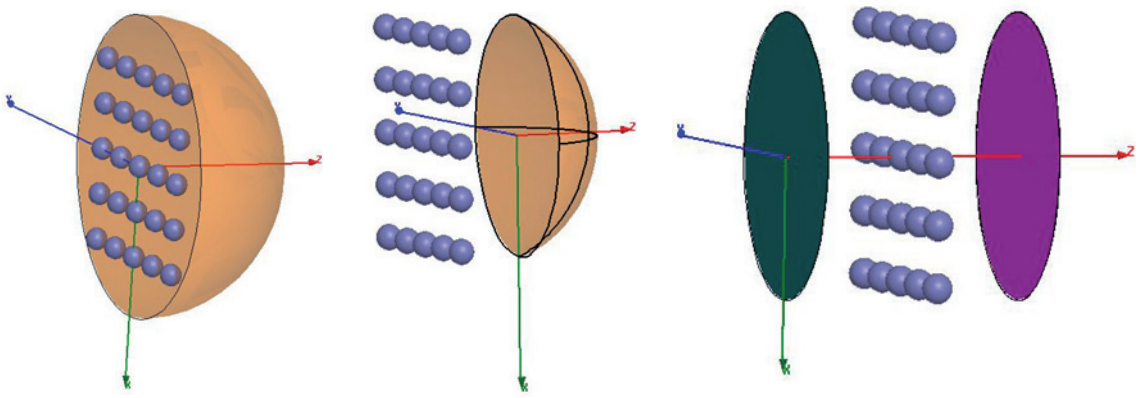


FIG. 3.19 – choix de la surface pour le calcul du flux d'énergie

Pour calculer des flux d'énergie à travers des surfaces quelconques, les multipôles doivent être calculés explicitement sur cette surface. Nous plaçons deux disques, un devant et un derrière le matériau (figure 3.19). Le flux d'énergie à travers les deux disques nous donne la réflexion et la transmission. La figure 3.20 représente une comparaison entre la transmission T et le complémentaire de la réflexion 1-R d'une structure métallique de 3 couches. La transmission donne des résultats aberrants alors que le calcul de 1-R donne de bons résultats. Cette différence de comportement entre la réflexion et la transmission est simple : le calcul de la transmission nécessite la traversée de l'onde à travers toute la structure alors que dans le cas de la réflexion, l'onde s'atténue très vite dans la structure. Pour des structures monocouches, la réflexion et la transmission sont la plupart du temps équivalentes. Ce n'est pas le cas des structures multicouches où interviennent en plus les diffractions par les faces latérales. A ce moment là, la relation T=1-R est fausse. De plus, il est plus aisé de positionner la surface de calcul dans le cas de la réflexion. Dans la suite du chapitre, nous n'étudierons que le complémentaire de la réflexion. Jusqu'ici nous nous sommes focalisés sur la transmission, nous afficherons le complémentaire de la réflexion du CPh fini sous forme de pseudo transmission 1-R. Cette pseudo transmission permettra de comparer plus facilement les structures finies et

infinies. La figure 3.20 représente aussi les sections de diffusion arrière, avant et totale appelées respectivement qback, qfor et qext. Leur unité est en “nombre de sphères diffractées”. Une unité de sphère diffractée correspond à la quantité d’énergie du champ incident traversant un disque de diamètre égal à la sphère correspondante. Elles sont calculées analytiquement. La transmission chute lorsque les sections de diffusion présentent des pics. Plus un agrégat de sphères diffuse, plus la transmission diminue. Au contraire, si les sphères ne diffusent pas, la lumière est totalement transmise. Les sphères deviennent invisibles *i.e.* leur rayon ou leur indice de réfraction est très faible.

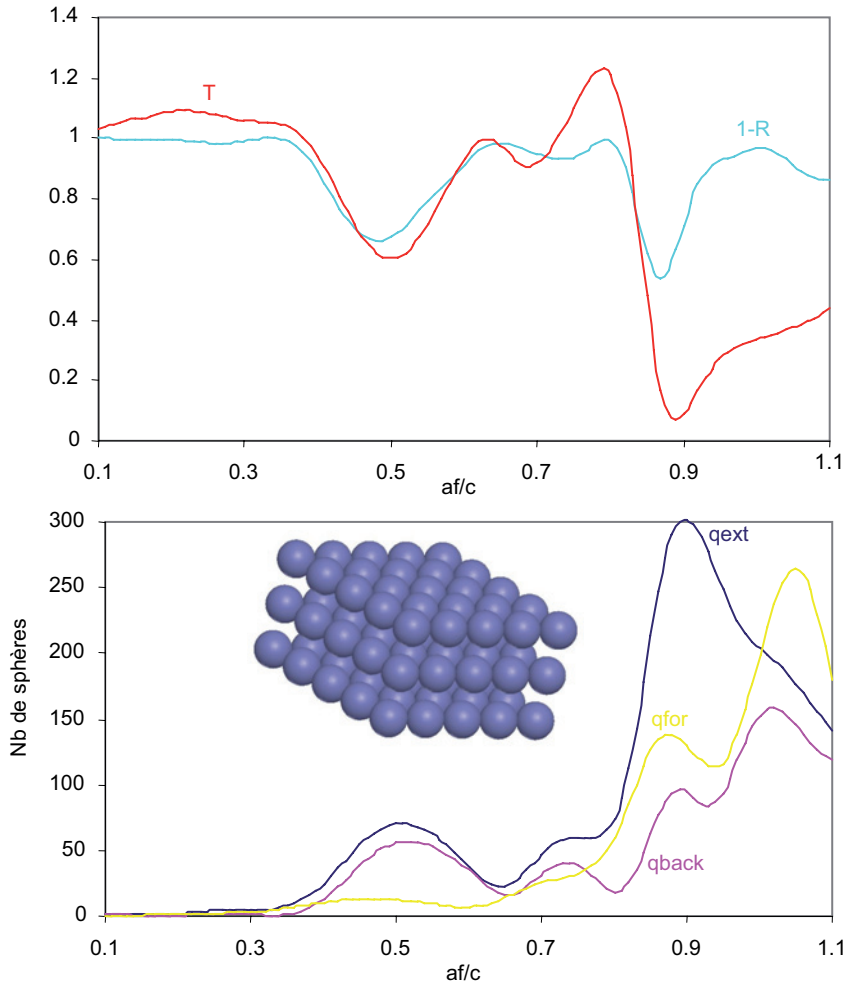


FIG. 3.20 – Calcul de R,T et des sections efficaces de diffusion d’une structure de 3 couches de sphères diélectriques

À la fréquence normalisée 0.79, le champ électrique est fortement diffracté sur les bords (figure 3.21). Le calcul de la réflexion et de la transmission devient difficile. Plus on augmente la fréquence, plus la diffraction devient forte. On doit augmenter la taille de la structure pour

que les calculs de réflexion transmission restent valides.

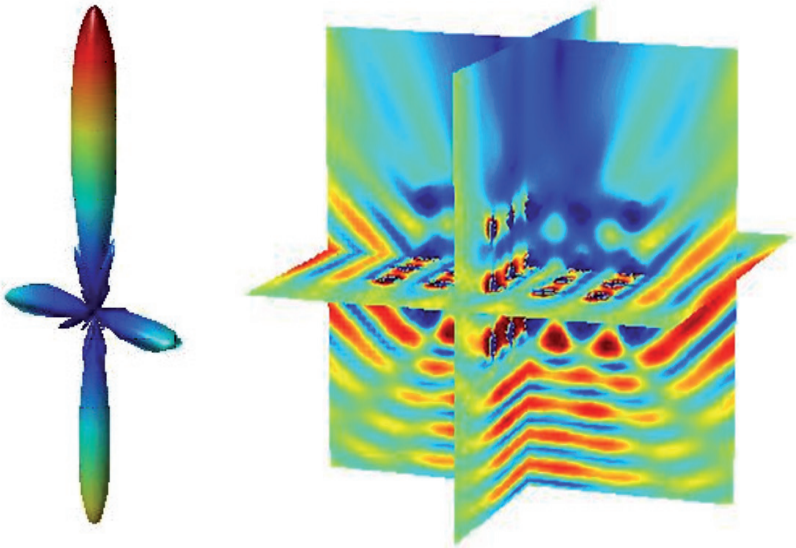


FIG. 3.21 – Champ électrique total de la structure précédente à $af/c = 0.79$

3.10 Du CPh Infini au CPh fini : étude paramétrique et vérification de la méthode

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié de nombreuses méthodes de simulation. Celles-ci seront mises à profit pour valider notre méthode MST. La comparaison entre méthodes est significative si on en compare au moins trois. Si on en utilise seulement deux, on ne sait pas à priori quelle est celle qui est correcte. En effet, les cristaux photoniques nécessitent beaucoup de ressources systèmes pour qu'une méthode converge et bien souvent, on peut être à la limite de convergence avec les ressources systèmes dont nous disposons. On comprend tout l'intérêt de comparer au moins trois méthodes entre elles. Nous allons pour cela étudier trois types de structures différentes.

3.10.1 Surface sélective en fréquence (FSS)

Une surface sélective en fréquence est comme son nom l'indique un filtre fréquentiel soit passe-bas, passe-haut, coupe-bande ou passe-bande. Il arrive souvent de confondre FSS et CPh. Une FSS ne présente pas de bande interdite seulement des fréquences de résonance.

Comme nous l'avons amplement vu, c'est grâce aux états de Bloch que l'on obtient une bande interdite. Nous allons étudier une FSS composé de 25 sphères (figure 3.22). Si on se place à la fréquence normalisée 0.5, on peut visualiser l'onde stationnaire créée par la FSS. L'onde est suffisamment plane pour avoir recours au calcul de la transmission. Les courbes seront représentées en linéaire dans ce chapitre car quelque soit la méthode que nous choisissons, les transmissions sont obtenues avec une précision linéaire. De plus, il est plus agréable d'utiliser cette échelle pour comparer les méthodes entre elles. On peut visualiser par exemple plus aisément les oscillations de Fabry-Pérot en transmission. La figure 3.23 compare la transmission de la FSS par trois méthodes différentes dont la MST.

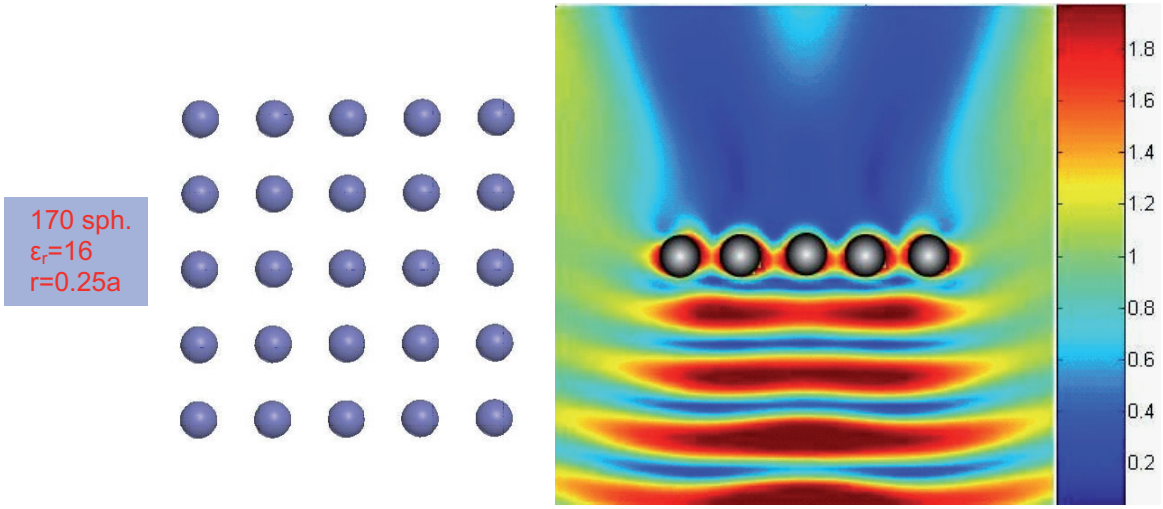


FIG. 3.22 – Etude d'une FSS et visualisation de l'amplitude complexe du champ total E

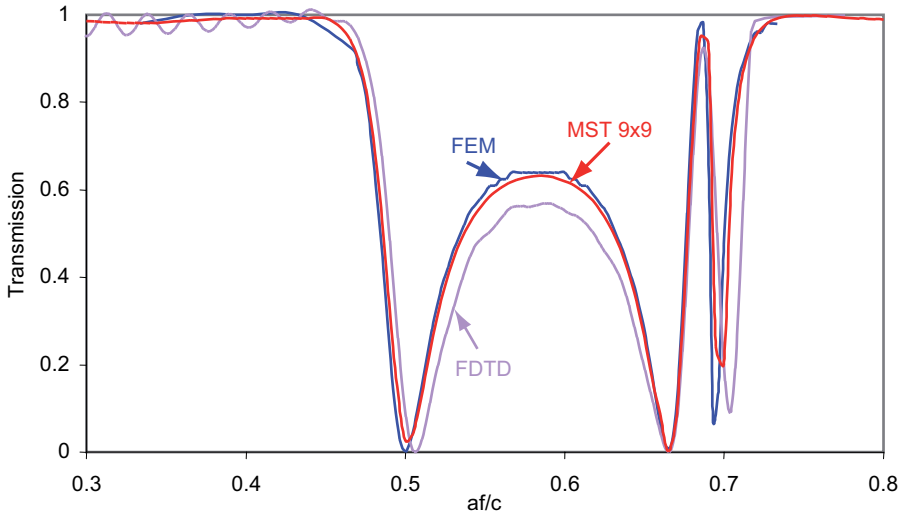


FIG. 3.23 – Comparaison de 3 méthodes pour l'étude d'une FSS

On s'aperçoit d'un excellent accord entre les courbes de la FEM et de la MST. Comme nous l'avons indiqué dans la conclusion du chapitre précédent, la FEM converge avec une grande précision. C'est le cas aussi de la MST. Par contre, il y a une petite différence avec la FDTD. En fait, il aurait fallu augmenter le maillage, rendant redhibitoires les temps de calcul. Le petit décalage en fréquence est du au fait que la FDTD est un code temporel. Donc, en effectuant la FFT des décalages peuvent apparaître. Le même problème apparaît avec la méthode FIT. Les petites oscillations entre les fréquences normalisées 0.3 et 0.5 sont dues aux conditions absorbantes. Le même problème apparaît entre 0.7 et 0.8.

Une comparaison entre différentes tailles de surfaces sélectives est effectuée à la figure 3.24. A partir de 49 sphères, la transmission de la FSS est équivalente à une FSS infinie. Seulement une largeur de 7 sphères suffit pour obtenir une FSS infinie. La convergence est très rapide puisque cela correspond à 2 ou 3 longueurs d'ondes. Pour une surface sélective de 5 sphères, la transmission est calculée sur un disque de diamètre de 3 sphères. Ce nombre de sphères est le nombre minimal pour calculer une transmission puisque déjà des erreurs apparaissent. Vers la fréquence 0.67, la MST descend en dessous de 0. Comme la transmission est égale à 1-R, ces valeurs négatives représentent une énergie réfléchie supérieure à l'énergie incidente. Ce fait est possible de se produire car l'onde incidente a une extension latérale infinie et les flux d'énergies sont calculés sur une surface finie.

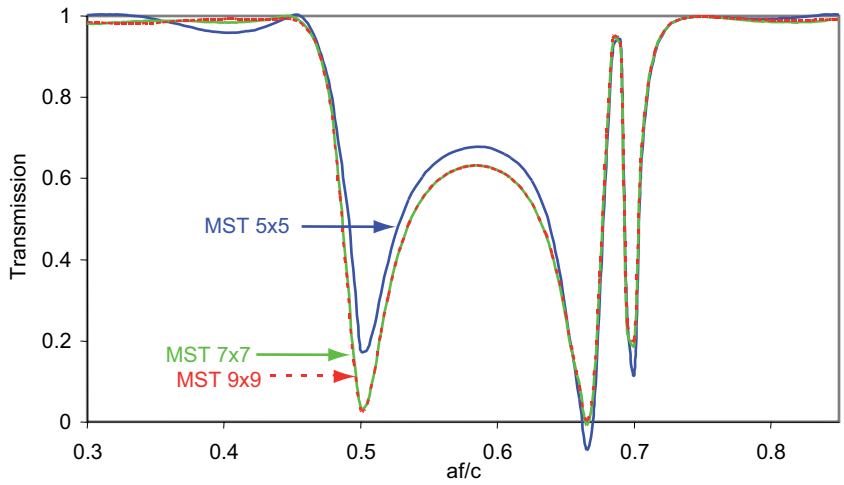


Fig. 3.24 – Influence de la taille de la FSS

Dans le cas de la FSS, la réflexion et la transmission obtenues par MST sont sensiblement équivalentes. Lorsque l'on passe à une structure multicouche comme un CPh, ce n'est plus vrai. Seule la réflexion sous forme de transmission sera affichée.

3.10.2 CPh cubique métallique

La MST modélise tous les matériaux linéaires et isotropes qu'ils soient diélectriques sans pertes, diélectriques à pertes, conducteurs, conducteurs parfaits... Nous allons étudier un CPh cubique métallique composé au maximum de 441 sphères métalliques parfaites. Les paramètres de la structure sont indiqués sur la figure 3.25.

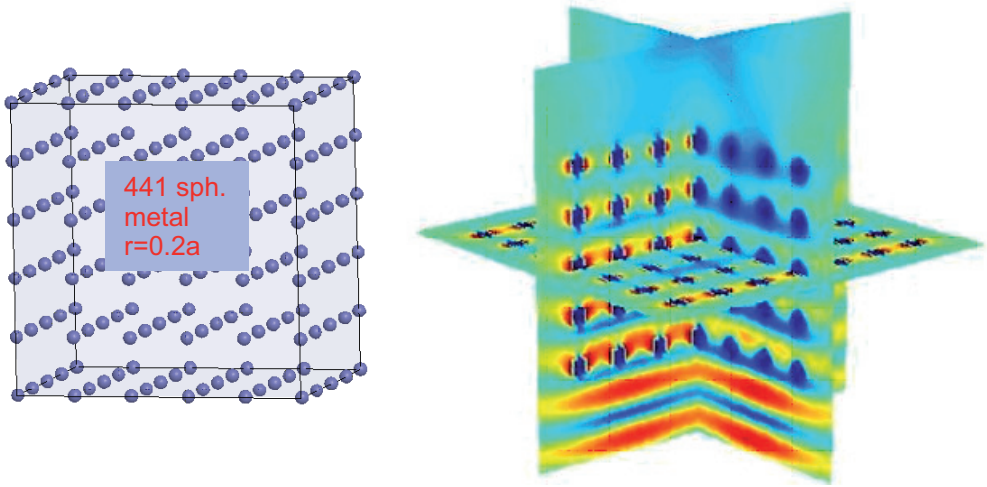


FIG. 3.25 – Grandeurs caractéristiques du CPh métallique et champ électrique total à af/c = 0.5 (même échelle que la figure 3.22)

La visualisation du champ électrique total en valeur absolue nous indique le champ transmis et réfléchi. On s'aperçoit qu'une grande partie de l'onde pénètre les premières couches du CPh mais elle s'atténue couche après couche. Seule la moitié environ du champ traverse totalement la structure. Le champ électrique interagit différemment avec les sphères, selon que l'on soit sur l'un ou l'autre des plans verticaux visualisant le champ (figure 3.25). L'interaction est maximale selon la polarisation de l'onde incidente. Du champ total, on obtient la transmission en fonction de la fréquence.

La transmission du CPh est étudiée par la FDTD, la FEM et la MST. On obtient une très bonne adéquation entre les courbes jusqu' à la fréquence 0.8 environ. Le CPh fini modélisé par la MST est équivalent au CPh infini jusqu'à cette fréquence. Au-delà de cette fréquence, le CPh fini diffracte le champ par les faces latérales (figure 3.26). Le CPh fini contient 49 sphères par couche dans cette modélisation. Si on augmente le nombre de sphères par couche *i.e.* la surface du CPh, le CPh fini sera équivalent au CPh infini même au-delà de la fréquence 0.8. Lorsque la diffraction prend le pas sur la réflexion de Bragg, la convergence de la transmission

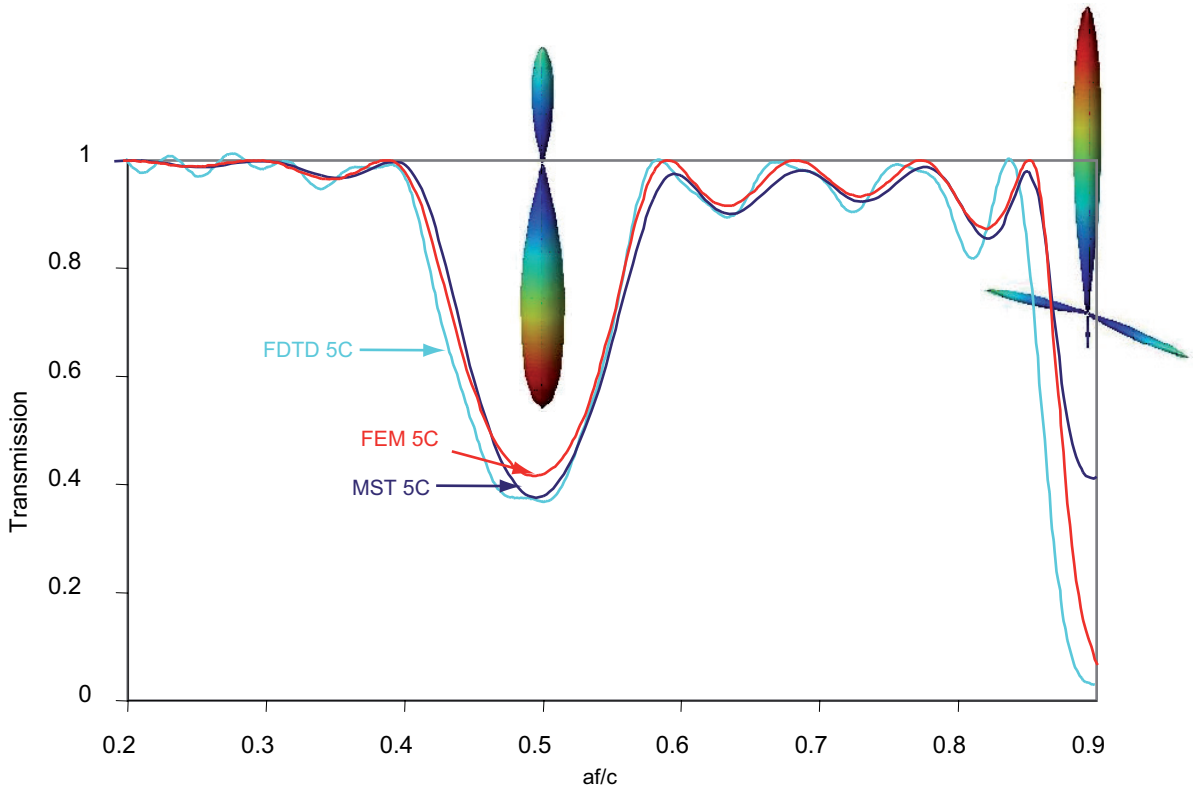


FIG. 3.26 – Comparaison de la transmission du CPh métallique par 3 méthodes différentes

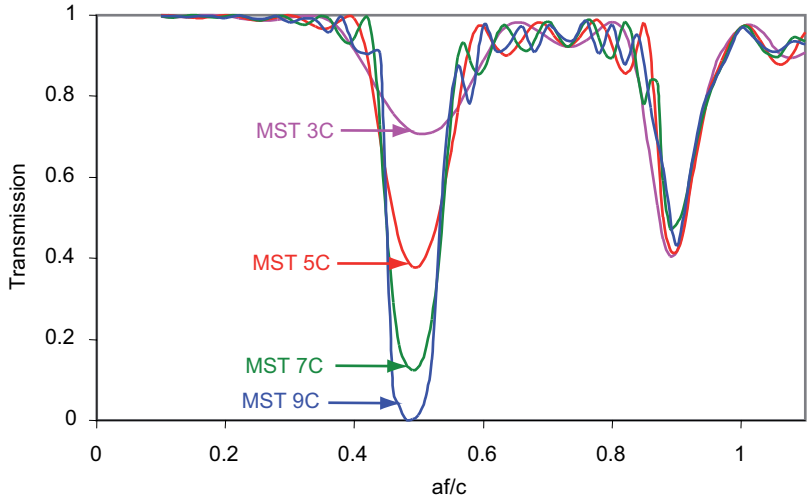


FIG. 3.27 – Influence du nombre de couches dans un CPh métallique

du CPh fini vers le CPh infini est plus lente.

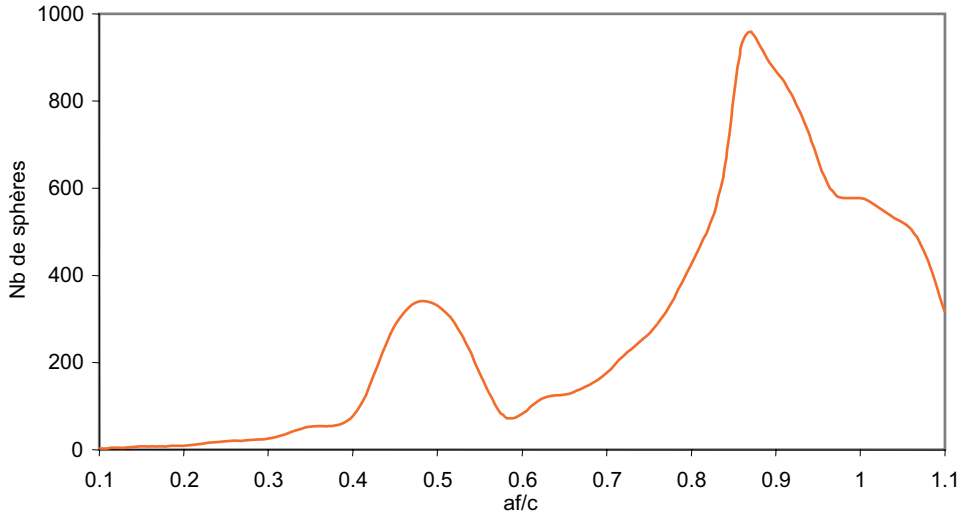


FIG. 3.28 – Section efficace de diffusion du CPh métallique 5 couches

Le changement du nombre de couches du CPh entraîne une modification de la première bande interdite (figure 3.27). Cette bande interdite s'approfondit en augmentant le nombre de couches. A ces fréquences, le CPh se comporte bien comme un réflecteur de Bragg. Par contre, la seconde bande interdite ne s'approfondit pas en augmentant le nombre de couches. De plus, sa fréquence est mal positionnée pour obtenir une réflexion de Bragg (voir chapitre 4). La figure 3.28 nous indique que la quantité de champ diffracté présente des maximums au niveau des bandes interdites. Cette quantité est très élevée pour la seconde bande interdite. On obtient la même conclusion que pour les figures précédentes : la diffraction est prépondérante sur la réflexion de Bragg au niveau de la seconde bande interdite.

3.10.3 CPh cubique diélectrique

En remplaçant le motif métallique précédent par un motif diélectrique de permittivité 16, on obtient un CPh diélectrique (figure 3.29). Cette figure permet de visualiser le champ diffracté à une fréquence inférieure à sa première bande interdite. On s'aperçoit que le champ diffracté est très faible. Comme pour la figure précédente, l'intensité du champ diffracté augmente avec la fréquence.

Sur la figure 3.30, nous avons étudié la transmission du CPh diélectrique par la MST, la PWM et la FDTD. La PWM, nous indique que les trois bandes interdites n'existent qu'en incidence normale. Nous avons une relative bonne correspondance sur la position des bandes

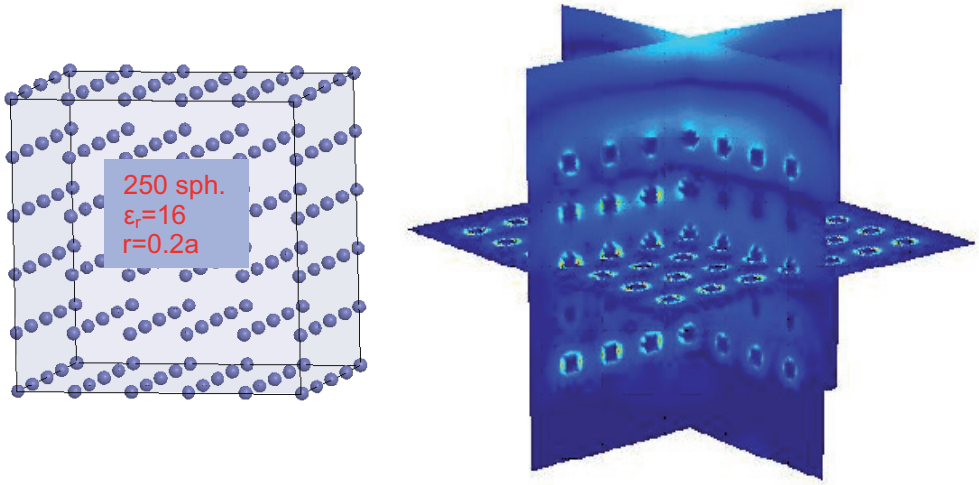


FIG. 3.29 – Structure du CPh diélectrique et champ diffracté réel du CPh de gauche à $af/c = 0.3$

interdites entre la PWM et la MST.

A partir d'une certaine surface du CPh fini, le CPh se comporte comme un CPh infini (figure 3.30). Pour une surface de 25 sphères, il existe une différence sur la première bande interdite entre le CPh fini et infini. Lorsque l'on place 49 sphères par couche, la première bande interdite est sensiblement équivalente dans les deux cas. En ce qui concerne la deuxième et troisième bande interdite, la convergence est plus lente. Nous avons déjà constaté cet effet dans le CPh précédent. Si on étudie la transmission du CPh par rapport au nombre de couches, on obtient les mêmes conclusions que précédemment (figure 3.31). La première bande interdite s'approfondit comme un pic de Bragg alors que les autres bandes interdites ne changent quasiment pas. La première bande interdite est décalée vers les faibles fréquences du fait de la réflexion de Bragg.

Le comportement général du CPh cubique est indépendant de la nature du matériau utilisé dans les sphères. Le comportement général est indépendant aussi de la forme de l'inclusion. Nous allons vérifier cette affirmation en étudiant les défauts apparaissant dans les CPhs.

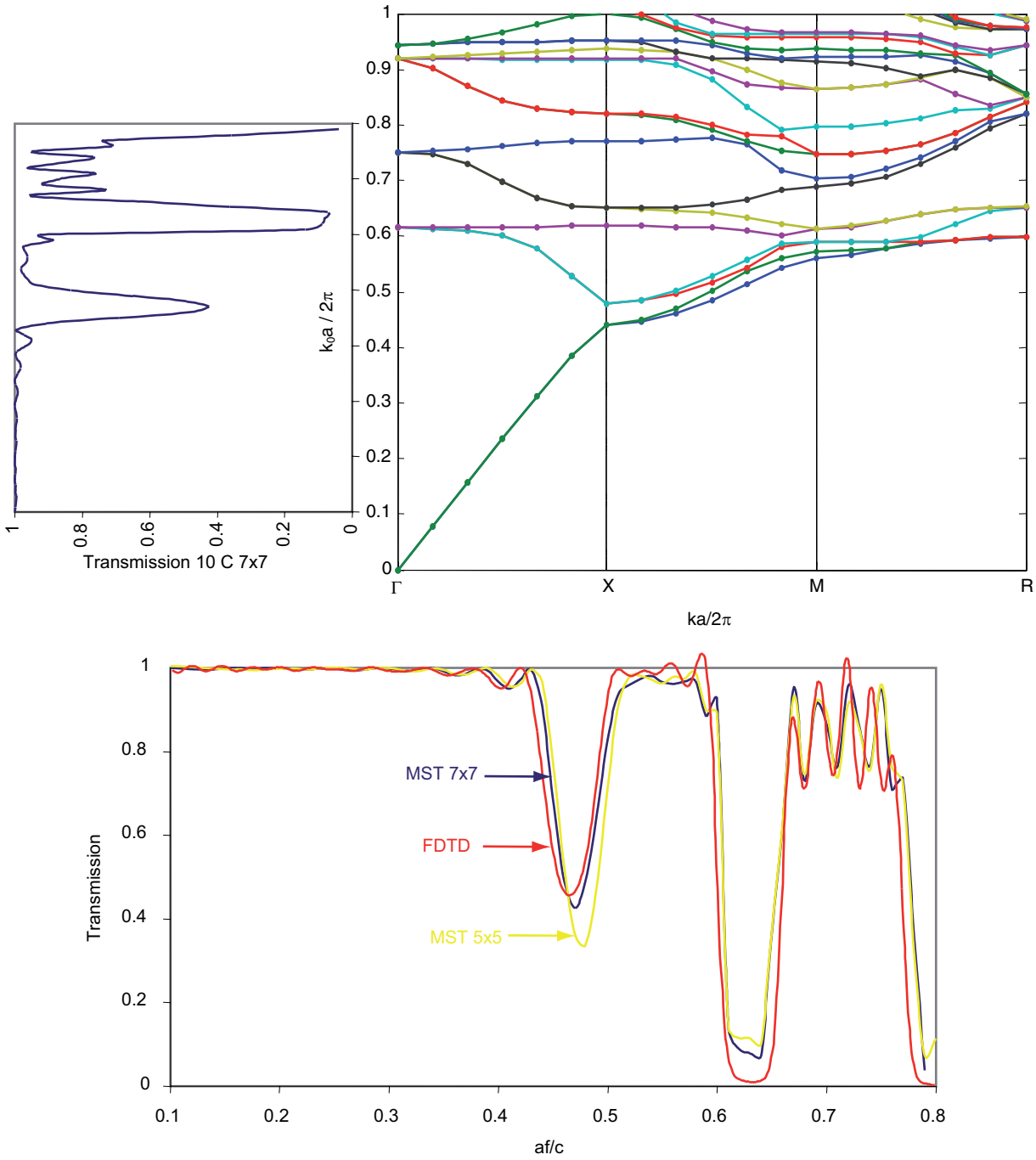


FIG. 3.30 – comparaison de la transmission CPh diélectrique par 3 méthodes différentes

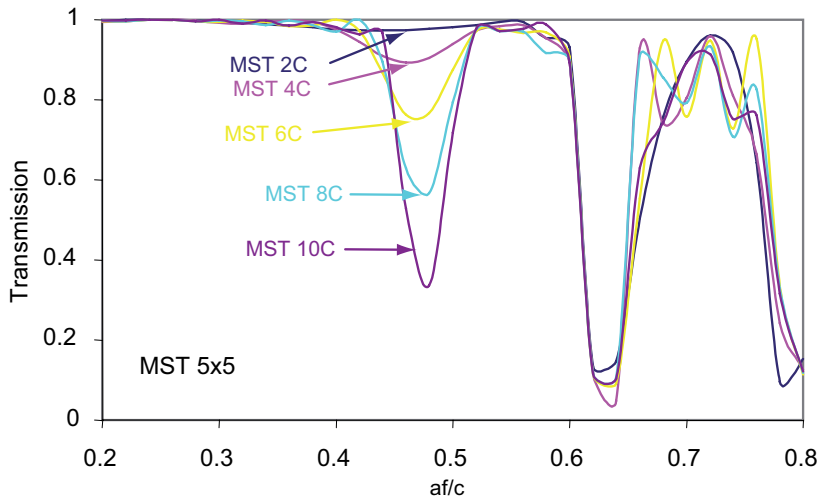


FIG. 3.31 – Influence du nombre de couches dans un CPh diélectrique

3.11 Du CPh parfait au CPh aléatoire : étude de défauts dans les CPhs

Dans notre code de multidiffusion, aucune condition de symétrie n'est exigée. Nous pouvons choisir le diamètre et la position de toutes les sphères. Cette caractéristique est très importante pour l'étude des défauts dans les CPhs. Les défauts peuvent être de deux types : les variations aléatoires de l'ensemble du réseau CPh et les variations arbitraires localisées sur un emplacement du CPh. On choisit d'étudier des défauts dans les mêmes structures que précédemment.

3.11.1 Variations arbitraires de la position des couches

Nous présentons ici un échantillon des possibilités de variations des couches sur le CPh diélectrique précédent. Le CPh comporte 10 couches. Ce CPh peut être coupé en couches selon les trois directions de l'espace. Nous avons déplacé les 5 premières couches du CPh. Par souci de clarté, seul 6 couches sont représentées dans les schémas de la figure 3.32 et figure 3.33. Le déplacement est exprimé en pourcentage du pas du réseau. Un même décalage est appliqué aux 5 couches ; elles sont liées. Nous nous sommes intéressés ici seulement à l'incidence normale. Nous avons étudié deux cas différents : les variations selon l'axe de polarisation et les variations selon l'axe de propagation. Sur la figure 3.32, les bandes interdites remontent progressivement par rapport au décalage des couches. Il y a presque une loi linéaire entre la remontée des bandes interdites et le décalage. En fait, ce n'est pas étonnant, si on

regarde la géométrie du problème. En décalant les couches, la deuxième bande interdite varie mais il n'y a pas de changement en diminuant ou en augmentant le nombre de couches. Cela prouve bien que seule la géométrie intervient sur la variation de la transmission avec les décalages de couches.

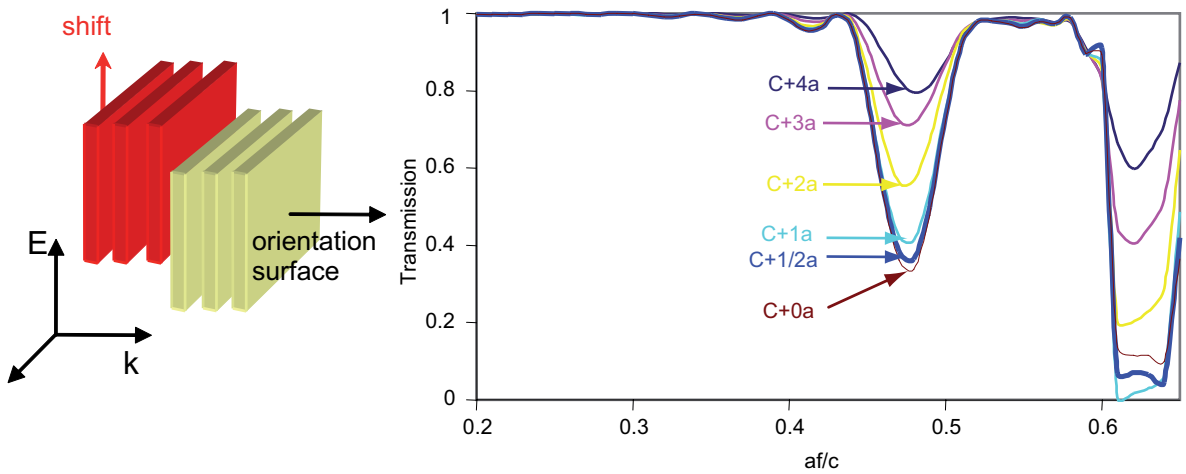


FIG. 3.32 – Variation arbitraire de la position des couches : Couches perpendiculaires à la polarisation

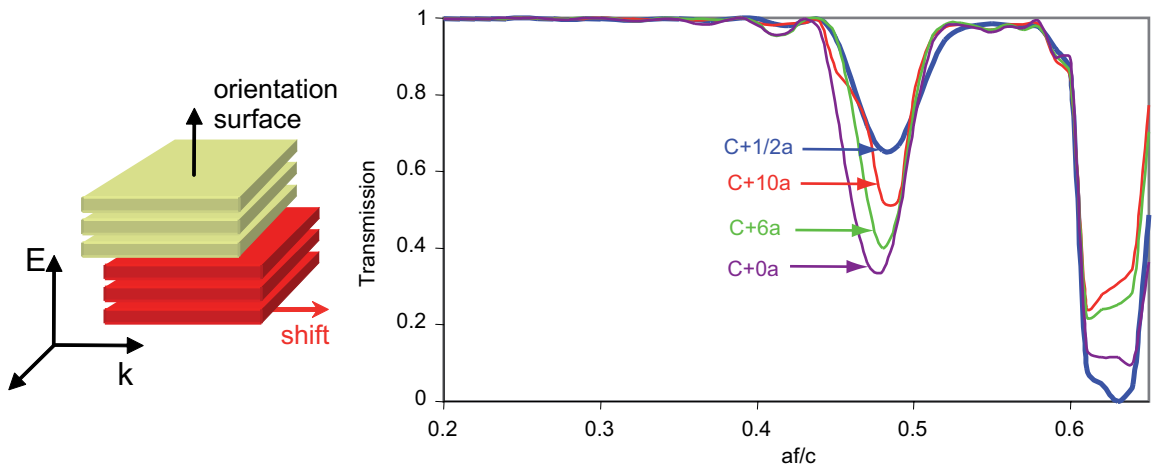


FIG. 3.33 – Variation arbitraire de la position des couches : Couches perpendiculaires à la propagation

Sur la figure 3.33, les bandes interdites varient lentement pour des décalages égaux à un nombre entier de pas. En fait, le cœur de la structure ne change pas. Quand le décalage n'est pas proportionnel à une valeur entière de pas, la première bande interdite remonte très fortement. Le CPh est beaucoup plus désorganisé ici que pour les décalages précédents. Pour

un décalage d'un demi pas, le CPh est beaucoup plus sensible dans le cas de la figure 3.33 que sur la figure 3.32. Il n'est pas étonnant que le CPh soit plus sensible aux décalages selon l'axe de la propagation que selon l'axe de la polarisation. Nous retrouvons ce que nous avions déjà noté expérimentalement. Les CPhs sont très sensibles aux épaisseurs et aux variations de couches selon l'axe de la propagation. Cela est dû à l'origine des bandes interdites.

3.11.2 Suppression de une ou deux couches : effet Fabry-Pérot

Dans le cas des cristaux photoniques tridimensionnel, il existe une grande variété de défauts. On peut supprimer ou ajouter des éléments. Comme nous travaillons avec un réseau cubique, nous allons supprimer une ou deux couches centrales du CPh. Ce CPh qui s'apparentait à un miroir de Bragg devient un Fabry-Pérot. Nous reprenons le CPh métallique précédent et nous supprimons la troisième la quatrième couche. La courbe de la figure 3.34 compare la transmission entre la FDTD et la MST de cette structure. Nous avons une bonne correspondance des courbes. Les deux pics dans la bande interdite représentent les défauts dans le CPh. La visualisation à gauche de la courbe nous indique que nous avons couplé l'onde incidente à un mode évanescent du CPh. Dans une bande interdite, seuls des états évanescents peuvent exister (voir chapitre 1). On obtient deux maximums dans la cavité car nous avons supprimé deux couches.

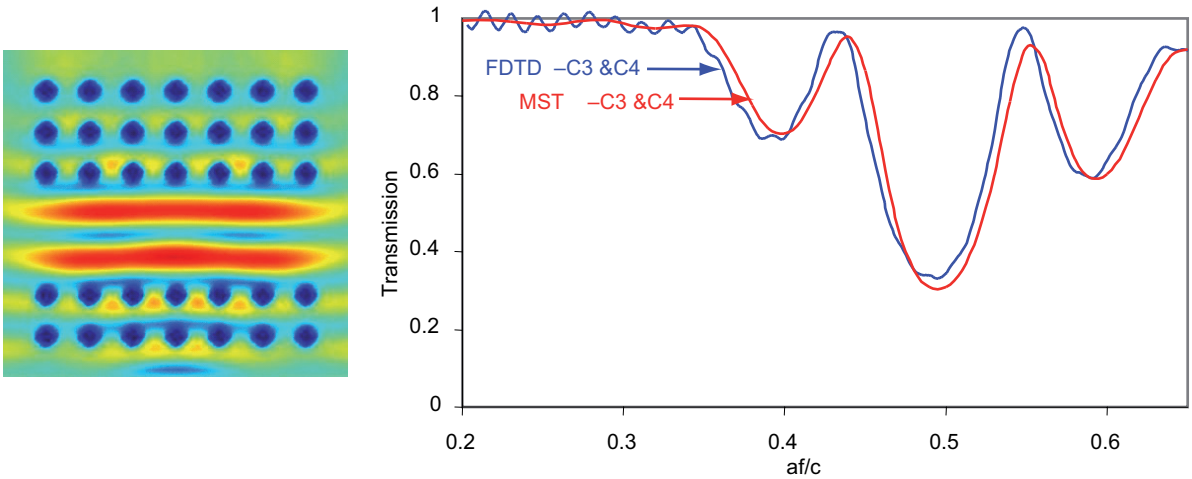


FIG. 3.34 – suppression de deux couches dans le CPh métallique : transmission et visualisation du champ électrique à $af/c = 0.44$

Les deux états de défauts apparaissent progressivement (figure 3.35). Les deux oscillations de Fabry-Pérot juxtaposant la bande interdite du CPh parfait s'approfondissent en ajoutant

un défaut puis deux défauts alors que dans le même temps, la bande interdite remonte. Si on augmente le nombre de couches, on obtient le même comportement que dans le cas unidimensionnel. Les pics séparants les oscillations de Fabry-Pérot et la bande interdite deviennent plus fins.

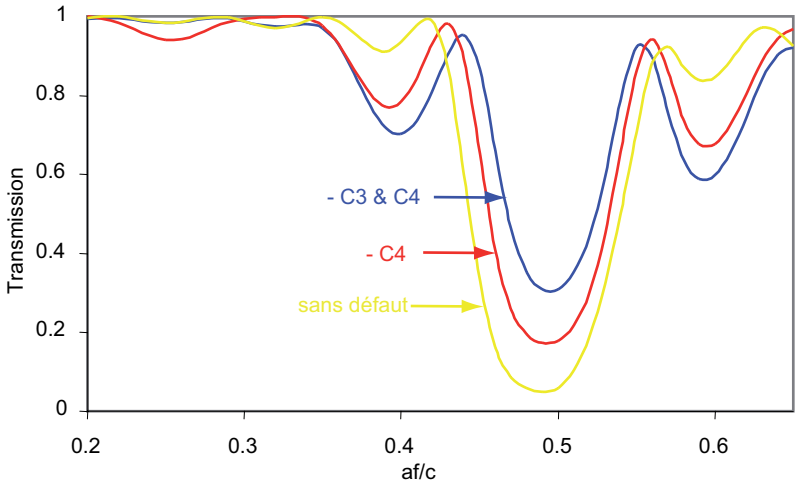


FIG. 3.35 – transmission du CPh métallique avec et sans suppression de couches

Nous avons fait la même étude dans le cas du CPh diélectrique 10 couches. Nous avons supprimé une couche dans le CPh (figure 3.36). Contrairement au CPh métallique, seul un état de défaut apparaît dans la bande interdite du CPh. Un seul maximum apparaît dans la cavité car nous avons supprimé qu'une couche.

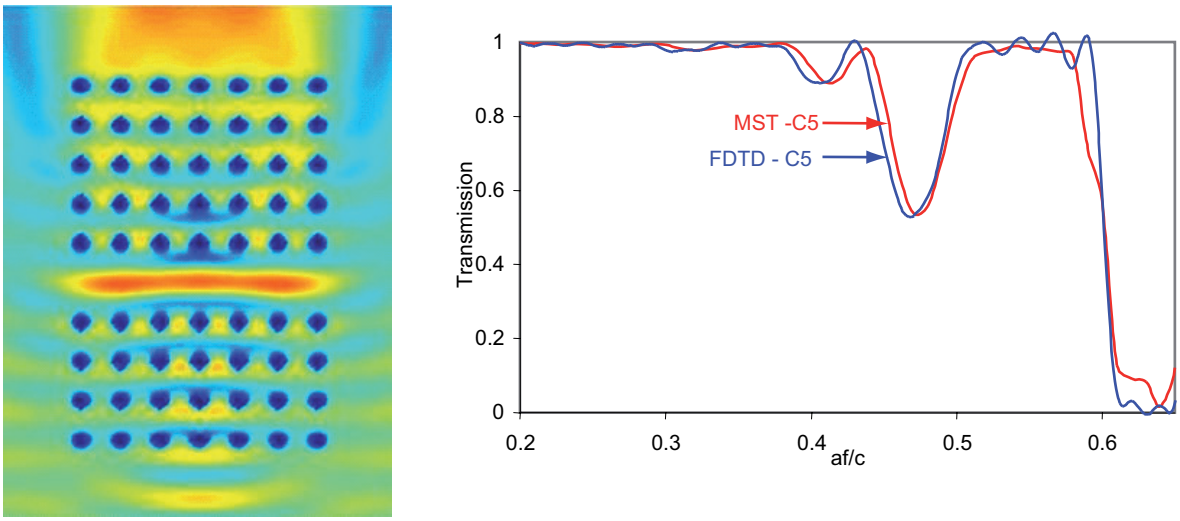


FIG. 3.36 – suppression d'une couche dans le CPh diélectrique : transmission et visualisation du champ électrique à $af/c = 0.44$

Le pic de défaut dans la transmission apparaît progressivement (figure 3.37). Il n'existe aucun état de défauts dans la seconde bande interdite.

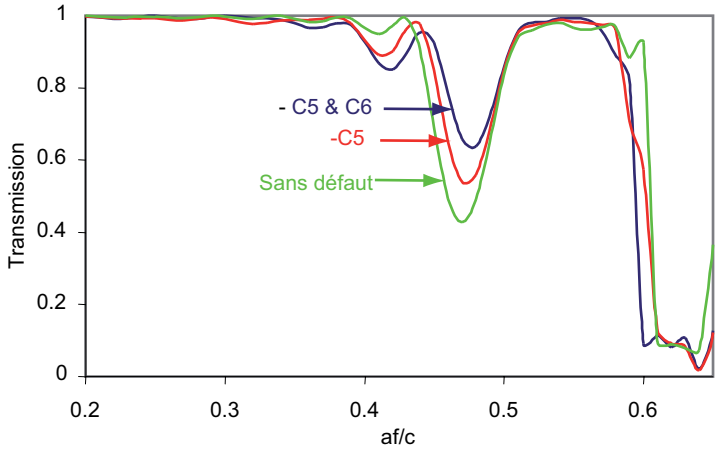


FIG. 3.37 – transmission du CPh diélectrique avec et sans suppression de couches

3.11.3 Variations aléatoires des rayons et des positions des sphères

Nous avons étudié l'influence des variations aléatoires des rayons et des positions de sphères. Nous gardons le même CPh diélectrique que précédemment. Sur la figure 3.38, nous réalisons une variation aléatoire sur les positions des sphères autour de la valeur initiale. Quelques précautions doivent être prises pour effectuer cette variation aléatoire. Pour chaque tirage, la moyenne et l'écart-type sont gardés constants. La variation aléatoire de la position est effectuée en coordonnées sphériques.

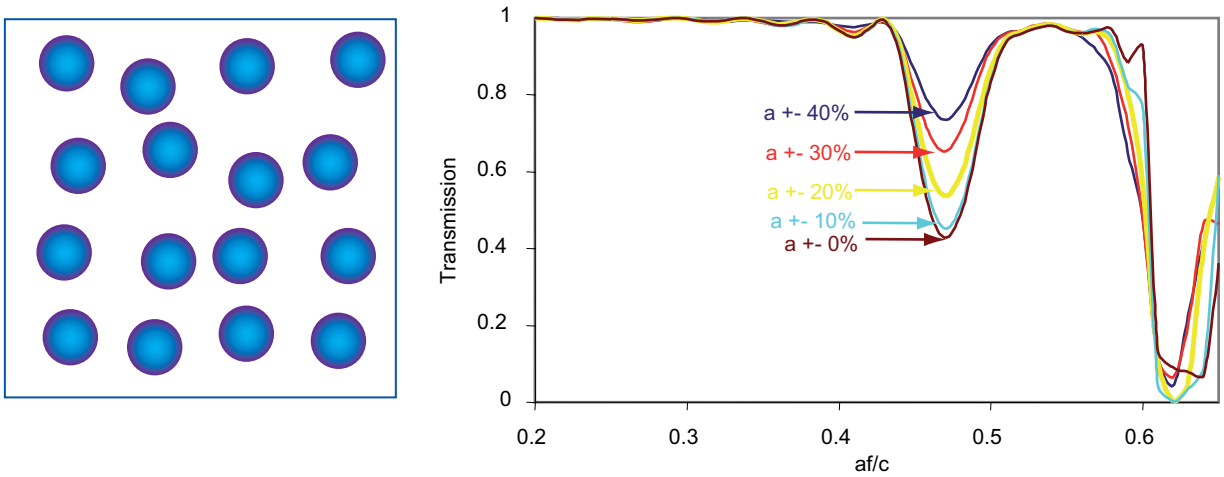


FIG. 3.38 – Effet de la variation de la position des sphères sur la transmission du CPh

La première bande interdite remonte graduellement lors de l'augmentation du pourcentage de la variation aléatoire. Cette bande interdite a un comportement traditionnel. Le réseau est désorganisé au fur et à mesure que la variation aléatoire augmente. D'autre part la deuxième bande interdite ne change presque pas. Les deux premières bandes interdites ont un comportement radicalement différent. Si on garde une seule couche du CPh, la deuxième bande interdite existera encore. Cette bande interdite a le même comportement qu'une surface sélective en fréquence.

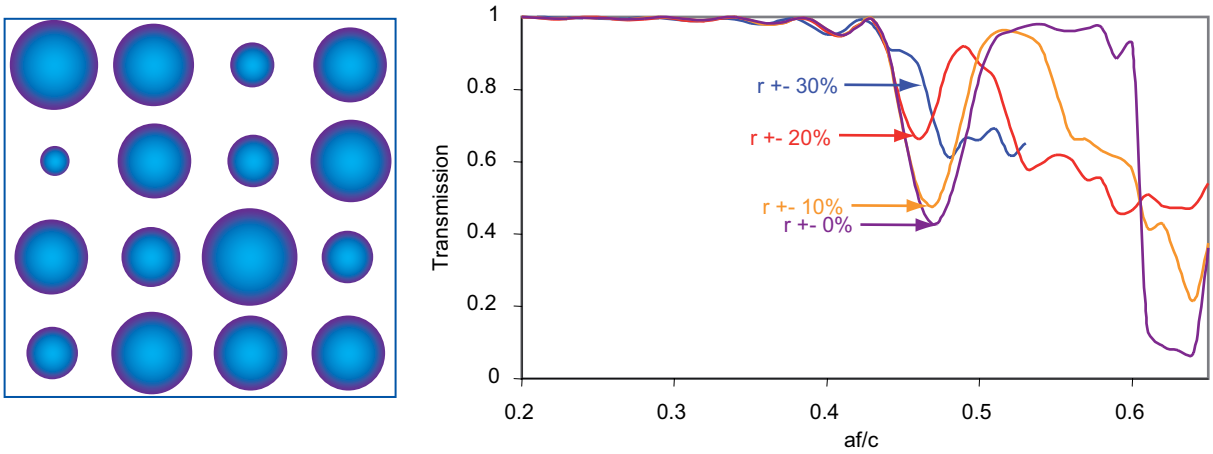


FIG. 3.39 – Effet de la variation du rayon des sphères sur la transmission du CPh

Sur la figure 3.39, nous réalisons une variation aléatoire des rayons de sphères. Ici aussi, l'écart type et la moyenne des rayons de sphères sont gardés constants. Une variation aléatoire du rayon des sphères a une influence faible jusqu' à ±10%. Au delà de ce pourcentage, les deux bandes interdites disparaissent rapidement. Il y a presque un seuil de pourcentage où le réseau ne se comporte plus comme un cristal photonique. La structure cubique est plus sensible aux variations des tailles de sphères qu'aux variations de positions des sphères. Pour des variations aléatoires inférieures à 10% et préservant les paramètres moyens du réseau initial, les caractéristiques physiques du CPh demeurent les mêmes.

3.11.4 Influence de la forme du motif

A l'heure actuelle, notre code de multidiffusion est limité aux inclusions sphériques. Pour étudier l'influence de la forme des inclusions, nous avons utilisé la FEM. La figure 3.40 représente la transmission du CPh métallique 5 couches pour deux motifs différents. Le volume du motif est gardé constant, seul sa forme change. La position des bandes interdites ne change

pas. Leur amplitude varie au niveau des bandes interdites.

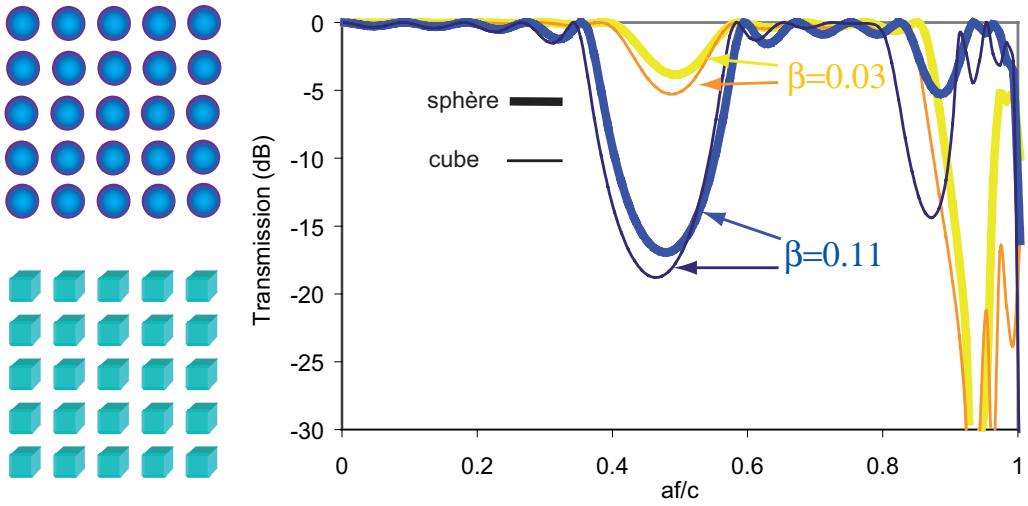


FIG. 3.40 – Influence de la forme de l'inclusion dans le CPh métallique avec un facteur de remplissage constant

3.12 Conclusion et perspectives

Le comportement général du CPh cubique est indépendant à un décalage près de la nature du matériau utilisé dans les sphères. Il est indépendant aussi de la forme de l'inclusion. La théorie de la multidiffusion permet d'établir le comportement de chaque bande interdite. Elle nous permet de trancher entre un comportement de réflecteur de Bragg et un comportement de réseau diffractant. La méthode MST a été comparée et validée avec les méthodes de modélisation des CPhs infinis du chapitre précédent. Les mesures expérimentales des CPhs finis du chapitre suivant seront aussi un bon moyen de validation du code.

De nombreuses modélisations et améliorations du code sont en cours d'élaboration. Les opales et le réseau diamant seront prochainement étudiés. Une optimisation du temps de calcul de la transmission est possible. Il existe plusieurs pistes pour obtenir cette optimisation comme par exemple essayer d'éviter le calcul explicite des harmoniques sphériques vectorielles. La méthode MST peut être généralisée aux objets non sphériques à l'aide de la matrice T. Des applications au-delà des CPhs en découleront.

Références

[1] L. Rayleigh, *On the scattering of light by small particles*, Philos. Mag. **41**, 447 (1871). 122

[2] L. V. Lorenz, *Sur la lumière réfléchie et réfractée par une sphère transparente*, Ňuvre Scientifiques de Lorenz, Librairie Lehman et Stage , 405 (1898). 122

[3] G. Mie, *Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloider Metallösungen*, Ann. D. Phys. **25**, 377 (1908).

[4] P. Debye, *Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material*, Ann. D. Phys. **30**, 57 (1909). 122

[5] A. L. Aden and M. Kerker, *Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres*, J. Appl. Phys. **22**, 1242 (1951). 122

[6] Asano and G. Yamamoto, *Light scattering by a spheroidal particle*, Appl. Opt. **14**, 29 (1975). 122

[7] L. Rayleigh, *On the electromagnetic theory of light*, Philos. Mag. **41**, 81 (1881). 122

[8] J. R. Wait, *Scattering of a plane wave from a circular dielectric cylinder at oblique incidence*, Can. J. Phys. **33**, 189 (1955). 122

[9] C. Yeh, *Backscattering Cross Section of a Dielectric Elliptical Cylinder*, J. Opt. Soc. Am. **55**, 309 (1965). 122

[10] P. Vincent and R. Petit, *Sur la diffraction d'une onde plane par un cylindre diélectrique*, Opt. Commun. **5**, 261 (1972). 122

[11] D. Maystre and P. Vincent, *Diffraction d'une onde électromagnétique plane par un objet cylindrique non infiniment conducteur de section arbitraire*, Opt. Commun. **5**, 327 (1972). 122

[12] P. C. Waterman, *Matrix Formulation of Electromagnetic Scattering*, Proceedings of the IEEE **53**, 805 (1965). 122

[13] V. Twersky, *Multiple scattering of radiation by an arbitrary configuration of parallel cylinders*, J. Acoust. Soc. Am. **24**, 42 (1952). 123

[14] V. Twersky, *Multiple scattering by an arbitrary planar array of parallel cylinders and by two parallel cylinders*, J. Appl. Phys. **23**, 407 (1952).

[15] V. Twersky, *Multiple scattering by an arbitrary planar array of parallel cylinders and by two parallel cylinders*, J. Appl. Phys. **23**, 1099 (1952). 123

[16] O. R. Cruzan, *Translational addition theorems for spherical vector wave functions*, Q. Appl. Math. **20**, 33 (1962). 123, 125, 139

[17] B. Friedman and J. Russek, *Addition theorems for spherical waves*, Q. Appl. Math. **12**, 13 (1954).

[18] A. Stein, *Addition theorems for spherical wave functions*, Q. Appl. Math. **19**, 15 (1961). 123, 125, 139, 140

[19] C. Liang and Y. T. Lo, *Scattering by two spheres*, Radio Sci. **2**, 1481 (1967). 123

[20] J. H. Bruning and Y. T. Lo, *Multiple scattering of EM waves by spheres, part I-multiple expansion and ray-optical*, IEEE Trans. Antennas Propag. **AP-19**, 378 (1971). 123, 125

[21] J. H. Bruning and Y. T. Lo, *Multiple scattering of EM waves by spheres, part II-numerical and experimental*, IEEE Trans. Antennas Propag. **AP-19**, 391 (1971).

[22] F. Borghese, P. Denti, G. Toscano, and O. I. Sindoni, *Electromagnetic scattering by a cluster of spheres*, Appl. Opt. **18**, 116 (1979). 125

[23] F. Borghese, P. Denti, R. Saija, G. Toscano, and O. I. Sindoni, *Multiple electromagnetic scattering from a cluster of spheres I. Theory*, Aerosol Sci. Technol. **4**, 227 (1984). 123

[24] K. A. Fuller and G. Kattawar, *Consummate solution to the problem of classical electromagnetic scattering by ensembles of spheres, I Linear chains*, Opt. Lett. **13**, 90 (1988). 123

[25] K. A. Fuller and G. W. Kattawar, *Consummate solution to the problem of classical electromagnetic scattering by ensembles of spheres, II Clusters of arbitrary configurations*, Opt. Lett. **13**, 1063 (1988). 123

[26] D. W. Mackowski, *Analysis of radiative scattering for multiple sphere configurations*, Proc. R. Soc. London Ser. A **433**, 599 (1991). 123, 139

[27] V. Vignéras-Lefebvre, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1991). 123

[28] F. de Daran, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1994).

[29] M. D. du Rau, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1997).

[30] F. Pessan, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1998). 123

[31] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley, New-York (1983). 124, 146

[32] H. C. van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*, Dover, New-York (1981). 146

[33] J. A. Stratton, *Théorie de l'électromagnétisme*, Dunod, Paris (1961). 124

[34] X. Wang, X. G. Zhang, Q. Yu, and B. N. Harmon, *Multiple-scattering theory for electromagnetic waves*, Phys. Rev. B **47**, 4161 (1993). 125, 136

[35] N. Stefanou, V. Karathanos, and A. Modinos, *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*, J. Phys. : Condens. Matter **4**, 7389 (1992). 136

[36] J. D. Jackson, *Electrodynamique classique*, Dunod, Paris (2001). 125

[37] G. Gouesbet, B. Maheu, and G. Gréhan, *Light scattering from a sphere arbitrary located in a Gaussian beam using a Bromwich formulation*, J. Opt. Soc. Am. A **16**, 1641 (1999). 126

[38] W. J. Wiscombe, *Improved Mie scattering algorithms*, Appl. Opt. **19**, 1505 (1980). 130, 248

[39] R. G. Newton, *Scattering theory of waves and particles*, Springer, New-York (1982). 134

[40] Y. L. Xu, *Calculation of the Addition Coefficients in Electromagnetic Multisphere-Scattering theory*, J. Comput. Phys. **127**, 285 (1996). 139

[41] A. R. Edmonds, *Angular momentum in quantum mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton (1974). 140

[42] Y. L. Xu and R. T. Wang, *Electromagnetic scattering by an aggregate of sphere : theoretical and experimental study of the amplitude scattering matrix*, Phys. Rev. E **58**, 3931 (1998). 148, 150

[43] R. T. Wang, J. M. Greenberg, and D. W. Schuerman, *Experimental results of dependent light scattering by two spheres*, Opt. Lett. **6**, 543 (1981). 150

[44] P. Chýlek, *Mie scattering into the backward hemisphere*, J. Opt. Soc. Am. **63**, 1467 (1973). 150

Chapitre 4

Mise en œuvre experimentale : application aux cristaux photoniques en polymère conducteur

Contenu du chapitre

4.1 Introduction 174

4.2 Le Banc de mesure millimétrique ABmm 175

4.2.1 La génération du signal 176

4.2.2 La réception du signal 177

4.2.3 Les isolateurs 178

4.2.4 Les cornets 179

4.2.5 Faisceau gaussien - Système quasi-optique 181

4.3 Etalonnage et amélioration de la précision du banc de mesure . 181

4.3.1 Transformées de Fourier 182

4.3.2 Filtrage de la réponse temporelle 184

4.3.3 Filtrage de la réponse fréquentielle 186

4.3.4 Simplification et amélioration de la méthode de filtrage 190

4.3.5 Décalages en fréquence 193

4.4 Méthodes et exemples de caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels 194

4.4.1 CPh cubique métallique 194

4.4.2 CPh cubique diélectrique 195

4.4.3 Diagramme de bande 197
4.4.4 Réflexion de Bragg 199
4.5 Les polymères conducteurs 202
4.5.1 Les polymères conjugués 202
4.5.2 Les porteurs de charge libre 203
4.5.3 Génération des charges - dopage 206
4.5.4 Les polyanilines 207
4.5.5 La percolation 212
4.5.6 Modèles de conduction 213
4.6 Caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels en polymère conducteur 215
4.6.1 Caractérisation du polymère conducteur 216
4.6.2 Choix de la structure BIP 219
4.6.3 Modélisation de la structure 220
4.6.4 Etude des structures expérimentales 221
4.6.5 Influence du nombre de couches dans le CPh polymère 222
4.6.6 Procédés d'impression du polymère conducteur 223
4.7 Conclusions et applications 225
Références 231

4.1 Introduction

L'étude expérimentale des cristaux photoniques nécessite une gamme de fréquence micro-onde très étendue. Au laboratoire, nous disposons de nombreux bancs de mesures couvrant le spectre électromagnétique du continu jusqu'à 110 GHz. La taille des cristaux photoniques est proportionnelle à la longueur d'onde d'étude. Nous utiliserons le banc centimétrique qui dispose de deux jeux de cornets balayant les plages 8-12 GHz et 12-18 GHz. Bien que le banc soit focalisé, la surface des CPhs doit être au minimum de 50 cm. Le banc millimétrique nécessite des tailles d'échantillons de l'ordre de 5-10 cm. Le banc millimétrique est plus adapté pour les caractérisations des CPhs. Après une présentation générale du banc de mesure et une amélioration de sa précision, nous caractériserons quelques cristaux photoniques classiques. Une étude des polymères conducteurs, nous permettra de réaliser et de caractériser des cristaux photoniques en polymères conducteurs.

4.2 Le Banc de mesure millimétrique ABmm

Le banc millimétrique en espace libre, dont nous disposons au laboratoire, balaie une bande de fréquence très large de 18 à 110 GHz (figure 4.1). Cette gamme de fréquence étendue permet d'étudier simultanément plusieurs bandes interdites photoniques d'un cristal photonique. Il est composé d'un analyseur de réseau vectoriel MVNA 8-350-2 (Millimeter Vector Network Analyzer). L'analyseur est prévu pour fonctionner de 8 à 350 GHz avec 2 canaux de réception simultanés (réflexion et transmission). Des versions plus récentes de cet analyseur atteignent des fréquences de 1 THz sur 4 canaux de réceptions simultanés. Nous disposons de quatre paires de têtes millimétriques balayant les gammes :

- 18-26 GHz,
- 29-51 GHz,
- 42-72 GHz, et
- 70-110 GHz.

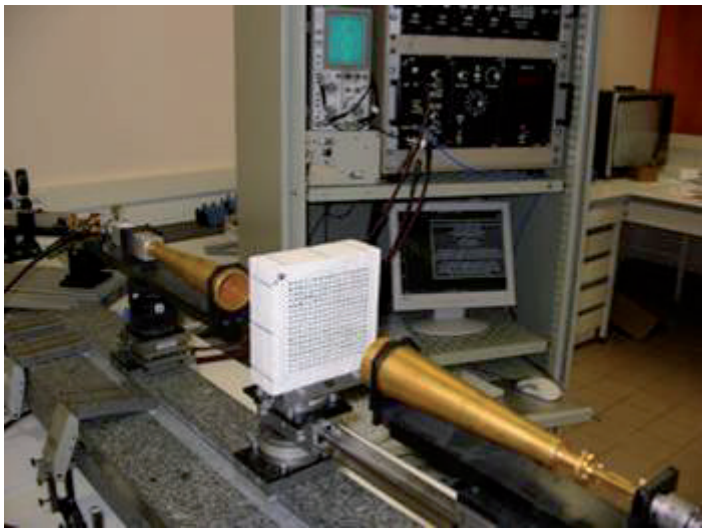


Fig. 4.1 – Banc millimétrique

Ces fréquences sont obtenues à partir d'une source 8-18 GHz (source locking frequency counter). Ce signal centimétrique est dirigé par des câbles coaxiaux SMA vers des multiplieurs en fréquences (Harmonic Generator) pour obtenir les fréquences millimétriques des quatre gammes de fréquences (figure 4.2). Ces multiplieurs sont reliés aux cornets par des guides d'ondes rectangulaires. Le signal se propage en l'espace libre sous forme d'un faisceau gaussien. Le signal transmis par l'échantillon (Device Under Test) est reçu par un cornet et un détecteur harmonique (Harmonic Mixer). Le signal réfléchi est récupéré par un coupleur qui

le transmet par guide rectangulaire à un détecteur harmonique. Un ordinateur PC pilote l'ensemble et récupère les données par des cartes d'aquisitions. Un oscilloscope visualise en temps réel le signal détecté en module et en phase. Il permet d'ajuster l'amplification à l'émission et l'atténuation en réception. Les différents modules de l'ABmm sont détaillés dans les paragraphes suivants.

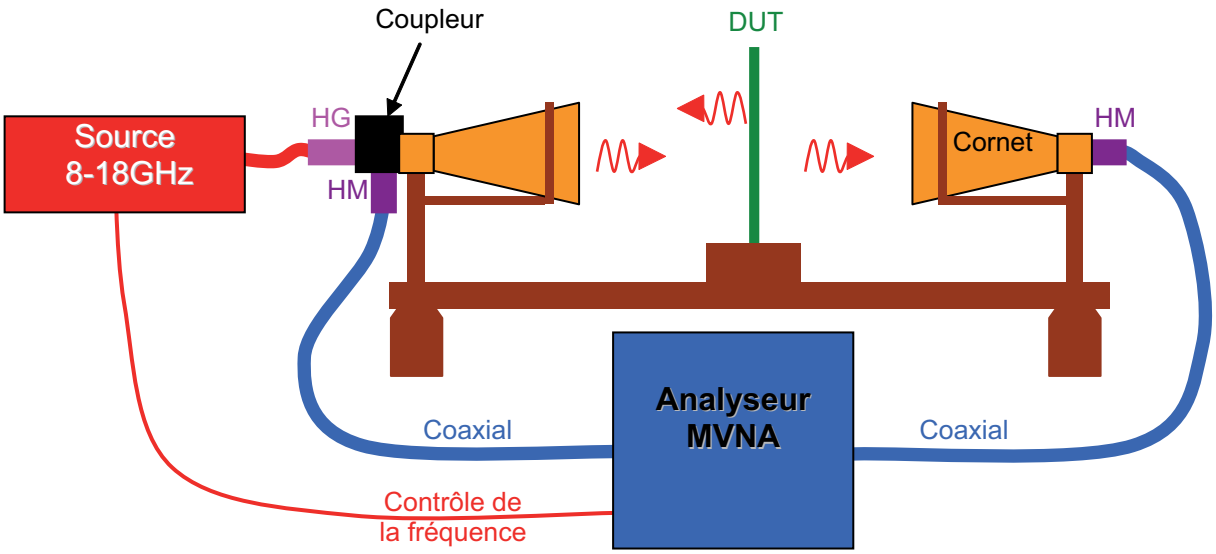


FIG. 4.2 – Schéma du banc de mesure

4.2.1 La génération du signal

Le dispositif est doté d'une source centimétrique YIG synthétisant la gamme de fréquence F_1 =8-18 GHz. Les ondes millimétriques des quatre bancs peuvent être générées par un multiplieur à oscillateur local mais ici nous utiliserons des diodes varactor pour éviter l'utilisation d'une seconde source et d'une alimentation. Sur la figure 4.3, R est une résistance d'autopolarisation de la diode varactor. Cette résistance évite d'ajouter une polarisation extérieure. En dimensionnant correctement la capacité du varactor, on génère des composantes aux fréquences $N.F_1$ (N entier).

La source centimétrique fait office de pompe. Le guide à la suite de la diode joue le rôle d'un filtre, il élimine les harmoniques basses et atténue les hautes fréquences. Néanmoins, le varactor doit être réservé pour des multiplications de rangs faibles ($N < 6$). Pour le banc 70-110 GHz, on utilise un doubleur et un tripleur, l'un à la suite de l'autre, pour obtenir un sextupleur. Du fait de ces multiplieurs en cascade, un amplificateur est rajouté sur ce

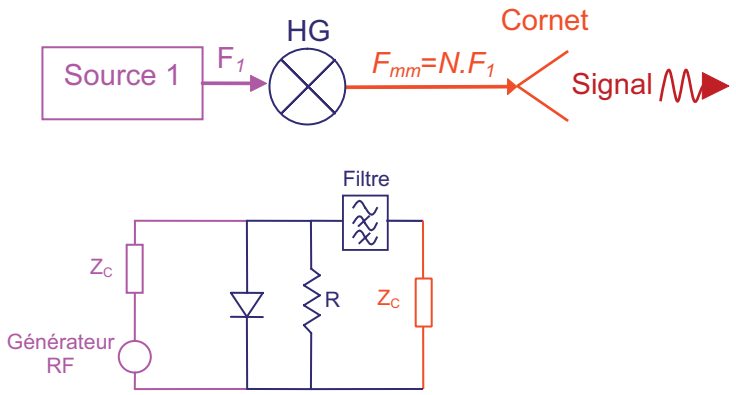


FIG. 4.3 – Multiplieur de fréquence à varactor (HG)

banc, en amont des varactors. Pour des bancs de fréquences supérieures à 110 GHz, l'ABmm utilise des oscillateurs accordables à diodes GUNN. Le générateur d'harmoniques choisi ici, nous permet de changer de gamme de fréquence par une seule connexion de type SMA entre la tête émettrice et le câble coaxial de la source. La réception du signal utilisera aussi un dispositif qui est limité en nombre de connexions.

4.2.2 La réception du signal

Un mélangeur d'harmoniques rabaisse la gamme de fréquence de $F_{mm} = N.F_1$ GHz aux fréquences de travail de F_i=9 MHz, 34 MHz et 59 MHz. Une seconde source fait office d'oscillateur local. Elle est incorporée dans l'analyseur MVNA. Une PLL permet de synchroniser la phase de la seconde source sur la première (figure 4.4).

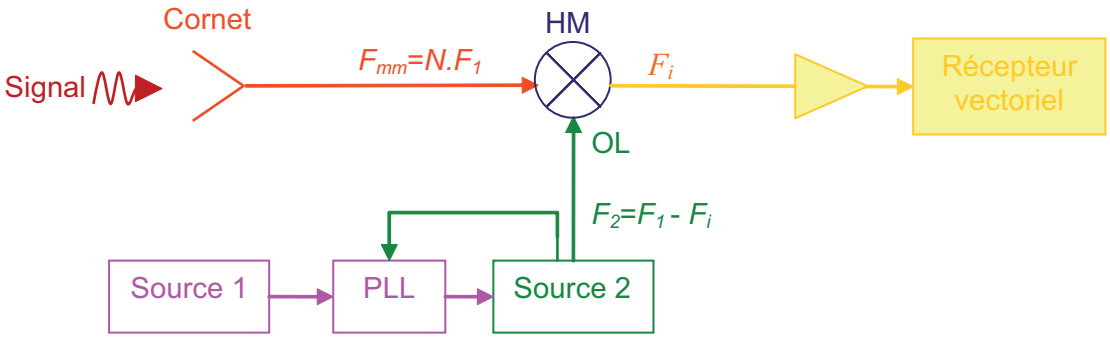


FIG. 4.4 – Mélangeur harmonique

La fréquence intermédiaire est égale à :

$$F_i = |F_{mm} - N.F_2| \tag{4.1}$$

Le bruit de phase vaut :

$$\Phi_i = |\Phi_{mm} - N.\Phi_2| = |N.\Phi_1 - N.\Phi_2| \tag{4.2}$$

Φ_1 et Φ_2 sont égaux car les phases des sources sont synchronisées par la PLL. Comme on utilise le même facteur de multiplication N pour le HM et le HG, le bruit de phase s'annule. On utilise des diodes Schottky comme mélangeur en réflexion et en transmission. Une ligne microstrip faisant office d'antenne plonge dans le guide HF (figure 4.5). Elle capte le signal de mesure qui est transféré à la diode Schottky. Le signal de l'oscillateur local est transporté par un câble coaxial jusqu'à la diode pour que le mélange s'effectue. On obtient une somme de fréquences de battements $\sum_n F_{i,n}$. Un filtre microstrip sélectionne la bonne bande de fréquence de travail F_i. Un récepteur vectoriel traite ce signal pour en extraire le champ transmis et réfléchi.

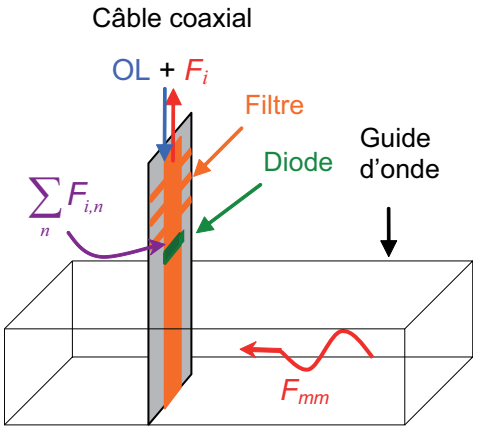


FIG. 4.5 – Détecteur à diode Schottky (HM)

Pour éviter la saturation du détecteur, des atténuateurs sont placés en amont des diodes. Les atténuateurs sont plus élevés pour les bancs de plus faibles fréquences. Comme pour le générateur d'harmoniques, le changement de gamme de fréquence est réalisé ici aussi par une seule connexion SMA.

4.2.3 Les isolateurs

Des isolateurs à effet Faraday sont utilisés pour éviter des réflexions parasites qui entraîneraient une dégradation de la source ou une diminution de la dynamique de mesure. Les isolateurs ne sont pas toujours adaptés pour l'ensemble des fréquences des différentes bandes de mesure.

Les trois isolateurs sont placés :

- à l'émission : entre la diode émettrice et le cornet émetteur,
- à la réception de la transmission : entre le cornet récepteur et la diode réceptrice du signal, et
- à la réception de la réflexion : entre le coupleur directif et la diode réceptrice.

Ils sont constitués d'un guide circulaire fonctionnant en mode TE_{11} relié par deux transitions progressives à deux guides rectangulaires fonctionnant en mode TE_{01}. Une ferrite placée dans le guide circulaire permet une rotation de 45° de la polarisation. Grâce à cette rotation, le champ ne peut se propager que d'un seul sens.

Des isolateurs sont rajoutés à la sorties des câbles coaxiaux qui transportent le signal 8-18 GHz. Ces isolateurs sont réalisés à partir de circulateurs.

4.2.4 Les cornets

Comme nous sommes en espace libre, nous devons adapter l'impédance de l'onde guidée à l'espace libre. Nous utilisons sur la gamme 18-26 GHz, des cornets pyramidaux. Ce choix a écornetsté fait essentiellement pour des questions de coûts. Pour les trois autres bancs, on utilise des cornets scalaires. Ce sont des cornets coniques dont les parois internes sont rainurées (figure 4.6).

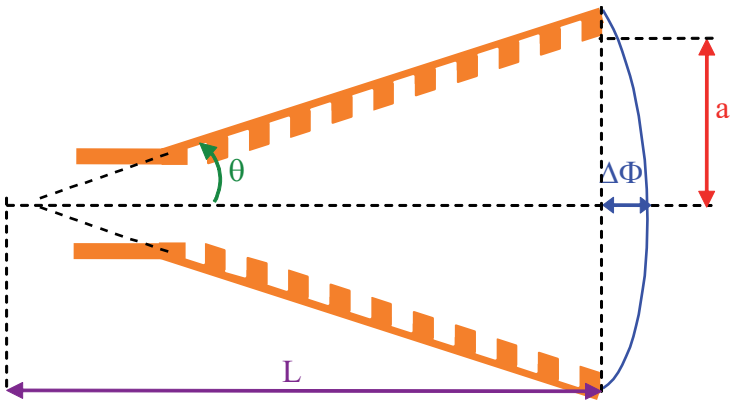


FIG. 4.6 – Cornet scalaire

Ils ont un meilleur diagramme de rayonnement que les précédents mais sont plus difficiles à usiner. L'erreur de phase maximale à l'embouchure des cornets scalaires et pyramidaux est donnée à partir des notations de la figure 4.6 :

$$\Delta\Phi = \frac{\pi a^2}{\lambda_0 L} = \frac{2\pi a \tan(\theta)}{\lambda_0} \tag{4.3}$$

Pour diminuer l'erreur de phase, les cornets sont de formes plus allongées que les cornets traditionnels (tableau 4.1). Il y a un facteur 5 entre le diamètre du cornet scalaire et la longueur du cornet. Les erreurs de phases des cornets scalaires sont suffisamment faibles pour n'imposer aucunes distances minimales sur les conditions d'éclairement en champ lointain. Ces

	a (cm)	L (cm)	min < $\Delta\Phi$ < max
Banc 18-26 GHz	1.45	5.5	0.11 – 0.17
Banc 29-51 GHz	2.2	24.2	0.10 – 0.17
Banc 42-72 GHz	1.55	18	0.09 – 0.16
Banc 75-110 GHz	1.1	12	0.13 – 0.18

TAB. 4.1 – Erreur de phase en radian sur les cornets des quatre bancs de mesures

cornets corrugués ont un diagramme de rayonnement à symétrie de révolution [1]. L'idée de coupler différents modes afin d'obtenir un faisceau gaussien a été suggérée pour la première fois par Potter (1963). Le principe de base consiste à convertir une partie de l'énergie du mode TE_{11} issu d'un guide circulaire en mode TM_{11} pour ensuite les combiner avec la bonne relation de phase et produire ainsi un profil de champ linéaire de mode hybride HE_{11}. Le mode TE_{11} est obtenu à partir du mode TE_{01} par une transition guide rectangulaire / guide circulaire. Plus cette transition est longue, meilleur sera l'adaptation. Le mode TM_{11} est créé par les cannelures. Les parois cannelées imposent des conditions aux limites identiques pour les deux polarisations du champ électrique et cela a pour effet de contraindre le champ à se concentrer sur l'axe. Les diagrammes de rayonnement de ces cornets sont gaussiens jusqu'à environ -20 dB de la puissance sur l'axe. Ces cornets ont un rendement de faisceau élevé *i.e.* l'énergie rayonnée décroît très vite au-delà du lobe principal. On aurait pu utiliser des cornets bi-modes plus aisés à usiner mais leur bande est plus étroite que les cornets scalaires. Pour augmenter encore la bande passante, il suffit d'augmenter le diamètre d'ouverture mais la taille du faisceau augmente aussi. L'ouverture du faisceau est essentiellement déterminée par $k_0 a$ et est donc dépendante de la fréquence. La distance z entre le centre de phase et l'ouverture du cornet est :

$$z = \frac{L}{1 + \left(\frac{\lambda_0 L}{w_0^2}\right)^2} \tag{4.4}$$

Le waist du faisceau est indépendant de la fréquence et vaut environ 0.33 fois le diamètre d'ouverture. En résumé, les cornets scalaires nous permettent de mesurer des échantillons de

faibles tailles sans aucune distance minimale d'éloignement de l'échantillon par rapport aux cornets.

4.2.5 Faisceau gaussien - Système quasi-optique

Les composants optiques comme les lentilles, les miroirs, etc., ont des dimensions très grandes devant la longueur d'onde. Par contre ici, les composants ne mesurent que quelques longueurs d'ondes. Les problèmes de diffractions doivent être pris en considération. On parle de système "quasi-optique". Ce terme provient de la ressemblance des dispositifs utilisés en micro-onde pour assurer ces transformations avec ceux employés en optique. La taille du faisceau est de quelques longueurs d'ondes. L'amplitude du faisceau a une variation gaussienne lorsque l'on s'éloigne de l'axe. On résout l'équation d'onde en espace libre en utilisant deux hypothèses simplificatrices :

$$\begin{cases} \Delta^2\Psi + k_0^2\Psi = 0 \\ \text{l'onde se propage selon, } z \ \Psi = \psi(x,y,z)e^{ik_0 z} \\ \text{l'onde varie lentement avec } z,\ \partial_z^2\psi \text{ négligeable} \end{cases} \tag{4.5}$$

On obtient le faisceau gaussien suivant :

$$\begin{aligned} &\psi(x,y,z) = A\frac{w_0}{w\left(z\right)}\exp\left(-\frac{\rho^2}{w^2\left(z\right)}\right)\exp\left(-i\frac{\pi\rho^2}{\lambda_0 R\left(z\right)} + i\arctan\left(\frac{z}{z_R}\right)\right) \\ &\text{avec } \rho = \sqrt{x^2+y^2} \text{ et la longueur de Rayleigh } z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda_0} \end{aligned} \tag{4.6}$$

Les caractéristiques du faisceau sont sa taille et son rayon de courbure :

$$\begin{aligned} w^2\left(z\right) &= w_0^2\left(1+\frac{z^2}{z_R^2}\right) \\ R\left(z\right) &= z\left(1+\frac{z_R^2}{z^2}\right) \end{aligned} \tag{4.7}$$

Le front d'onde d'un faisceau gaussien est plan au niveau du waist et courbe sur le reste de l'axe z.

4.3 Etalonnage et amélioration de la précision du banc de mesure

Le banc de mesure ne réalise pas directement la mesure de réflexion et de transmission. Il est nécessaire d'étalonner le banc. Les mesures seront toujours réalisées par rapport à une mesure de référence. Les réflexions et les transmissions seront affichées en dB. On utilise une

mesure à vide et une mesure sur une plaque métallique comme mesures de référence pour la transmission et la réflexion respectivement.

$$\begin{aligned} t_{exp.} &= \frac{t_{ech}}{t_{vide}} \\ r_{exp.} &= -\frac{r_{ech} - t_{vide}}{r_{cc} - t_{vide}} \end{aligned} \tag{4.8}$$

La plaque métallique de référence doit être de la même taille que l'échantillon. Les deux différences dans la formule précédente suppriment les réflexions de l'environnement dans le cas où l'échantillon est inférieur à la tâche focale [1, 2]. Dans le cas contraire, la formule se simplifie :

$$r_{exp.} \cong -\frac{r_{ech}}{r_{cc}}\ t_{vide} \ll r_{cc} < r_{ch} \tag{4.9}$$

Le signe moins provient du déphasage de 180° de la plaque métallique. Nous n'avons pas pris la même convention que dans le cas théorique (référence de phase au niveau de la première interface de la couche). La convention choisie est très proche des mesures effectuées.

L'utilisation d'un banc focalisé présente deux avantages. Elle évite l'utilisation d'une chambre anéchoïque coûteuse et la taille minimum des échantillons pour effectuer la mesure est largement diminuée. Par contre, des réflexions parasites de l'onde électromagnétique entre l'échantillon et l'environnement du banc de mesure peuvent diminuer la sensibilité du banc (figure 4.7).

La méthode de calibrage entraîne un deuxième type de réflexions parasites. Des réflexions interviennent sur la mesure à vide (figure 4.7). Elles ne sont pas les mêmes en présence de l'échantillon. Lors du calcul de la transmission, elles ne s'annulent pas. Ces deux types de réflexions induisent des transmissions parasites. Celles-ci ont une distance plus grande à parcourir par rapport à la transmission simple de l'échantillon. On sait que les distances de transmission et les temps de transmission varient de la même manière. Donc la courbe de transmission est modulée par un bruit oscillant à une fréquence élevée. Ces transmissions parasites seront supprimées par un filtrage temporel.

4.3.1 Transformées de Fourier

Le passage de l'espace fréquentiel à l'espace temporel est réalisé par une transformée de Fourier. Plusieurs formes de transformée de Fourier existent. Nous utilisons celle qui n'introduit pas de facteur 2π :

$$F(\nu) = \widehat{f}(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i2\pi\nu t} dt \ \rightleftharpoons\ f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\nu) e^{i2\pi\nu t} d\nu \tag{4.10}$$

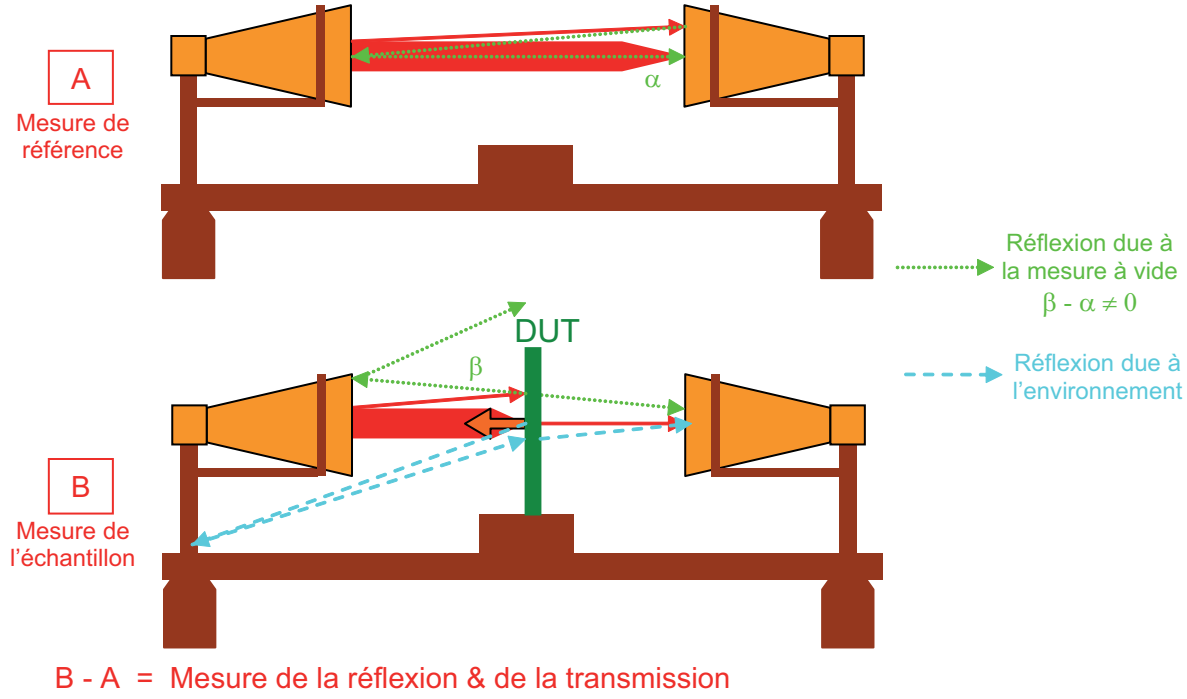


FIG. 4.7 – Réflexions parasites

Les signaux en sortie de l'analyseur sont discrets. Les fonctions utilisées dans la transformée de Fourier doivent être discrétisées en multipliant le signal par un peigne de Dirac $\Delta_T(t) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \delta(t - nT)$. Le produit de convolution d'un signal borné par un peigne de Dirac rend ce signal périodique. Ces propriétés sont résumées ci-dessous :

$$\begin{aligned} f_{discret} &= f_{continu}(t) \cdot \Delta_T(t) \\ f_{priodique} &= f_{born}(t) * \Delta_T(t) \end{aligned} \tag{4.11}$$

La transformée de Fourier a une propriété très intéressante pour ces signaux. Un signal échantillonné tous les T est transformé dans l'espace dual en un signal périodique de période 1/T. La propriété duale est elle aussi vérifiée. En faisant un abus de langage bien pratique sur les distributions, on a :

$$\begin{aligned} \widehat{f(t) * \delta_T}(t) &= \frac{1}{T} F(\nu) \cdot \Delta_{\frac{1}{T}}(\nu) \\ \widehat{f(t) \cdot \delta_T}(t) &= \frac{1}{T} F(\nu) * \Delta_{\frac{1}{T}}(\nu) \end{aligned} \tag{4.12}$$

En utilisant ces deux propriétés, un signal périodique discret a aussi un spectre périodique discret. Si on s'intéresse seulement à une période, la transformée de Fourier des signaux

continus sous forme d'une intégrale sur tout l'espace est réécrite en une transformation de Fourier discrète sous forme d'une somme sur une seule période.

$$F(k) = \sum_{k=0}^{N-1} f(n)e^{-i2\pi kn/N} \rightleftharpoons f(n) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} F(k)e^{i2\pi kn/N} \tag{4.13}$$

N est le nombre d'échantillon. n et k sont les variables t et ν discrétisées. Pour des signaux à valeurs réelles, la condition de Shannon doit être vérifiée pour éviter un recouvrement du spectre. Les signaux à valeurs complexes peuvent être deux fois moins échantillonnés que les signaux à valeurs réelles sans recouvrement du spectre.

Nous avons le choix entre plusieurs algorithmes de transformée de Fourier rapide qui sont plus ou moins perfectionnés. Nous utiliserons un algorithme appelé FFTW qui n'exige pas un nombre d'échantillons en puissance de deux. Cet algorithme a été créé pour la méthode des ondes planes [3]. Le but de cet algorithme n'est pas de minimiser le nombre d'opérations en virgule flottante mais plutôt le temps de calcul. Le principe de la méthode est d'optimiser l'algorithme de FFT classique par une fonction supplémentaire qui teste différentes instructions, différents scénarios et qui choisit le programme le plus rapide pour chaque système informatique. C'est cet algorithme qui est implémenté sous Matlab.

4.3.2 Filtrage de la réponse temporelle

L'objectif de ce paragraphe est de filtrer la réponse temporelle pour obtenir un signal temporel sans bruit. L'élimination de ce bruit nous permettra de localiser avec précision dans la réponse temporelle les réflexions dues à l'échantillon mesuré. Nous allons reprendre l'exemple proposé dans la référence [1]. Deux cylindres métalliques de 5mm de diamètre espacés de 3cm sont placés sur l'axe du faisceau. Le premier cylindre est à 5cm de l'embouchure du cornet. Le signal réfléchi est mesuré sur la bande 28-51GHz (figure 4.8). La mesure de référence est faite à la sortie du coupleur.

Si nous passons dans le domaine temporel, nous observons des pics entre 60 et 80 cm (figure 4.9). Ils correspondent à environ deux fois la longueur du coupleur au cylindre. Comme nous mesurons deux cylindres, nous devrions observer deux pics sur la courbe. Ce n'est pas le cas, il y a plus de pics que de cylindres. De plus, un signal important apparaît vers les 10-20 cm. Si nous appliquons une fenêtre de pondération de Blackman au signal fréquentiel, on s'aperçoit que les pics qui se situent à environ 10, 20 et 80 cm sont supprimés. Cela nous montre que ces pics n'ont aucune réalité physique. Les pics restants sont atténués par la

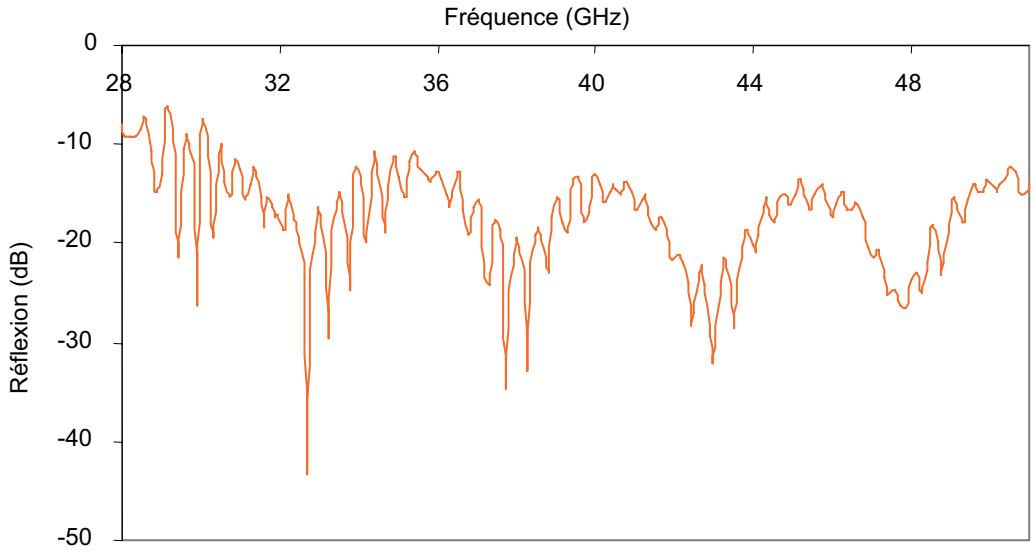


FIG. 4.8 – Transmission de deux cylindres en polarisation TE

fenêtre de Blackman. D'après la fenêtre de pondération, on en déduit qu'il y a des erreurs en bord de plage de fréquence. On sait de plus que la plage 28-33 GHz est la partie qui a la dynamique la plus faible et donc l'erreur la plus forte.

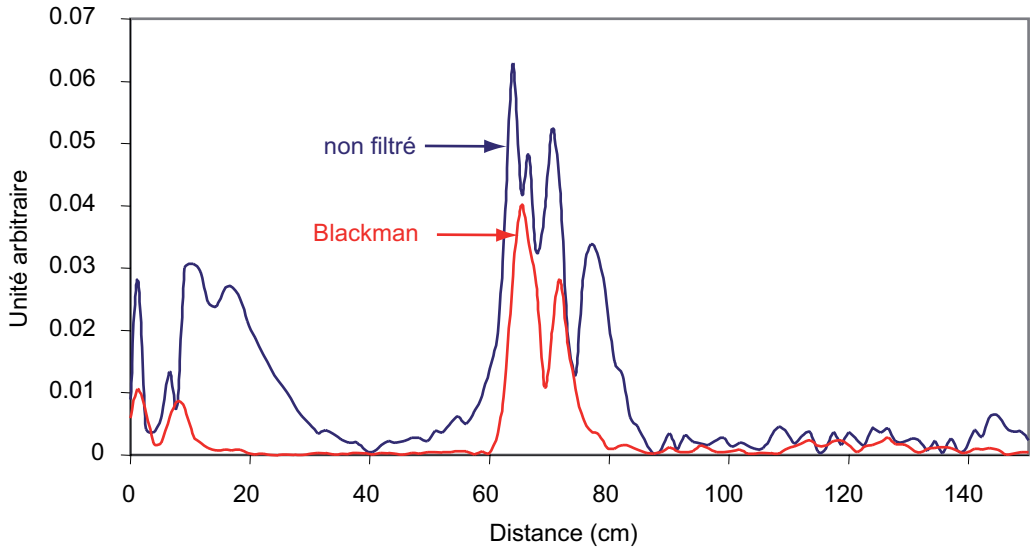


FIG. 4.9 – Comparaison de la réponse temporelle filtré et non filtré

Sur la figure 4.10, nous calculons la réponse temporelle sur la plage 33-51 GHz. Les pics non physiques précédents disparaissent comme prévu. Le premier pic correspondant au premier cylindre est amplifié. Le début de la réponse correspond aux réflexions entre le coupleur et le cornet.

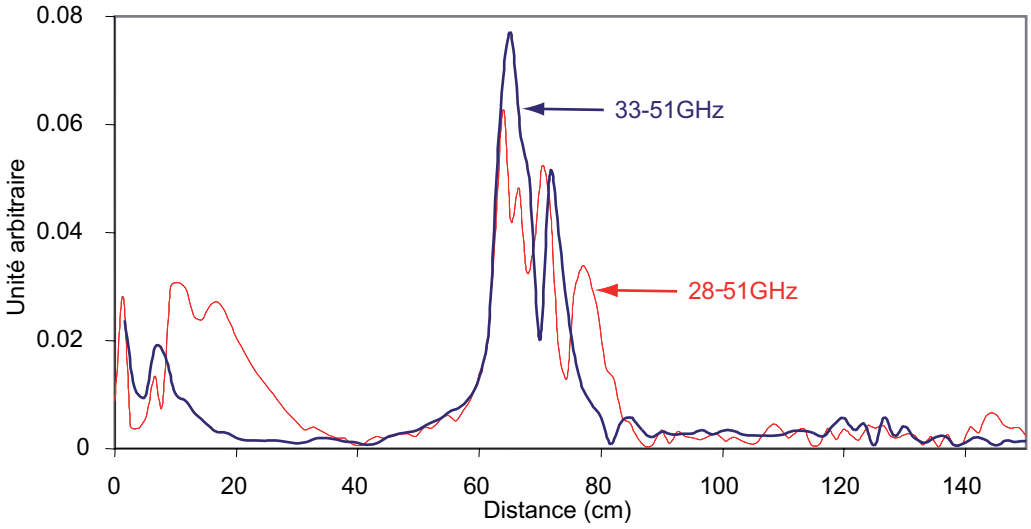


FIG. 4.10 – Comparaison de la réponse temporelle de la plage de fréquences tronquée et non tronquée

Si on supprime les plages de fréquences contenant le plus d'imprécision, le signal temporel physique sans bruit apparaît. Il n'y a pas d'atténuation du signal. Une autre solution consiste à utiliser des fenêtres de pondération comme nous l'avons fait précédemment avec la fenêtre de Blackman. Mais malheureusement cette fenêtre atténue le signal. Nous avons appliqué plusieurs fenêtres de pondérations sur la plage la plus précise du signal fréquentiel (figure 4.11). Comme le signal brut est suffisamment lissé par la troncature, les fenêtres de pondération n'améliorent pas le signal. Par contre, tous les signaux filtrés sont atténués par rapport au signal non filtré. L'atténuation des pics physiques pose problème lors du retour dans l'espace fréquentiel. Les fenêtres de pondération appliquées au signal fréquentiel sont intéressantes pour visualiser des signaux sur des bandes élargies. Pour obtenir un signal temporel lissé sans atténuer les pics, la seule solution est de tronquer la réponse fréquentielle.

4.3.3 Filtrage de la réponse fréquentielle

Le but est d'extraire la réponse fréquentielle sans bruit du signal brut. Le filtre doit supprimer le bruit *i.e.* les réflexions parasites mais il ne doit supprimer aucuns éléments du signal physique. Nous allons filtrer la réponse fréquentielle en réflexion d'une plaque de permittivité 10 et d'une plaque de téflon. La comparaison entre la mesure expérimentale et l'équation analytique est plus aisée dans le cas des plaques que des cylindres. Le filtrage temporel précédent nous permet de situer avec précision les pics de réflexions du matériau.

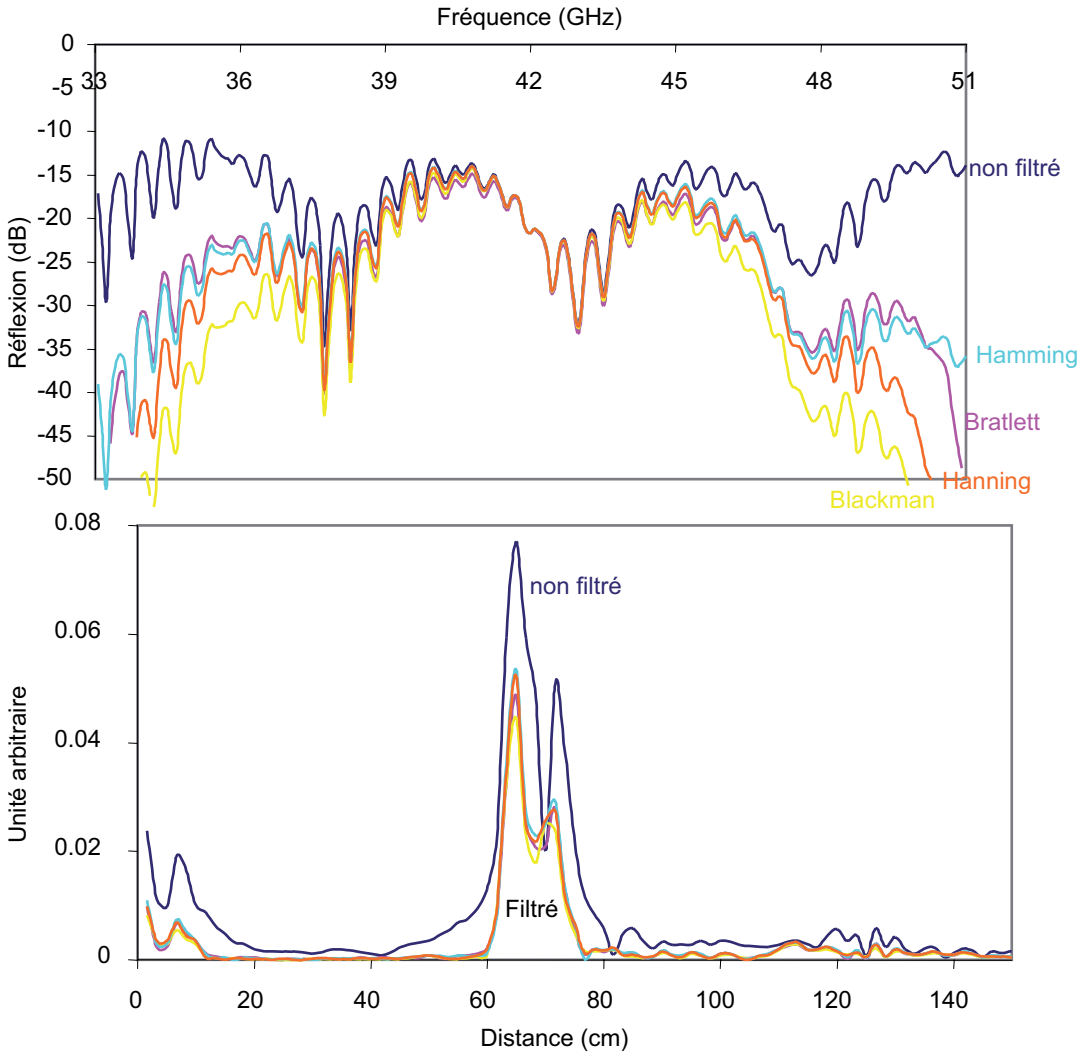


FIG. 4.11 – Réponse fréquentielle et temporelle avec différentes fenêtres de pondération

Nous allons créer une porte de filtrage qui englobe ces pics (figure 4.12). La hauteur des pics nous donne l'importance des différentes réflexions. Après quelques réflexions entre les deux interfaces de la plaque, le signal est très fortement atténué. Grâce à cette atténuation rapide, la porte de filtrage peut être choisie plus fine et le signal physique ne se retrouve pas noyé dans les réflexions parasites. Cette porte sera appliquée au signal temporel non filtré et au signal de référence. Une FFT sur chacun des signaux précédents nous donnera le signal fréquentiel brut filtré et le signal de référence fréquentiel filtré. On obtient la réflexion filtrée par une normalisation entre les deux derniers signaux. La figure 4.13 décrit l'ensemble de ces étapes. Les signaux S_{ech} et S_{ref} sont soit une mesure absolue du signal (en puissance), soit une mesure par rapport à une autre mesure de référence (en dB). Ici ce sera une mesure relative.

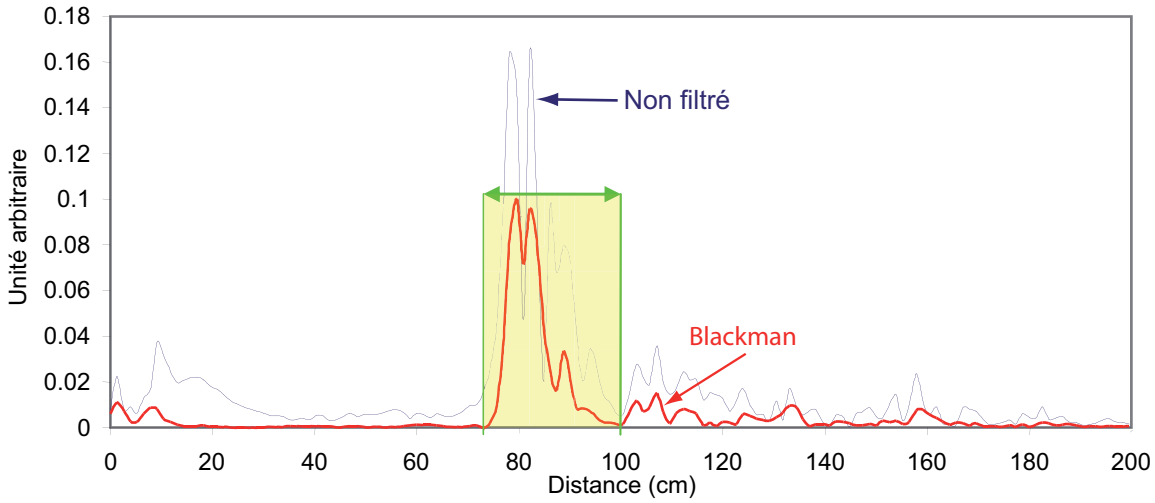


FIG. 4.12 – Sélection de la plage des pics de réflexions de la plaque $\varepsilon_r = 10$

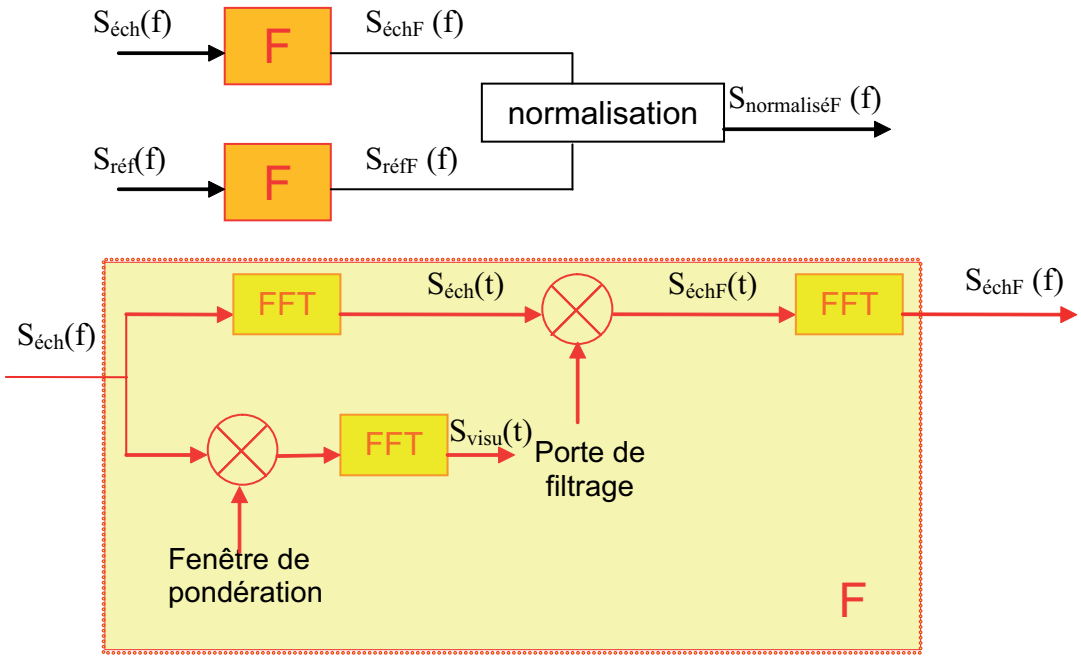


FIG. 4.13 – Diagramme du filtrage

Lors de la visualisation de S_{ech} et S_{ref}, la mesure relative permet de décaler les pics physiques dans la réponse temporelle et d'évaluer les réflexions avant ce pic comme la réflexion coupleur cornet. La porte de filtrage n'a pas la même forme selon qu'elle est appliquée au signal S_{ech} ou au signal S_{ref}. Ce diagramme pourra être grandement simplifié mais pour tester différentes normalisations l'ensemble de ces étapes est nécessaire. La figure 4.14 représente les signaux bruts et filtrés de la plaque de permittivité 10. Les signaux représentés sont normalisés par rapport à une plaque métallique au niveau du cornet. La phase de la réflexion sera affichée avec le déphasage de 180° du court-circuit pour des raisons de lisibilité. Le filtrage est réalisé sur le module et la phase simultanément. Si le module et la phase avaient été filtrés séparément, la réponse temporelle n'aurait eu aucune signification physique en terme de réflexion.

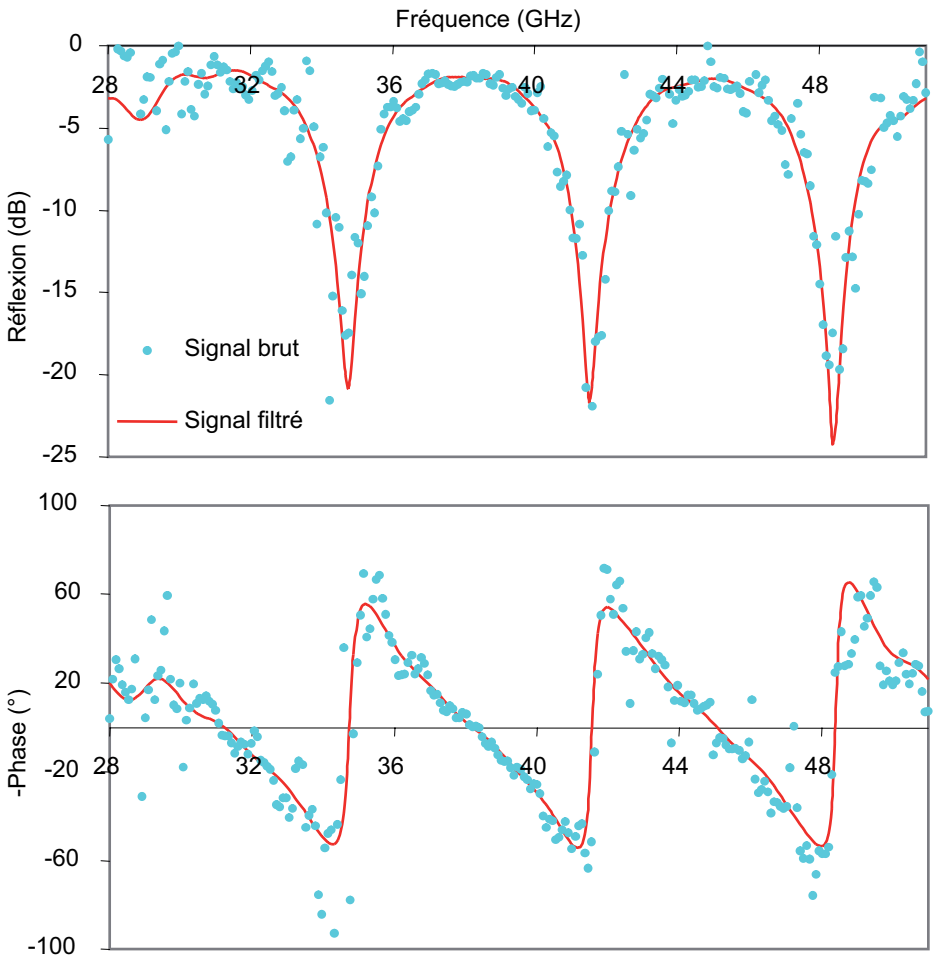


Fig. 4.14 – Filtrage de la réflexion

4.3.4 Simplification et amélioration de la méthode de filtrage

Sur la figure précédente, le signal est correctement filtré en module et en phase. Jusqu'ici, nous avons utilisé des signaux S_{ech} et S_{ref} normalisés au niveau du cornet. Nous allons tester différentes normalisations pour la mesure en réflexion (figure 4.15).

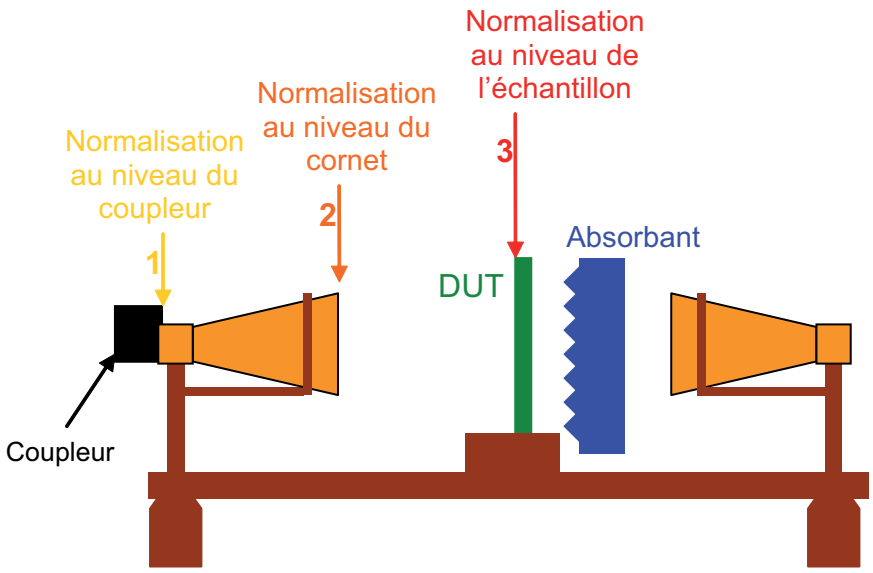
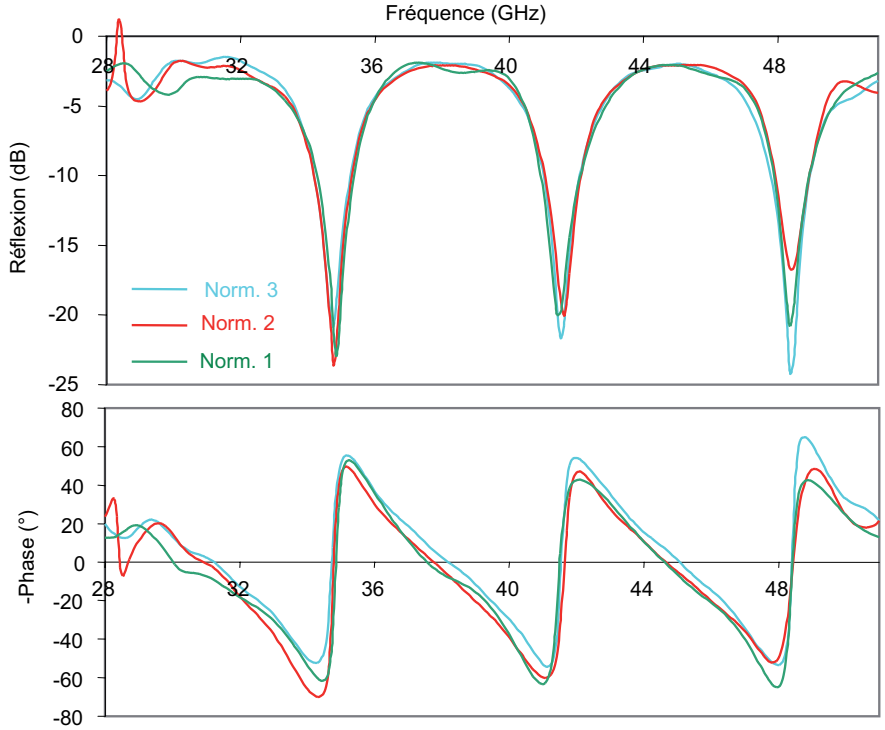
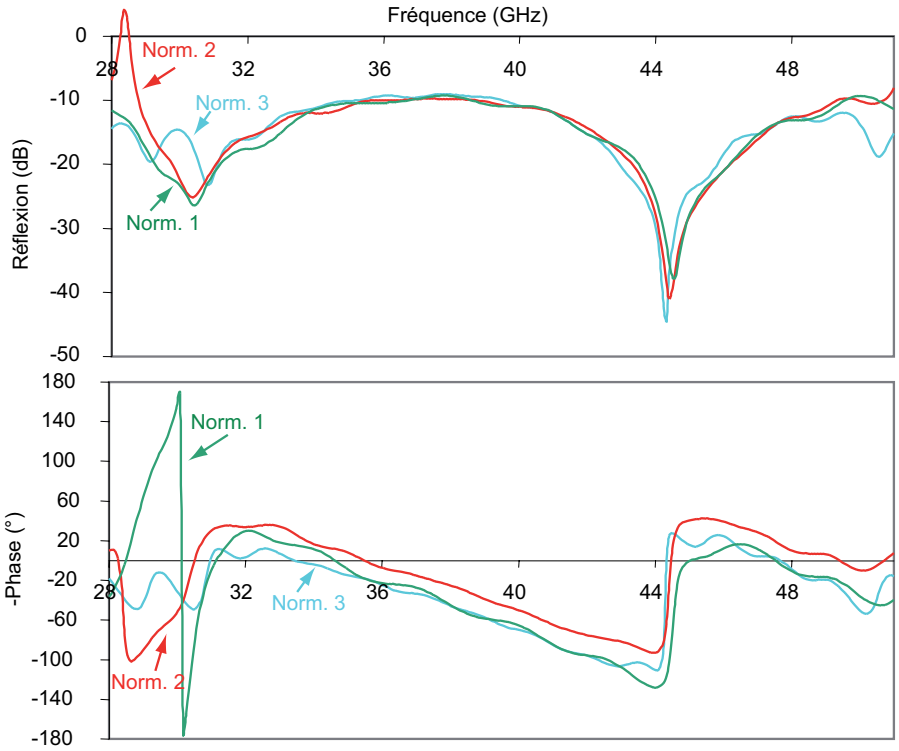


FIG. 4.15 – Description des trois normalisations testées

Nous avons tracé la réflexion des deux plaques pour ces trois normalisations (figure 4.16). Ces courbes montrent une relative équivalence entre ces normalisations. Les véritables différences sont dans la mise en œuvre de ces normalisations. Pour simplifier, nous n'utiliserons que la normalisation au niveau de l'échantillon. Cet échantillon est placé au centre des deux cornets. Les cornets corrugués ont une erreur de phase très faible. L'échantillon peut être rapproché jusqu'à être collé au cornet source. La figure 4.17 présentent la réflexion et la transmission de la plaque de téflon pour deux positions différentes de l'échantillon. Le bruit de la transmission est légèrement diminué lorsque la plaque est collée contre le cornet. Pour le module de la réflexion la diminution est encore plus grande. La phase de la réflexion de la plaque centrée est fausse pour la deuxième moitié de la plage de fréquence étudiée. Lorsque la plaque est collée contre le cornet, le bruit est considérablement diminué. Même si le filtrage peut supprimer tout ou partie de ce bruit, il est plus intéressant d'en créer le moins possible. Le filtrage est encore grandement nécessaire pour supprimer le bruit restant. De 26 à 33 GHz, le banc de mesure a une très faible dynamique. C'est pour cela que des erreurs apparaissent à ces fréquences là.

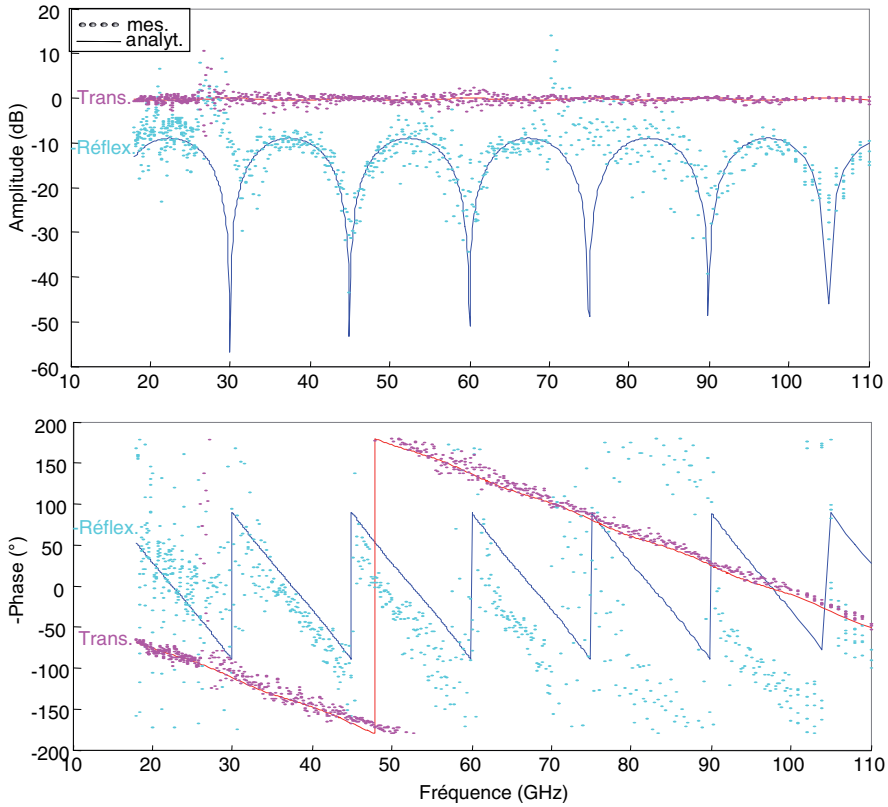


(a) Plaque de permittivité 10

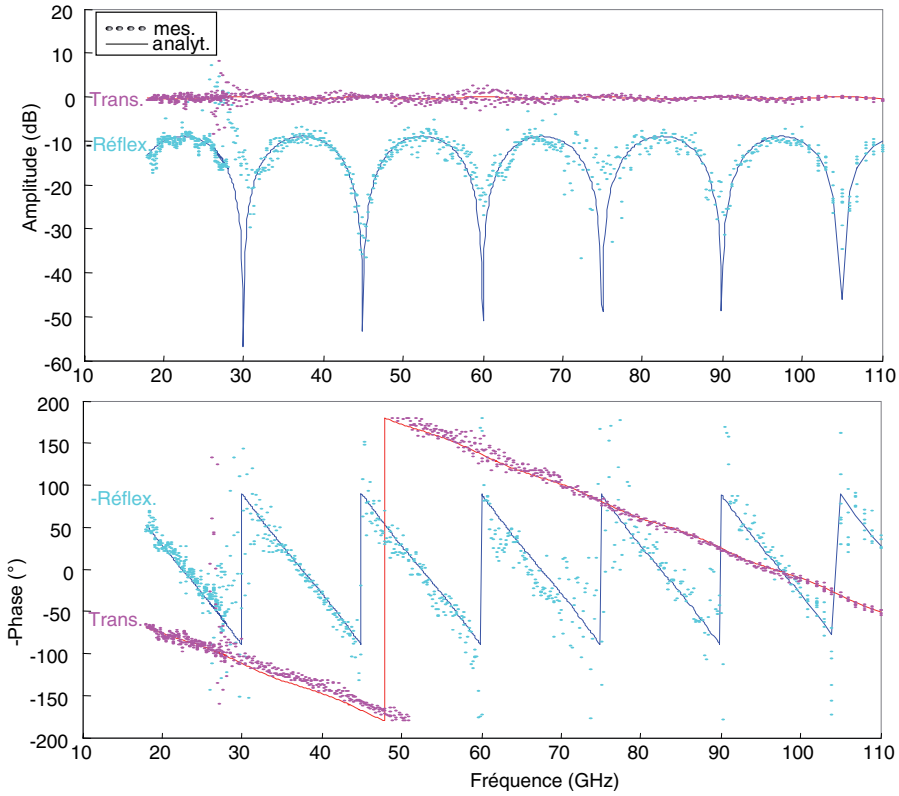


(b) Plaque de téflon

FIG. 4.16 – Réflexion de deux plaques différentes



(a) Plaque de téflon centré entre les 2 cornets



(b) Plaque de téflon plaqué contre le cornet source

FIG. 4.17 – Réflexion de la plaque de téflon normalisée selon deux positions différentes

4.3.5 Décalages en fréquence

Bien que le bruit soit bien diminué, la mesure de la plaque de téflon ne permet pas de déceler d'éventuel décalage en fréquence. La plaque de permittivité 10 a des résonances plus proches en fréquences. Nous avons mesurée cette plaque de 8 à 110 GHz. La partie 8-18 GHz est obtenue sur un banc centimétrique avec un analyseur HP. Cette partie est filtrée par l'analyseur en interne. Nous avons comparé l'amplitude de la réflexion modélisée et mesurée de la plaque de permittivité 10 (figure 4.18). Les recoupements entre les bancs sont aussi affichés. On s'aperçoit d'un décalage important des résonances sur les bancs 18-26 et 29-51. Ces deux bandes sont encadrées par les bandes de l'analyseur centimétrique et les bandes supérieures de l'analyseur millimétrique. Ces bandes données par deux analyseurs différents ont leurs résonances placées correctement en fréquence.

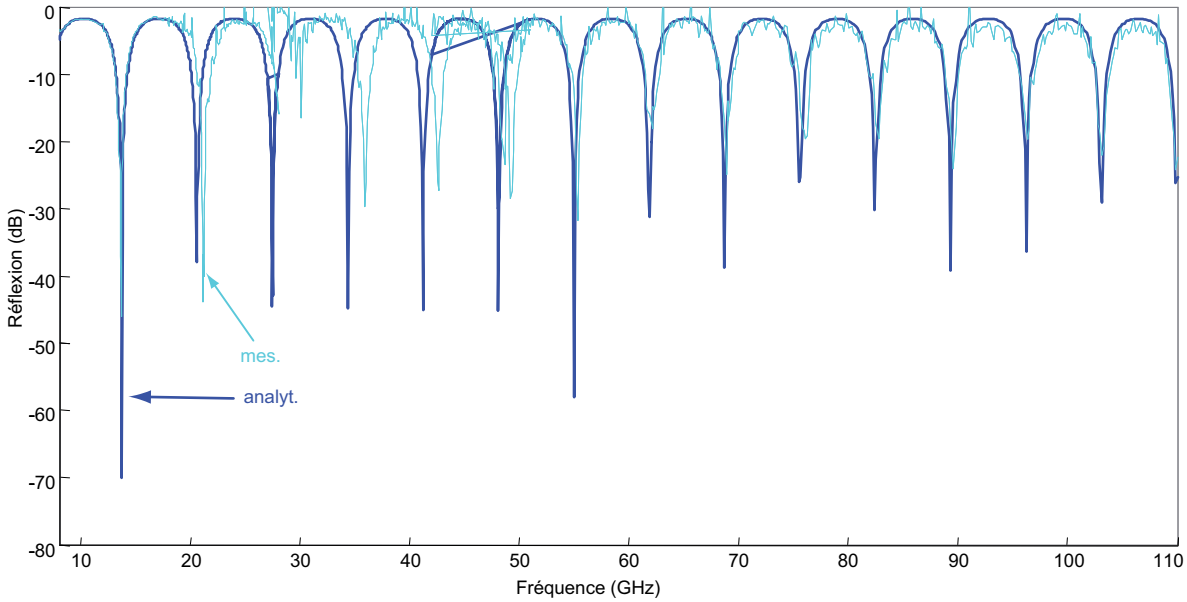


FIG. 4.18 – Réflexion expérimentale et analytique de 8 à 110 GHz de la plaque permittivité 10

La figure 4.19 réalise un zoom sur le deuxième et troisième banc. Ces deux bancs se recoupent entre 42 et 51 GHz. On observe un décalage important en fréquence du deuxième banc par rapport au troisième. Ces décalages en fréquences sont aussi observés sur la phase et la transmission. Ces décalages sont causés par le matériau qui n'a pas une permittivité constante sur la plage de fréquence et par le banc de mesure qui ne donne pas le même résultat pour deux points de fréquences identiques, sur deux bancs différents. Ce dernier décalage devra

être pris en compte dans la caractérisation des cristaux photoniques.

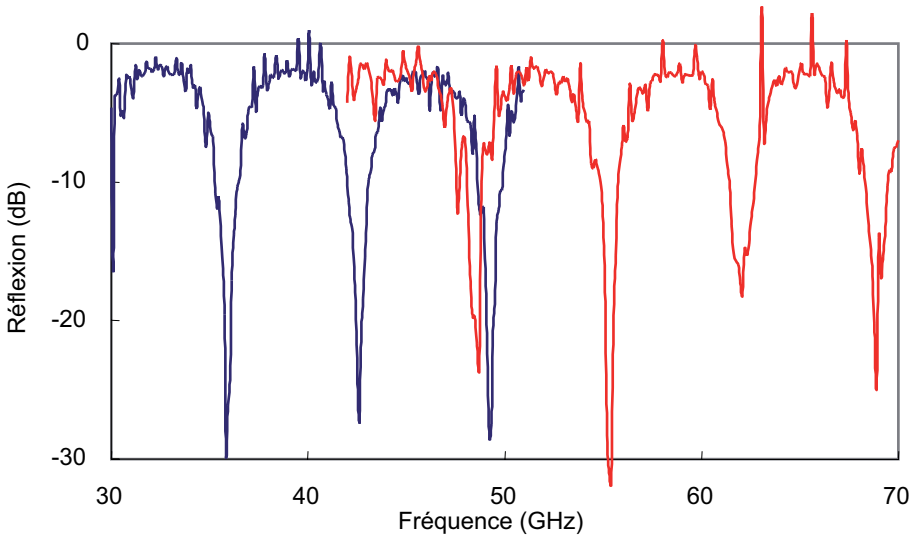


FIG. 4.19 – Recoupement du 2^{ieme} et 3^{ieme} banc de la figure précédente

4.4 Méthodes et exemples de caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels

Au cours des chapitres précédents, nous avons modélisé la structure cubique simple par diverses méthodes numériques et analytiques. Nous allons vérifier expérimentalement ces modélisations. La caractérisation des CPhs sur la gamme micro-onde présente deux avantages importants. Le premier, la taille des CPhs à réaliser est de l'ordre de quelques centimètres. A ces tailles là, les structures sont facilement réalisables à faibles coûts. Le second avantage est que les mesures micro-ondes sont réalisées en amplitude et en phase. L'amplitude nous permet de tracer la transmission et la réflexion du CPh. Le diagramme de dispersion du CPh est tracé à partir du déphasage. Nous allons étudier plusieurs structures différentes.

4.4.1 CPh cubique métallique

Nous avons fabriqué des cristaux photoniques dont la structure est composée d'un réseau cubique simple et d'un motif sphérique métallique (figure 4.20). Les billes sont placées dans des couches de mousse Rohacell. La mousse sert de support aux billes. Elle a une permittivité très proche de celle de l'air. Cette mousse est percée par une perceuse numérique pour obtenir le meilleur positionnement possible des billes.

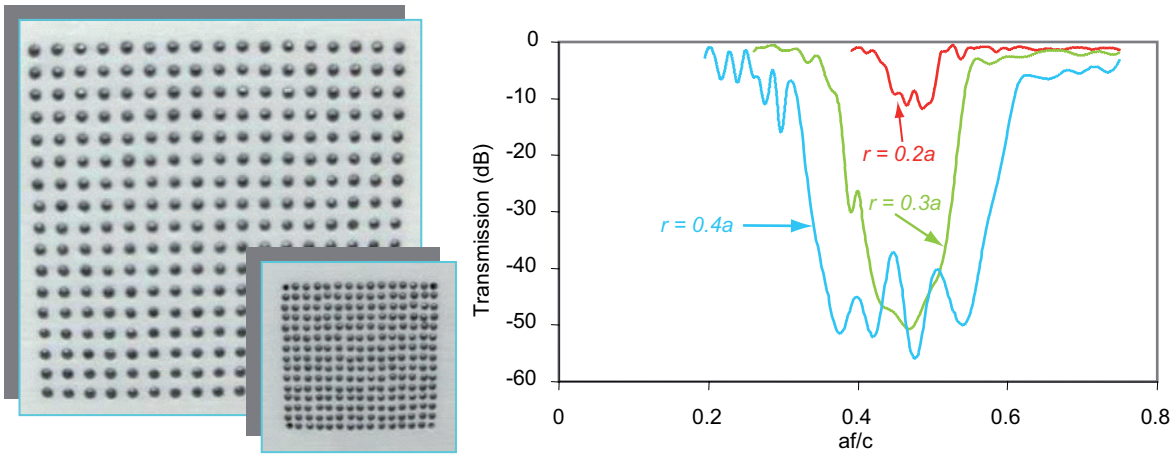


FIG. 4.20 – Photos et courbes de transmission du CPh cubique métallique 12 couches

Nous avons étudié trois pas différents pour un même rayon des billes. La transmission de ces CPhs nous donne la position des bandes interdites (figure 4.20). Pour des compacités différentes, la position de la bande interdite ne change pas. En augmentant la compacité, la bande interdite s'élargit et s'approfondit. Nous avons comparé la mesure du CPh $r = 0.3a$ à une modélisation FDTD (figure 4.21). La FDTD est très bien adaptée pour l'étude de structures métalliques. Nous avons une très bonne adéquation sur la position de la bande interdite. Il existe une petite différence sur la profondeur de la bande interdite entre la mesure et la modélisation. La mesure en transmission a une dynamique de 70 dB. Cela revient à dire que l'on peut détecter et mesurer un signal jusqu'à -70dB. Par contre, la modélisation a une dynamique de 40dB environ. Cette faible dynamique de la FDTD s'explique aisément. Pour des questions de temps de développement, nous n'avons pas implémenté les PML dans la FDTD qui utilise des conditions de Bloch. Nous utilisons seulement des conditions de Mur. On comprend aisément cette différence entre -40dB et -50dB au niveau de la bande interdite.

4.4.2 CPh cubique diélectrique

Nous avons étudié des CPhs diélectriques en conservant la structure précédente (figure 4.20). Nous avons pour cela remplacé les billes métalliques par des billes de verre. La permittivité réelle des billes a été mesurée en cavité résonante 10 GHz. Elle est de 4. Les billes ont un diamètre de 3mm. Les courbes de transmission de la figure 4.22 nous indiquent la position de la première bande interdite de chaque CPh. Malheureusement, on constate que cette taille de bille ne se combine pas très bien avec notre banc de mesure. La courbe de transmission

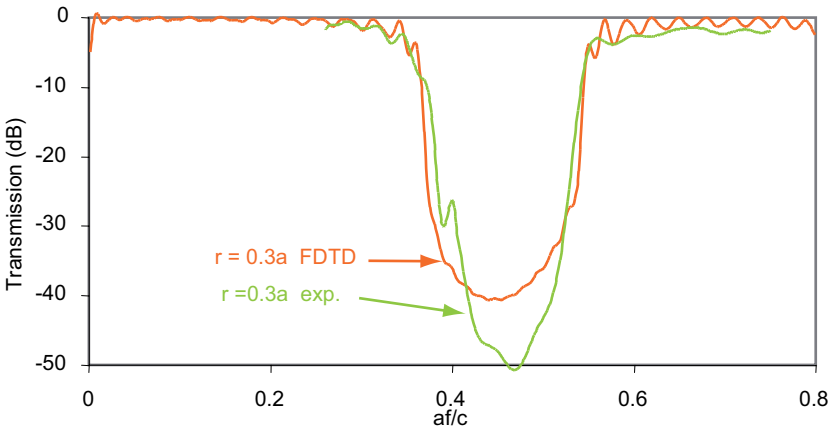


FIG. 4.21 – Comparaison de la de la transmission du CPh modélisé et du CPh expérimental

du CPh $r = 0.2a$ démarre au milieu de la première bande interdite car le banc de mesure commence à 18GHz. La première bande interdite des CPhs $r = 0.3a$ et $r = 0.4a$ se trouvent à 27 GHz et 31.5GHz. Ce sont les fréquences qui ont le moins de dynamique et le plus d'erreur. A rayon constant, plus on augmente la compacité, plus le pas diminue. Les erreurs augmentent de pair. Malgré toutes ces difficultés et en utilisant le filtrage expliqué dans les paragraphes précédents, on retrouve la position des bandes interdites avec une bonne précision (figure 4.22).

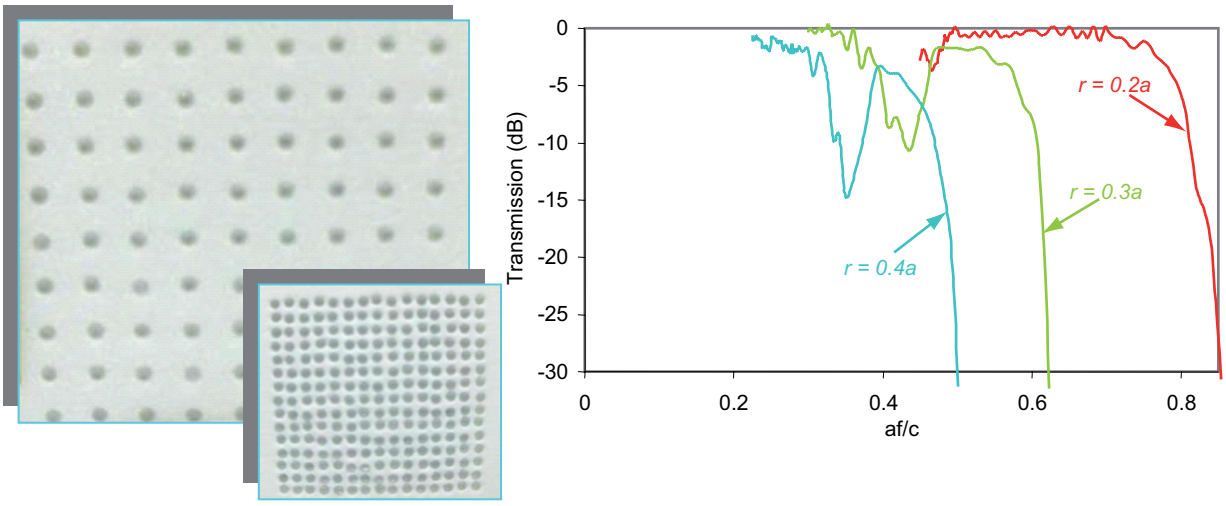


FIG. 4.22 – Photos et courbes de transmission du CPh cubique diélectrique 12 couches

Le CPh est étudié sur la gamme 18-110 GHz. La permittivité et les pertes peuvent varier sur cette gamme de fréquence. La permittivité des sphères est difficile à mesurer du fait de la

gamme de fréquence choisie et de la forme sphérique. Nous n'avons pas de cavités pour ces fréquences là.

Par la TMM, nous avons modélisé le CPh diélectrique $r = 0.3a$ pour des sphères ayant des pertes (figure 4.23). Lorsque les pertes des sphères augmentent, le niveau de transmission présente une pente avec la fréquence. Le même phénomène est observé expérimentalement (figure 4.22). Donc nos sphères présentent des pertes.

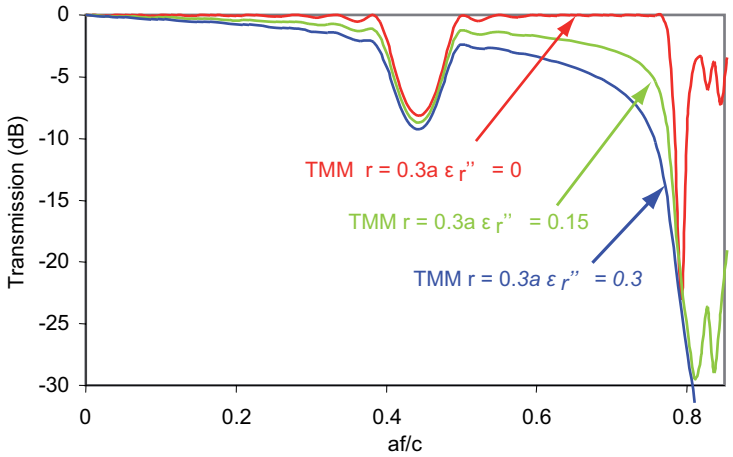


FIG. 4.23 – Modélisation de la transmission du CPh cubique diélectrique 16 couches

Une des application de ces structures est la caractérisation de matériaux. Si nous disposons de suffisamment d'échantillons d'un matériau, nous pouvons réaliser un CPh et en déduire les propriétés diélectriques de ce matériau.

4.4.3 Diagramme de bande

La phase de la transmission contient toutes les informations du diagramme de dispersion du CPh [4–7]. Pour calculer la structure de bande, nous devons obtenir le vecteur d'onde du cristal pour chaque fréquence ou nombre d'onde :

$$\begin{aligned} \phi &= kL - k_0 L \ \ [2\pi] \\ k &= \frac{\phi}{L} + k_0 \ \ [2\pi/L] \end{aligned} \tag{4.14}$$

L et ϕ sont respectivement l'épaisseur du CPh et le déphasage en transmission normalisé par rapport à l'onde incidente (équation 4.8). On parcourt la première zone de Brillouin en changeant l'angle d'incidence θ de l'onde électromagnétique. Deux exemples pour mieux comprendre :

– pour l'orientation ΓX, on choisit l'incidence normale, et

– pour l'orientation XM on choisit un angle d'incidence à 45°.

Le vecteur d'onde peut être décomposé en deux parties : une partie parallèle et une partie orthogonale à la surface du CPh :

$$\begin{aligned} k &= k_{\parallel}\hat{e}_{\parallel} + k_{\perp}\hat{e}_{\perp} \\ \|k\| &= k \end{aligned} \tag{4.15}$$

D'après les lois de Snell-Descartes, le vecteur d'onde parallèle est conservé :

$$k_{\parallel} = k_0 \sin\theta \tag{4.16}$$

La partie parallèle permet de choisir l'orientation dans le diagramme de bande *i.e.* choisir entre ΓX, XM ... La partie orthogonale permet de choisir le vecteur d'onde à l'intérieur de cette orientation. Connaissant le module du vecteur d'onde et la partie parallèle, on en déduit le vecteur d'onde et donc la structure de bande du CPh.

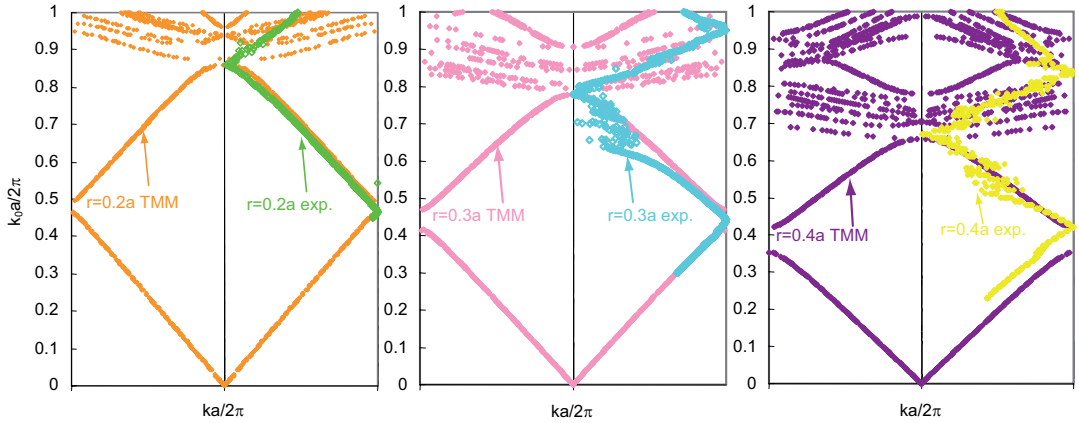


FIG. 4.24 – Diagramme de bande théorique et expérimental du CPh diélectrique

Pour certaines parties de la zone Brillouin, le vecteur d'onde parallèle devient trop grand pour l'atteindre expérimentalement de manière directe. On doit utiliser un prisme pour augmenter ce vecteur d'onde. Ce problème ne nous concernera pas car on étudiera ici que l'incidence normale. La figure 4.24 est une comparaison des diagrammes de bandes théoriques et expérimentaux des CPhs diélectriques précédents. Les diagrammes théoriques sont obtenus par la TMM. Les diagrammes expérimentaux sont obtenus par la méthode décrite dans le paragraphe précédent. La deuxième bande du CPh $r = 0.3a$ contient beaucoup de bruit entre les fréquences 0.6 et 0.7. Le niveau de transmission à ces fréquences est très faible (figure 4.22). Le déphasage est très difficile à mesurer. On observe un décalage de la première bande expérimentale du CPh $r = 0.4a$. Ce CPh est celui qui a le pas le plus petit des trois. Ce décalage

est du probablement à la précision de réalisation du CPh. Ce décalage correspond à quelques centaines de microns de différence d'épaisseur entre couches. Ces épaisseurs correspondent à la précision maximale de fabrication que nous pouvons atteindre. Au-delà de la seconde bande, les diagrammes de bandes ne correspondent pas. Deux raisons à cela. Le CPh expérimental a une très faible transmission à ces fréquences . Cela entraîne des erreurs de phases. Les bandes supérieures à la seconde bande ne peuvent pas être tous couplées par une onde plane. Pour pouvoir activer un état électromagnétique de la structure, la symétrie de cet état doit être la même que celle de l'onde incidente. L'indice effectif est obtenu à partir du diagramme de bande ou de la phase de la transmission (figure 4.25) :

$$n = 1 + \frac{\phi}{k_0 L} \quad [2\pi/k_0 L] \tag{4.17}$$

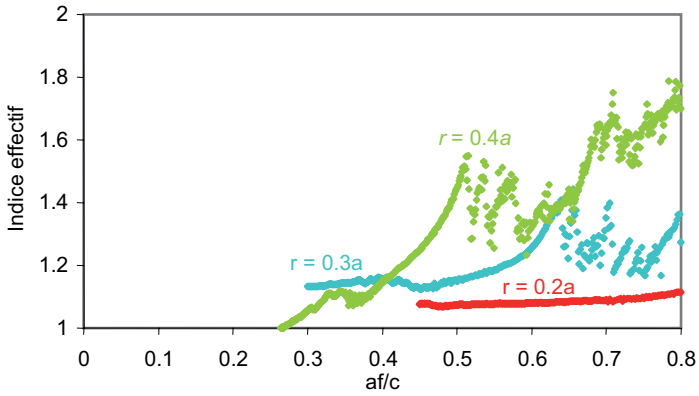


FIG. 4.25 – Indice effectif du CPh diélectrique

Plus la taille des sphères est petite, moins l'indice varie en fréquence. Dans certaines structures métalliques, on peut obtenir des permittivités négatives (voir chapitre 1).

4.4.4 Réflexion de Bragg

Les CPhs diélectriques et métalliques précédents se comportent comme des réflecteurs de Bragg au niveau de la première bande interdite. Ce comportement a déjà été montré dans le cas des CPhs 2D [8]. L'explication 2D de D. Maystre reste valable pour le cas 3D. On peut utiliser le schéma de la figure 4.26 pour exprimer la loi de Bragg en incidence normale.

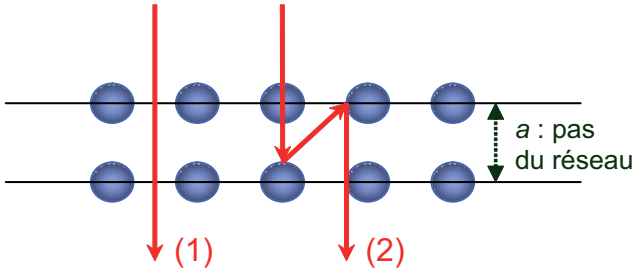


FIG. 4.26 – Interférences entre deux faisceaux de lumière

Le déphasage entre 2 faisceaux est donné par la relation suivante :

$$\begin{aligned} &\phi = 2\pi\frac{\delta}{\lambda_0} + 2p \\ &\lambda_0 \ \text{: longueur d'onde d'étude} \\ &\delta \ \text{: différence de marche} \\ &p \ \text{: déphasage du à la réflexion de l'onde entre deux couches} \end{aligned} \tag{4.18}$$

La différence de marche s'écrit :

$$\begin{aligned} &\delta = 2n_a a \\ &a \ \text{: pas du réseau} \\ &n_a \ \text{: indice de réfraction moyen du matériau} \end{aligned} \tag{4.19}$$

L'indice de réfraction moyen est égal à un dans le cas d'un CPh métallique. Dans le cas du CPh diélectrique, il est calculé de la manière suivante :

$$\begin{aligned} &n_a = 1 + \beta(n-1) \\ &n \ \text{: indice de réfraction des sphères} \\ &\beta \ \text{: facteur de remplissage} \end{aligned} \tag{4.20}$$

Le calcul du déphasage dû à la réflexion de l'onde entre deux couches fait intervenir la matrice de dispersion (référence de phase au niveau de la première interface) :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \tag{4.21}$$

Le cristal photonique étudié est réciproque : $S_{ij} = S_{ji}$. Si on considère des sphères sans pertes, nous avons conservation de l'énergie dans le CPh. La matrice $\mathbf{S}$ est donc unitaire :

$$\begin{aligned} &\mathbf{S}\mathbf{S}^* = 1 \\ &S_{11}S_{21}^* + S_{21}S_{11}^* = 0 \end{aligned} \tag{4.22}$$

On en déduit que :

$$\begin{aligned} &\frac{S_{11}}{S_{11}^*} = -\frac{S_{21}}{S_{21}^*} \\ &\arg(S_{11}) = \arg(S_{21}) \pm \frac{\pi}{2} \end{aligned} \tag{4.23}$$

Le déphasage dû à la réflexion de l'onde entre deux couches par rapport à l'onde transmise est égal à :

$$p = \pm\pi/2 \tag{4.24}$$

En utilisant les équations précédentes, le déphasage entre 2 faisceaux s'écrit de la manière suivante :

$$\phi = 2\pi\left(\frac{2n_a a}{\lambda} \pm \frac{1}{2}\right) \tag{4.25}$$

Le déphasage global pour des interférences destructives s'écrit :

$$\begin{aligned} &\phi = 2\pi\left(N \pm \frac{1}{2}\right) \\ &N \ \text{: un entier} \end{aligned} \tag{4.26}$$

Les bandes interdites sont des interférences destructives en transmission. Si on associe les deux relations précédentes, on en déduit la position des bandes interdites en fréquence.

$$\lambda = \frac{2n_a a}{N} \ \frac{af}{\mathrm{c}} = \frac{N}{2n_a} \tag{4.27}$$

Cette loi fonctionne bien pour la première bande interdite. Dans le cas du cristal photonique diélectrique du chapitre 2 ($r = 0.4a$ $\varepsilon_r = 5.1$), on obtient par le calcul :

$$\begin{aligned} &\beta = \frac{4}{3}\pi\,(0.4)^3 = 0.27 \\ &n_a = 1 + 0.27(\sqrt{5.1} - 1) = 1.34 \\ &\frac{af}{c} = 0.37 \end{aligned} \tag{4.28}$$

Ce résultat est en adéquation avec les résultats obtenus au chapitre 2. Il est inutile d'appliquer la formule à la deuxième bande interdite de la structure. Elle est cachée par une forte diffraction apparaissant au-delà de la première bande interdite. Cette forte diffraction est issue d'une forte interaction entre les sphères. Elle a été mise en évidence par le code de multidiffusion développé au chapitre 3. Après quelques généralités sur les polymères conducteurs, nous étudierons des structures CPh en polymère conducteur. Nous verrons quels bénéfices peut apporter l'utilisation de ce matériau dans les CPhs.

4.5 Les polymères conducteurs

Les polymères, souvent utilisés pour leurs propriétés mécaniques, leur faible densité ou leur inertie chimique, sont aussi connus pour leur excellente résistivité électrique. L'industrie électrique les a depuis longtemps utilisés comme gaine pour câbles, ou comme diélectrique de condensateur. C'est à partir des années 50 que l'idée d'associer les propriétés mécaniques des polymères aux propriétés conductrices des métaux a conduit à la préparation des polymères chargés ou polymères conducteurs extrinsèques, par inclusion de charges conductrices dans une matrice polymère. Ces matériaux peuvent atteindre une conductivité de 10^3 S.cm^{-1}. Toutefois, cette conductivité est obtenue au prix d'une forte charge d'inclusions (30 à 40% en masse) nuisant ainsi fortement à la tenue mécanique de l'ensemble.

Dans les années 60 se développèrent les conducteurs organiques, dans lesquels le déplacement électronique est assuré par l'empilement de molécules possédant une alternance de simples et doubles liaisons appelés polymères conjugués. Cependant, ces polymères conjugués possèdent des propriétés semi-conductrices, avec des conductivités de l'ordre de 10^{-5} S.cm^{-1}.

En 1977, a eu lieu la création du premier polymère conducteur à conduction intrinsèque (PCI) ; les porteurs de charges appartiennent aux chaînes polymères elles-mêmes. L'équipe de A. J. Heeger, A. G. MacDiarmid et H. Shirakawa [9] a eu l'idée de doper un polyacétylène avec des vapeurs oxydantes d'iode, ce qui a pour effet de multiplier la conductivité par 10^{13}. Cette équipe a reçu pour ces recherches le prix Nobel de Chimie en l'année 2000. Cette idée fut ensuite adaptée à d'autres polymères à chaîne conjuguée : polypyrrole, polythiophène, polyaniline ...

Après avoir défini les polymères conjugués, nous déterminerons quels sont les porteurs de charges mis en jeu et comment est effectué la génération de ces charges. Nous nous intéresserons à un cas particulier de polymères conducteur, la polyaniline. La description du transport de charge nous permettra de mieux comprendre les modèles de conduction existants.

4.5.1 Les polymères conjugués

Définissons tout d'abord ce qu'est un polymère. Un polymère est une macromolécule engendrée par la répétition d'unités structurales, appelées motifs constitutifs. Les polymères sont synthétisés en reliant les molécules de monomères entre elles par des liaisons chimiques covalentes. Les polymères conventionnels sont dits saturés : par exemple dans le polyéthylène $(\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-})_n$ chaque atome de carbone est hybridé sp^3 et ne peut donc former que des

liaisons σ avec les atomes voisins. Les transitions électroniques ne peuvent se produire qu'entre le niveau liant σ et le niveau anti-liant σ^* : l'énergie entre les niveaux étant de l'ordre de 6 eV, les polymères saturés sont donc des isolants.

Les polymères conjugués sont issus de la répétition régulière de monomères contenant des électrons π, de manière à obtenir une chaîne ne présentant pas d'interruption de la conjugaison ; le système d'électrons π est complètement étendu sur toute la chaîne. De nombreuses structures polymères présentent cette conjugaison, la plus simple d'entre elles est la molécule de polyacétylène (figure 4.27). Elle est formée d'une chaîne d'atomes de carbone portant chacun un atome d'hydrogène, et liés entre eux alternativement par une liaison simple et une liaison double.

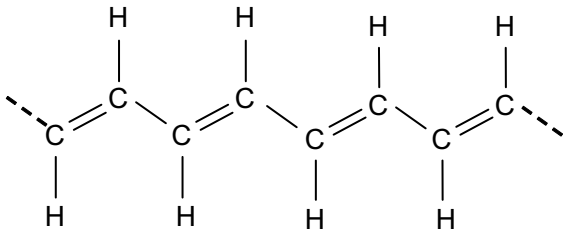


FIG. 4.27 – Représentation de la structure chimique du *trans*-polyacétylène

4.5.2 Les porteurs de charge libre

L'étude fondamentale des polymères conducteurs a été faite sur le polyacétylène. Nous étudierons cette molécule dans ce paragraphe. Les atomes de carbone de la chaîne polymère du polyacétylène sont hybridés sp^2 et possèdent un électron de valence non apparié dans une orbitale $2p_z$. Le recouvrement ou la conjugaison de ces orbitales va créer une "super orbitale" s'étendant tout au long de la chaîne (orbitale supra-moléculaire). Des électrons pourront se déplacer dans cette orbitale, donnant naissance à des phénomènes de conduction électronique le long de la molécule. Toutefois à l'état naturel, cette structure n'est pas conductrice. La molécule de polyacétylène décrite précédemment, *i.e.* une chaîne infinie d'unité CH n'est stable qu'à des températures supérieures à 10000 K. Physiquement, on obtiendrait un métal à une dimension, créé par les p-électrons totalement délocalisés. Les porteurs de charges mis en jeu ici sont les électrons π. Les liaisons doubles ont une densité en porteurs de charges supérieure aux liaisons simples. Les électrons de la liaison π sont partiellement délocalisés sur les liaisons σ adjacentes. Afin de conserver l'électroneutralité, les ions positifs (groupe CH)

sont déplacés vers les densités électroniques fortes, *i.e.* vers les liaisons doubles. Cela a pour conséquence un allongement des liaisons simples et inversement pour les liaisons doubles. La déformation de la chaîne polymère coûte en énergie. Mais elle est contrebalancée par un abaissement de l'énergie électronique du système. Globalement, il y a un abaissement de l'énergie lorsque le polymère est sous sa forme dimérisée. Le système est donc stabilisé sous cette forme. Pour chaque alternance entre liaison double et liaison simple, une distorsion de Peierls se crée. Elle entraîne une suppression d'un état dans le diagramme de bande. Pour la molécule polyacétylène qui est faite d'un très grand nombre de liaisons simples et doubles, un gap se forme centré sur le niveau de Fermi. Cette ouverture du gap transforme un métal en un semi-conducteur ou en un isolant. On peut progressivement passer d'un état liant et antiliant de la molécule d'éthylène à une bande de conduction et de valence du polyacétylène (figure 4.28). Chaque double liaison crée deux états supplémentaires.

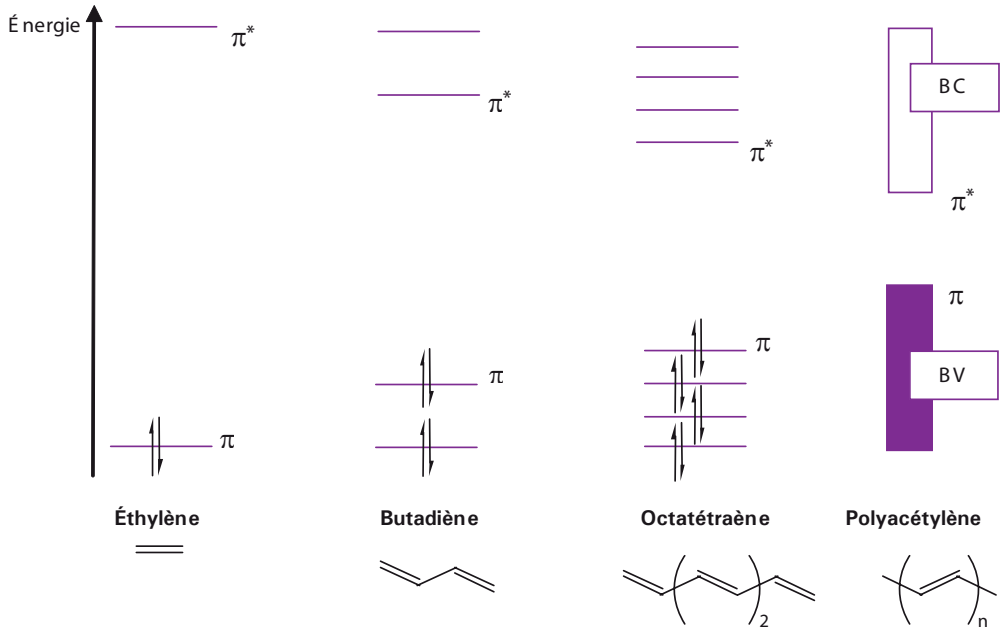


FIG. 4.28 – Diagramme des orbitales moléculaires π

Dans une même chaîne de polymère conducteur, des domaines se trouvant dans deux états fondamentaux différents peuvent cohabiter et donnent lieu à des défauts topologiques situés entre deux domaines (figure 4.29). Le chimiste le voit comme la dimérisation de la chaîne qui a commencée en deux endroits différents, *i.e.* les domaines dimerisés s'agrandissent et quand ils se touchent, laissent un électron non lié seul au dessus de la chaîne. Cette rupture de la symétrie de la chaîne est appelée un défaut conjugué. Ce défaut localisé sur un site n'est en

réalité pas aussi abrupt. Il s'étend sur 10 ou 15 groupes CH (figure 4.29).

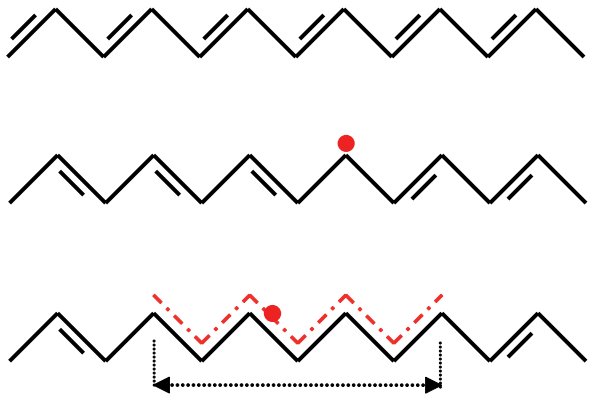


FIG. 4.29 – Défaut conjugué dans une chaîne polymère

On peut conjecturer que les défauts conjugués se déplacent comme des ondes solitaires. La chaîne de polyacétylène peut être vue comme un système de potentiels à deux puits couplés. On écrit l'équation différentielle non linéaire de ce système :

$$\partial_x^2\phi - \partial_t^2\phi = 2\omega^2\left(\phi^3 - \phi\right) \tag{4.29}$$

La solution de cette équation est une onde solitaire. Le défaut conjugué précédent se comporte bien comme un soliton. Une importante caractéristique du soliton est son déplacement non dispersif. Comme dans le cas d'un semi-conducteur classique, ce défaut conjugué crée un état électronique localisé dans la bande interdite. Un défaut conjugué peut être vu comme une suppression d'une transition de Peierls. S'il n'y a pas de transition de Peierls, il n'y a pas non plus d'état électronique supprimé. Par conséquent, un état électronique se crée au milieu de la bande interdite (niveau de Fermi).

Le cristal de polyacétylène est un amas de chaînes qui interagissent entre elles. Cela a pour conséquence de créer une interaction attractive entre deux solitons d'une même chaîne. Si l'un des solitons est chargé, il y a une interaction attractive. Ils forment un polaron qui a un spin, une charge et qui crée une déformation du réseau. Deux solitons chargés et de même charge subissent deux forces antagonistes : l'attraction crée par le réseau, la répulsion crée par leur charge. Il s'établit un équilibre et on obtient un bipolaron. Le coût énergétique de la création du bipolaron est voisin de celui de la création de deux polarons, mais la diminution du potentiel d'ionisation est nettement supérieure dans le cas du polaron. Ceci explique pourquoi dans les systèmes non-dégénérés, le bipolaron est thermodynamiquement plus stable que deux polarons.

4.5.3 Génération des charges - dopage

Les défauts conjugués décrits précédemment augmentent la conductivité dans les polymères conjugués en créant des états électroniques dans la bande interdite. S'ils sont suffisamment nombreux, la conductivité augmente de plusieurs ordres de grandeur et le polymère passe de l'état isolant ou semi-conducteur à l'état conducteur (figure 4.30).

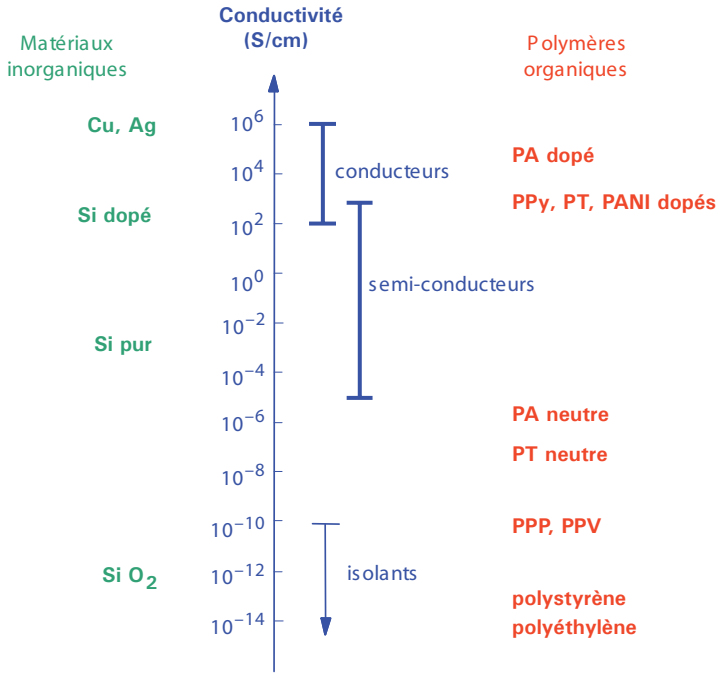


FIG. 4.30 – Ordre de grandeur de la conductivité dans les polymères conjugués

Typiquement sur le *trans*- polyacétylène, un défaut d'enchaînement (soliton) se produit une fois sur deux milles unités CH. En fait, les défauts conjugués sont créés en grand nombre par dopage du polymère conjugué. Il existe plusieurs types de dopages dans les polymères conjugués :

- le dopage redox qui fait intervenir des ions. Il peut être appliqué à l'ensemble des polymères conjugués. Il est réalisé par voie chimique ou électrochimique.
- la photogénération et l'injection de charge permettent d'obtenir des dopages transitoires sans ions dopants.
- un dopage non redox et qui conserve le même nombre d'électrons dans la structure. Par contre le niveau d'énergie des électrons est réarrangé durant le processus de dopage. Le dopage est obtenu par un équilibre acide-base. Le premier exemple a été obtenu pour la polyaniline et étendu à des systèmes poly(heteroaromatic vinylènes). Ce dopage sera

détaillé dans le paragraphe consacré à la polyaniline.

Le dopage par un agent oxydoréducteur va créer des états électroniques dans la bande interdite (figure 4.31). Lorsque le dopage augmente, les polarons deviennent des bipolarons puis des bandes de bipolarons ou de polarons. Pour des dopages faibles, une énergie importante est nécessaire pour que les charges puissent franchir le gap : on se trouve typiquement dans le cas d'un semi-conducteur. Pour des taux de dopage supérieurs, les états électroniques se recouvrent, la mobilité des charges est alors facilitée, et l'on se rapproche d'un comportement métallique.

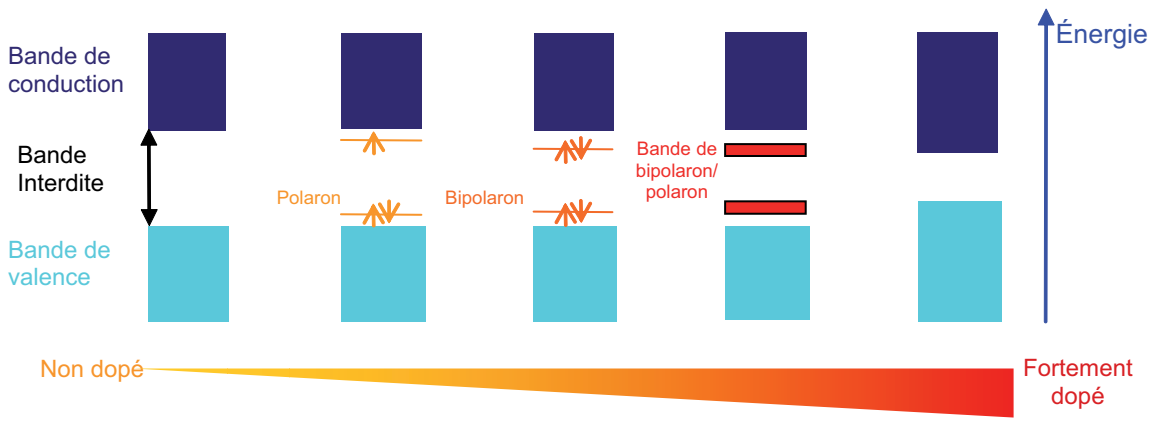
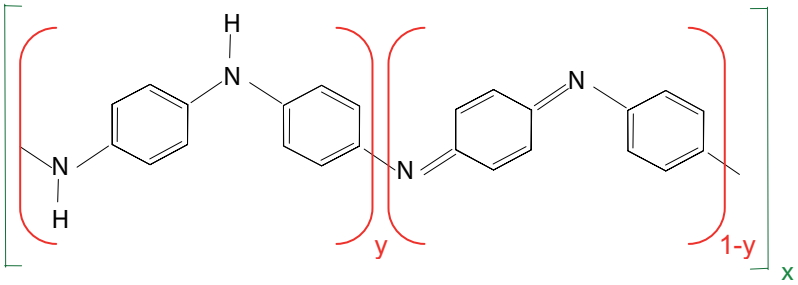


FIG. 4.31 – Evolution de la conductivité avec le taux de dopage (dopage n)

4.5.4 Les polyanilines

Les polyanilines (PAni) sont connues depuis plus d'un siècle. Elles représentent une classe de polymères conducteurs très importante. Ce sont les seuls polymères qui peuvent être dopés par protonation à partir d'un acide. La version dopée de la polyaniline atteint des conductivités très élevées tout en gardant de très bonnes propriétés mécaniques. En alliant ces propriétés aux faibles coûts de mise en œuvre, la polyaniline a donné naissance à de nombreuses applications commerciales. La polyaniline non dopée est une chaîne polymère composée d'une combinaison de deux unités monomères différentes : la diamine phénylène et la diimine quinoide :



Grâce à ses groupes N-H, la polyaniline est particulièrement flexible. Parmi les polyanilines isolantes, on distingue la leucoéméraldine, l'éméraldine et la pernigraniline selon leurs degrés d'oxydation (figure 4.32). On peut les distinguer par leur couleur respective : brune, bleue foncée et violette.

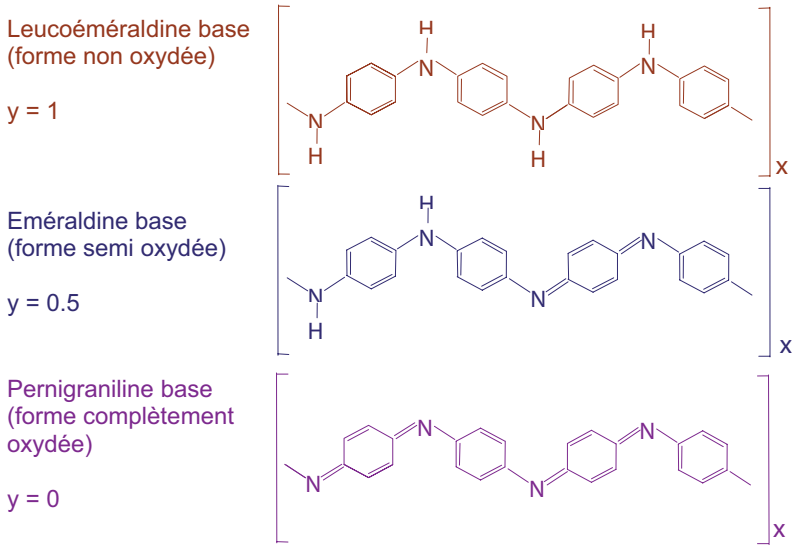


FIG. 4.32 – Les différentes formes de la polyaniline isolante

Les porteurs de charges

La structure de la polyaniline est un système non dégénéré. Lorsque l'on permute les liaisons, la structure change d'énergie. Les seuls porteurs de charges susceptibles de se propager dans la polyaniline sont les polarons et les bipolarons. Pour un taux de dopage pas trop élevé, l'équipe de Brédas, Epstein et MacDiarmid a montré que la structure bipolaronique n'était pas en accord avec les mesures optiques, Raman et magnétiques [10]. La structure bipolaronique se transforme en une structure polaronique (figure 4.33). Lorsque que l'on augmente le taux de dopage, une partie des polarons se réarrangent en bipolaron.

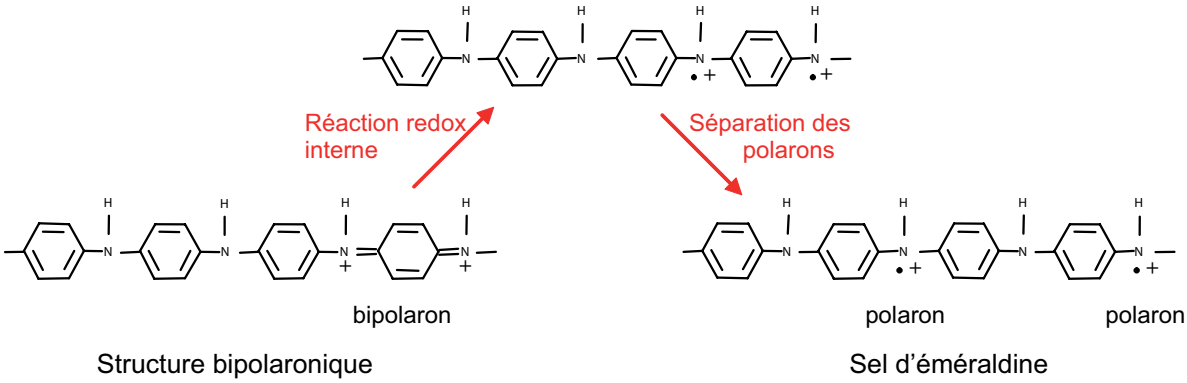
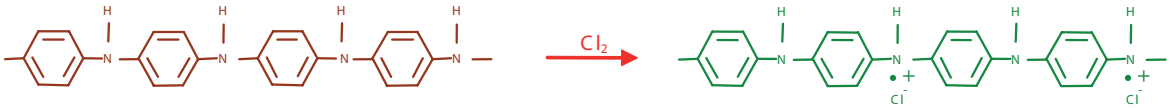


FIG. 4.33 – Formation de deux polarons à partir d'un bipolaron

Dopage

Parmi les polymères conducteurs, c'est la polyaniline qui atteint les conductivités les plus élevées. La polyaniline peut être dopée de deux façons différentes. En dopant la leucoéméraldine base par oxydation chimique on obtient la polyaniline dopée ou sel d'éméraldine. On peut utiliser comme oxydant une solution de chlorine :



Ce dopage implique une oxydation des liaisons σ et π, et pas seulement des liaisons π comme c'est le cas dans des dopages p classiques.

Une deuxième technique de dopage est la protonation de l'éméraldine base par un acide, par exemple l'acide chlorhydrique [11]. Le dopage protonique est un processus acido-basique réversible. On obtient la même polyaniline dopée. L'éméraldine passe de sa forme neutre à sa forme protonée et sa couleur du bleu foncé au vert.

Le dopage par un acide protonique est la méthode la plus utilisée car elle permet de rendre la polyaniline plus soluble. La protonation est réalisée soit à partir d'une solution de polyaniline non dopée dans un solvant organique, soit directement à partir du film de

polyaniline isolant. Dans le premier cas, la solution de PAni est versée goutte à goutte dans une solution acide. Le mélange se précipite, il est filtré et on obtient une poudre que l'on presse en pastille. Dans le second cas, le film isolant est plongé dans une solution d'acide fort. Les conductivités obtenues par ces deux méthodes ne dépassent pas 100 S/m. Pour obtenir des conductivités plus élevées, la PAni doit être dopée directement en solution pour que la protonation s'effectue sur chaque chaîne.

Les dopants

De nombreux dopants peuvent être utilisé pour arracher ou ajouter des électrons à la polyaniline. Le plus souvent on utilise des dopants organiques qui seront associés à des solvants organiques. On peut citer comme exemple : l'acide camphorsulfonique (CSA), l'acide dodécylbenzène sulfonique (DBSA), l'acide sulfosalicylique, le p-toluène, des di-esters d'acide phosphorique et l'acide sulfonique tosylène (TSA). Olinga et Pron [12] ont utilisé un nouveau dopant : le di-octyl-phtalate fonctionnalisé par un groupement sulfonate (ou diesters d'acide 4-sulfophtalique, DEHEPSA). Le dopant apporte une fonction plastifiante qui conduit à de bonnes caractéristiques mécaniques, très stable dans le temps. Nous utiliserons ce dopant dans nos films.

Les solvants

Il existe très peu de polymères qui soit solubles et transformables dans leur état dopé. La polyaniline ne peut pas être transformée thermiquement car elle nécessiterait une température trop élevée. Une dégradation de la PAni s'ensuivrait et elle perdrait son caractère conducteur. La conductivité métallique de la PAni entraîne dans sa structure de très fortes interactions intramoléculaires. La polyaniline n'est pas soluble à cause de ses forces intramoléculaires. La tension de surface de la PAni varie de 200 mN/m (sels) à 2000 mN/m (métaux). Aucun solvant n'a de telles tensions de surfaces pour solubiliser la polyaniline. On parle de dispersion plutôt que de mise en solution de la polyaniline. Le solvant n'agit que pour disperser les agrégats en particules les plus fines. On peut utiliser un disperseur pour aider à casser ou à cisailler les agrégats de PAni. Contrairement aux solvants non organiques, les solvants organiques permettent d'obtenir des films de conductivités élevées, tout en ayant un processus d'élaboration simple. Nous associerons au dopant organique que nous utilisons un solvant organique : l'acide dichloroacétique ou l'acide formique. Avec cette association, Les

conductivités peuvent atteindre 10^4 S.m^{-1}.

Le transport de charge

Un échantillon réel de polymère conducteur est une structure hétérogène de fibres interpénétrées et de grains (figure 4.34). La description des polymères conducteurs à partir du diagramme de bande n'est pas totalement correcte. Les polymères conducteurs ne sont organisés que pour certaines échelles. Ce ne sont pas des cristaux. Nous avons vu dans les chapitres précédents que le milieu devait être périodique avec ou sans défauts pour parler de diagramme de bande. Les polymères conducteurs sont des structures aléatoires pour certaines échelles.

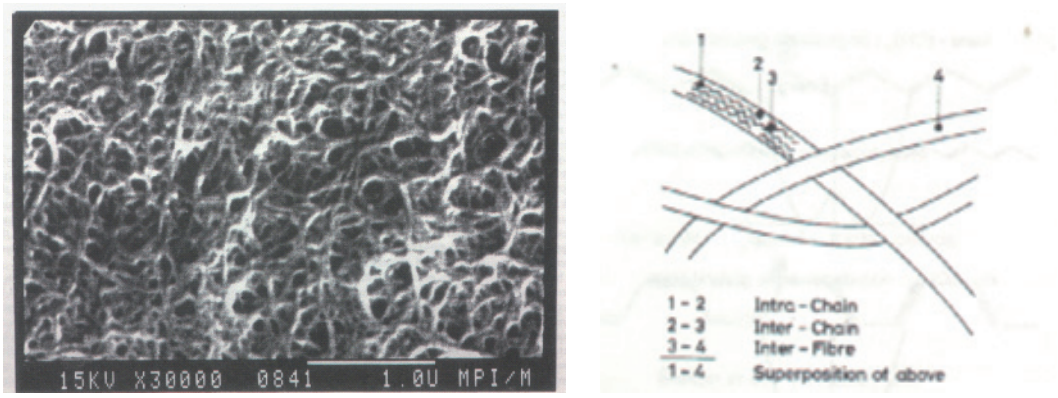


FIG. 4.34 – Structure d'un film de *trans*-polyacétylène

Dans le cas du *trans*-polyacétylène, les porteurs de charges mis en jeu sont les solitons, les polarons et les bipolarons. La vitesse du son dans les films de polyacétylène est de $\nu = 2 \times 10^5$ cm.s^{-1}, inférieure à la vitesse du son à l'intérieur de la chaîne. Cette vitesse est la vitesse limite des solitons car ils transportent avec eux la déformation du réseau. Les solitons se propagent seulement sur des distances de 10 nm, la longueur des segments conjugués. Ils ne participent pas à la conduction DC. Les solitons participent à la conduction AC par saut ou par effet tunnel. La conduction dans le film de polymère est la superposition de différentes conductions :

- intra-chaîne : l'ensemble des porteurs de charges participent à la conduction dans la chaîne du polymère conducteur. Cette conduction est unidimensionnelle.
- inter-chaîne : la conduction est faite par saut (hopping) ou par effet tunnel des électrons. Ces électrons forment dans la chaîne de réception des solitons ou des polarons. Cela est

du à la forte interaction électron-phonon.

– inter-fibre : la conduction utilise les mêmes processus que dans le cas inter-chaîne.

4.5.5 La percolation

Le terme de percolation est utilisé dans une grande variété de situation. Elle fait appel à la notion de diffusion dans un système aléatoire en partie interconnecté. On peut citer comme exemple la percolation de l'eau dans un sol ou une poudre. Jusqu'à un certain seuil, l'eau est absorbée par la poudre sans écoulement. Puis au-delà de ce seuil, l'eau s'écoule, ruisselle de plus en plus. Le passage d'un état à l'autre se fait de façon abrupte.

Dans le cas général, les particules mises en contact peuvent être modélisées sous forme de grains ou de fibres. Au vu de la structure des polymères conducteurs, un réseau de fibres désorganisées est très bien adapté à leur modélisation. Un schéma permet de mieux comprendre les différents liens qu'il existe dans cette structure (figure 4.35).

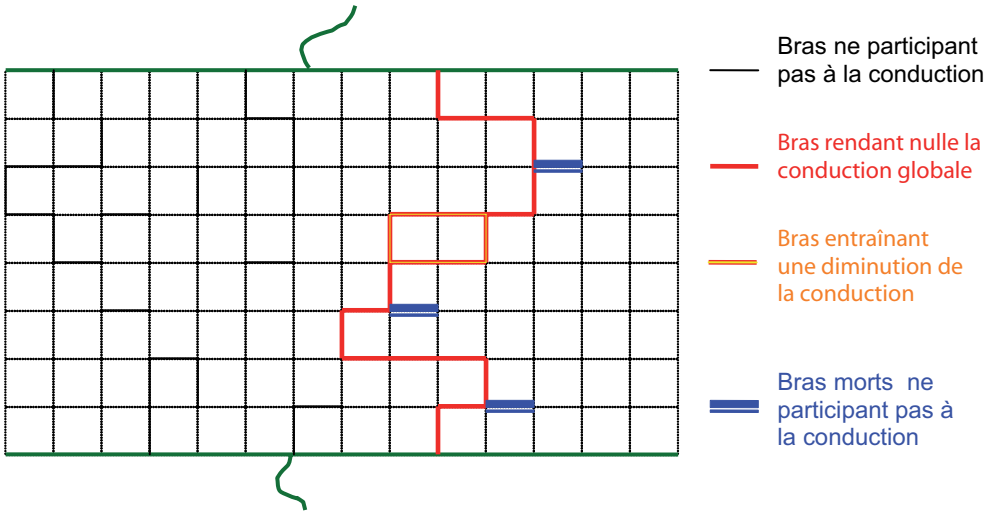


FIG. 4.35 – Mise en évidence des différents liens possibles

Si le schéma précédent est un réseau de résistances disposées aléatoirement, on modélise de façon statique la conduction dans un polymère conducteur. On obtient la loi de conduction suivante :

$$\begin{aligned} &\sigma \propto (p - p_c)^{\alpha} \quad p > p_c \\ &\text{Réseau 3D : } \alpha = 2 \\ &\text{Réseau 2D : } \alpha = 1.3 \\ &p \text{ est la probabilité qu'un lien soit conducteur.} \end{aligned} \tag{4.30}$$

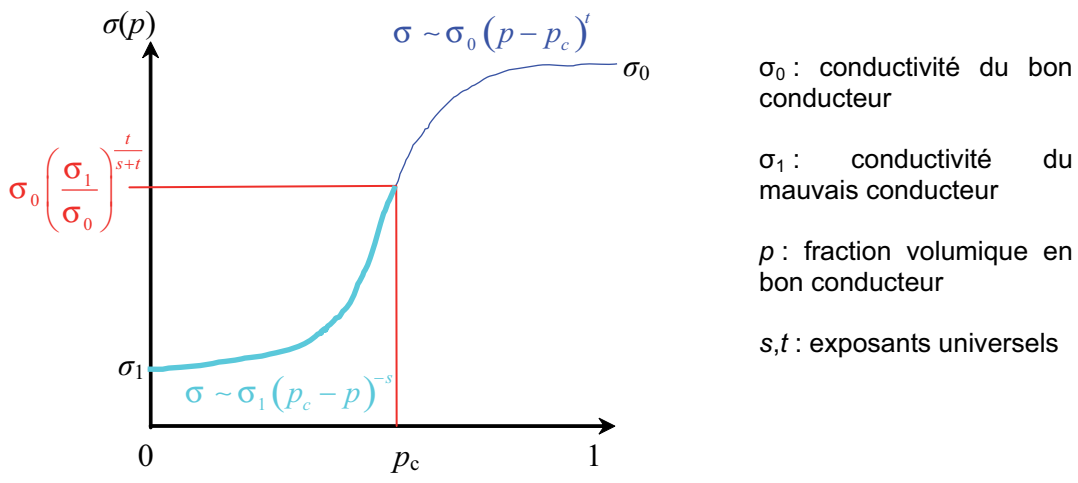


FIG. 4.36 – Variation de la conductivité en fonction de la fraction volumique p

Dans le cas réel, nous avons un mélange entre un bon conducteur et un mauvais conducteur. Pour $p < p_c$, la conductivité est non nulle. La conductivité est modélisée par la courbe tracée sur la figure 4.36. La théorie de la percolation est adaptée pour la mesure de la conductivité en continu. De nombreux paramètres comme la viscosité, la tension superficielle interviennent dans la détermination du seuil critique de percolation. Il est difficile de prédire théoriquement ce seuil.

4.5.6 Modèles de conduction

Pour mieux décrire la conductivité, des lois en fonction de la température, de la fréquence ou du champ électrique appliquée ont été mises en place. La conductivité σ d'un matériau est définie par la relation suivante :

$$\sigma = nq\mu \tag{4.31}$$

avec n la densité de porteur, q la charge et μ la mobilité de la charge. Dans le cas d'un métal, la conductivité est une fonction décroissante de la température (tableau 4.2). Par contre dans le cas d'un semi-conducteur intrinsèque, c'est une fonction croissante avec la température. La conductivité d'un semi-conducteur dopé dépend de la concentration en atomes donneurs ou accepteurs. Les polymères conducteurs ont des structures de bandes voisines de celles des semi-conducteurs. Ceci explique que des modèles théoriques, initialement développés pour les semi-conducteurs ou des alliages métalliques amorphes ont pu être appliqués aux polymères conducteurs. La conductivité des polymères conducteurs est influencée par la densité de por-

T : température
K_B : constante de Boltzmann
E_g : gap du semi-conducteur
E : énergie du porteur
E_F : énergie de Fermi
α : constante
N : densité de donneurs ou d'accepteurs
m^* : masse effective du porteur
τ : temps de relaxation

	densité de porteur n	mobilité μ
métal	10^{23} e$^-$/cm^3	$\sim T^{-n}$
semi-conducteur intrinsèque	$\sim e^{-\frac{E_g}{2k_BT}}$	$\left\lvert \frac{q\tau}{m^*} \right\rvert$
semi-conducteur extrinsèque	$\frac{N}{1+\alpha e^{\frac{\lvert E_F-E\rvert}{k_BT}}}$	$\left\lvert \frac{q\tau}{m^*} \right\rvert$

Tab. 4.2 – Evolution de la densité de porteurs de charge et de leur mobilité en fonction de la température dans les matériaux classiques

teurs de charge et leur mobilité. La conductivité est décrite par plusieurs modèles différents (tableau 4.3) selon que le transport de charge soit réalisé par saut (VRH), par effet tunnel (CELT, FIT). Tous les modèles précédemment cités peuvent être regroupés en une seule équation avec des paramètres ajustables :

$$\sigma\left(T\right) = \sigma_0 e^{-\left(\frac{T_1}{T+T_0}\right)^{\alpha}} \tag{4.32}$$

Modèles	Conductivité σ
Conduction métallique quasi-unidimensionnelle	$\sigma_0 e^{\frac{K}{T}}$
Variable Range Hopping	$e^{-AT^{-1/4}}$
Miller-Abrahams	$e^{-\frac{E_A}{kT}}$
Charging Energy Limited Tunneling	$\sigma_0 e^{-\frac{A}{T^a}}$
Fluctuation Induced Tunneling	$\sigma_0 e^{-\frac{T_1}{T+T_0}}$

Tab. 4.3 – Modèles de conductivité en fonction de la température dans les polymères conducteurs [13–18]

La conductivité des milieux désordonnés augmente avec la fréquence. Dans le cas DC, les électrons doivent traverser l'ensemble de l'échantillon par des sauts entre chaînes et aussi entre fibres. Par contre aux hautes fréquences, les sauts ne sont plus nécessaires. On peut s'attendre à une conductivité σ_{dc} constante jusqu'à un certain seuil de fréquence. Après ce

seuil, la conductivité croît comme une simple loi de puissance (figure 4.37) :

$$\sigma(\omega) = \sigma_{dc}\left[1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^s\right] \tag{4.33}$$

Lorsque la conductivité en continu est suffisamment forte, la variation de la conductivité en fréquence est très faible. Nous allons vérifier cette affirmation dans le paragraphe suivant par des mesures de conductivité statiques et à hautes fréquences.

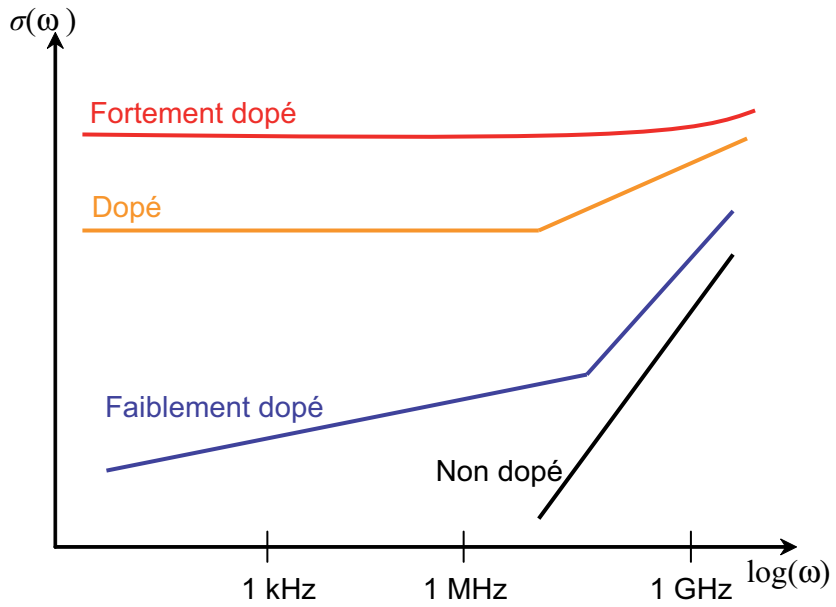


FIG. 4.37 – Conductivité d'un polymère conducteur en fonction de la fréquence [19]

4.6 Caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels en polymère conducteur

Les polymères conducteurs sont utilisés comme matériau en tant que tel ou dans une matrice pour des applications de compatibilité électromagnétique. Nous allons utiliser les polymères conducteurs comme motif dans les cristaux photoniques. Nous avons choisi la polyaniline comme polymère conducteur (figure 4.38). La polyaniline utilisée est une émeraldine base dopée chimiquement. Le process permet d'obtenir de forts niveaux de conductivité (quelques milliers de S/m). Elle est fournie par la société PANIPLAST dans deux solvants : l'acide dichloroacétique et l'acide formique.

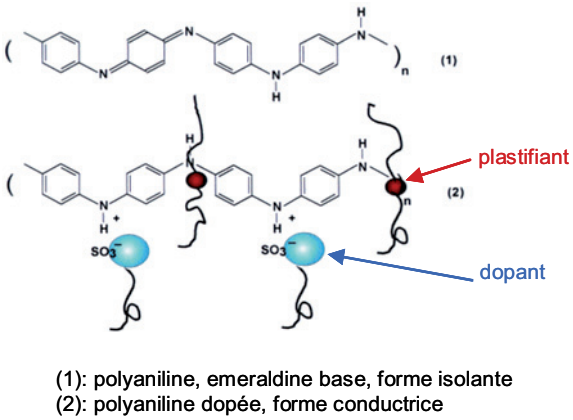


FIG. 4.38 – Molécule de polyaniline

Le dopant utilisé (DEHEPSA) apporte une fonction plastifiante qui conduit à de bonnes caractéristiques mécaniques de nos films. Selon les quantités des différents solvants utilisées et la viscosité recherchée, la conductivité peut varier d'un ordre de grandeur. La conductivité dépend aussi du process d'évaporation des solvants. Après séchage de la solution, nous obtenons un film mince d'épaisseur contrôlable. Elle peut être choisie sur une gamme de 20 μm à 150 μm.

4.6.1 Caractérisation du polymère conducteur

La mesure de la conductivité statique et dynamique du polymère conducteur nécessite des moyens spécifiques. Le choix de la méthode de caractérisation électrique dépend de l'épaisseur du film. Nous utilisons la méthode des quatre fils pour mesurer la conductivité statique (figure 4.39). Elle présente l'avantage d'éliminer les effets de bords, en prenant en compte dans la mesure, seulement la partie rectiligne des lignes de champ électrique. On mesure 1200±100 S/m de conductivité statique pour un échantillon de film de PAni.

On caractérise aussi le film en transmission sur l'ABmm sur une gamme de fréquence de 18 à 110 GHz. La mesure est faite en espace libre. L'utilisation de cornets corrugués assure la focalisation de l'onde sur l'échantillon. Le film de polymère est considéré comme un échantillon uniforme d'épaisseur d. Comme pour les mesures précédentes, on utilise une mesure à vide et une mesure sur une plaque métallique comme mesures de référence pour la transmission et la réflexion équation 4.8. Ces paramètres sont reliés aux paramètres S du chapitre 2 (référence

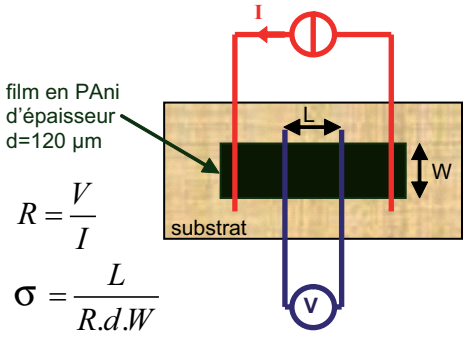


FIG. 4.39 – Mesure de la conductivité statique par la technique des quatre fils

de phase au niveau de la première interface) par les relations de normalisations suivantes :

$$\begin{aligned} r_{exp.} &= -r = S_{11}e^{-i\pi} \\ t_{exp.} &= t = S_{21}e^{-ik_0 d} \end{aligned} \tag{4.34}$$

En prenant en compte les multiples réflexions aux interfaces du film, la réflexion et la transmission théorique s'écrivent :

$$\begin{aligned} S_{11} &= \rho\frac{1-\tau^2}{1-\rho^2\tau^2} \\ S_{21} &= \tau\frac{1-\rho^2}{1-\rho^2\tau^2} \end{aligned} \tag{4.35}$$

ρ et τ sont les réflexion et transmission sans les multiples réflexions *i.e.* sans les résonances Fabry-Pérot. Ces grandeurs s'expriment de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1-n}{1+n} \\ \tau &= e^{ink_0 d} \end{aligned} \tag{4.36}$$

Dans notre cas, nous mesurons les paramètres S et nous cherchons la permittivité et la conductivité du film. Plusieurs méthodes existent pour obtenir les paramètres électriques du film. La première méthode, la méthode de Nicholson, Ross et Weir [20, 21], inverse analytiquement la réflexion et la transmission. Nous recherchons seulement la permittivité ou l'indice de réfraction, la perméabilité est égale à 1. Il existe deux schémas pour retrouver l'indice n. Le premier schéma consiste à retrouver la première réflexion avec les relations suivantes :

$$\begin{cases} \rho = K \pm \sqrt{K^2-1} \\ |\rho| < 1 \end{cases} \quad \text{avec } K = \frac{S_{11}^2 - S_{21}^2 + 1}{2S_{11}} \tag{4.37}$$

Puis nous en déduisons l'indice complexe :

$$n = \frac{1-\rho}{1+\rho} \tag{4.38}$$

Ce schéma est malheureusement très instable. Nous utilisons un second schéma, à partir de la transmission sans les multiples réflexions qui s'écrit de la manière suivante :

$$\tau = \frac{S_{11} + S_{21} - \rho}{1 - (S_{11} + t)\,\rho} \tag{4.39}$$

On en déduit l'indice complexe à partir de τ :

$$n = \frac{\log(\tau)}{ik_0 d} = \frac{1}{ik_0 d}\left[\ln|\tau| + i\left(\arg(\tau) + 2\pi N\right)\right] \text{ avec } N \text{ entier} \tag{4.40}$$

Ce schéma est stable mais la fonction logarithme complexe est multiforme. Nous devons déterminer l'entier N. Il existe plusieurs possibilités pour le déterminer. La plus simple consiste à faire l'hypothèse que la transmission de la couche est égale à τ en première approximation donc :

$$\arg(S_{21}) \cong \arg(\tau) = \Re e\{n\} k_0 d + 2\pi N \tag{4.41}$$

La relation précédente nous permet de déduire l'indice de réfraction réel en première approximation :

$$\Re e\{n\} \cong \frac{\Delta\left[\arg(S_{21})\right]}{\Delta\left[k_0\right] d} \tag{4.42}$$

Cela correspond à la pente de la phase de S_{21}. Des deux relations précédentes, on retrouve l'entier N. Cette démarche est correcte si l'entier N ne varie pas entre les deux points de fréquences pris pour calculer la pente. Au lieu d'utiliser cette technique analytique, on peut utiliser aussi des techniques numériques comme la méthode de Newton. Ces différentes méthodes sont utilisées pour homogénéiser des cristaux photoniques et des matériaux à indice négatif sous forme d'une couche uniforme avec un indice de réfraction effectif.

En utilisant ces méthodes, on trouve les paramètres électriques du polymères : σ=1200±200 S/m et ε'_r=200±100 (figure 4.40). Comme nous avons choisi une PAni fortement dopée, il n'y a pas de différences entre conductivité statique et conductivité à hautes fréquences.
Sur la figure 4.41, nous avons tracé l'évolution de la conductivité aux cours du séchage du film. Nous avons accès à ces données car la mesure sur le banc en espace libre est une mesure non destructive. On s'aperçoit d'une montée abrupte de la conductivité. On le comprend aisément grâce à la théorie de la percolation. Les différents pourcentages de la figure représentent la quantité d'acide formique par rapport à la quantité de solvant totale (acide formique + acide dichloroacétique). En choisissant une répartition spécifique ente les solvants, on peut ajuster la conductivité du polymère conducteur.

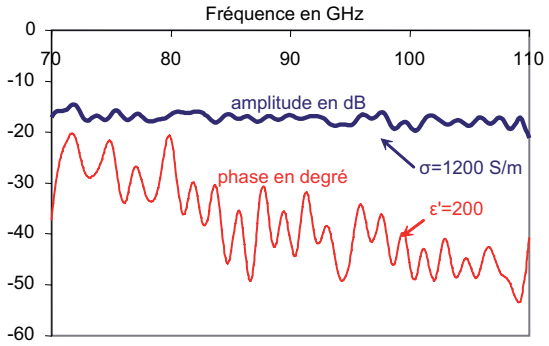


FIG. 4.40 – Mesure de la conductivité par l'ABmm

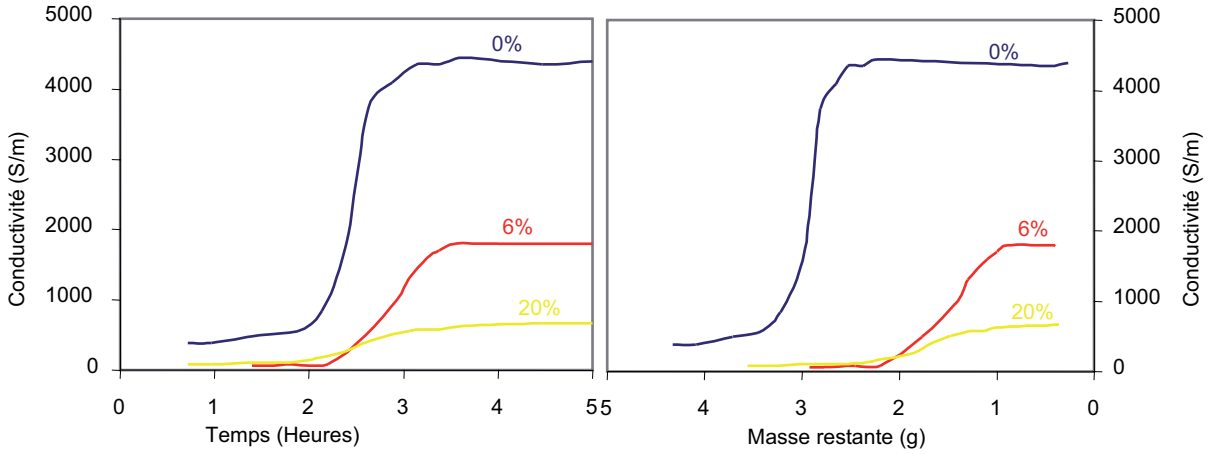


FIG. 4.41 – Evolution de la conductivité d'un film en polyaniline en fonction du temps d'évaporation des solvants et de la masse de polyaniline restante

Par la suite, nous utiliserons une solution de PAni qui produit des films de conductivité 1200 S/m. Les caractéristiques électriques du polymère ont permis de choisir la structure CPh adéquat.

4.6.2 Choix de la structure BIP

Le choix de la structure est déterminé par plusieurs critères imposés par le polymère. L'évaporation uniforme du solvant de la solution de PAni impose une structure lamellaire sous forme de patchs. Nous avons choisi un réseau tétragonal simple de pas 9 mm et un motif carré de coté 3 mm (figure 4.42). Un réseau tétragonal est un réseau cubique dont une des dimensions de la maille élémentaire est différente des deux autres. Nous avons réalisé un CPh de 640 patchs disposés en 10 couches selon l'axe de propagation.

En variant les épaisseurs des couches, nous obtenons différents réseaux tétragonaux. L'épais-

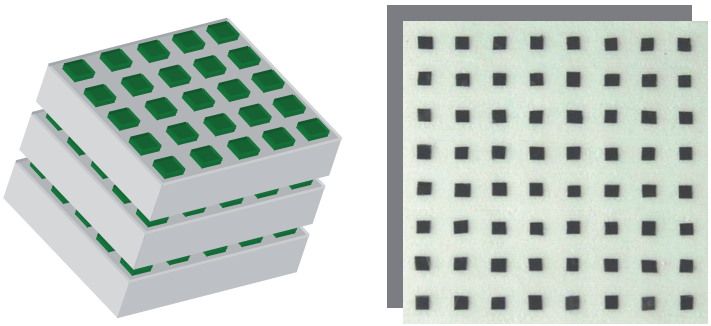


FIG. 4.42 – Schéma et photo de la structure choisie

seur des patchs doit être supérieure à la profondeur de pénétration de l'onde pour se rapprocher des patchs métalliques.

Pour une conductivité de 1200 S/m, cette épaisseur doit être supérieure à 100 μm (tableau 4.4). On obtient grâce à cette condition des bandes interdites profondes avec un faible nombre de couches. Des modélisations de ce cristal photonique permettront de mieux comprendre l'influence de la conductivité de la PAni.

Conductivité	δ
1200 S/m	78 μm
120 S/m	246 μm
50 S/m	380 μm

TAB. 4.4 – Profondeur de pénétration δ à 35 GHz

4.6.3 Modélisation de la structure

Nous modélisons la structure précédemment choisie sur 5 couches séparées par 3 mm. L'épaisseur des patchs est de 120μm. Nous avons utilisé la FDTD pour modéliser cette structure car le paramètre conductivité existe de façon intrinsèque et la géométrie de la structure se prête bien au maillage cubique. Nous avons étudié l'effet de la conductivité sur le cristal photonique choisi.

Selon la figure 4.43, les courbes de la transmission du CPh en polymère conducteur et du CPh métallique sont équivalentes à partir d'une conductivité de 1200 S/m. Ce niveau de seuil de la conductivité n'est pas étonnant ; il correspond à la profondeur de pénétration. Les

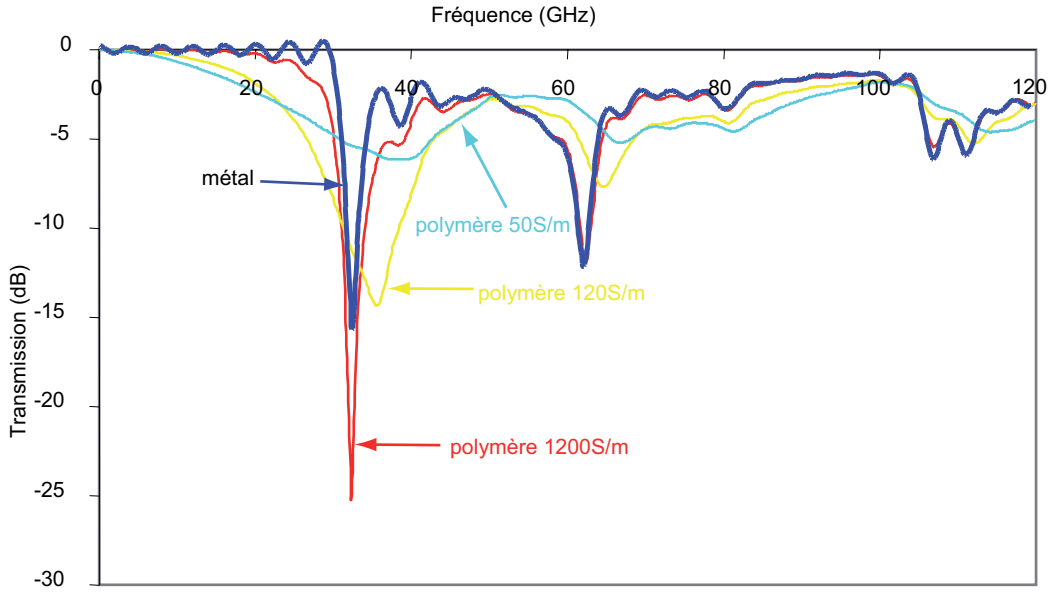


FIG. 4.43 – Modélisation FDTD des transmissions du CPh

seules différences entre la courbe du métal et la courbe du polymère-1200S/m apparaissent sur la première bande interdite. En diminuant la conductivité, les différences entre le CPh métallique et polymère atteignent progressivement la deuxième et la troisième bande interdite. Cela montre que la profondeur de pénétration joue un rôle important sur la transmission du CPh polymère. Ces simulations nous ont permis de choisir la conductivité et l'épaisseur des patchs polymère de nos structures expérimentales.

4.6.4 Etude des structures expérimentales

Après avoir construit notre CPh en polymère, nous avons mesuré la transmission de cette structure sur le banc de mesure millimétrique. Le polymère utilisé pour réaliser ces structures a une conductivité de 1200 S/m. Pour comparer ces structures avec leurs homologues métalliques, nous avons également construit des CPhs en remplaçant les patchs polymère par des patchs métalliques de mêmes dimensions.

Pour les trois structures présentées sur figure 4.44, les transmissions entre les CPhs métal et les CPhs polymères sont sensiblement égales. Les différences observées sont dues à la faible précision de fabrication. Ces courbes de transmission large bande nous permettent de conclure que les patchs polymère sont équivalents aux patchs métalliques. Ce résultat est la conséquence du choix de l'épaisseur des patchs polymère, supérieure à la profondeur de pénétration de l'onde dans le matériau. Une conductivité de 1200 S/m du polymère et une

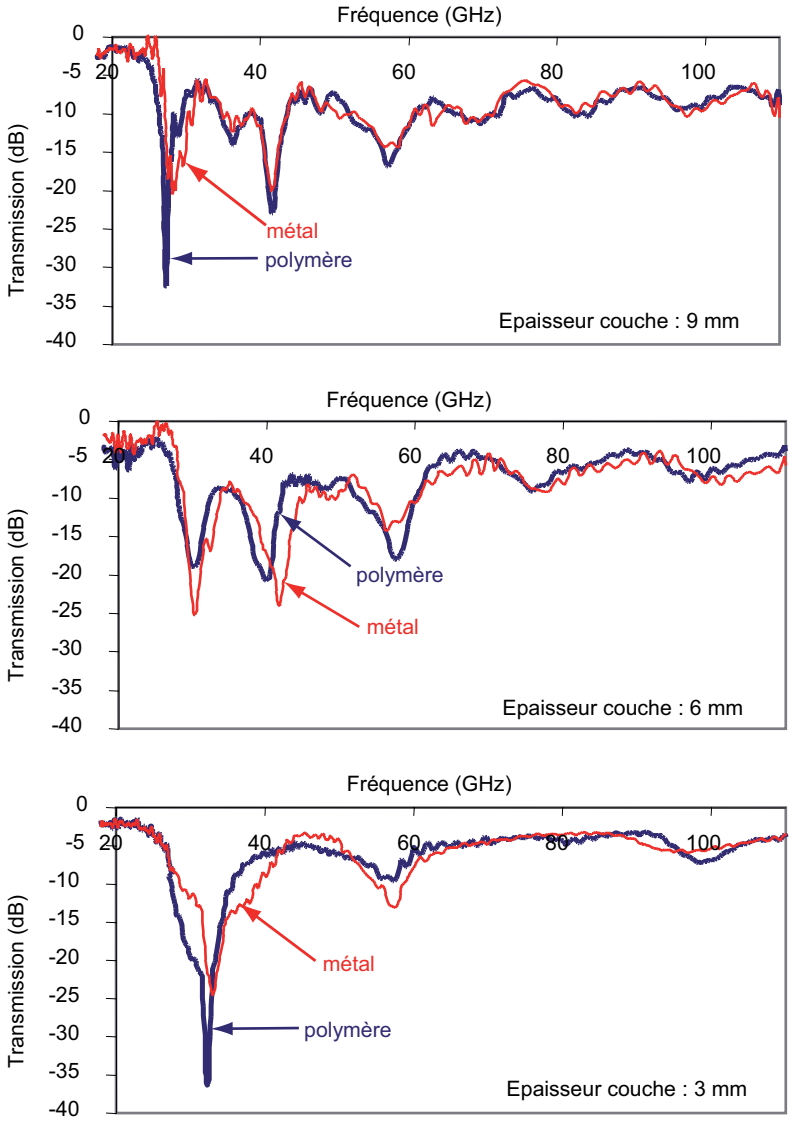


FIG. 4.44 – Comparaison des transmissions des CPhs 5 couches en polymère et en métal

épaisseur des patchs de 120 μm sont suffisantes pour obtenir un CPh métallique équivalent.

4.6.5 Influence du nombre de couches dans le CPh polymère

Nous avons étudié l'influence du nombre de couches sur la transmission du CPh polymère (figure 4.45). Par souci de clarté, seulement les CPhs 5 et 10 couches sont représentés. Les résultats de cette étude comparative diffèrent selon la nature du réseau.

Pour le réseau cubique simple, quand le nombre de couches augmente les gaps s'approfondissent mais malheureusement le niveau général de la transmission diminue beaucoup. En diminuant l'espace entre les couches, on obtient une structure tétragonale. Si le nombre de

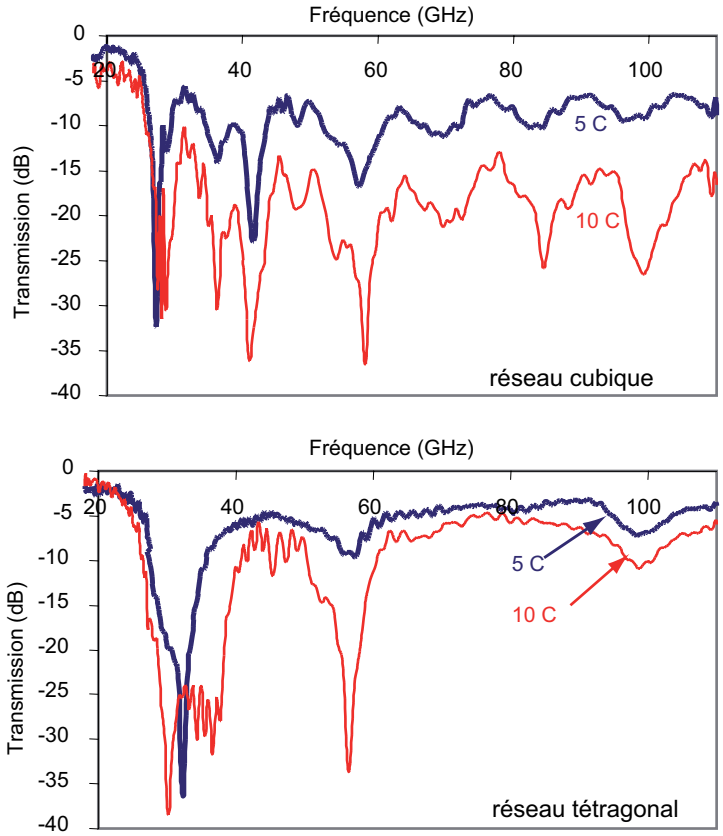


FIG. 4.45 – Comparaison des transmissions des CPhs 5 et 10 couches

couches augmente sur cette nouvelle structure, le gap s'élargit et s'approfondit beaucoup ; et il n'y a aucune atténuation du niveau de la transmission comme précédemment. De plus, la structure tétragonale est trois fois plus compacte que la structure cubique. Ces structures sont réalisées manuellement. Pour gagner en précision, on peut avoir recours à des techniques d'impression des polymères conducteurs.

4.6.6 Procédés d'impression du polymère conducteur

En raison des diverses propriétés chimiques et physiques que l'on peut rencontrer parmi les différents polymères, plusieurs techniques peuvent être utilisées dans la fabrication des couches minces de polymères, telles que la lithographie, de l'évaporation thermique, la tournette (spin coating), l'immersion, l'impression, l'autoassemblage couche par couche et la pulvérisation. La PAni utilisée dans notre cas a une conductivité élevée et une bonne flexibilité. Pour cette PAni particulière, le processus du dépôt doit être amélioré. De nombreuses techniques sont employées pour imprimer les polymères sur divers substrats tels que la sérigraphie [22],

l'impression par micro contact [23], l'impression par jet d'encre [24] et l'impression thermique par transfert [23].

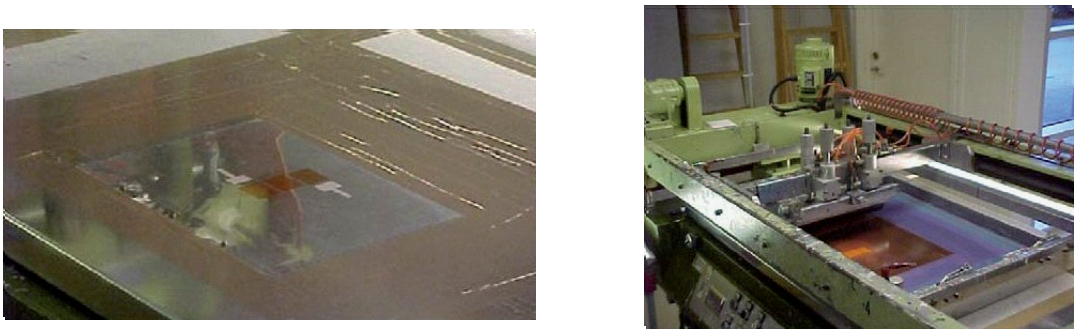


FIG. 4.46 – Impression par sérigraphie

L'écran de la technique de sérigraphie se compose de fils de soie, synthétique ou en acier (figure 4.46). Ces fils sont tissés ensemble, ils sont étirés et montés sur une armature. Les pores de la maille sont bloqués dans des secteurs où il n'y a pas d'images et ouverts là où l'image doit être transférée, à la manière d'un pochoir. Une raclette en caoutchouc ou en métal est employée pour passer l'encre à une vitesse et à une pression fixes au-dessus de l'écran, transférant de ce fait l'image sur un substrat tenu en place sous elle par un vide. La sérigraphie est adaptée pour toutes les épaisseurs de polymères déposés. La viscosité de la PAni doit être assez haute pour éviter les bavures mais pas trop pour ne pas bloquer les pores.

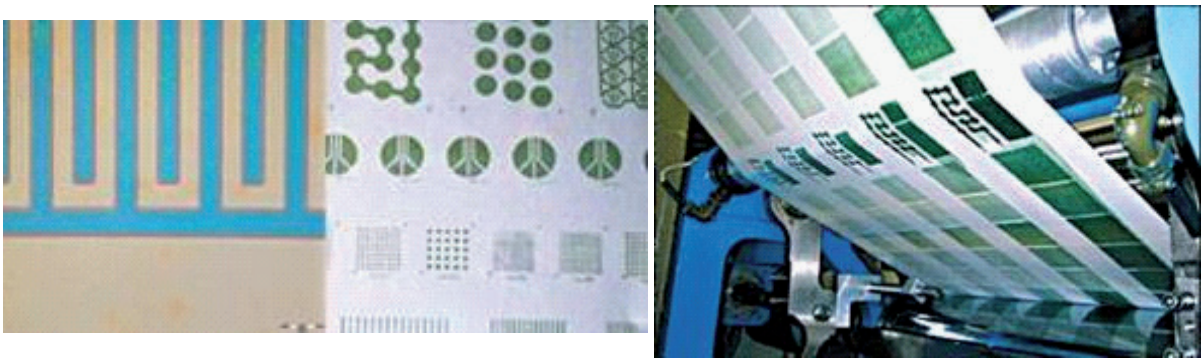


FIG. 4.47 – Impression par technique jet d'encre sur substrat papier (vitesse 100 m/min)

L'impression jet d'encre est complémentaire de la technique de sérigraphie (figure 4.47). La viscosité de l'encre est beaucoup plus faible pour cette technique. Les imprimantes jet d'encre peuvent fonctionner soit en mode continu soit en mode goutte sur demande. En mode continu, l'encre est pompée puis éjectée par une buse. Des gouttelettes de même tailles et uniformément

espacées sont obtenues en imposant une perturbation périodique produisant une tension de surface et donc un jet d'encre. L'impression de jet d'encre en mode continu est principalement employée pour des applications graphiques à grande vitesse. Le mode goutte sur demande est la méthode à choisir car les gouttes ont une taille plus petite, et le placement de celles-ci est plus précis. Une impulsion acoustique éjecte des gouttelettes d'encre d'un réservoir par une buse. L'impulsion peut être produite thermiquement ou piézoélectriquement.

En mode thermique, l'encre est chauffée localement pour former une bulle de vapeur qui éjecte une gouttelette d'encre. Ce mode est souvent employé lorsque le solvant est l'eau. Ce mode impose des restrictions dans le choix du polymère, bien que des encres thermiques non aqueuses soient disponibles.

L'impression à jet d'encre piézoélectrique se fonde sur la déformation d'un certain matériel piézoélectrique pour causer un changement de volume soudain et par conséquent pour produire une impulsion acoustique. En principe, cette technique est adaptée pour une grande variété de solvants. La partie la plus cruciale de la technologie d'impression jet d'encre est probablement l'encre et ses propriétés physiques, en particulier la viscosité et la tension superficielle. La viscosité doit être suffisamment basse. Quand trop d'énergie cinétique est absorbée par la viscosité, aucune gouttelette n'est éjectée. Les solutions de polymère doivent donc être suffisamment diluées.

Ces techniques peuvent paraître coûteuses et complexes. En fait il n'en est rien, puisque une simple imprimante jet d'encre peut suffire [25]. Il est préférable d'utiliser une imprimante à jet d'encre piézoélectrique (Epson) plutôt que thermique (Hewlett Packard) car la technique piézoélectrique est plus indépendante des propriétés physiques du polymère. La PAni doit être suffisamment fluide et dispersée.

4.7 Conclusions et applications

Selon les modélisations et les fabrications réalisées, nous avons prouvé qu'une conductivité de 1200 S/m du polymère avec des patchs de 120 μm est suffisante pour obtenir un CPh métallique équivalent. Nous pouvons étendre la démonstration aux surfaces sélectives en fréquence. Les structures réalisées peuvent être appliquées comme radôme d'une antenne pour augmenter sa directivité. On peut opter pour une technologie tout polymère antenne + radôme. Une antenne patch en polymère conducteur a déjà été réalisée avec des performances équivalentes à leurs homologues métalliques [26]. L'intérêt de l'utilisation du polymère se

situe au niveau de son coût de fabrication, son poids et sa compatibilité technologique. Les techniques d'impression des métaux peuvent être transposées aux niveaux des polymères conducteurs.

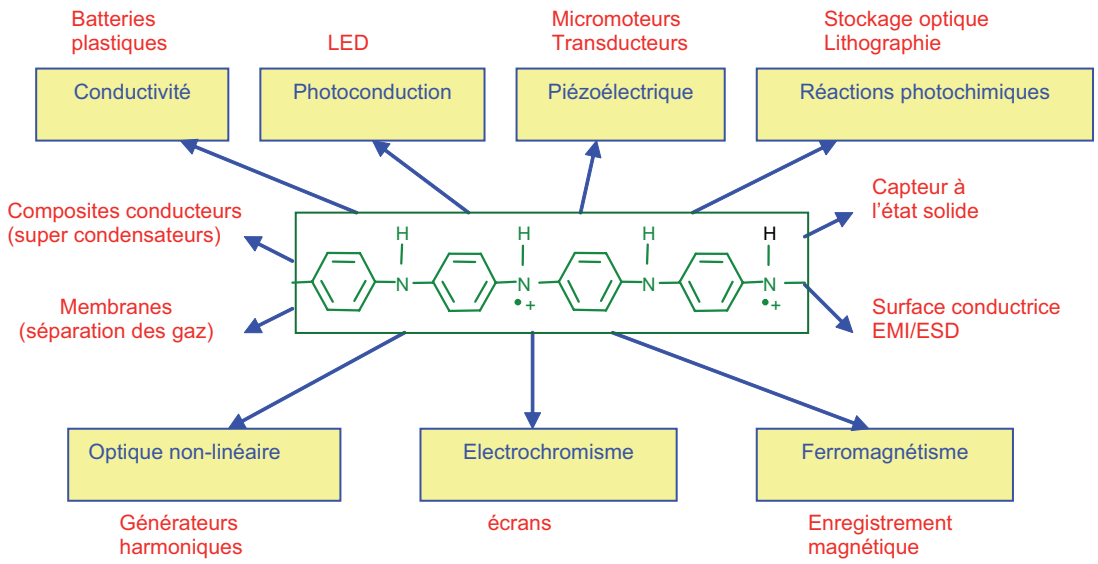


FIG. 4.48 – Applications réalisées ou envisagées de la polyaniline

Les applications des polymères conducteurs ne se limitent pas à ces applications. Le secteur des polymères conducteurs est un secteur en plein essor. La production mondiale de polymères conducteurs ne cesse d'augmenter. Ces dernières années de nouvelles applications ont vues le jour (figure 4.48). Les applications des polymères conducteurs peuvent être séparés en trois domaines :

- Les métaux organiques : Ils visent à remplacer les métaux. C'est cette propriété que nous avons utilisée pour élaborer nos CPhs. L'avantage des métaux organiques est leur poids relativement faible, leur coût de fabrication, leur mise en œuvre aisée et leur compatibilité technologique avec de nombreux substrats.
- Les semi-conducteurs organiques : Ils utilisent le caractère semi-conducteur des polymères conjugués pour réaliser des transistors FET et des LED. Ils visent à remplacer les écrans classiques par des écrans souples faibles coûts et à rendre les circuits électroniques souples.
- Les polymères électroactifs : ils utilisent les processus de dopage et dédopage dans le secteur du stockage de l'énergie. Leurs effets piezoélectrique, ferromagnétique et non linéaires permettent d'envisager des applications dans le domaine des capteurs et du

biomédical.

Grâce à des polymères conducteurs électroactifs, nous pouvons construire des CPhs accordables. En effet, la conductivité de la PAni dopée à l'argent a la propriété remarquable de varier avec la tension appliquée [27, 28]. Cette tension implique un dopage de la PAni et donc une augmentation de sa conductivité. La bande interdite du CPh pourrait alors être commandée simplement par une tension.

Références

[1] E. Chung, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1999). 180, 182, 184

[2] F. de Daran, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1994). 182

[3] M. Frigo and S. G. Johnson, *FFTW : An Adaptive Software Architecture for the FFT*, Proceedings of the International Conference on Acoustics Speech and Signal Processing **3**, 1381 (1998). 184

[4] W. M. Robertson and G. Arjavalingam, *Measurement of Photonic Band Structure in a two-Dimensional Periodic Dielectric Array*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2023 (1992). 197

[5] E. Özbay, E. Michel, G. Tuttle, R. Biswas, K. M. Ho, J. Bostak, and D. M. Bloom, *Terahertz spectroscopy of the three-dimensional photonic band-gap crystals*, Opt. Lett. **19**, 1155 (1994).

[6] W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. Joannopoulos, *Measurement of photon dispersion relation in a two-dimensional ordered dielectric arrays*, J. Opt. Soc. Am. B **10**, 322 (1993).

[7] E. Özbay, A. Abeyta, G. Tuttle, M. Tringides, R. Biswas, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, and K. M. Ho, *Measurement of a three-dimensional photonic band gap in a crystal structure made of dielectric rods*, Phys. Rev. B **50**, 1945 (1994). 197

[8] D. Maystre, *Electromagnetic study of photonic band gap*, Pure Appl. Opt. **3**, 975 (1994). 199

[9] C. K. Chiang, C. R. Fincher, Y. W. Park, A. J. Heeger, H. Shirakawa, E. J. Louis, S. C. Gua, and A. G. MacDiarmid, *Electrical Conductivity in Doped Polyacetylene*, Phys. Rev. Lett. **39**, 1098 (1977). 202

[10] S. Stafström, J. L. Brédas, A. J. Epstein, H. S. Woo, D. B. Tanner, W. S. Huang, and A. G. MacDiarmid, *Polaron lattice in highly conducting polyaniline : Theoretical and optical studies*, Phys. Rev. Lett. **59**, 1464 (1987). 208

[11] J. C. Chiang and A. G. MacDiarmid, *'Polyaniline' : Protonic acid doping of the emeraldine form to the metallic regime*, Synth. Met. **13**, 193 (1986). 209

[12] T. Olinga, A. Pron, and J. P. Travers, *8ème Journées Polymères Conducteurs, Aussois, France*, (1999). 210

[13] T. Colin, thèse de l'Université de Bordeaux 1 (1997). 214, 253

[14] Y. Cheguettine, thèse de l'Université Joseph Fourier-Grenoble 1 .

[15] S. Kivelson and A. J. Heeger, *Intrinsic conductivity of conducting polymers*, Synth. Met. **22**, 371 (1988).

[16] P. Sheng, B. Abeles, and Y. Arie, *Hopping Conductivity in Granular Metals*, Phys. Rev. Lett. **31**, 44 (1973).

[17] P. Sheng, *Fluctuation-induced tunneling conduction in disordered materials*, Phys. Rev. B **21**, 2180 (1980).

[18] P. Sheng and J. Klafter, *Hopping conductivity in granular disordered systems*, Phys. Rev. B **27**, 2583 (1983). 214, 253

[19] J. P. Parneix, *Propriétés électriques des polymères et applications*, GFP **9**, 365 (1994). 215, 251

[20] A. M. Nicholson and G. F. Ross, *Measurement of the intrinsic properties of materials by the time domain techniques*, IEEE Trans. Instrum. Meas. **MI-19**, 377 (1970). 217

[21] W. B. Weir, *Automatic measurement of complex dielectric constant and permeability at microwave frequencies*, Proc. IEEE **62**, 33 (1974). 217

[22] F. C. Krebsa, J. Alstrupa, H. Spanggaarda, K. Larsenb, and E. Koldb, *Production of large-area polymer solar cells by industrial silk screen printing lifetime considerations and lamination with polyethyleneterephthalate*, J. Sol. Mat. , 293 (2004). 223

[23] G. Blanchet and J. Rogers, *Printing Techniques for Plastic Electronics*, Journal of Imaging Science and Technology **47**, 296 (2003). 224

[24] B.-J. de Gans, P. C. Duineveld, and U. S. Schubert, *Inkjet Printing of Polymers : State of the Art and Future Developments*, Adv.Mater. , 203 (2004). 224

[25] B. Chen, T. Cui, Y. Liu, and K. Varahramyan, *All-polymer RC filter circuits fabricated with inkjet printing technology*, Solid-state electronics **47**, 841 (2003). 225

[26] H. Rmili, J. L. Miane, H. Zangar, and T. Olinga, *Simulation of a single-feed high conducting polymer patch antenna*, MMS 2004, Marseille (2004). 225

[27] A. Barnes, A. Despotakis, P. V. Wright, T. C. P. Wong, B. Chambers, and A. P. Anderson, *Control of conductivity at microwave frequencies in a poly(aniline hydrochloride)-silver-polymer electrolyte composite material*, Electron. Lett. **32**, 358 (1996). 227

[28] P. V. Wright, B. Chambers, A. Barnes, K. Barnes, K. Lees, and A. Despotakis, *Progress in smart microwave materials and structures*, J. Smart. Mater. Struc. **9**, 273 (2000). 227

Conclusion générale

Cette recherche avait pour objectifs la modélisation, la réalisation et la caractérisation de cristaux photoniques tridimensionnels. Dans un premier temps, nous avons effectué une comparaison la plus complète possible entre les méthodes d'étude des cristaux photoniques. Elles ont été exploitées tout au long du manuscrit dès le premier chapitre. Pour ce faire, nous avons utilisé :

- pour moitié des codes commerciaux ou libres dont certains ont été adaptés spécialement pour les cristaux photoniques,
- et pour moitié des codes que nous avons développés.

Par analogie entre les approches issues de différents domaines de la physique, nous avons pu appliquer de nouvelles méthodes. Ces dernières peuvent être classées en plusieurs catégories en fonction de la forme et du traitement des équations de Maxwell :

- choix entre les équations temporelles ou fréquentielles,
- discrétisation des équations aux dérivées partielles ou développement sur une base de fonctions solution des équations aux dérivées partielles.

L'ensemble des méthodes vérifie la règle suivante : lorsque la taille de l'objet augmente devant la longueur d'onde d'étude, la complexité des calculs augmente exponentiellement.

Après voir fait cette comparaison à grande échelle, le constat était clair : aucune méthode ne permettait d'étudier les défauts dans les cristaux photoniques de manière satisfaisante. Les deux méthodes les plus courantes consistaient soit à répéter périodiquement le défaut (méthode de la supercellule), soit à le considérer comme une perturbation. Mais aucune d'entre elles ne permet d'étudier des variations aléatoires appliquées aux paramètres d'un cristal photonique fini (position ou taille des objets par exemple). La multidiffusion qui étudie des réseaux finis avec un motif sphérique, vient combler ce manque. Le formalisme utilisé permet d'exporter le code sans aucune modification sur un supercalculateur. Cette méthode a été optimisée en temps de calcul et en occupation mémoire pour permettre la prise en compte

d'un maximum de sphères. Elle calcule le champ diffracté sous forme d'un développement multipolaire. Après avoir résolu tous les problèmes mathématiques et algorithmiques du code concernant la convergence des séries de fonctions et l'optimisation en temps de calcul et en mémoire, un nouveau problème d'ordre physique est posé : le calcul de la transmission à travers une structure finie. En effet, la définition de cette transmission n'est pas unique. Ainsi, plus la surface du cristal photonique orthogonale à la propagation est grande, meilleur sera le calcul de la transmission. La surface de calcul du flux d'énergie doit être bien dimensionnée et bien positionnée pour éviter une trop grande dépendance de la transmission par rapport à sa propre définition. De cette façon, la définition de la transmission du cristal photonique fini se rapproche de celle du cristal photonique infini. Des comparaisons avec les méthodes précédemment cités ont permis de valider notre nouvelle méthode. De plus, la théorie de la multidiffusion permet d'établir le comportement de chaque bande interdite. Elle nous permet de trancher entre un comportement de réflecteur de Bragg et un comportement de réseau diffractant.

Grâce à la multidiffusion, nous avons pu étudier une série de défauts qui jusqu'ici n'étaient pas accessible par d'autres méthodes. Les premiers d'entre eux sont les variations aléatoires de la position et du rayon des sphères. La variation sur la position des sphères agit progressivement sur la bande interdite de Bragg, alors qu'elle n'agit quasiment pas sur la deuxième bande interdite. La première bande interdite remonte progressivement lorsque la variation augmente. Dans le cas des variations aléatoires du rayon des sphères, les conséquences sur les bandes interdites sont beaucoup plus tranchées. En dessous de 10% de variations, la variation a une très faible influence sur le cristal photonique, au-delà le comportement de bande interdite n'existe plus. Pour des variations aléatoires inférieures à 10% et préservant les paramètres moyens du réseau initial, les caractéristiques physiques du cristal photonique demeurent les mêmes. A volume constant, la forme du motif n'a pas d'influence sur la position de la bande interdite. Un second type de défaut étudié a été le décalage des couches. Pour des décalages de pas entier, la remontée des bandes interdites est progressive. Par contre, pour des décalages d'un demi pas selon l'axe de propagation, la première bande interdite remonte fortement. Le cristal photonique est beaucoup plus désorganisé ici que pour les décalages précédents. Le cristal photonique a une sensibilité accrue aux décalages selon l'axe de propagation du fait de la nature même des bandes interdites.

Pour l'instant le code de multidiffusion est limité à des motifs sphériques. La méthode est généralisable à n'importe quel motif à l'aide de la matrice T. Dans un futur proche, cette matrice sera implémentée dans notre code. Une étude de défauts dans les structures diamant et les opales sera prochainement réalisée. Mais pour cela, le code doit être encore optimisé en temps de calcul et en espace mémoire.

La mise en place d'outils de modélisation des cristaux photoniques, nous a permis de réaliser des cristaux photoniques en polymères conducteurs. Notre polymère conducteur impose une structure lamellaire sous forme de patchs, ce qui constitue plutôt un avantage. Nous avons vérifié par une comparaison avec son homologue métallique et aussi par des modélisations que les défauts dans les patchs polymères avaient une très faible influence sur la bande interdite. Ce résultat rejoint ceux de la multidiffusion. A partir d'une conductivité de 1200 S/m et pour des épaisseurs de patchs de 120 μm, le cristal photonique en polymère conducteur est équivalent à son homologue métallique. Il suffit pour cela que l'épaisseur des patchs soit supérieure à la profondeur de pénétration de l'onde. Des techniques bas coût de sérigraphie ou d'impression jet d'encre peuvent être envisagées pour réaliser plus précisément ces structures. Les structures que nous avons réalisées peuvent être implantées comme râdome d'une antenne patch. L'ensemble du dispositif serait en polymère conducteur. Nos structures sont intéressantes aussi pour la compatibilité électromagnétique du fait de la large et profonde bande interdite obtenue avec un faible nombre de couches. Le nombre de couches et la masse volumique du polymère conducteur permettent de réaliser des structures à bandes interdites photoniques extrêmement légères. On combine ainsi le faible nombre de couches des cristaux photoniques métalliques et la légèreté des motifs diélectriques. La forme du motif en patch contribue aussi à la légèreté du dispositif. Grâce à la combinaison de ces trois paramètres, les structures que nous avons réalisées sont les structures tridimensionnelles les plus légères du marché.

Si on remplace le polymère conducteur que nous utilisons par un polymère électroactif, nous pourrons modifier sa conductivité par une commande en tension. Nous obtiendrons des structures accordables en fréquence. Le domaine des micro-ondes est en attente très forte de telles structures.

Publications et communications scientifiques

Revues internationales

A three dimensional planar photonic crystal using conducting polymers
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
Microwave Opt. Tech. Letters, Mars 2005, pp 460-463

Un article a été soumis et deux articles relatifs aux différentes communications ci-dessous sont en cours d'écriture.

Communications internationales avec comité de lecture et actes

EBG structures using conducting polymers : a step to tunability
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
27th Antennas Technology Workshop on Innovative Periodic Antennas, Mars 2004, Santiago de Compostela, poster

Simulation of random variations and localized defects in cubic 3D Photonic Band Gap Structures
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
LATSIS Symposium, Mars 2005, Lausanne, poster

Localized defects and random variations in 3D-PBG
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix

ANTEM, Juin 2005, St Malo, oral

Analytical Modeling of Defects in 3D-PBG
L. Oyhenart, V. Vignéras, J. P. Parneix
35 th European Microwave Conf., Octobre 2005, Paris, oral

Numerical study of defects in cubic 3D Photonic Band Gap Structures
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
Assemblée Générale de l'URSI, Octobre 2005, New-Delhi, poster

Modeling and visualization of the scattered field by a collection of scatterers
L. Oyhenart, V. Vignéras
Mediterranean Microwave Symposium, Septembre 2006, Gênes, oral

Communications nationales avec comité de lecture et actes

Etude paramétrique numérique et expérimentale de structures BIP tri-dimensionnelles : préliminaire à la réalisation de BIP en polymère conducteur
V.Vignéras, **L. Oyhenart**, F. Demontoux, J.P. Parneix
JFMM & TELECOM 2003, Octobre 2003, Marrakech, oral

Les cristaux photoniques 3D à base de polymère conducteur
L. Oyhenart, T. Olinga, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
8ème Journées de Caractérisation Microondes et Matériaux, Avril 2004, La Rochelle, oral

Modélisation par multidiffusion de défauts dans les cristaux photoniques 3D
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
8ème Journées de Caractérisation Microondes et Matériaux, Avril 2004, La Rochelle, poster

Etude de l'évolution de la conductivité microonde de la polyaniline au cours de la formation d'un film
H. Rmili, **L. Oyhenart**, J-L Miane, V. Vignéras, T. Olinga, H. Zangar, J-P Parneix
8ème Journées de Caractérisation Microondes et Matériaux, Avril 2004, La Rochelle, poster

La méthode de la matrice de diffraction appliquée aux cristaux photoniques 3D
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
14èmes Journées Nationales Microondes, Mai 2005, Nantes, oral

Détermination du seuil de conductivité d'un polymère conducteur pour la réalisation d'un BIP métallique
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
14èmes Journées Nationales Microondes, Mai 2005, Nantes, poster

Mesure de la conductivité micro-onde de la polyaniline au cours de la fabrication d'un film.
H. Rmili, **L. Oyhenart**, J.L. Miane, V. Vignéras, T. Olinga, J. P. Parneix
11èmes JPC, 12-16 septembre 2005, Batz-sur-Mer, poster

Dispositifs accordables à base de matériaux ferroélectriques
L. Oyhenart, V. Vignéras, J.L. Miane
9ème Journées de Caractérisation Microondes et Matériaux, Mars 2006, Saint-Étienne,oral

Autres Communications

Etude paramétrique de matériaux à bande interdite photonique tri-dimensionnels Application à la réalisation de BIPs actifs à partir de matériaux accordables
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
Journées du GDR Ondes, Groupe Thématique 2 " Matériaux complexes ", Juin 2003, Orsay, oral

Propagation des ondes électromagnétiques dans les milieux hétérogènes : applications aux BIPs et aux métamatériaux
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix
Journées Interférences d'Ondes, Décembre 2003, Marseille, poster

Cristaux photoniques en polymère conducteur, une voie vers l'agilité en fréquence
L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix

Journées Interférences d'Ondes, Décembre 2003, Marseille, poster

Les cristaux photoniques 3D à base de polymère conducteur

L. Oyhenart, V. Vignéras, F. Demontoux, J. P. Parneix

Journées Métamatériaux, Décembre 2004, Villeneuve d'Ascq, poster

Simulation des effets de variations aléatoires de défauts dans des cristaux photoniques 3D

F. Demontoux, **L. Oyhenart**, V. Vigneras, J.P. Parneix

Colloque scientifique Modélisation Microscopique et Mésoscopique en Physique, dans l'Environnement et en Chimie, Avril 2005, Talence, poster

Abréviations

AANR All Angles Negative Refraction

ABC Absorbing Boundary Conditions

BC Bande de Conduction

BV Bande de Valence

BIP Bande Interdite Photonique

CPh Cristal Photonique

EDP équation aux dérivées partielles

EFS Equifrequency Surface

FDFD Finite Difference Frequency Domain

FDTD Finite Difference Time Domain

FSS Frequency selective surface

FEM Finite Element Method

MoM Moment Method

MST Multiple-Scattering Theory

FIT Finite Integration Method

PBG Photonic Band Gap

PAni Polyaniline

PC Photonic Crystal

PCI Polymère Conducteur Intrinsèque

PML Perfect Matched Layer

PWM Plane Wave Method

SEW Surface Electromagnetic Wave

SPP Surface Plasmon-Polariton

TB Tight Binding

TIR Total Internal Reflection

TLM Transmission Line Matrix

TMM Transfert Matrix Method

UCPBG Ultra Compact Photonic Band Gap

Constantes et variables

$\hbar$ constante de Plank valeur : $6.5822.10^{-16}$ eV.s

c célérité de la lumière dans le vide valeur : $2{,}99792.10^{8}$ m.s^{-1}

ε_0 permittivité électrique du vide valeur : $8{,}85418.10^{-12}$ F.m^{-1}

μ_0 perméabilité magnétique du vide valeur : $4\pi.10^{-7}$H.m^{-1}

ε permittivité électrique d'un matériau

$\varepsilon_r = \varepsilon_r' + i\varepsilon_r''$ permittivité relative d'un matériau

μ perméabilité magnétique d'un matériau

μ_r perméabilité relative d'un matériau

σ conductivité d'un matériau

$n = c\sqrt{\varepsilon\mu} = n' + in''$ indice de réfraction d'un matériau

si $\mu_r = 1$, $\varepsilon_r' = n'^2 - n''^2$ et $\varepsilon_r'' = 2n'n''$

f fréquence d'étude

ν fréquence d'étude

$\lambda = c/f$ longueur d'onde d'étude

$\omega = 2\pi f$ pulsation d'étude

k vecteur d'onde

$k_0 = \omega/c$ nombre d'onde dans le vide

$k_1 = n\omega/c$ nombre d'onde dans un matériau

K vecteur d'onde de Bloch

$v_\phi = c/n = \omega/k$ vitesse de phase

$v_g = \partial_k\omega = v_\phi + k\partial_k v_\phi$ vitesse de groupe

E champ électrique

D déplacement électrique

P polarisation volumique

ρ densité de charge libre

H champ magnétique

B induction magnétique

M aimantation volumique

J densité de courant libre

a pas du réseau

r rayon des sphères et des cylindres

β facteur de remplissage d'une structure

Table des figures

1 Les reflets bleus des ailes du papillon Morpho d'Amazonie sont dus à un matériau photonique . . . iii

1.1 Cristaux photoniques à une, deux et trois dimensions . . . 2

1.2 Photographies d'opales à différentes échelles . . . 3

1.3 Nombre de publications par an sur les cristaux photoniques . . . 4

1.4 Eclairement d'un CPh . . . 4

1.5 Plaque diélectrique infinie selon les directions x et y . . . 11

1.6 Diagramme de dispersion d'une plaque . . . 12

1.7 Les différents modes guidés dans une plaque . . . 13

1.8 Interférences de différents faisceaux dans un miroir de Bragg à 2 et 3 couches 14

1.9 Analogies du diagramme de bande électronique et du diagramme de dispersion d'un cristal photonique . . . 14

1.10 Création du schéma de zone réduite . . . 15

1.11 Influence de la différence de permittivité dans le gap . . . 16

1.12 Résolution de l'équation transcendantale . . . 17

1.13 Champ électrique et énergie locale du CPh 1D . . . 18

1.14 Courbe de transmission (module et phase) du CPh précédent . . . 19

1.15 Variation de la permittivité de la couche diélectrique du CPh 1D . . . 19

1.16 Transmission du Fabry-Pérot et visualisation du champ électrique à $af/c = 0.292685$ . . . 20

1.17 Fréquences du défaut . . . 21

1.18 Diagramme de bande d'un CPh 1D moins une couche diélectrique . . . 22

1.19 Etude d'un CPh ayant une couche diélectrique supplémentaire et visualisation du champ électrique au niveau du défaut . . . 23

1.20 Etude d'un CPh dont une couche d'air est remplacée par une couche diélectrique 24
1.21 CPh 1D fini, état de surface 25
1.22 Procédés utilisé pour la réflexion externe omnidirectionnelle 26
1.23 Transmission d'un miroir de Bragg d'indice $n_1 = 1.7$ et $n_2 = 3.4$ 26
1.24 Structure de bande du miroir de Bragg d'indice $n_1 = 1.7$ et $n_2 = 3.4$ 27
1.25 Contours de la réflexion omnidirectionnelle en $\Delta\omega$ 28
1.26 Procédés utilisé pour la réflexion interne omnidirectionnelle 28
1.27 Dispositif réel [17] 29
1.28 CPh 2D 29
1.29 CPh 2D carré inverse de permittivité 13 et de rayon normalisé 0.45 30
1.30 CPh 2D triangulaire inverse de permittivité 13 et de rayon normalisé 0.45 . . 31
1.31 Diagramme de dispersion d'un CPh avec un défaut 0D 32
1.32 Diode Laser et fibre optique [23, 24] 32
1.33 Diagramme de dispersion d'un CPh avec un défaut 1D 33
1.34 Exemples de réalisations de défauts 1D à partir de CPh 2D 33
1.35 Exemple de CPh 2.5D 34
1.36 Diagramme de dispersion de deux CPh 2.5D [MIT] 36
1.37 Photographie de la Yablonovite 38
1.38 Bande interdite complète dans une structure CFC 39
1.39 Structure tas de bois 39
1.40 Diverses structures à bande interdite complète 39
1.41 Défaut localisé dans la Yablonovite [41] 40
1.42 Transmission des défauts localisés [41] 41
1.43 Spectre de dissipation de la puissance d'une interface diélectrique/métal [43] . 42
1.44 Comparaison des transmissions d'un CPh diélectrique et d'un CPh métal de mêmes rayons des cylindres $r = 1/6a$ 43
1.45 Ligne de transmission sans pertes 44
1.46 Étude par des matrices transferts d'une ligne de transmission sans pertes chargée périodiquement par une admittance en parallèle 44
1.47 Vue en coupe et vue de dessus d'une surface haute impédance 46
1.48 Exemples d'associations d'antennes patch et dipôles à un matériau CPh . . . 46
1.49 Guide d'onde quasi-TEM 47

1.50 Comportement d'une ligne classique et d'une ligne inversée 48
1.51 Schémas d'une ligne de transmission sans pertes chargée périodiquement par une inductance en parallèle et une capacité en série 49
1.52 Photo de la ligne microstrip inversée 49
1.53 Photo du plan composé de lignes de transmission inversées 50
1.54 Schéma d'un métamatériau 51
1.55 Photo d'un métamatériau 51
1.56 Diagramme de bande sur la première zone de Brillouin et Diagramme de bande 3D d'un CPh diélectrique 2D 52
1.57 Contours équifréquences du CPh diélectrique 2D 53
1.58 Quatre cas de rayons réfractés par des CPhs [58] 54
1.59 Rayons réfractés construit à partir de l'EFS [59] (les flèches fines et épaisses sont les vitesses de phase et de groupe respectivement) 54
1.60 Ultraréfraction, réfraction négative et super lentille, simulation et expérience [60–62] 55
1.61 Visualisation de la fonction de Green dans un cristal photonique 1D composé de couches de métamatériaux [64] 56

2.1 Résolution des équations de Maxwell 65
2.2 Choix de la forme des équations à résoudre et étapes de résolution du problème 69
2.3 Réduction du domaine de calcul par différentes techniques 70
2.4 Décomposition en onde progressive et rétrograde 72
2.5 Coefficient de réflexion et de transmission 73
2.6 Indice de réfraction du CPh 1D 74
2.7 Défaut dans un CPh 1D 78
2.8 Maillage triangulaire adaptatif 79
2.9 Fonctions d'interpolation linéaire et quadratique 81
2.10 Les différentes étapes de la méthode des éléments finis 81
2.11 Modélisation d'un CPh par des conditions périodiques 83
2.12 Transmission du CPh composé de 5 couches de sphères infiniment conductrices de rayon $r = 0.2a$ 84
2.13 Modélisation d'un CPh par des plans E et H 85
2.14 CPh métallique 5 couches de sphères $r = 0.2a$ 85

2.15 Maillage et visualisation de la solution du CPh en X 87
2.16 Diagramme de bande du CPh cubique 87
2.17 Cellule de Yee et position des champs 89
2.18 Variation de la vitesse de phase numérique (FDTD 2D) 90
2.19 Formulation TF/SF 91
2.20 Architecture du code FDTD sur supercalculateur et PC 92
2.21 Source, sonde et conditions aux limites pour les CPhs infinis 93
2.22 Intensité et déphasage du CPh métallique 93
2.23 Modélisation en incidence oblique 94
2.24 Application des conditions de Bloch 95
2.25 Type de structure utilisée pour le diagramme de bande 95
2.26 Amplitude du CPh diélectrique au point R de la zone de Brillouin 96
2.27 Placement dans le maillage des composantes de tensions et de flux 97
2.28 Différents maillages et approximations 98
2.29 CPh métallique 5 couches de sphères $r = 0.2a$ 99
2.30 Structure de bande du CPh diélectrique 101
2.31 Développement sur une base d'onde plane 103
2.32 les différentes étapes de calcul de la réflexion/transmission 103
2.33 Transmission du CPh diélectrique 104
2.34 Définition des vecteurs de l'équation centrale 107
2.35 Transformation de la maille 109
2.36 Diagramme de bande du CPh diélectrique précédent 110
2.37 transmission d'un CPh 2D triangulaire avec un défaut 112
2.38 Visualisation du champ électrique au niveau de la fréquence de défaut 113

3.1 Photographie à la même échelle du développement multipolaire de l'onde plane pour 2 fréquences différentes 128
3.2 Photographie à la même échelle du champ incident et du champ diffracté correspondant 130
3.3 Critère de Wiscombe [38] 130
3.4 Photographie du champ diffracté en valeur absolu selon deux directions perpendiculaire et du diagramme de rayonnement de ce champ 131
3.5 Photographie du champ total 131

3.6 Diagramme de la méthode de multidiffusion 132
3.7 Découpage du domaine de calcul 134
3.8 Boucle fermée représentant le calcul du champ incident et du champ diffracté 136
3.9 Diagramme de bande du CPh diélectrique calculé à partir de la multidiffusion 137
3.10 Diagramme des différentes étapes du code 138
3.11 Procédé de calcul des coefficients de translations 140
3.12 Comparaison des simulations avec deux algorithmes différents 141
3.13 Comparaison du nombre d'itérations nécessaires pour chacune des méthodes pour une structure de 5 sphères 142
3.14 Comparaison des temps de calcul des différentes méthodes pour une structure de 5 sphères 143
3.15 Architecture du code MST 145
3.16 définition du plan de diffraction 147
3.17 Comparaison de la matrice de diffraction obtenu par MST et FEM 149
3.18 Comparaison de l'intensité de diffraction expérimentale et théorique d'un agrégat de 25 sphères 150
3.19 choix de la surface pour le calcul du flux d'énergie 151
3.20 Calcul de R,T et des sections efficaces de diffusion d'une structure de 3 couches de sphères diélectriques 152
3.21 Champ électrique total de la structure précédente à $af/c = 0.79$ 153
3.22 Etude d'une FSS et visualisation de l'amplitude complexe du champ total E . 154
3.23 Comparaison de 3 méthodes pour l'étude d'une FSS 154
3.24 Influence de la taille de la FSS 155
3.25 Grandeurs caractéristiques du CPh métallique et champ électrique total à af/c = 0.5 (même échelle que la figure 3.22) 156
3.26 Comparaison de la transmission du CPh métallique par 3 méthodes différentes 157
3.27 Influence du nombre de couches dans un CPh métallique 157
3.28 Section efficace de diffusion du CPh métallique 5 couches 158
3.29 Structure du CPh diélectrique et champ diffracté réel du CPh de gauche à $af/c = 0.3$ 159
3.30 comparaison de la transmission CPh diélectrique par 3 méthodes différentes . 160
3.31 Influence du nombre de couches dans un CPh diélectrique 161

3.32 Variation arbitraire de la position des couches : Couches perpendiculaires à la polarisation . . . 162
3.33 Variation arbitraire de la position des couches : Couches perpendiculaires à la propagation . . . 162
3.34 suppression de deux couches dans le CPh métallique : transmission et visualisation du champ électrique à $af/c = 0.44$ . . . 163
3.35 transmission du CPh métallique avec et sans suppression de couches . . . 164
3.36 suppression d'une couche dans le CPh diélectrique : transmission et visualisation du champ électrique à $af/c = 0.44$ . . . 164
3.37 transmission du CPh diélectrique avec et sans suppression de couches . . . 165
3.38 Effet de la variation de la position des sphères sur la transmission du CPh . . 165
3.39 Effet de la variation du rayon des sphères sur la transmission du CPh . . . 166
3.40 Influence de la forme de l'inclusion dans le CPh métallique avec un facteur de remplissage constant . . . 167

4.1 Banc millimétrique . . . 175
4.2 Schéma du banc de mesure . . . 176
4.3 Multiplieur de fréquence à varactor (HG) . . . 177
4.4 Mélangeur harmonique . . . 177
4.5 Détecteur à diode Schottky (HM) . . . 178
4.6 Cornet scalaire . . . 179
4.7 Réflexions parasites . . . 183
4.8 Transmission de deux cylindres en polarisation TE . . . 185
4.9 Comparaison de la réponse temporelle filtré et non filtré . . . 185
4.10 Comparaison de la réponse temporelle de la plage de fréquences tronquée et non tronquée . . . 186
4.11 Réponse fréquentielle et temporelle avec différentes fenêtres de pondération . 187
4.12 Sélection de la plage des pics de réflexions de la plaque $\varepsilon_r = 10$ . . . 188
4.13 Diagramme du filtrage . . . 188
4.14 Filtrage de la réflexion . . . 189
4.15 Description des trois normalisations testées . . . 190
4.16 Réflexion de deux plaques différentes . . . 191
4.17 Réflexion de la plaque de téflon normalisée selon deux positions différentes . . 192

4.18 Réflexion expérimentale et analytique de 8 à 110 GHz de la plaque permittivité 10 193
4.19 Recoupement du 2^{ieme} et 3^{ieme} banc de la figure précédente 194
4.20 Photos et courbes de transmission du CPh cubique métallique 12 couches . . 195
4.21 Comparaison de la de la transmission du CPh modélisé et du CPh expérimental 196
4.22 Photos et courbes de transmission du CPh cubique diélectrique 12 couches . . 196
4.23 Modélisation de la transmission du CPh cubique diélectrique 16 couches . . . 197
4.24 Diagramme de bande théorique et expérimental du CPh diélectrique 198
4.25 Indice effectif du CPh diélectrique 199
4.26 Interférences entre deux faisceaux de lumière 200
4.27 Représentation de la structure chimique du *trans*-polyacétylène 203
4.28 Diagramme des orbitales moléculaires π 204
4.29 Défaut conjugué dans une chaîne polymère 205
4.30 Ordre de grandeur de la conductivité dans les polymères conjugués 206
4.31 Evolution de la conductivité avec le taux de dopage (dopage n) 207
4.32 Les différentes formes de la polyaniline isolante 208
4.33 Formation de deux polarons à partir d'un bipolaron 209
4.34 Structure d'un film de *trans*-polyacétylène 211
4.35 Mise en évidence des différents liens possibles 212
4.36 Variation de la conductivité en fonction de la fraction volumique p 213
4.37 Conductivité d'un polymère conducteur en fonction de la fréquence [19] . . . 215
4.38 Molécule de polyaniline 216
4.39 Mesure de la conductivité statique par la technique des quatre fils 217
4.40 Mesure de la conductivité par l'ABmm 219
4.41 Evolution de la conductivité d'un film en polyaniline en fonction du temps d'évaporation des solvants et de la masse de polyaniline restante 219
4.42 Schéma et photo de la structure choisie 220
4.43 Modélisation FDTD des transmissions du CPh 221
4.44 Comparaison des transmissions des CPhs 5 couches en polymère et en métal . 222
4.45 Comparaison des transmissions des CPhs 5 et 10 couches 223
4.46 Impression par sérigraphie 224
4.47 Impression par technique jet d'encre sur substrat papier (vitesse 100 m/min) 224

4.48 Applications réalisées ou envisagées de la polyaniline 226

Liste des tableaux

1.1 Tableau comparant les équations d'évolution de la mécanique quantique et de l'électromagnétisme 9
1.2 Tableau comparant les différentes équations d'ondes 10

2.1 Tableau récapitulatif du nombre d'équations à résoudre selon les différents CPhs 68
2.2 Tableau comparant l'ensemble des méthodes 115

4.1 Erreur de phase en radian sur les cornets des quatre bancs de mesures 180
4.2 Evolution de la densité de porteurs de charge et de leur mobilité en fonction de la température dans les matériaux classiques 214
4.3 Modèles de conductivité en fonction de la température dans les polymères conducteurs [13–18] 214
4.4 Profondeur de pénétration δ à 35 GHz 220

Index

ABmm, 175
angle de Brewster, 27
antenne, 46

banc millimétrique, 175
bande interdite photonique, 15
bipolaron, 208

coefficients de Clebsch-Gordan, 139
coefficients de Mie, 128
coefficients de translations, 138
conduction, 213
contours équifréquences, 52
cornet, 179
couche, 10
CPh discret, 43
CPh métallique, 40
CPh ultra-compacts, 43
CPh1D, 13
CPh2D, 29
CPh3D, 35
cristal photonique, 2
cône de lumière, 10

diagramme de bande, 15
diagramme de dispersion, 11
diffraction, 122
diffusion, 122
différences finies, 88
diode Schottky, 177
diode varactor, 176
distorsion de Peierls, 203
dopage, 206
dopant, 210
défaut accepteur, 22
défaut donneur, 22
développement multipolaire, 126

Fabry-Pérot, 18
faisceau gaussien, 181
FDFD, 100
FDTD, 88
FEM, 79
fibre optique, 31
FIT, 96
fonction de Green, 77
fonctions d'ondes vectorielles sphériques, 124
FSS, 153

gap, 15

hamiltonien, 7

indice négatif, 50
intensité de diffraction, 149
isolateur, 178

KKR, 133

Korringa-Kohn-Rostoker, 133
Kronig-Penney, 74

LASER, 31
liaisons fortes, 110
ligne CL, 47
ligne de transmission, 44

matrice de dispersion, 73, 217
Matrice de l'amplitude de diffraction, 146
matrices transferts, 71, 100
Mie, 128
miroir de Bragg, 13
miroir omnidirectionnel, 24
modes couplés, 75
modes de surfaces, 23
modes guidés, 11
modes radiatifs, 11
modes rayonnants, 11
modes évanescents, 11
MST 1D, 71
MST 2D, 111
MST 3D, 122
multidiffusion, 111, 137
multiplieur, 176
mélangeur, 177
métamatériau, 50

nombre d'onde dans le vide, 16

ondes planes, 105

p-électrons, 203
percolation, 212
plaque, 10
polaron, 208
polyaniline, 207
polymère conducteur, 202
polymère conjugué, 202
porteurs de charges, 208
PWM, 105

réflexion, 73, 150, 182, 217
réfraction négative, 51

soliton, 205
solvant, 210
Surface sélective en fréquence, 153
surface équifréquence, 52

TB, 110
tenseur de Green, 133
TMM, 71, 100
Transformées de Fourier, 182
transmission, 73, 150, 182, 217
transport de charge, 211

UCPBG, 43
ultraréfraction, 55

vecteur d'onde de Bloch, 16

éléments finis, 79
équation d'onde électromagnétique, 8
équation d'évolution de Maxwell, 7
équations de Maxwell, 5, 66
équations de Schrödinger, 7
états évanescents, 17