HAL
open science

Etude de la propagation et du confinement de la lumière dans des nanostructures

Christophe Sauvan

To cite this version:

Christophe Sauvan. Etude de la propagation et du confinement de la lumière dans des nanostructures. Physique [physics]. Université Paris Sud - Paris XI, 2005. Français. NNT : . tel-00011142

HAL Id: tel-00011142

https://pastel.hal.science/tel-00011142v1

Submitted on 14 Apr 2006

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

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

UNIVERSITÉ PARIS XI
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THESE

Présentée pour obtenir le grade de
DOCTEUR EN SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ PARIS XI ORSAY

Spécialité : Optique et Photonique

par

Christophe Sauvan

Etude de la propagation et du confinement de la lumière dans des nanostructures

Soutenue le 13 octobre 2005
devant la commission d'examen composée de :

M. Lucio Claudio	ANDREANI	Rapporteur
M. Daniel	COURJON	Examinateur
M. Stefan	ENOCH	Rapporteur
M. Jean-Jacques	GREFFET	Examinateur
M. Philippe	LALANNE	Directeur de thèse
M. Jean-Michel	LOURTIOZ	Président
M. Pierre	VIKTOROVITCH	Membre invité

Remerciements

Il me faut maintenant rédiger cette page cruciale, à la fois tant attendue et tant redoutée, cette page qui clôt trois ans de travail et qui pourtant sera lue en premier et en détail par la plupart des lecteurs. Bref, il est grand temps de passer aux remerciements. Si une thèse était un travail solitaire dont on vient à bout muni d'un simple crayon et d'une feuille de papier, il suffirait d'un grand merci à Canson et à Bic, et hop, terminé. Mais non. Trois ans de travail d'équipe, trois ans de discussions enrichissantes, trois ans de rencontres diverses et variées, en bref trois ans de vie, ça fait un paquet de « merci » à distribuer. Et si possible avec une pointe de sincérité, un soupçon de générosité, une pincée d'humour, voire même, pour les gourmets, un zeste d'ironie (et un peu de sucre en poudre ! Les connaisseurs apprécieront...).

Je voudrais en premier lieu remercier la Délégation Générale pour l'Armement pour avoir financé ce travail de thèse, que j'ai effectué dans le groupe Nanophotonique et Electromagnétisme du Laboratoire Charles Fabry de l'Institut d'Optique. Je remercie chaleureusement Lucio Claudio Andreani et Stefan Enoch pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail et Daniel Courjon, Jean-Jacques Greffet, Jean-Michel Lourtioz et Pierre Viktorovitch pour m'avoir fait l'honneur et le plaisir de faire partie du jury.

Je tiens également à remercier sincèrement Pierre Chavel qui, malgré ses activités de direction (et de déménagement !) du laboratoire Charles Fabry, est toujours parvenu à consacrer le temps nécessaire pour relire un article ou assister à la répétition d'une conférence. Ce qui s'est toujours traduit par des discussions scientifiques fructueuses et des conseils avisés.

Qui dit thèse, dit bien sûr directeur de thèse. J'ai eu la chance d'être encadré par Philippe Lalanne, ex-rugbyman et futur-ex-footballeur hors normes, et ces quelques mots ne suffiront sans doute pas à lui exprimer toute ma gratitude. Je lui dois notamment un enthousiasme communicatif et (presque) sans faille, un encadrement quotidien plus proche du travail en tandem que du pilotage à distance, un apprentissage de cette faculté indispensable qui consiste à porter un regard critique sur son travail (et accessoirement sur celui des autres), des discussions intéressantes sur le rôle et la place de la modélisation en physique, sans oublier de multiples voyages aux destinations plutôt ensoleillées.

Au tour maintenant du peintre italien d'adoption, du mathématicien accro aux réseaux qui nous exhorte sans cesse à garder les pieds sur terre. Sans lui, un certain nombre de calculs un peu ardus seraient probablement restés sans solution. Merci Jean-Paul d'avoir partagé avec moi ton expérience de l'électromagnétisme et merci

de ta disponibilité constante pour répondre à mes nombreuses (et trop souvent triviales) questions concernant le fonctionnement de reticolo.

Je remercie bien sûr le professeur Susumu Noda, le Lance Armstong de la microcavité à cristaux photoniques, qui m'a permis de m'introduire subrepticement dans le petit monde des trous manquants, expression fantaisiste à la limite de l'oxymore qui permet d'égayer les repas de famille. Le gruyère est-il un emmental plein de trous manquants ?

Ne possédant malheureusement pas la verve suffisante pour consacrer un paragraphe à chacun, je remercie également, en vrac et sans ordre de priorité autre que le capharnaüm de mes neurones, toutes les personnes que j'ai côtoyées durant ces trois années et qui ont participé à les rendre si agréables au quotidien : Jean-Claude, pour quelques calculs réalisés de concert ainsi que certaines discussions sur la version électronique du Fabry-Perot et de l'impédance ; Guillaume, pour quelques calculs de dernière minute et surtout pour m'avoir aidé à arroser notre cher *Ficus* pendant un an ; Denis et Daniel, pour ces discussions enflammées dont ils ont le secret et qui ont animé la plupart de nos déjeuners ; Nathalie et Danièle, pour leur aide « administrative » et leurs sourires quotidiens ; Martin, pour tous ces échanges d'e-mails et de résultats de calcul ; Benoît, Stéphane, Luc, Nadia, Mathieu, Sylvain, Sophie, Delphine, Michele, Dario et Marco, pour avoir égayé congrès et autres écoles d'été ; Céline, Yann, Solon, Ignacio, Philippe, Jean-Marc, Sébastien, Gérard, Gisèle, Hervé et Jean, membres permanents ou de passage dans le groupe ou à proximité et qui participent à l'ambiance chaleureuse qui règne dans le labo.

Je n'oublie pas mes deux fidèles Clio, usées bien avant l'âge, que je remercie pour m'avoir accompagné quotidiennement dans mes chevauchées sauvages à travers les vastes plaines ... de la Beauce.

Je voudrais enfin remercier ma famille, qui m'a permis d'arriver jusque là en me soutenant dans les différents choix que j'ai eu à faire. Et puis on peut dire que le goût des sciences est un peu de famille, en quelque sorte. Merci à la famille About pour sa présence le jour J. Et oui, on dirait que je ne suis plus célibataire : y'a des détails qui trompent pas. Merci Nancy pour ton soutien quotidien et sans faille. Cette thèse est un peu la tienne.

Je termine sur un clin d'œil avec ces paroles, empruntées à une chanson de Boris Vian : « Y'a quelque chose qui cloche là-dedans, j'y retourne immédiatement. »

Orléans, Novembre 2005

I think the problem is not to find the best or most efficient method to proceed to a discovery, but to find any method at all.

R. P. Feynman

Table des matières

Introduction **5**

I Outils et études numériques **9**

Introduction de la première partie **11**

1 Présentation de la méthode numérique utilisée **13**
1.1 La méthode modale de Fourier 14
1.1.1 Problème de la diffraction par un réseau 14
1.1.2 Calcul des modes : problème aux valeurs propres 16
1.1.3 Echanges d'énergie entre les modes aux interfaces 18
1.1.4 Bilan 20
1.2 Généralisation de la méthode modale de Fourier 20
1.2.1 Le problème des conditions d'ondes sortantes 20
1.2.2 Les Perfectly Matched Layers par l'exemple 22
1.3 Conclusion 23

2 Règles de troncature pour la modélisation des discontinuités **25**
2.1 Introduction 26
2.2 Solution of Maxwell's equations by the Galerkin method 27
2.2.1 Presentation of the Galerkin method 27
2.2.2 Intuitive argument for the truncation process 29
2.2.3 Eigenvalue problem for the translation invariant structure . . 31
2.3 Numerical example for Hermite-Gauss functions 32
2.4 Conclusion 35

3 Etude numérique du mode fondamental des guides à cristaux photoniques **37**
3.1 Calcul des pertes de propagation 38
3.1.1 Problème physique à résoudre 38
3.1.2 Etat de l'art des méthodes numériques déjà utilisées 40
3.1.3 Approche originale développée 44
3.1.4 Validation des résultats numériques obtenus 48
3.2 Modèle Fabry-Perot de la résonance transverse 52
3.2.1 Géométrie considérée 52
3.2.2 Modèle Fabry-Perot et courbe de dispersion 53

3.2.3 Expression analytique de l'atténuation 54
3.2.4 Interprétation physique du spectre d'atténuation 57
3.2.5 Discussion des limites du modèle 59
3.3 Calcul de la durée de vie 59
3.3.1 Relation entre l'atténuation et la durée de vie 60
3.3.2 Durée de vie des modes des guides à cristaux photoniques . . 62
3.3.3 Bilan 65
3.4 Calcul de la réflectivité modale 65
3.4.1 Problème physique à résoudre 65
3.4.2 Utilisation de la méthode modale de Fourier généralisée 66
3.4.3 Etude de la convergence du calcul 67
3.5 Conclusion 68

Conclusion de la première partie 71

II Structures sub-λ pour l'optique diffractive large bande 73

Introduction de la deuxième partie 75

4 Introduction à l'optique diffractive 77
4.1 Les optiques diffractives classiques 77
4.1.1 Equivalence entre composants réfractifs et composants diffractifs 77
4.1.2 Effet d'ombrage 79
4.1.3 Variation de l'efficacité avec la longueur d'onde 80
4.1.4 Optiques diffractives insensibles à la longueur d'onde 84
4.2 Les optiques diffractives binaires 85
4.2.1 Principe 86
4.2.2 Indice effectif et modes de Bloch 87
4.2.3 Les optiques diffractives binaires en pratique 90
4.3 Conclusion 92

5 Fonctionnement large bande grâce à la dispersion des matériaux artificiels 93
5.1 Modèle simplifié pour l'efficacité des optiques diffractives binaires . . 93
5.1.1 Expression analytique de l'efficacité 94
5.1.2 Influence du paramètre α sur l'efficacité 97
5.2 Conception d'optiques diffractives large bande 97
5.2.1 Contraintes technologiques et valeurs du paramètre α 98
5.2.2 Exemple de conception 100
5.3 Calcul électromagnétique rigoureux 101
5.4 Conclusion 103

6 Efficacité d'un composant diffractif de phase lentement variable 105
6.1 Modèle : approximation de la phase lentement variable 106
6.1.1 Construction du composant diffractif 106

6.1.2 Ordres diffractés par le composant 107
6.1.3 Calcul de l'efficacité : transmittance locale 109
6.2 Validation du modèle en incidence normale 110
6.2.1 Expression de l'efficacité en incidence normale 110
6.2.2 Validation 111
6.3 Comportement aux courtes longueurs d'onde 113
6.3.1 Etude de la fonction $T(\phi_0)$ 113
6.3.2 Comment empêcher l'excitation de modes guidés ? 116
6.4 Conclusion 117

Conclusion de la deuxième partie 119

III Confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques 121

Introduction de la troisième partie 123

7 Analyse des mécanismes physiques du confinement 127
7.1 Etat de l'art des cavités à cristaux photoniques 128
7.2 Rappels d'électromagnétisme sur le facteur de qualité d'une cavité . . 130
7.2.1 Equations de Maxwell dans un milieu matériel 130
7.2.2 Définition d'un mode propre 131
7.2.3 Définition énergétique du facteur de qualité 132
7.2.4 Diagramme de rayonnement de la cavité 133
7.3 Critique de l'approche basée sur l'analyse de Fourier du mode 136
7.3.1 Présentation de l'analyse de Fourier 136
7.3.2 Critique du choix de la position du plan 137
7.3.3 Caractère non-prédictif de l'analyse de Fourier 139
7.4 Modèle Fabry-Perot 141
7.4.1 Présentation du modèle 141
7.4.2 Equations du Fabry-Perot : accord de phase et facteur de qualité 142
7.4.3 Validation du modèle 144
7.4.4 Interprétation de l'effet du déplacement des trous 146
7.5 Conclusion 149

8 Etude de la réflectivité modale des miroirs à cristaux photoniques 151
8.1 Introduction 152
8.2 Mode-profile mismatch problem 153
8.3 Bloch mode engineering for lowering radiation losses 156
8.4 Numerical evidence 158
8.4.1 Tuning hole position 158
8.4.2 Tuning hole position and diameter 160
8.5 Conclusion 162

Conclusion de la troisième partie 165

Conclusion **167**

A Calculation of the matrices E, A and K_x in the Hermite-Gauss basis **171**

B Atténuation et durée de vie des modes d'un guide à cristaux photoniques **173**

Bibliographie **177**

Introduction

Un des enjeux importants en nanophotonique est le contrôle des photons — émission, propagation et détection — dans de petits volumes de l'ordre de quelques λ^3 afin de réaliser de nouveaux composants très compacts. Les applications de ce contrôle couvrent des domaines très variés allant des interconnexions optiques à la réalisation d'expériences d'électrodynamique quantique à l'état solide, en passant par la conception de nouvelles sources de lumière aux fonctionnalités originales, sources de photons uniques ou lasers sans seuil par exemple. Depuis les articles fondateurs de la fin des années 80 [Yab87, Joh87, Yab91], le domaine des cristaux photoniques est sorti du cadre du contrôle de l'émission spontanée pour se diversifier aux problématiques de la propagation et de la détection. C'est ainsi que les structures à base de cristaux photoniques, au sens large du terme, constituent aujourd'hui les briques élémentaires d'un véritable « mécano » pour la lumière.

Cependant, les règles du jeu ne sont pas encore totalement maîtrisées. Pour y parvenir, il est nécessaire de bien comprendre l'interaction de la lumière avec des matériaux structurés à une échelle légèrement plus petite que la longueur d'onde. Bien que pouvant être calculées numériquement puisqu'elles sont entièrement contenues dans les équations de Maxwell, ces interactions n'en sont pas moins difficiles à interpréter en termes de quantités physiques simples. Ce n'est pourtant qu'au prix d'une telle interprétation qu'il sera possible de *contrôler* le flot de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde. Autrement dit de maîtriser la conception et la réalisation de nouveaux composants pour l'optique et l'optoélectronique.

Au cours de cette thèse, nous nous sommes intéressés à des structures à base de cristaux photoniques bidimensionnels gravés dans un empilement de couches minces, structures qui peuvent être utilisées aussi bien en optique guidée qu'en optique en espace libre. Nous avons réalisé trois études différentes autour de la problématique de la compréhension des interactions de la lumière avec ces structures : une étude théorique et numérique de la propagation de la lumière dans des guides à cristaux photoniques, une étude d'optiques diffractives blazées sur une large plage spectrale et une étude du confinement de la lumière dans des microcavités à cristaux photoniques. Ces études sont rapportées dans le manuscrit sous forme de trois parties largement indépendantes.

La première partie est dédiée à *l'étude numérique du mode fondamental des guides à cristaux photoniques* et, plus largement, à la présentation des outils numériques utilisés au cours de la thèse. Nous présentons tout d'abord les grandes lignes de la méthode qui a été utilisée pour calculer l'ensemble des résultats numériques

de la thèse, puis nous l'appliquons aux guides à cristaux photoniques. Nous nous sommes intéressés à un système modèle des cristaux photoniques, le guide à une rangée manquante, ainsi qu'à trois quantités physiques essentielles, *l'atténuation, la durée de vie et la réflexion* sur un cristal photonique bidimensionnel du mode fondamental.

De manière indépendante, cette partie numérique aborde également le problème général de *la stabilité et de la convergence des méthodes numériques* utilisées pour résoudre les équations de Maxwell. Plus précisément, ce travail s'intéresse à la large classe des méthodes dites de Galerkin qui reposent sur une décomposition du champ électromagnétique dans une base de fonctions, puis sur la projection des équations de Maxwell sur cette même base. Nous suggérons que les résultats classiques concernant l'écriture du produit de fonctions discontinues dans la base des ondes planes [Lal96c, Li96b] peuvent être généralisés à de nombreuses autres bases de fonctions continues, laissant ainsi espérer une augmentation significative de la vitesse de convergence.

Dans la deuxième partie, nous quittons l'optique guidée pour l'optique en espace libre et considérons les cristaux photoniques comme des réseaux de diffraction bipériodiques fortement modulés. *Nous abandonnons l'aspect bande interdite des cristaux photoniques pour nous intéresser à leurs propriétés de dispersion structurale.* Suite à de premiers travaux de thèse concernant un nouveau type d'optiques diffractives [Lee01], nous montrons qu'une utilisation adéquate de cette dispersion permet de surmonter la principale limitation des optiques diffractives, à savoir leur utilisation efficace sur une large plage spectrale.

Un Chapitre introductif permet au lecteur de se familiariser avec les principes de l'optique diffractive classique, qui utilise des profils continus de type échelette, ainsi qu'avec le concept de matériau artificiel à la base de l'optique diffractive binaire, qui utilise des structures sub-λ. Nous présentons ensuite les deux contributions originales de ce travail : 1) un modèle simple qui montre comment utiliser la dispersion des structures sub-λ pour *concevoir des composants diffractifs qui restent efficaces sur une large bande spectrale* et 2) un modèle approché de l'efficacité des composants diffractifs de phase lentement variable qui prédit quantitativement leurs comportements spectral et angulaire. Ces travaux se poursuivent aujourd'hui par la thèse de Céline Ribot dans le cadre d'une collaboration Institut d'Optique/Thales Research and Technology financée par un contrat de la Délégation Générale pour l'Armement.

Dans la troisième partie, nous étudions en détail *les mécanismes physiques à l'origine du confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques.* Dans un premier temps, nous portons un regard critique sur l'approche la plus répandue permettant d'analyser le confinement. Cette approche, basée sur une analyse globale du champ électromagnétique par transformée de Fourier [Vuc02a, Sri02, Aka03a], constitue une analyse du spectre angulaire des pertes d'une cavité mais ne fournit aucune information sur leur origine physique. Nous développons ensuite une approche radicalement différente. Celle-ci, basée sur un *modèle Fabry-Perot*, fournit une expression analytique du facteur de qualité qui met en évidence les paramètres physiques essentiels du problème : *les pertes radiatives à l'interface des miroirs et la vitesse de groupe du mode de Bloch guidé à l'intérieur de la cavité.*

Après avoir montré le rôle important joué par les miroirs à cristaux photoniques dans le confinement de la lumière, nous étudions *l'origine physique des pertes radiatives se produisant à l'interface du miroir*. Nous montrons que ces pertes proviennent d'une désadaptation de profil de mode, c'est-à-dire d'une différence entre le profil du mode guidé incident et le profil du mode de Bloch évanescent du miroir.

Première partie

Outils et études numériques

Introduction de la première partie

Electromagnetic design and simulation tools
are the main needed research requirement :
Get people who can solve Maxwell's equations.
E. Yablonovitch, PECS VI

Les équations de Maxwell étant exactes pour des matériaux linéaires, leur résolution à l'aide de méthodes numériques rigoureuses a toujours joué un rôle très important dans tous les domaines de l'électromagnétisme. Le domaine de la nanophotonique, apparu grâce au développement des nanotechnologies et dont l'objectif est le contrôle de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde, n'échappe pas à cette règle. Les besoins en calcul numérique y sont même accrus car le coût de fabrication d'un objet structuré à l'échelle de la centaine de nanomètres reste très élevé. Ainsi, pour concevoir un composant photonique, mieux vaut avoir recours au calcul numérique plutôt qu'à la fabrication de multiples échantillons.

Pour autant, le calcul numérique ne constitue pas une solution de facilité. Il s'agit en effet de calculer la diffraction par des structures tridimensionnelles de géométrie complexe composées de matériaux présentant de forts contrastes d'indices — donc loin du régime perturbatif — et faisant coexister des éléments de grande et de petite tailles par rapport à la longueur d'onde. Une résolution numérique rigoureuse des équations de Maxwell — sans approximation — est donc nécessaire.

Un large choix de méthodes s'offre à celui qui cherche à résoudre numériquement les équations de Maxwell. Un critère de choix intéressant consiste à considérer le caractère « physique » de la méthode de calcul. Ainsi, des méthodes de type différences finies ou éléments finis qui reposent sur une discrétisation tridimensionnelle de l'espace se réduisent bien souvent à une boîte noire numérique.

Les méthodes modales, du fait de l'intégration analytique des équations de Maxwell dans une direction de l'espace, possèdent au contraire une signification physique forte. En effet, elles reposent sur *le calcul des échanges d'énergie aux interfaces entre tous les modes* — propagatifs et radiatifs — se propageant dans la structure. Dans de nombreuses situations, peu de modes (souvent les quelques premiers modes propagatifs ou faiblement évanescents) participent réellement au transport de l'énergie. En identifiant ces modes, *le calcul numérique permet une compréhension fine de phénomènes physiques* observés expérimentalement ou prédits numériquement. Cette compréhension constitue le premier pas indispensable vers une ingénierie de ces

phénomènes (leur optimisation ou au contraire leur suppression) ou leur extension à des situations différentes.

La méthode numérique utilisée dans ce travail est une extension au calcul de structures non-périodiques de la *méthode modale de Fourier*, dite aussi Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA) [Gay85] ou méthode différentielle [Pop00], bien connue et très utilisée pour le calcul de la diffraction par des objets périodiques. La méthode numérique originale qui résulte de cette généralisation a été développée à l'Institut d'Optique au début des années 2000 [Lal00b, Sil01]. Elle permet de calculer de manière stable et efficace une grande variété de structures. Dans ce travail, nous avons appliqué cette méthode à des structures à base de cristaux photoniques bidimensionnels gravés dans des empilements de couches minces. Ces structures suscitent un fort intérêt en optique intégrée mais leur modélisation s'avère difficile, notamment à cause des pertes par diffraction hors du plan des couches. Nous verrons que l'utilisation de la méthode modale de Fourier généralisée permet de calculer ces pertes avec précision.

Le premier Chapitre de cette partie présente en deux temps la méthode numérique utilisée. Nous décrivons tout d'abord de façon générale la méthode modale de Fourier dans le cas d'un objet périodique, en mettant en avant l'interprétation physique en termes d'échanges d'énergie entre modes. Puis nous montrons comment cette méthode peut être généralisée au calcul de la diffraction par des objets non-périodiques grâce à l'utilisation de couches absorbantes qui permettent de remplir correctement les conditions d'ondes sortantes.

Dans le deuxième Chapitre, nous revenons sur un point clé de l'implémentation de la méthode modale de Fourier. La décomposition du champ électromagnétique en séries de Fourier est au cœur de la méthode, et il est bien connu depuis le milieu des années 90 [Lal96c, Gra96] que cette décomposition doit être faite en respectant certaines règles pour assurer une vitesse de convergence optimale. Ces règles, connues sous le nom de *Fourier factorization rules*, ont été énoncées [Li96b] puis démontrées [Li01] dans le cadre spécifique d'une décomposition dans une base d'ondes planes. Le Chapitre 2, qui reprend l'intégralité d'un article publié dans la revue Optical and Quantum Electronics [Sau04a], montre que ces règles doivent être considérées dans un cadre beaucoup plus général et qu'elles pourraient s'appliquer à de nombreuses autres bases de fonctions.

Le dernier Chapitre montre deux exemples conceptuellement simples mais numériquement difficiles qui ont été au cœur de mes travaux sur les cristaux photoniques et qui permettent de tester finement les limites de la méthode modale de Fourier généralisée. Il s'agit, d'une part, du calcul précis de l'atténuation et de la durée de vie intrinsèques du mode fondamental d'un guide à cristaux photoniques et, d'autre part, du calcul de la réflectivité de ce mode sur un miroir à cristaux photoniques 2D. Il est important de s'attarder sur ces résultats numériques car ils sont au cœur de la discussion menée dans la troisième partie de la thèse sur les mécanismes physiques gouvernant le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques.

Chapitre 1

Présentation de la méthode numérique utilisée

L'objet de ce Chapitre est de présenter la méthode numérique originale développée à l'Institut d'Optique qui a été utilisée dans ce travail. Il n'a pas pour objectif d'être exhaustif et détaillé, mais plutôt de dégager les caractéristiques principales de la méthode de calcul. Ce Chapitre fournit ainsi au lecteur les clés qui ont servi à obtenir certains résultats numériques difficiles de cette thèse.

Il existe de nombreuses méthodes numériques permettant de résoudre les équations de Maxwell. Ces méthodes peuvent être classées suivant différents critères, comme le domaine dans lequel elles opèrent, temporel ou fréquentiel, ou encore le nombre de dimensions de l'espace qu'elles discrétisent. Par exemple, la méthode FDTD (Finite Difference Time Domain), une des méthodes numériques les plus répandues, opère dans le domaine temporel en discrétisant les trois directions de l'espace.

La méthode numérique utilisée dans ce travail est une méthode modale fréquentielle utilisant une discrétisation bidimensionnelle (2D) suivie d'une intégration analytique dans la troisième direction. Elle consiste en une généralisation de la *méthode modale de Fourier* au calcul de structures non-périodiques. Cette méthode numérique originale a été développée à l'Institut d'Optique au début des années 2000 [Lal00b, Sil01] et fait encore actuellement l'objet de développements [Hug05b, Lec05].

Nous présentons dans la première section de ce Chapitre les grandes lignes de la méthode modale de Fourier. Nous insistons plus particulièrement sur les caractéristiques qui donnent à cette méthode une signification physique forte (calcul des modes de l'objet et de leurs échanges d'énergie) ainsi que sur deux points clés qui rendent cette méthode numérique stable et efficace (utilisation des règles de factorisation des séries de Fourier et du formalisme de la matrice de diffraction). Dans la deuxième section, nous montrons comment cette méthode peut être généralisée au calcul de la diffraction par des objets non-périodiques. Cette extension du domaine d'application de la méthode est basée sur une périodisation artificielle de l'objet couplée à l'utilisation de couches absorbantes — purement numériques — qui permettent de remplir correctement les conditions d'ondes sortantes.

1.1 La méthode modale de Fourier

La méthode modale de Fourier permet de résoudre le problème de la diffraction par une structure périodique en calculant les modes de la structure et leurs échanges d'énergie aux interfaces. Les modes sont calculés en développant en série de Fourier le champ électromagnétique ainsi que la permittivité et la perméabilité de la structure. Cette méthode, qui porte également dans la littérature le nom de RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis), a été développée initialement vers la fin des années 70 pour l'analyse électromagnétique des réseaux de diffraction [Kno78, Cha80, Gay85]. Parallèlement, elle a été utilisée dans le domaine des cristaux photoniques pour le calcul des diagrammes de bande [Ho90, Zha90] sous le nom de méthode des ondes planes.

Pour exposer les grandes lignes de la méthode modale de Fourier, nous considérons le problème de la diffraction par le réseau unidimensionnel (1D) multi-couches de la Figure 1.1. Le cas plus général d'un réseau 2D n'apporte pas de difficultés supplémentaires autres que des difficultés d'ordre calculatoire.

1.1.1 Problème de la diffraction par un réseau

Le réseau 1D de la Figure 1.1 est formé d'un empilement de couches dont la permittivité relative ε_p et la perméabilité relative μ_p sont périodiques suivant x de période Λ et invariantes suivant z. Les milieux I et II entourant le réseau sont des milieux homogènes non-magnétiques d'indice de réfraction n_{I} et n_{II}. Le réseau est éclairé à la longueur d'onde λ depuis le milieu I par une onde plane dont l'incidence est donnée par la composante tangentielle k_x de son vecteur d'onde. L'objectif est de calculer le champ à l'extérieur et à l'intérieur du réseau.

Expression du champ électromagnétique dans les milieux I et II

Dans les milieux homogènes I et II, chaque composante du champ électromagnétique est donnée par un *développement de Rayleigh*,

$$\psi^{\mathrm{I}}(x,z) = \sum_m I_m^{\mathrm{I}}\, e^{ik_{xm}x}\, e^{-ik_{zm}^{I}(z-z_{N+1})} + \sum_m D_m^{\mathrm{I}}\, e^{ik_{xm}x}\, e^{ik_{zm}^{\mathrm{I}}(z-z_{N+1})}\,, \tag{1.1}$$

$$\psi^{\mathrm{II}}(x,z) = \sum_m I_m^{\mathrm{II}}\, e^{ik_{xm}x}\, e^{ik_{zm}^{\mathrm{II}}z} + \sum_m D_m^{\mathrm{II}}\, e^{ik_{xm}x}\, e^{-ik_{zm}^{\mathrm{II}}z}\,, \tag{1.2}$$

c'est-à-dire une somme discrète d'ondes planes dont les composantes tangentielles des vecteurs d'onde sont données par la loi des réseaux

$$k_{xm} = k_x + mK, \tag{1.3}$$

où $K = \frac{2\pi}{\Lambda}$ est le module du vecteur réseau et m est un entier relatif. Dans les équations 1.1 et 1.2, les coefficients I_m^{I} (resp. I_m^{II}) sont les amplitudes des modes — des ondes planes en l'occurrence — incidents dans le milieu I (resp. le milieu II), et les coefficients D_m^{I} (resp. D_m^{II}) sont les amplitudes des modes diffractés dans le milieu I (resp. le milieu II). Les coefficients des modes incidents sont connus,

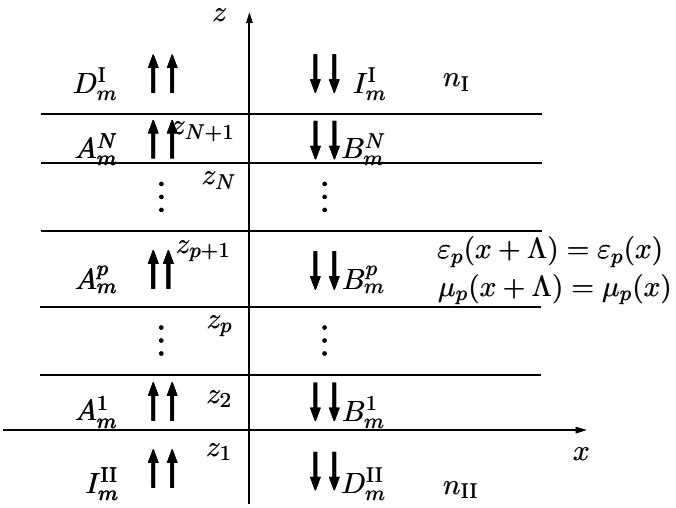

Figure 1.1: *Problème de la diffraction par un réseau multi-couches 1D. La permittivité et la perméabilité de chaque couche sont périodiques en x de période Λ et invariantes en z. Tous les milieux sont isotropes. Les milieux* I *et* II *sont supposés homogènes par souci de conformité à l'ensemble de la littérature, mais cette hypothèse n'est pas fondamentalement nécessaire.*

$$I_m^{\mathrm{I}} = \delta_{m0} \quad \text{et} \quad I_m^{\mathrm{II}} = 0, \tag{1.4}$$

par exemple, mais nous laissons les équations 1.1 et 1.2 sous cette forme pour conserver la généralité d'une décomposition dans la base des modes.

Les composantes k_{zm}^{I} et k_{zm}^{II} du vecteur d'onde s'expriment en fonction de k_{xm} et de l'indice de réfraction des milieux I et II :

$$k_{zm}^j = \begin{cases} \sqrt{k_0^2 n_j^2 - k_{xm}^2} & \text{si} \quad k_0 n_j \geqslant k_{xm} \\ i\sqrt{k_{xm}^2 - k_0^2 n_j^2} & \text{si} \quad k_0 n_j < k_{xm} \end{cases} \tag{1.5}$$

avec $j = \mathrm{I}, \mathrm{II}$ et $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$. Les signes des racines ont été choisis pour respecter les conditions d'ondes sortantes.

Pour connaître le champ dans les milieux I et II, donné par les équations 1.1 et 1.2, il faut donc calculer les amplitudes des modes diffractés D_m^{I} et D_m^{II}.

Expression du champ électromagnétique dans les couches du réseau

Dans chaque couche p du réseau, le champ électromagnétique peut également s'écrire sous la forme d'une décomposition modale :

$$\psi^p(x,z) = \sum_m A_m^p f_m^p(x)\, e^{i\beta_m^p(z-z_p)} + \sum_m B_m^p g_m^p(x)\, e^{-i\beta_m^p(z-z_p)}, \tag{1.6}$$

où β_m^p est la constante de propagation du mode numéro m, $f_m^p(x)$ et $g_m^p(x)$ sont les profils des modes se propageant respectivement vers les z positifs et vers les z

négatifs, et A_m^p et B_m^p sont leurs amplitudes. Si la couche p est homogène, cette décomposition modale se réduit à une décomposition en ondes planes.

En écrivant cette décomposition modale, nous avons réalisé *une intégration analytique des équations de Maxwell dans la direction z*. Le calcul de la dépendance en x du champ, c'est-à-dire le calcul des profils des modes, se fait en *discrétisant la direction x dans l'espace de Fourier*.

Du fait de la périodicité de la structure, ces modes sont des *modes de Bloch* et leurs profils sont des fonctions pseudo-périodiques de période Λ qui peuvent être décomposées en série de Fourier. Chaque composante du champ électromagnétique s'écrit donc finalement sous la forme suivante :

$$\psi^p(x,z) = \sum_m A_m^p \left[\sum_j c_{mj}^p \, e^{ik_{xj}x} \right] e^{i\beta_m^p(z-z_p)} + \sum_m B_m^p \left[\sum_j d_{mj}^p \, e^{ik_{xj}x} \right] e^{-i\beta_m^p(z-z_p)}. \tag{1.7}$$

On notera l'importance de la composante tangentielle k_x du vecteur d'onde qui se conserve dans toute la structure modulo K.

Pour connaître le champ dans chaque couche, il faut donc calculer le profil (les coefficients c_{mj}^p et d_{mj}^p) et la constante de propagation β_m^p de chaque mode, puis leurs amplitudes A_m^p et B_m^p. Nous allons voir à la section 1.1.2 que le calcul des modes se fait en résolvant un problème aux valeurs propres. Puis nous verrons à la section 1.1.3 que les amplitudes des différents modes (y compris les modes diffractés dans les milieux I et II) sont calculées en résolvant un système linéaire formé des relations de continuité aux interfaces entre les composantes tangentielles des champs.

1.1.2 Calcul des modes : problème aux valeurs propres

Le calcul des modes est un point crucial de la méthode modale de Fourier. Dans le cas où elle est utilisée pour calculer le diagramme de bande d'un cristal photonique, c'est même le seul élément de la méthode qui est mis en œuvre. Ce calcul repose sur la *résolution d'un problème aux valeurs propres* et il est fondamental pour les performances de la méthode de poser correctement ce problème. En effet, la vitesse de convergence de la méthode modale de Fourier a été pendant longtemps limitée par une mauvaise formulation du problème aux valeurs propres. Ce n'est qu'au milieu des années 90 que ce problème a été résolu [Lal96c, Gra96, Li96b]. Ces travaux ont permis une amélioration drastique des performances et ont rapidement été appliqués au calcul de la diffraction par des réseaux bipériodiques [Li97] ainsi qu'au calcul du diagramme de bande des cristaux photoniques [Lal98a, Eno01].

Nous présentons dans ce qui suit la formulation correcte du problème aux valeurs propres qui utilise les *règles de factorisation des séries de Fourier* dérivées par Lifeng Li [Li96b, Li01].

Equations de Maxwell dans l'espace de Fourier

Le problème aux valeurs propres s'obtient en transposant les équations de Maxwell dans l'espace réciproque de Fourier, c'est-à-dire en développant en série de

Fourier le champ électromagnétique ainsi que la permittivité et la perméabilité relatives. En polarisation TM, les modes propres de chaque couche p peuvent être écrits sous la forme

$$\begin{aligned} H_y(x,z) &= \frac{-i}{\sqrt{Z_0}} \sum_m h_m e^{ik_{xm}x}\, e^{i\beta z}, \\ E_x(x,z) &= \sqrt{Z_0} \sum_m e_{xm} e^{ik_{xm}x}\, e^{i\beta z}, \\ E_z(x,z) &= \sqrt{Z_0} \sum_m e_{zm} e^{ik_{xm}x}\, e^{i\beta z}. \end{aligned} \tag{1.8}$$

La suppression de l'indice p faisant référence à la couche considérée et l'introduction de l'impédance du vide $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ servent à simplifier les notations.

Les équations de Maxwell en rotationel vérifiées par ces modes sont

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu_0\mu(x)H_y, \tag{1.9}$$

$$\frac{1}{\varepsilon(x)}\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\varepsilon_0 E_x, \tag{1.10}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(x)E_z, \tag{1.11}$$

où ω est la fréquence du mode. Le cas de la polarisation TE est obtenu en remplaçant les champs (H_y, E_x, E_z) par les champs (E_y, H_x, H_z) et en intervertissant la permittivité et la perméabilité $\varepsilon \leftrightarrow -\mu$ dans les équations 1.9, 1.10 et 1.11.

Les équations de Maxwell sont transposées dans l'espace de Fourier en introduisant dans les équations 1.9, 1.10 et 1.11 le développement en série de Fourier du champ donné par l'équation 1.8 ainsi que le développement en série de Fourier de la permittivité relative $\varepsilon(x)$, de son inverse $\varepsilon^{-1}(x)$ et de la perméabilité relative $\mu(x)$:

$$i\frac{\beta}{k_0}[e_x] - K_x[e_z] = U[h], \tag{1.12}$$

$$-i\frac{\beta}{k_0}A[h] = [e_x], \tag{1.13}$$

$$K_x[h] = E[e_z]. \tag{1.14}$$

Dans ces équations matricielles, les vecteurs $[h]$, $[e_x]$ et $[e_z]$ sont formés des coefficients de Fourier des champs H_y, E_x et E_z ; les matrices E, A et U sont les matrices de Toeplitz construites à partir des coefficients de Fourier de ε, $1/\varepsilon$ et μ ; et la matrice K_x est une matrice diagonale dont les éléments sont ik_{xm}/k_0.

Problème aux valeurs propres

Le problème aux valeurs propres en polarisation TM est finalement obtenu en substituant $[e_x]$ et $[e_z]$ des équations 1.13 et 1.14 dans l'équation 1.12 :

$$A^{-1}[U + K_x E^{-1} K_x][h] = \frac{\beta^2}{k_0^2}[h]. \tag{1.15}$$

De même, le problème aux valeurs propres en polarisation TE est donné par

$$V^{-1}[E + K_x U^{-1} K_x][e] = \frac{\beta^2}{k_0^2}[e], \tag{1.16}$$

où la matrice V est la matrice de Toeplitz construite à partir des coefficients de Fourier de $1/\mu$. Ainsi, les constantes de propagation des modes de Bloch de la couche considérée et leurs profils sont donnés par les valeurs propres et les vecteurs propres solutions de l'équation 1.15 ou de l'équation 1.16, suivant le cas de polarisation.

Les règles de factorisation des séries de Fourier ont été appliquées lors de l'écriture des équations 1.9, 1.10 et 1.11. Ces règles permettent de formuler un problème aux valeurs propres qui *remplit correctement les conditions aux limites au niveau des discontinuités*, même lorsque les matrices sont tronquées pour des raisons évidentes d'implémentation numérique [Li96b]. Nous verrons dans le Chapitre 2 que le problème qui consiste à remplir correctement les conditions aux limites avec des équations tronquées dépasse largement le cadre des méthodes utilisant les séries de Fourier. Ce problème se pose en fait dès que l'on modélise une structure discontinue à l'aide d'une méthode numérique dans laquelle le champ électromagnétique est décomposé sur une base de fonctions continues.

1.1.3 Echanges d'énergie entre les modes aux interfaces

Après avoir résolu le problème aux valeurs propres, il faut calculer les amplitudes A_m^p et B_m^p des modes dans chaque couche ainsi que les amplitudes D_m^{I} et D_m^{II} des modes diffractés dans les milieux I et II. Cela est effectué en écrivant les relations de continuité entre les composantes tangentielles des champs à toutes les interfaces $z = z_1, \ldots, z_p, \ldots, z_{N+1}$ de la structure.

Ainsi, en polarisation TE (resp. TM) on écrit la continuité de E_y (resp. H_y) et de H_x (resp. E_x). Le champ E_y (resp. H_y) est donné par l'équation 1.7 dans laquelle les modes ont été calculés en résolvant le problème aux valeurs propres donné par l'équation 1.16 (resp. l'équation 1.15). Le champ H_x (resp. E_x) se déduit de E_y (resp. H_y) grâce aux équations de Maxwell, et s'exprime en fonction de $\frac{\partial E_y}{\partial z}$ (resp. $\frac{\partial H_y}{\partial z}$). Par exemple, la continuité de E_y à l'interface $z = z_{p+1}$ s'écrit

$$\sum_m A_m^p c_{mj}^p e^{i\beta_m^p(z_{p+1}-z_p)} + \sum_m B_m^p d_{mj}^p e^{-i\beta_m^p(z_{p+1}-z_p)} = \sum_m A_m^{p+1} c_{mj}^{p+1} + \sum_m B_m^{p+1} d_{mj}^{p+1}, \tag{1.17}$$

pour $j = -\frac{M-1}{2} \ldots \frac{M-1}{2}$, où M est le nombre total d'harmoniques de Fourier retenues dans le développement.

La constante de propagation β_m^p et les coefficients c_{mj}^p, d_{mj}^p, c_{mj}^{p+1} et d_{mj}^{p+1} étant connus grâce au calcul des modes, l'équation 1.17 constitue un ensemble de M équations à $4M$ inconnues. Ces inconnues sont les amplitudes des modes dans les couches p et $p+1$, A_m^p, B_m^p, A_m^{p+1} et B_m^{p+1}. La continuité de H_x à l'interface $z = z_{p+1}$ nous fournit M équations supplémentaires reliant les mêmes $4M$ inconnues.

Nous disposons ainsi d'un système linéaire de $2M$ équations à $4M$ inconnues. Il est donc possible de relier linéairement les amplitudes entre elles. Il existe plusieurs

formalismes pour cela, mais tous ne sont pas stables numériquement lorsque l'épaisseur des couches est grande[1]. C'est le cas par exemple du formalisme de la matrice de transfert, qui relie les amplitudes dans la couche p aux amplitudes dans la couche $p+1$. Nous utilisons le formalisme de la matrice de diffraction (S-matrix formalism) qui est connu pour sa stabilité [Cha94, Li96a]. La matrice de diffraction, que nous appelons par la suite matrice S, relie les amplitudes *entrantes* dans la couche p aux amplitudes *sortantes* :

$$\begin{bmatrix} A^{p+1} \\ B^{p} \end{bmatrix} = \mathrm{S}^p \begin{bmatrix} A^{p} \\ B^{p+1} \end{bmatrix}, \tag{1.18}$$

où A^p est le vecteur contenant les M amplitudes A^p_m. Il en est de même pour les vecteurs A^{p+1}, B^p et B^{p+1}.

La matrice S, outre sa stabilité numérique, présente l'avantage d'avoir une signification physique importante puisqu'elle représente les échanges d'énergie qui ont lieu à chaque interface entre les différents modes. Elle peut en effet être écrite sous la forme de 4 blocs de taille $M \times M$,

$$\begin{bmatrix} A^{p+1} \\ B^{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^{p+1} & R^{p+1} \\ R^{p} & T^{p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^{p} \\ B^{p+1} \end{bmatrix}, \tag{1.19}$$

où R^{p+1} (resp. R^p) est la réflexion des modes dans la couche $p+1$ (resp. la couche p) et T^{p+1} (resp. T^p) est la transmission des modes dans la couche $p+1$ (resp. la couche p). Ceci est illustré sur la Figure 1.2.

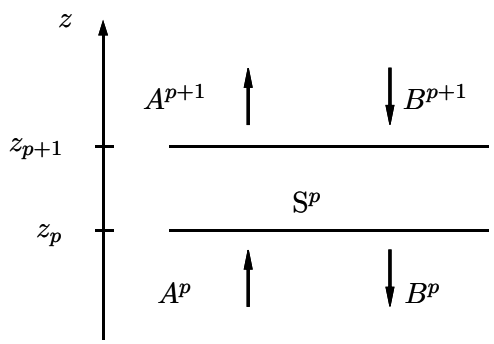

Figure 1.2: *La matrice* S^p *relie les amplitudes entrantes dans la couche* p *aux amplitudes sortantes.*

Le calcul de la matrice S^p de chaque couche se fait donc par la résolution d'un système linéaire. Ensuite, les différentes matrices sont concaténées pour obtenir la matrice S totale du réseau,

$$\begin{bmatrix} D^{\mathrm{I}} \\ D^{\mathrm{II}} \end{bmatrix} = \mathrm{S} \begin{bmatrix} I^{\mathrm{II}} \\ I^{\mathrm{I}} \end{bmatrix} = \mathrm{S}^0 \otimes \mathrm{S}^1 \otimes \cdots \otimes \mathrm{S}^N \begin{bmatrix} I^{\mathrm{II}} \\ I^{\mathrm{I}} \end{bmatrix}, \tag{1.20}$$

où S_0 est la matrice S correspondant uniquement à l'interface inférieure entre le milieu II et la première couche du réseau. Les matrices S forment une algèbre différente

[1] Le problème provient des modes évanescents et de l'évaluation numérique des termes en exponentielle de l'équation 1.17 qui peuvent être très grands ou très petits en même temps.

de l'algèbre habituelle des matrices, et le produit $\otimes$ de deux matrices S n'est pas le produit habituel de deux matrices [Li96a], il contient en particulier des inversions de matrices.

La matrice S totale du réseau possède la même signification physique que la matrice S^p de chaque couche. Elle se divise en 4 blocs,

$$\begin{bmatrix} D^{\mathrm{I}} \\ D^{\mathrm{II}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^{\mathrm{I}} & R^{\mathrm{I}} \\ R^{\mathrm{II}} & T^{\mathrm{II}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I^{\mathrm{II}} \\ I^{\mathrm{I}} \end{bmatrix}, \tag{1.21}$$

où T^{I} (resp. T^{II}) est la transmission du réseau dans le milieu I (resp. le milieu II) et R^{I} (resp. R^{II}) est la réflexion du réseau dans le milieu I (resp. le milieu II). Ces 4 blocs représentent les échanges d'énergie entre modes incidents et modes diffractés par le réseau.

1.1.4 Bilan

D'un point de vue numérique, la méthode modale de Fourier repose sur la diagonalisation d'une matrice, voir section 1.1.2, et sur la résolution d'un système linéaire, voir section 1.1.3. Ces problèmes d'algèbre linéaire peuvent être résolus efficacement grâce à des bibliothèques numériques contenant des algorithmes très performants. Par contre, ces algorithmes ne se prêtent pas facilement à un calcul parallèle, à l'inverse de ceux utilisés dans les méthodes de type FDTD qui reposent essentiellement sur des manipulations simples de matrices creuses de grande taille.

Ces caractéristiques découlent directement du caractère modal de la méthode, c'est-à-dire de l'intégration analytique des équations de Maxwell dans une direction. De notre point de vue, la description en termes d'échanges d'énergie entre modes et l'analyse physique qu'elle permet valent largement la perte d'efficacité numérique due à l'impossibilité de la parallélisation du code. Il est à noter que l'intégration analytique dans une direction de l'espace autorise la modélisation d'objets très étendus dans cette direction. C'est un avantage important des méthodes modales en général par rapport aux méthodes reposant sur une discrétisation tridimensionnelle.

Pendant longtemps, la méthode modale de Fourier a été utilisée uniquement pour l'analyse de structures périodiques. Nous allons voir maintenant qu'il est possible de l'appliquer au calcul de la diffraction par des structures non-périodiques, grâce à l'utilisation de couches absorbantes.

1.2 Généralisation de la méthode modale de Fourier

1.2.1 Le problème des conditions d'ondes sortantes

Pour pouvoir appliquer la méthode modale de Fourier à une structure tridimensionnelle (3D) non-périodique de taille finie, la première idée qui vient à l'esprit est de périodiser artificiellement la structure dans deux directions de l'espace, comme illustré sur la Figure 1.3. Cette périodisation artificielle, très utilisée en physique du solide où elle est connue sous le nom de méthode « super-cellule », permet d'obtenir

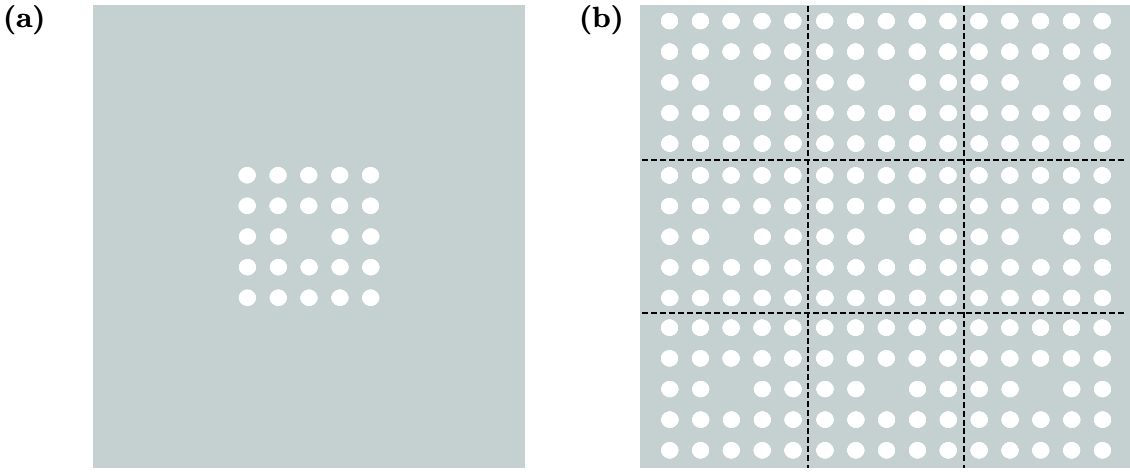

Figure 1.3: *Périodisation de type « super-cellule ». (a) Objet de taille finie dans un espace infini. (b) Objet périodisé dans deux directions. Les pointillés marquent la limite entre les différentes cellules, où les conditions d'ondes sortantes ne sont pas respectées.*

une structure bipériodique sur laquelle nous pouvons appliquer la méthode modale de Fourier.

Cependant, les solutions des équations de Maxwell de la structure ainsi périodisée ne sont pas les mêmes que celles de la structure initiale. Ceci est dû au fait que *les conditions d'ondes sortantes ne sont pas respectées dans la structure périodisée* de la Figure 1.3(b). En effet, les ondes sortantes d'une cellule se comportent comme des ondes entrantes dans les cellules voisines, modifiant ainsi le problème électromagnétique.

Pour remplir correctement les conditions d'ondes sortantes, il est nécessaire d'introduire entre les cellules des couches absorbantes, de façon à éliminer la contamination électromagnétique des cellules entre elles. Ces couches, qui doivent absorber totalement la lumière sans la réfléchir sont dites parfaitement adaptées, Perfectly Matched Layers (PMLs) en anglais.

Remplir correctement les conditions d'ondes sortantes est un problème partagé par de nombreuses méthodes numériques dès lors qu'il s'agit de calculer la diffraction par un objet de taille finie. Ainsi, depuis leur invention en 1994 [Bér94], les PMLs ont été largement utilisées pour la résolution numérique des équations de Maxwell. Elles ont été utilisées dans tous les domaines de l'électromagnétisme, aussi bien avec des méthodes de type FDTD, pour lesquelles elles ont été introduites, qu'avec des méthodes modales [Bie02].

L'idée de coupler l'utilisation de PMLs avec la méthode modale de Fourier a été introduite à l'Institut d'Optique au début des années 2000 dans le cadre de la thèse d'Eric Silberstein [Lal00b, Sil01, Cao02]. Cette idée simple a été reprise par la suite par plusieurs acteurs importants du domaine, M. G. Moharam (CREOL) [Moh03] et K.-M. Ho (Iowa State University) [Li04].

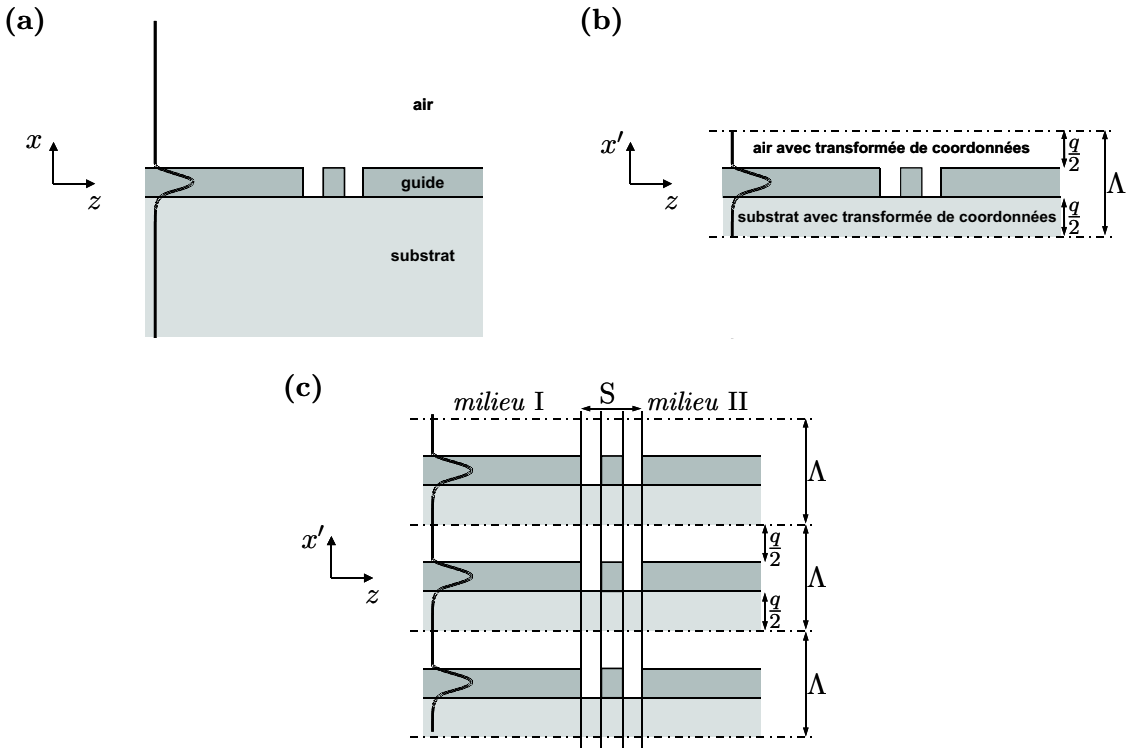

Figure 1.4: *Périodisation avec PMLs. (a) Objet de taille finie dans un espace infini* $x \in]-\infty; +\infty[$. *(b) Objet avec transformée de coordonnées. Les deux espaces semi-infinis de part et d'autre de l'objet ont été ramenés à des espaces de taille finie* $\frac{q}{2}$. *L'objet se trouve donc dans un espace fini* $x' \in]-\frac{\Lambda}{2}; +\frac{\Lambda}{2}[$. *(c) Même objet que (b) périodisé avec une période* Λ. *C'est à cette structure périodique qu'est appliquée la méthode modale de Fourier.*

1.2.2 Les Perfectly Matched Layers par l'exemple

Le concept de PML peut être introduit de différentes façons, en utilisant des champs « splittés » [Bér94], des milieux anisotropes [Sac95], ou une transformée de coordonnées complexe [Che94]. Le lecteur intéressé par ce sujet pourra se référer à l'article [Hug05b] qui présente les PMLs à l'aide d'une transformée de coordonnées complexe et non-linéaire et qui discute leur mise en œuvre dans la méthode modale de Fourier.

En pratique, l'objectif de la transformée de coordonnées complexe est de transformer le milieu semi-infini qui entoure l'objet — l'air ou le substrat de la Figure 1.4(a) — en un milieu absorbant de taille finie qui garantit que les conditions d'ondes sortantes soient strictement préservées dans l'air et dans le substrat. La cellule de calcul qui est périodisée est alors formée de l'objet entouré de la zone dans laquelle se situe la transformée de coordonnées. Les conditions d'ondes sortantes sont remplies (théoriquement) car toutes les ondes propagatives et évanescentes qui entrent dans une cellule de calcul (les ondes sortantes des cellules adjacentes) sont atténuées sur une distance infinie avant d'atteindre l'objet.

La Figure 1.4 illustre ce principe sur l'exemple d'un guide d'onde planaire dans

lequel deux fentes ont été gravées. La Figure 1.4(a) montre le problème physique à résoudre, qui consiste à calculer la diffraction du mode fondamental du guide par les fentes. La Figure 1.4(b) montre le problème équivalent obtenu après application de la transformée de coordonnées $x \to x'$, qui transforme les deux espaces semi-infinis de part et d'autre de l'objet en deux espaces finis de taille $\frac{g}{2}$. L'objet se trouve maintenant dans un espace de taille finie Λ. Finalement, la Figure 1.4(c) montre le problème périodisé. Formellement, c'est un réseau 1D multi-couche de période Λ. En référence à la section 1.1.1, les milieux I et II ont été représentés sur la Figure 1.4(c), ainsi que la matrice S du réseau. Celui-ci est constitué de trois couches (délimitées par les traits verticaux) dans lesquelles la permittivité et la perméabilité sont périodiques en x' de période Λ et invariantes en z. Les milieux I et II ne sont plus des milieux homogènes comme dans le cas de la diffraction par un réseau en espace libre. Les modes incidents et diffractés reliés par la matrice S ne sont donc plus des ondes planes, ce sont les modes guidés et radiatifs du guide planaire dans l'espace transformé.

1.3 Conclusion

Nous avons présenté dans ce Chapitre les grandes lignes de la méthode numérique qui a été utilisée dans ce travail. Cette méthode originale est basée sur la méthode modale de Fourier et utilise des couches absorbantes de type PML. L'intérêt de généraliser ainsi la méthode modale de Fourier est de pouvoir disposer d'une méthode numérique stable et efficace pour traiter des problèmes de diffraction non-périodiques.

Par rapport à des méthodes de type différences finies ou éléments finis qui reposent sur une discrétisation 3D des équations de Maxwell, la méthode modale de Fourier repose sur une discrétisation 2D — dans l'espace de Fourier — et sur une intégration analytique dans la troisième direction de l'espace. L'intégration analytique, en introduisant naturellement les modes de la structure ainsi que leurs échanges d'énergie aux interfaces, procure à la méthode numérique une signification physique forte et permet de *calculer directement l'énergie diffractée dans un mode en optique intégrée*. La direction dans laquelle est réalisée l'intégration analytique est alors fixée par le problème physique à résoudre, c'est la direction de propagation du mode considéré. Un exemple d'un tel calcul est donné à la section 3.4.

Par contre, pour les structures qui ne possèdent pas d'axe de propagation privilégié, l'intégration analytique peut être réalisée dans n'importe laquelle des trois directions de l'espace. Le choix de cette direction privilégiée se fait en fonction des particularités géométriques de l'objet, avec par exemple l'efficacité numérique comme critère de choix, voir section 3.1.

Chapitre 2

Règles de troncature pour la modélisation des discontinuités

Le fait que deux schémas de discrétisation différents des équations de Maxwell dans l'espace de Fourier aboutissent à des vitesses de convergence très différentes est un problème bien connu [Lal96c, Gra96]. Il a été montré que ce problème provenait de la troncature des séries de Fourier, obligatoire pour des raisons d'implémentation numérique, et de la présence de discontinuités dans l'objet [Li96b]. La démonstration aboutissant à l'établissement des règles de troncature dans l'espace de Fourier (aussi appelées règles de factorisation) repose complètement sur des théorèmes mathématiques relatifs aux séries de Fourier [Li01]. Ce résultat apparaissait donc, avant nos travaux, intrinsèquement lié à l'utilisation d'une base de Fourier, alors que la modélisation d'objets discontinus et la troncature de séries infinies sont des problèmes qui dépassent ce cadre.

Dans ce Chapitre, nous montrons que *les résultats connus pour les séries de Fourier peuvent être généralisés à d'autres bases de fonctions.* Ce travail ne constitue pas une démonstration mathématique, mais il suggère fortement que de nombreuses méthodes numériques basées sur une décomposition du champ électromagnétique dans une base de fonctions continues peuvent bénéficier d'une forte amélioration de leur vitesse de convergence. Ce Chapitre reprend l'intégralité de l'article paru dans la revue Optical and Quantum Electronics sous le titre *Truncation rules for modeling discontinuities with Galerkin method in electromagnetic theory* [Sau04a].

Nous montrons tout d'abord que, dans le cadre de la résolution des équations de Maxwell à l'aide de la méthode de Galerkin, il existe plusieurs schémas de discrétisation, quelle que soit la base de fonctions utilisée. Nous proposons ensuite un argument intuitif suggérant que ces schémas différents se caractérisent par des vitesses de convergence différentes, comme dans le cas des séries de Fourier. Cet argument nous permet d'énoncer des règles de troncature pour la modélisation des discontinuités qui généralisent les règles de factorisation des séries de Fourier [Li96b, Li01]. Ces règles de troncature sont ensuite validées numériquement sur un exemple utilisant les fonctions de Hermite-Gauss. Nous mettons en particulier en évidence que l'amélioration de la vitesse de convergence provient du fait que les conditions aux limites sont correctement remplies au niveau des discontinuités.

Au-delà de l'amélioration observée spécifiquement pour les fonctions de Hermite-

Gauss, ce travail sous-tend l'hypothèse que de nombreuses méthodes n'utilisant pas les séries de Fourier pourraient bénéficier d'une forte accélération de leur convergence. Cette hypothèse est complètement absente des travaux antérieurs réalisés sur les décompositions en séries de Fourier. Ainsi, même si notre travail manque de rigueur mathématique, il a le mérite de poser le problème de façon générale.

2.1 Introduction

Because Maxwell's equations for linear materials are exact, computation plays a crucial role in the analysis and the design of photonic devices. The electromagnetic analysis of periodic structures has been performed over many years with methods relying on Fourier series to expand the permittivity and the electromagnetic fields. Earlier examples can be found in [Nev73, Kno78, Cha80, Gay85] for the analysis of the diffraction by gratings and more recently in [Ho90, Zha90] for the band computation of photonic crystals. For a long time, the numerical performances of these methods have been plagued by slow convergence performances since an impractically large number of Fourier terms had to be retained in the expansions in order to obtain accurate computational results. These rather low performances have been believed to be caused by the use of Fourier series to expand discontinuous functions (the permittivity for instance), and the Gibbs phenomenon has been invoked [Li93, Vil94].

In 1996, a truly dramatic improvement in the convergence rate was achieved for Transverse Magnetic (TM) polarization of one-dimensional gratings [Lal96c, Gra96], as well as for the general case of conical diffraction [Lal96c]. This improvement was achieved by reformulating the eigenvalue problem for the Bloch wave computation in the periodic structure. Especially, it was clearly evidenced that the use of the Fourier coefficients of the impermittivity (the inverse of the permittivity) or of the permittivity itself is crucial when establishing the eigenvalue problem. This finding was followed by the derivation of mathematical theorems that govern the factorization of Fourier series [Li96b, Li01].

These works had a tremendous impact on the performances of theories relying on Fourier expansion techniques and earlier methods have been rapidly revisited and improved by the use of the correct Fourier factorization rules. Examples of improvements are the Fourier modal method for crossed gratings [Li97], the differential method [Pop00], the C-method [Li96c], and the plane wave method for band computations [Lal98a, Eno01], to quote only a few of them. Furthermore, it has been recently proposed that Fourier expansion techniques can also be used for non-periodic diffraction problems [Lal00b, Sil01, Ter01] thanks to an artificial periodization combined with the use of perfectly-matched-layers [Bér94] to electromagnetically isolate the periodized cells. Recent examples in integrated optics are the calculation of the reflection [Ter01, Cty02] and the out-of-plane radiation losses of guided waves impinging on one-dimensional [Pal01] and two-dimensional [Sil01] Bragg gratings, the loss modeling of line-defect photonic crystal waveguides [Lal02, Sau03]. As a whole, all these theoretical contributions make Fourier expansion techniques a simple and efficient tool to solve Maxwell's equations for various periodic and non-periodic diffraction problems.

Clearly, the reason for the drastically enhanced performances is that the electromagnetic boundary conditions at the interface between different media are well satisfied [Li96b], even when the matrices of the eigenvalue problem are truncated for the sake of numerical implementation. Let us mention that the development of numerical codes which implement accurately the boundary conditions at material interfaces is a general trend in electromagnetic theory, see for instance in a different context, the efforts devoted to finite-difference techniques [Hoe92, Hel96, Lal00a]. Knowing the reason for the convergence improvement is essential, but it does not provide intuition for the derivation of the correct factorization rules and for its domain of applicability. There is a long way to go from matching accurately the boundary conditions in a truncated space to deriving the correct factorization rules.

In this work, we study the formulation of an electromagnetic problem in a discrete truncated space, using orthogonal functions expansion techniques (Galerkin method). These orthogonal functions can be the Fourier functions or any other complete set of orthogonal functions. We show that the existence of two truncation schemes for the matrices of an eigenvalue problem is quite general, and we evidence that the use of the impermittivity or of the permittivity in the formulation of an eigenvalue problem has generally a huge impact on the convergence performances. This finding is supported by a numerical evidence obtained for Hermite-Gauss functions and by an intuitive argument which simply explains the difference of convergence performances between both truncation schemes. Although this argument lacks mathematical basis, we believe that it well reflects the main aspects associated to the truncation problem.

In Section 2.2, the general formulation of the Galerkin method for an elementary electromagnetic problem is presented, together with a discussion on the impact of the truncation of the equations on the convergence performances. In Section 2.3, numerical computations performed for a simple example which can be easily reproduced are provided to support the analysis. It is shown that the two main results known for Fourier series, namely an enhanced convergence rate and an uniform convergence for the correct truncation scheme, remain valid when using Hermite-Gauss series. Finally, the article is summarized in Section 2.4 and perspectives are discussed.

2.2 Solution of Maxwell's equations by the Galerkin method

2.2.1 Presentation of the Galerkin method

Let us illustrate our purpose by considering a classical problem in electromagnetism, namely the calculation of the eigenmodes of a one-dimensional lamellar structure, see Figure 2.1. The whole problem (structure and electromagnetic field) is invariant along the y-direction. The relative permittivity ε and permeability μ of the structure depend only on the x-coordinate, and the structure is invariant by translation along the z-direction. This simple geometry encompasses for instance one-dimensional photonic crystals or planar waveguides.

Maxwell's equations can be separated into two independent systems of linear

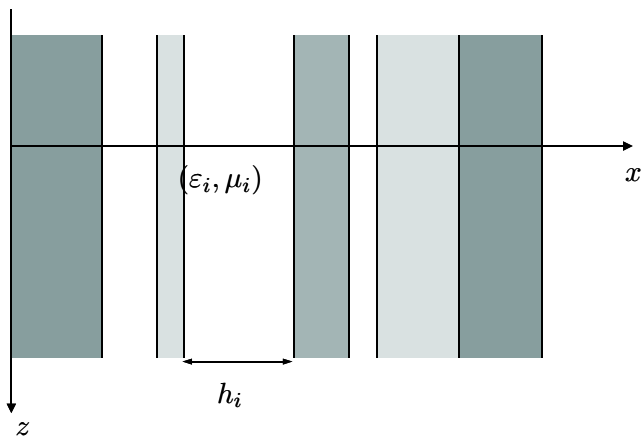

Figure 2.1: *General scheme of a one-dimensional lamellar structure. Each layer has a permittivity ε_i, a permeability μ_i and a thickness h_i. The structure is characterized by a piecewise constant distribution $\varepsilon(x)$ and $\mu(x)$ and is invariant by translation along the z-direction.*

differential equations. For Transverse Magnetic (TM) polarization (magnetic field parallel to the y-axis), the eigenmodes of the structure at the frequency ω can be written as [Sny83]

$$\vec{E}(x,z,t) = \sqrt{Z_0}[e_x(x)\vec{u}_x + e_z(x)\vec{u}_z]e^{i\beta z}e^{-i\omega t}, \tag{2.1}$$

$$\vec{H}(x,z,t) = \frac{-i}{\sqrt{Z_0}}h(x)\vec{u}_y e^{i\beta z}e^{-i\omega t}, \tag{2.2}$$

where Z_0 is the vacuum impedance and β is the propagation constant. The associated Maxwell's equations are

$$\begin{cases} i\beta h(x) = -k_0\varepsilon(x)e_x(x), \\ e_z(x) = \dfrac{1}{k_0\varepsilon(x)}\dfrac{\mathrm{d}h(x)}{\mathrm{d}x}, \\ i\beta e_x(x) = k_0\mu(x)h(x) + \dfrac{\mathrm{d}e_z(x)}{\mathrm{d}x}, \end{cases} \tag{2.3}$$

where k_0 is the modulus of the free space wave vector. The Transverse Electric (TE) polarization (electric field parallel to the y-axis) case is simply obtained by replacing (h, e_x, e_z) by (e, h_x, h_z) and by inverting the permittivity and the permeability $\varepsilon(x) \leftrightarrow \mu(x)$ in Equation 2.3. The TM polarization is considered hereafter.

It is convenient to write Equation 2.3 as an operator equation, involving linear operators. The unknown functions to be calculated, $h(x)$, $e_x(x)$ and $e_z(x)$, belong to a specific space of functions $\mathbb{F}$ with a given scalar product, depending on the physical problem considered. The bra-ket notation is used in the following : any function f of $\mathbb{F}$ is denoted by $|f\rangle$ and the scalar product of two functions f and g of $\mathbb{F}$ is denoted by $\langle f|g\rangle$. The three other functions in Equation 2.3, namely $\varepsilon(x)$, $\frac{1}{\varepsilon(x)}$ and $\mu(x)$, are known and do not necessary belong to $\mathbb{F}$. They can be considered as linear operators over the space $\mathbb{F}$. With the bra-ket notation, Equation 2.3 can be written

$$\begin{cases} i\dfrac{\beta}{k_0}|h\rangle &= -\mathcal{E}|e_x\rangle, \\ |e_z\rangle &= \mathcal{A}\mathcal{D}|h\rangle, \\ i\dfrac{\beta}{k_0}|e_x\rangle &= \mathcal{U}|h\rangle + \mathcal{D}|e_z\rangle, \end{cases} \tag{2.4}$$

where $\mathcal{E}$, $\mathcal{A}$ and $\mathcal{U}$ denote the operators corresponding respectively to $\varepsilon(x)\times$, $\frac{1}{\varepsilon(x)}\times$ and $\mu(x)\times$. $\mathcal{D}$ is the differential operator $\frac{1}{k_0}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$. Equation 2.3 and Equation 2.4 are both written in spatial variables, only the notations differ.

An effective way to deal with this linear differential system is the well-known Galerkin method [Mar92, Boo92]. This method relies on the expansion of the unknown functions over a complete set of orthogonal functions. These functions, denoted by $|\psi_m\rangle$, $m = 1, 2, \ldots$, form an orthonormal basis of $\mathbb{F}$, $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$. The unknown fields are expanded over this basis as follows : $|h\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} h_m|\psi_m\rangle$, $|e_x\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} e_{xm}|\psi_m\rangle$ and $|e_z\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} e_{zm}|\psi_m\rangle$. Then the differential system is projected onto the same set of functions. As a consequence, Equation 2.4 written in space variables is transformed into a set of equations in discrete space. These equations contain an infinite number of terms and have to be truncated for the numerical implementation. Before formulating the equations in discrete space, let us first study the effects of the truncation process.

2.2.2 Intuitive argument for the truncation process

It is well established how the set of Equation 2.4 has to be truncated in discrete Fourier space in order to achieve fast convergence rates [Li96b]. An intuitive argument which shows that similar considerations hold for orthogonal functions different from the Fourier series is presented hereafter.

The truncation of Equation 2.4 is problematic because of the discontinuities contained in the physical problem. Equations 2.4 *all* contain relationships between a continuous function ($|h\rangle$ or $|e_z\rangle$) and a discontinuous one ($|e_x\rangle$, $\mathcal{D}|h\rangle$ or $i(\beta/k_0)|e_x\rangle - \mathcal{D}|e_z\rangle$) through an operator ($\mathcal{E}$, $\mathcal{A}$ or $\mathcal{U}$) associated to a known discontinuous function. As a generic example, let us consider the following relation in real space,

$$f(x) = b(x) \times g(x), \tag{2.5}$$

where $f(x)$ is an unknown continuous function belonging to $\mathbb{F}$, $g(x)$ is an unknown discontinuous function belonging to $\mathbb{F}$ and $b(x)$ is a known discontinuous function representing the permittivity, the permeability or their inverses. Note that the function $b(x)$ does not necessary belong to $\mathbb{F}$.

From Equation 2.5, and with the notations defined in Section 2.2.1, two operators have to be considered *a priori*

$$|f\rangle = \mathcal{B}|g\rangle, \tag{2.6}$$

$$\mathcal{C}|f\rangle = |g\rangle, \tag{2.7}$$

(a)

$$\begin{bmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_N \\ \vdots \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{00} & \cdots & B_{0N} & \cdots & B_0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ B_{N0} & \cdots & B_{NN} & \cdots & B_N \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ B_0 & \cdots & B_N & \cdots & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_0 \\ \vdots \\ g_N \\ \vdots \\ g \end{bmatrix}$$

(b)

$$\begin{bmatrix} C_{00} & \cdots & C_{0N} & \cdots & C_{0\infty} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ C_{N0} & \cdots & C_{NN} & \cdots & C_{N\infty} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ C_{\infty 0} & \cdots & C_{\infty N} & \cdots & C_{\infty\infty} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_N \\ \vdots \\ f_\infty \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_0 \\ \vdots \\ g_N \\ \vdots \\ g_\infty \end{bmatrix}$$

(c) *Truncation scheme I*

$$\begin{bmatrix} f_0^{(N)} \\ \vdots \\ f_N^{(N)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{00} & \cdots & B_{0N} \\ \vdots & & \vdots \\ B_{N0} & \cdots & B_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_0 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix}$$

(d) *Truncation scheme II*

$$\begin{bmatrix} C_{00} & \cdots & C_{0N} \\ \vdots & & \vdots \\ C_{N0} & \cdots & C_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_0^{(N)} \\ \vdots \\ g_N^{(N)} \end{bmatrix}$$

Figure 2.2: *Two different truncation schemes. (a) Infinite matrix relation in discrete space corresponding to Equation 2.6. (b) Infinite matrix relation in discrete space corresponding to Equation 2.7. (c) Truncation scheme I. (d) Truncation scheme II.*

where $\mathcal{B}$ and $\mathcal{C}$ are the linear operators corresponding respectively to $b(x)\times$ and $c(x)\times$, with $c(x) = \frac{1}{b(x)}$. Note that Equations 2.6 and 2.7 represent two equivalent forms of Equation 2.5.

The application of the Galerkin method to Equations 2.6 and 2.7 leads to two linear equations in discrete space, $[f] = B[g]$ and $C[f] = [g]$, where $[f]$ and $[g]$ are the infinite vectors formed with the expansion coefficients of $|f\rangle$ and $|g\rangle$, and B and C are the infinite matrices whose coefficients are respectively $B_{nm} = \langle\psi_n|\mathcal{B}|\psi_m\rangle$ and $C_{nm} = \langle\psi_n|\mathcal{C}|\psi_m\rangle$. The expansion coefficients of $|f\rangle$ and $|g\rangle$ are denoted by f_m and g_m hereafter.

Figures 2.2(a) and 2.2(b) illustrate the two matrix relations in the infinite discrete space. The truncated matrices B^{NN} and C^{NN} are shown in Figures 2.2(c) and 2.2(d). They are simply the submatrices of B and C defined by the black boxes in Figures 2.2(a) and 2.2(b). Clearly, the truncation introduces an error since the vector $[f^{(N)}] = B^{NN}[g]^N$ differs from $[f]^N$ and the vector $[g^{(N)}] = C^{NN}[f]^N$ differs from $[g]^N$, where $[f]^N$ and $[g]^N$ are the vectors formed by the first $(N+1)$ f_m and g_m coefficients, respectively.

As we shall see hereafter, it is often legitimate to consider that the coefficients of the continuous function tend to zero much faster than those of the discontinuous function. Let us first consider the specific case of a continuous function $f(x)$ equal to a linear combination of a finite number of basis functions, i.e. for $m > N_0$, $f_m = 0$. In order to estimate the truncation errors for the two different schemes, the truncation rank N is chosen larger than N_0. Clearly, the error introduced by the truncation scheme II $\left|\sum_{m>N} C_{pm} f_m\right|$ is equal to zero whereas the error introduced by the truncation scheme I $\left|\sum_{m>N} B_{pm} g_m\right|$ is not. Thus the truncation scheme I leads to the truncated relation $B^{NN}[g]^N = [f^{(N)}]$, where $[f^{(N)}]$ differs from the

exact vector $[f]^N$, whereas the truncation scheme II leads to the exact truncated relation $C^{NN}[f]^N = [g]^N$. If we assume that the inverse of the matrix C^{NN} exists, it implies that the first $(N+1)$ coefficients of the function $f(x)$ are computed exactly from the relation $(C^{NN})^{-1}[g]^N = [f]^N$.

As a whole it follows that, with the truncation scheme I, the coefficients of the continuous function $f(x)$ are obtained only *approximately*, whereas with the truncation scheme II, they are obtained *exactly*.

We have only considered a particular case, and in general, the continuous function $f(x)$ has to be described by an infinite number of basis functions. However, it is possible to conjecture that, under the assumption that the orthogonal functions $|\psi_m\rangle$ are continuous[1], continuous functions (like $f(x)$) are "better represented" in the basis than discontinuous ones (like $g(x)$). In other words, this amounts to consider that the expansion coefficients f_m of the continuous function decrease more rapidly than the coefficients g_m of the discontinuous function. This difference in convergence rate is well known for Fourier series for instance. With this in mind, and although the error relative to the continuous function introduced by the truncation scheme II is no longer strictly zero for large N, the previous argument remains qualitatively valid in the general case, and the truncation scheme II is expected to be more accurate than the truncation scheme I.

The conclusion of this discussion is that one has to pay close attention to the equations in real space before transposing them in discrete truncated space to minimize the truncation errors. In practice, the equations in real space have to be written in such a form that the operators associated to discontinuous functions operate only on continuous functions.

2.2.3 Eigenvalue problem for the translation invariant structure

In this Section, the truncation rule formulated in Section 2.2.2 is applied to discretize the set of Equation 2.4. For the sake of conciseness, the superscript N is no longer used in the matrix notations although we are indeed concerned with truncated matrix equations. To satisfy the intuitive argument, it is easily found that Equation 2.4 has to be rewritten differently

$$\left\{\begin{array}{rcl} i\dfrac{\beta}{k_0}\mathcal{A}|h\rangle & = & -|e_x\rangle, \\ \mathcal{E}|e_z\rangle & = & \mathcal{D}|h\rangle, \\ i\dfrac{\beta}{k_0}|e_x\rangle & = & \mathcal{U}|h\rangle + \mathcal{D}|e_z\rangle. \end{array}\right. \tag{2.8}$$

These equations in real space are then transposed in discrete space by using Galerkin method, and we obtain in a matrix form

[1]This assumption is reasonable : examples of complete sets of orthogonal functions commonly used in electromagnetism are plane waves, Bessel functions or Hermite-Gauss functions.

$$\begin{cases} i\dfrac{\beta}{k_0}A[h] &= -[e_x], \\ E[e_z] &= K_x[h], \\ i\dfrac{\beta}{k_0}[e_x] &= U[h] + K_x[e_z], \end{cases} \tag{2.9}$$

where E, A, U and K_x represent the truncated matrices associated to the operators $\mathcal{E}$, $\mathcal{A}$, $\mathcal{U}$ and $\mathcal{D}$, whose coefficients are defined in the Appendix A on one specific example. These equations can be reduced to a single eigenvalue problem for β^2

$$A^{-1}\left(U + K_x E^{-1} K_x\right)[h] = \frac{\beta^2}{k_0^2}[h]. \tag{2.10}$$

Equation 2.10 represents the general eigenvalue problem associated to a one-dimensional lamellar structure (for TM polarization[2]) and satisfying the intuitive argument for an arbitrary orthonormal basis. It is worth emphasizing that the natural[3] discretization scheme for the set of Equation 2.4 leads to a completely different eigenvalue-problem formulation in the discrete truncated space

$$E\left(U + K_x A K_x\right)[h] = \frac{\beta^2}{k_0^2}[h]. \tag{2.11}$$

For the particular case of the Fourier basis, $\psi_m(x) = \exp(imKx)$, E, A and U are Toeplitz matrices and K_x is diagonal. It is easy to see that Equations 2.10 and 2.11 are identical to Equations 9 and 6(a) in [Lal96c], except for minor convention disparities. Consequently, Equation 2.10 represents a generalization to other expansion basis of known results in Fourier series.

2.3 Numerical example for Hermite-Gauss functions

The intuitive argument given in Section 2.2 suggests that the work performed with Fourier series is quite general. In this Section, we provide a numerical evidence supporting this suggestion.

Many different set of orthogonal functions are used in electromagnetism to expand the unknown electric or magnetic fields. Clearly, verifying the argument of Section 2.2 for all of them would be tiresome. Hermite-Gauss functions constitute relevant test functions since they have been the subject of intense research over the last decade for modelling optical waveguides [Gal91, Ras93, Wel95, Ort03], and more recently, for modelling photonic crystal fibers [Mog98, Mon99]. They form an

[2]For TE polarization, the matrices E, A and U have to be replaced in Equations 2.10 and 2.11 by the matrices U, F and E, where F is the matrix associated to the operator $\mu^{-1}(x)\times$.

[3]By natural discretization scheme, we mean the formulation which is straightforwardly derived by a direct elimination of the electric field in between Equation 2.4. Note that Equation 2.11 has been used over 20 years with Fourier series before 1996.

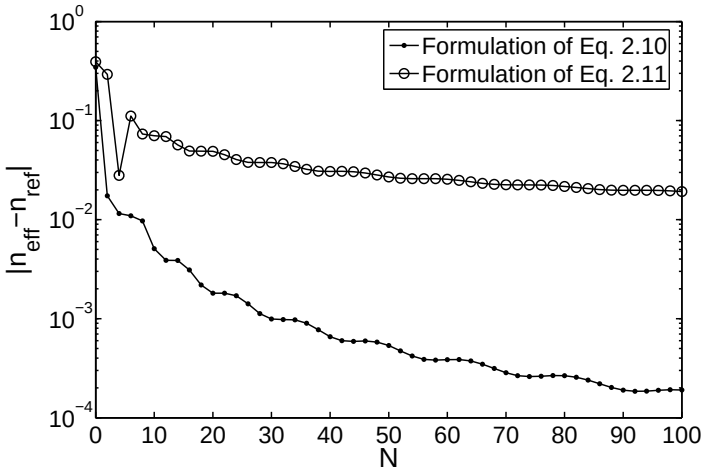

Figure 2.3: *Convergence of the effective index of the fundamental mode of a symmetrical waveguide as a function of the truncation rank N. The effective index is calculated by expanding the magnetic field over the Hermite-Gauss basis. The circles correspond to the effective index calculated with truncation scheme I (Equation 2.11) and the dots correspond to the effective index calculated with truncation scheme II (Equation 2.10).*

orthonormal complete basis of $\mathbb{L}^2$, which makes them suitable for the computation of guided modes since they naturally satisfy the boundary conditions at infinity.

For one-dimensional problems, the Hermite-Gauss function of order n, $n = 0, 1, \ldots,$ is defined by

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{w\sqrt{2\pi}n!}} H_n\left(\frac{x}{w}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{4w^2}\right), \tag{2.12}$$

where $H_n\left(\frac{x}{w}\right)$ is the nth-order Hermite polynomial [Abr72] and w is a scaling factor. The two important results of the work performed with Fourier series are the convergence improvement [Lal96c] and the demonstration of the uniform convergence [Li96b]. In the following, we show that these results remain valid for expansion techniques relying on Hermite-Gauss functions.

To illustrate our purpose, let us consider the basic problem of a planar dielectric symmetrical waveguide composed of two semi-infinite layers with permittivity $\varepsilon_1 = 1$ and a core layer with permittivity $\varepsilon_2 = 12.25$. The core thickness is $h = x_2 - x_1 = 300nm$, and the wavelength is $\lambda = 1\mu m$. The media are assumed to be non-magnetic. For this set of parameters, the waveguide supports two guided modes for TM polarization. The effective index of the fundamental guided mode $n_{eff} = \frac{\beta}{k_0}$ has been calculated with both formulations of Equations 2.10 and 2.11. Figure 2.3 shows the error $|n_{eff} - n_{ref}|$ as a function of the truncation rank N. The effective index n_{ref}, taken for reference, is calculated with the 2×2 matrix method [Yeh98] : $n_{ref} = 3.103057$. Details concerning the numerical calculation of the matrices E, A and K_x for the Hermite-Gauss functions can be found in the Appendix A. The

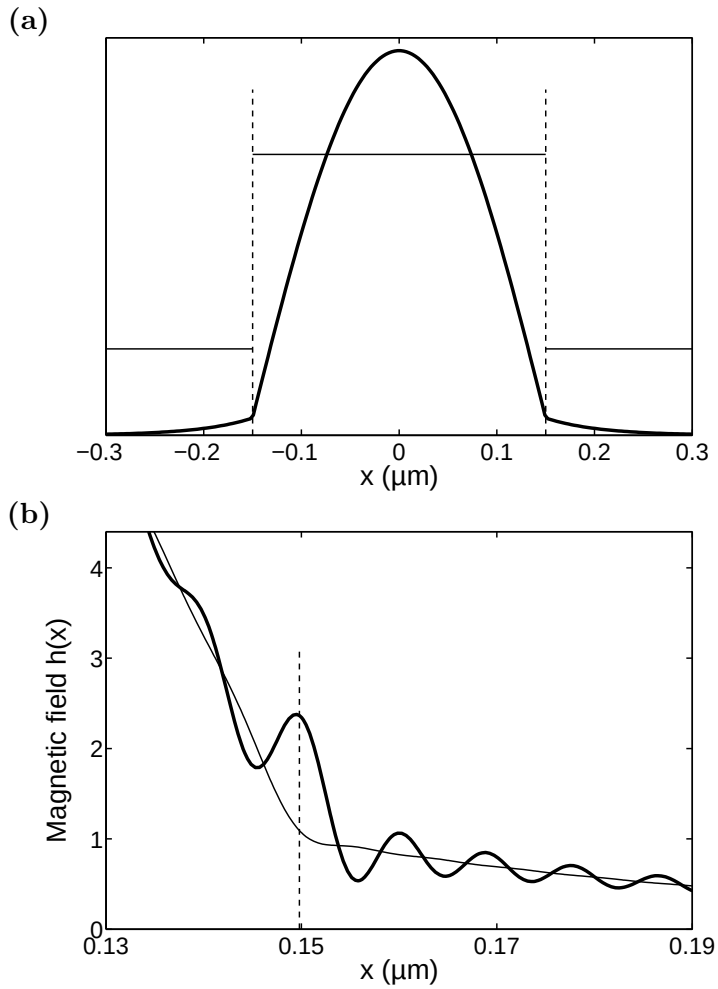

Figure 2.4: *Uniform convergence for the truncation scheme II. (a) Exact representation for the magnetic field $h(x)$ (bold curve) and for the permittivity $\varepsilon(x)$ (thin horizontal lines). (b) Magnetic field computed for $N = 170$ with the truncation scheme I (bold curve) and with the truncation scheme II (thin curve). The vertical dashed lines correspond to the permittivity discontinuities.*

scaling factor used for the computation of n_{eff} is $w = 50nm$. As shown in Figure 2.3, the eigenproblem formulation of Equation 2.10 provides a much faster convergence than the one of Equation 2.11.

Figure 2.4(a) shows the piecewise constant permittivity $\varepsilon(x)$ of the waveguide (thin horizontal lines) and the transverse magnetic field profile $h(x)$ of the fundamental mode (bold curve). For this simple example, the expression of the magnetic field is analytical. It is a cosine function in the core and decaying exponential functions in the claddings. Thus, according to Equation 2.3, the x-component $e_x(x)$ of the electric field is also an analytical function given by $-in_{eff}h(x)/\varepsilon(x)$. Let us denote by e_{xm} the exact coefficients of the discontinuous function $e_x(x)$ over the Hermite-Gauss basis. For a given truncation rank N, one can estimate the first $(N+1)$ Hermite-Gauss coefficients of $h(x)$, h_m, by using the truncation scheme I, $[h] = \frac{i}{n_{eff}}E[e_x]$ or

by using the truncation scheme II, $[h] = \frac{i}{n_{eff}} A^{-1}[e_x]$. Figure 2.4(b) compares the magnetic field profile $h(x) = \sum_{m=1}^{N} h_m |\psi_m\rangle$ obtained with both approaches for N = 170 and in the vicinity of the discontinuity. As shown, an uniform convergence is achieved with the truncation scheme II (thin curve), whereas the truncation scheme I (bold curve) results in large oscillations in the vicinity of the discontinuities.

This result obtained for Hermite-Gauss functions is very similar to the one known for Fourier series [Li96b]. Thus one may suspect that, like for Fourier series, the convergence improvement reported in Figure 2.3 is due to the fact that the boundary conditions are exactly matched.

2.4 Conclusion

We have revealed that the Fourier factorization rules which have strongly contributed to the elaboration of efficient numerical tools relying on Fourier series (plane-wave expansion) for modelling the diffraction of light by many structures in electromagnetics may as well be applied to other electromagnetic theories using other expansion basis. This finding is supported by a study of the convergence performances of different truncation schemes for calculating the guided modes of a planar waveguide with techniques relying on the expansion of the electromagnetic field over a complete basis of Hermite-Gauss functions.

Like for Fourier series, *a priori* similar truncation schemes have been found to lead to very different truncation errors and convergence rates, and the key role played by the discontinuity handling has been evidenced. In addition, we have provided an intuitive argument for explaining the different convergence rates. Clearly this argument lacks mathematical rigor and deserves further studies. We have been looking intensely for a mathematical justification but this work has proven unsuccessful. One of the major obstacles we have met is the proof of the existence of the inverse of the truncated matrices. However, during this work, we have fairly convinced ourselves that the basic assumption used for the intuitive argument (see Section 2.2.2) contains much of the statements required for expecting a difference in the convergence performances. Although it cannot be taken for granted, this basic assumption can be helpful to critically glance at other methods relying on other expansion techniques.

We hope that this work opens interesting perspectives for computational methods relying on Galerkin method in general. To restrict our discussion solely to Hermite-Gauss expansions, this work raises up an important aspect of the truncation problem, which has not been discussed earlier to our knowledge. Furthermore, since the basic properties known in Fourier series (convergence improvement and uniform convergence) remain valid for Hermite-Gauss functions, it is reasonably expected that the study of multidimensional problems could benefit from the works performed with Fourier series [Li97]. Note that for these multidimensional problems, Hermite-Gauss expansions which judiciously combine both truncation schemes in two orthogonal space directions have to be used. In addition, the authors have been recently aware that a related work has been performed with Fourier-Bessel functions, see [Pop04].

Chapitre 3

Etude numérique du mode fondamental des guides à cristaux photoniques

Dans ce Chapitre, nous utilisons la méthode modale de Fourier généralisée pour modéliser des structures à base de cristaux photoniques bidimensionnels gravés dans des empilements de couches minces. Du fait de certaines propriétés optiques intéressantes des cristaux photoniques, ces structures suscitent un fort intérêt en optique intégrée, tant pour réaliser des composants passifs (guides d'onde, jonctions en Y, filtres...) que des composants actifs (lasers, modulateurs...). Le guide d'onde formé en introduisant un défaut linéaire dans le cristal photonique — comme par exemple la suppression d'une rangée de trous — est la brique de base de tous ces composants. C'est une structure simple, mais sa modélisation électromagnétique s'avère difficile, notamment à cause des pertes par diffraction hors du plan des couches.

L'objet de ce Chapitre est d'effectuer une étude numérique et théorique détaillée de la propagation de la lumière dans les guides à cristaux photoniques. Cette étude s'appuie sur la méthode modale de Fourier généralisée qui a été présentée dans le Chapitre 1. Nous nous intéressons ici à deux problèmes « élémentaires » centrés autour du guide d'onde à cristaux photoniques : la détermination de l'atténuation et de la durée de vie intrinsèques du mode fondamental du guide et le calcul de la réflectivité de ce mode sur un cristal photonique bidimensionnel.

La première section de ce Chapitre est consacrée à la détermination des pertes de propagation intrinsèques du guide à cristaux photoniques. Ce travail a fait l'objet d'une publication dans la revue IEEE Photonics Technology Letters [Sau03]. Après avoir posé le problème à résoudre, nous présentons l'approche originale que nous avons développée en mettant en avant ses avantages par rapport aux approches antérieures présentes dans la littérature. Notre approche, basée sur le calcul de la résonance transverse associée au mode, constitue une extension de la *transverse resonance method* utilisée en optique intégrée pour calculer les modes d'un guide invariant par translation [Vas97]. Nos résultats sont validés en les comparant à des résultats expérimentaux ainsi qu'à des résultats numériques obtenus avec d'autres méthodes de calcul.

La deuxième section montre que, dans certains cas, la résonance transverse peut

être décrite à l'aide d'un modèle Fabry-Perot. L'atténuation du mode peut alors être exprimée analytiquement, mettant ainsi en évidence les paramètres physiques dont elle dépend.

Dans la troisième section, nous établissons la relation entre l'atténuation du mode, sa durée de vie et sa vitesse de groupe. Cette relation, qui montre que l'atténuation d'un mode lent diverge lorsque sa durée de vie garde une valeur finie non nulle, est validée pour le mode fondamental et le premier mode antisymétrique du guide à cristaux photoniques.

Dans la dernière section, nous présentons le calcul de la réflexion du mode guidé fondamental sur le cristal photonique sans défaut. Ce dernier calcul est à la base de l'interprétation physique du confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques que nous proposons dans le Chapitre 7.

3.1 Calcul des pertes de propagation

3.1.1 Problème physique à résoudre

Nous considérons le guide d'onde créé en introduisant un défaut linéaire dans un cristal photonique bidimensionnel. Le cristal est formé d'un réseau de trous d'air gravés dans une hétérostructure. Tous les calculs réalisés dans ce Chapitre concernent le guide d'onde à cristaux photoniques représenté à la Figure 3.1, formé en enlevant une rangée de trous dans la direction ΓK d'un réseau triangulaire de paramètre de maille a. Cependant, la méthode de calcul développée ici peut s'appliquer à tout type de défaut linéaire introduit dans un cristal photonique à maille carrée ou triangulaire. Le défaut linéaire est entouré de N rangées de trous de part et d'autre. Il s'agit donc de *modéliser une structure périodique de période a dans la direction z et de taille finie dans les deux directions x et y*. Le domaine de calcul 3D qu'il faut considérer est délimité par les rectangles noirs sur la Figure 3.1.

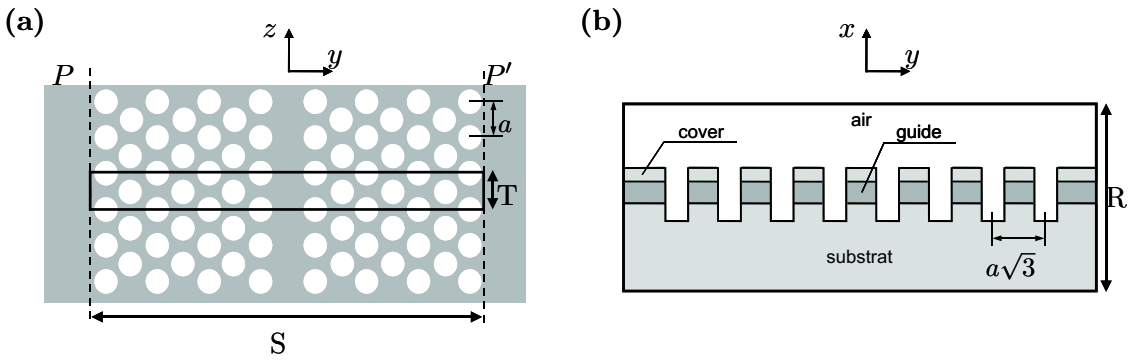

Figure 3.1: *Guide d'onde à cristaux photoniques en maille triangulaire. Le paramètre de maille du cristal photonique est a. (a) Vue de dessus et (b) vue de côté d'un guide avec $N = 7$ rangées de trous de part et d'autre du défaut. Les rectangles noirs délimitent le domaine de calcul 3D à considérer, quelle que soit la méthode numérique utilisée. Les matrices de diffraction* R, S *et* T *sont définies dans les sections 3.1.2 et 3.1.3.*

Les modes de cette structure sont des modes de Bloch. A la fréquence ω, chaque composante du champ électromagnétique s'écrit sous la forme

$$\psi(x, y, z) = u(x, y, z)e^{ikz}, \tag{3.1}$$

avec $u(x, y, z + a) = u(x, y, z)$. La constante de propagation k du mode est prise dans la première zone de Brillouin et la dépendance de la fonction u en x et en y est inconnue.

Courbe de dispersion du mode fondamental

Le guide d'onde de la Figure 3.1 supporte deux modes de Bloch dont la courbe de dispersion se situe à l'intérieur de la bande interdite du cristal. Les composantes prépondérantes de leur champ électromagnétique sont H_x et E_y, ce qui correspond à une polarisation quasi-TE, par référence au guide planaire non gravé. Les composantes H_x et E_y du premier mode sont symétriques par rapport à l'axe z et celles du deuxième mode sont antisymétriques [Chu00]. Nous nous intéressons ici aux *pertes de propagation du mode symétrique*, que nous qualifierons de mode fondamental. Sa courbe de dispersion $\omega(k)$ est représentée dans la première zone de Brillouin sur la Figure 3.2, accompagnée de deux tracés de champ.

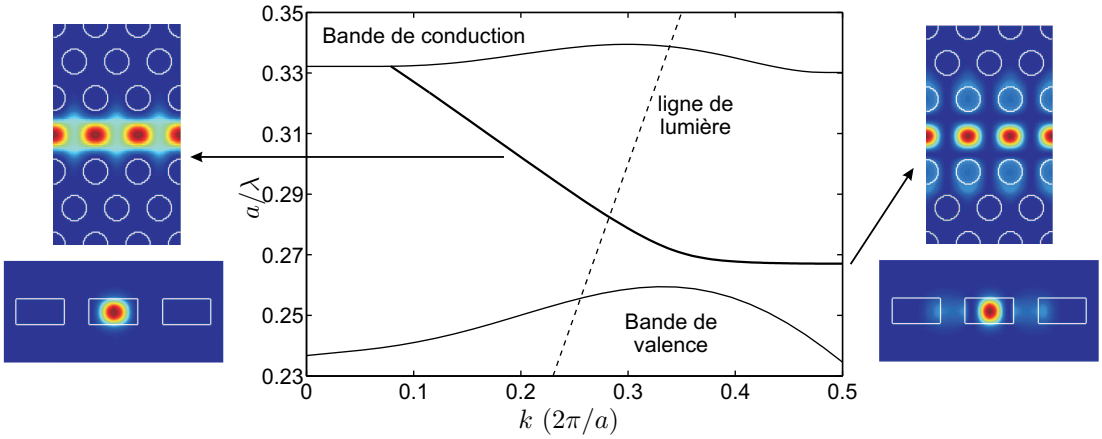

Figure 3.2: *Courbe de dispersion $\omega(k)$ du mode fondamental du guide à cristaux photoniques de la Figure 3.1. Les deux courbes en trait fin représentent les limites de la bande de valence et de la bande de conduction du cristal photonique sans défaut. Le module carré de la composante H_x du mode est représenté pour deux valeurs du vecteur d'onde, $k = 0.2$ et $k = 0.5$ (en unités $\frac{2\pi}{a}$). Les calculs ont été réalisés avec la méthode décrite à la section 3.1.3 pour un guide gravé dans une membrane d'indice $n = 3.4$ et de hauteur $h = 0.6a$. Le paramètre de maille et le rayon des trous sont respectivement $a = 390nm$ et $r = 0.3a$.*

Aux hautes fréquences, dans la partie linéaire de la courbe de dispersion, le confinement de la lumière est de type réfractif [Not01] et le guide à cristaux photoniques se comporte comme un guide ruban de même largeur. Pour des fréquences plus faibles proches de la coupure, le mode devient très dispersif. Sa vitesse de groupe diminue

fortement jusqu'à s'annuler au bord de la zone de Brillouin pour $k = \frac{\pi}{a}$ et l'extension latérale de son champ électromagnétique à l'intérieur du cristal photonique est plus importante.

Mécanismes physiques à l'origine des pertes de propagation

Un guide d'onde à cristaux photoniques est en fait similaire à un réseau coupleur unidimensionnel. Ainsi, au cours de sa propagation le long du défaut linéaire, *le mode de Bloch peut être couplé aux ondes planes propagatives dans l'air et dans le substrat* par la périodicité du cristal photonique. Ce couplage est possible dans l'air lorsque $k < \frac{\omega}{c}$ et dans le substrat lorsque $k < n_{sub}\frac{\omega}{c}$. On dit alors que le mode de Bloch est *au-dessus de la ligne de lumière* de l'air ou du substrat. Ce mode n'est pas réellement guidé : on parle de mode quasi-guidé. Lorsque le nombre N de rangées de trous de part et d'autre du défaut est infini, les modes de Bloch *sous la ligne de lumière* sont, eux, réellement guidés et se propagent le long du défaut sans être atténués.

Mais en pratique, le nombre N de rangées est nécessairement fini, rendant ainsi possible une fuite de la lumière dans le plan de l'hétérostructure par effet tunnel à travers le cristal photonique. Le taux de fuite que nous évoquons ici peut être compris comme un taux de diaphonie entre deux guides parallèles dans un circuit intégré à base de cristaux photoniques. Dès que le nombre N de rangées est assez grand, ces pertes par effet tunnel — qui se produisent à la fois en-dessous et au-dessus de la ligne de lumière — sont faibles par rapport aux pertes par diffraction au-dessus de la ligne de lumière. Mais nous verrons dans la section 3.1.4 qu'elles ne sont pas négligeables pour autant : elles peuvent être assez fortes dans certaines bandes de fréquence.

Tous les modes de Bloch d'un guide à cristaux photoniques de taille finie s'atténuent donc au cours de leur propagation ; et l'équation 3.1 se réécrit sous la forme

$$\psi(x, y, z) = u(x, y, z)e^{-\alpha z}e^{ikz}, \tag{3.2}$$

où α est le coefficient d'atténuation du mode. Ce coefficient est lié à la longueur d'atténuation $l = \frac{1}{2\alpha}$ qui représente la longueur caractéristique parcourue par le mode. Il est commode de décrire ces modes de Bloch à pertes à l'aide d'un vecteur d'onde complexe

$$\tilde{k} = k + i\alpha. \tag{3.3}$$

Ainsi, en cherchant les valeurs complexes du vecteur d'onde qui sont solutions des équations de Maxwell à la fréquence considérée, il est possible de calculer à la fois la constante de propagation k du mode et son atténuation α.

3.1.2 Etat de l'art des méthodes numériques déjà utilisées

Le calcul du coefficient d'atténuation α constitue bien sûr une étape importante à franchir avant d'envisager l'application des guides à cristaux photoniques dans des composants d'optique intégrée. Pourtant, la littérature ne contient que peu de travaux relatifs à ce calcul [Urs98, Not01, Had02, Lal02, Dés02, Vas02, And03, Cry05].

La principale raison est que *le calcul de la longueur d'atténuation dans un guide à cristaux photoniques est un problème numérique très difficile à résoudre.* D'une part, parce que les « solvers » de modes développés pour les guides invariants par translation ne peuvent être appliqués facilement au calcul des pertes d'une structure périodique. D'autre part, parce que la modélisation d'un guide à cristaux photoniques requiert un très grand domaine de calcul du fait de la grande taille de l'objet dans la direction y, voir Figure 3.1.

Pour mettre en avant l'originalité de l'approche que nous avons développée [Sau03], nous allons passer rapidement en revue les principaux travaux antérieurs. Ceux-ci peuvent être séparés en deux familles.

Approches utilisant une discrétisation tridimensionnelle

Cette première famille, qui a fait l'objet du plus grand nombre d'études, regroupe les approches basées sur une discrétisation tridimensionnelle du domaine de calcul. Cette discrétisation peut être réalisée par des techniques de différences finies dans le domaine temporel (FDTD) [Urs98, Not01, Dés02, Cry05] ou par des techniques d'éléments finis dans le domaine fréquentiel [Had02]. Dans tous ces travaux, les modes du guide à cristaux photoniques sont calculés en utilisant des conditions aux limites pseudo-périodiques dans la direction z et des couches absorbantes dans les directions x et y.

Approches semi-analytiques utilisant une discrétisation bidimensionnelle

La deuxième famille regroupe des méthodes semi-analytiques qui ne discrétisent qu'un domaine de calcul 2D, grâce à une intégration analytique des équations de Maxwell dans une direction de l'espace [Lal02, Vas02, And03]. Avant de passer en revue ces approches, rappelons qu'il existe, de façon générale, deux manières de calculer le vecteur d'onde complexe d'un mode guidé en ayant recours au calcul d'une matrice reliant le champ électromagnétique entre deux plans. Ces deux approches sont illustrées sur la Figure 3.3 pour un guide périodique, mais elles s'appliquent également au cas d'un guide d'onde invariant par translation [Vas97].

La première approche consiste à calculer *une matrice de diffraction transverse* R reliant les ondes planes incidentes dans l'air et dans le substrat aux ondes planes diffractées, voir Figure 3.3(a). Les modes du guide correspondent à la solution du problème électromagnétique en l'absence d'ondes incidentes. Ils sont donc obtenus en calculant *les pôles $\tilde{k}$ dans le plan complexe* de la matrice R, à la fréquence ω réelle fixée. Cette approche, appelée *polologie*, est utilisée depuis de nombreuses années dans la théorie des réseaux de diffraction pour calculer les modes de Bloch d'un réseau coupleur [Pet80, Pop93]. Elle est également utilisée pour calculer les modes d'un guide invariant par translation, sous le nom de *transverse resonance method* [Vas97].

La deuxième approche consiste à calculer *les valeurs propres de la matrice de diffraction longitudinale* T calculée entre deux plans séparés par une période a, voir Figure 3.3(b). En effet, l'équation 3.2 montre que les valeurs propres λ_j de la matrice T sont de la forme

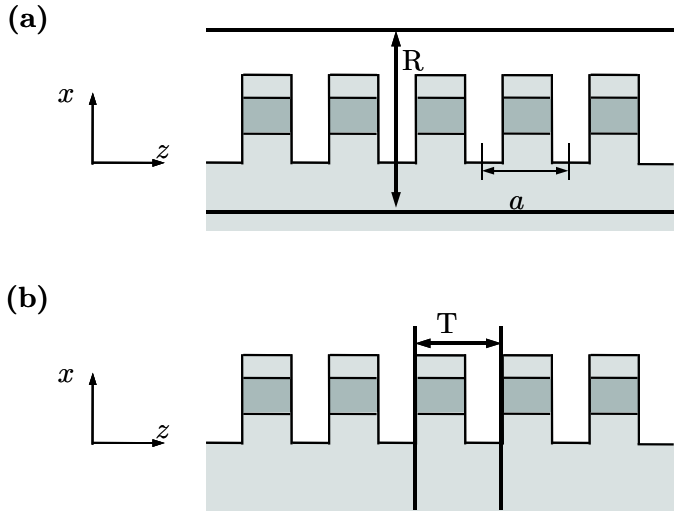

Figure 3.3: *Approches classiques permettant de calculer les modes d'un guide périodique de période a. Le système est supposé invariant dans la direction y. (a) Calcul des pôles complexes de la matrice de diffraction R, définie le long de la direction transverse à la propagation. (b) Calcul des valeurs propres de la matrice de diffraction T, définie le long de la direction de propagation.*

$$\lambda_j = e^{i\tilde{k}a}. \tag{3.4}$$

Dans le cas d'un guide invariant par translation, la distance séparant les deux plans peut être quelconque. Les performances de ces deux approches équivalentes sont comparées dans l'article [Cao02]. Revenons maintenant au cas particulier du guide à cristaux photoniques et commentons brièvement les trois méthodes développées avant nos travaux.

La méthode développée dans l'article [Lal02] utilise le calcul des valeurs propres de la matrice de diffraction longitudinale T. Cette matrice est définie suivant la direction z, voir Figure 3.1. Elle est calculée à l'aide de la méthode modale de Fourier généralisée, en utilisant des couches absorbantes dans les directions x et y. Le domaine de calcul 2D à discrétiser est représenté sur la Figure 3.4(b).

La référence [Vas02] applique le calcul des pôles complexes de la matrice de diffraction transverse R, définie suivant la direction x, voir Figure 3.1. Cette matrice est calculée en utilisant la technique de la super-cellule qui consiste à périodiser artificiellement le guide d'onde dans la direction y. Le problème se ramène alors au calcul classique du pôle d'un réseau bipériodique. La période de ce réseau (le domaine de calcul à discrétiser) est représentée sur la Figure 3.4(a).

Enfin, une approche originale a été développée à l'Université de Pavie par L. C. Andreani [And03]. Cette approche utilise également une périodisation artificielle du guide dans la direction y. Les modes du guide à cristaux photoniques sont calculés en décomposant le champ électromagnétique sur les modes guidés du guide planaire — l'empilement de couches sans le cristal photonique — puis en calculant le couplage

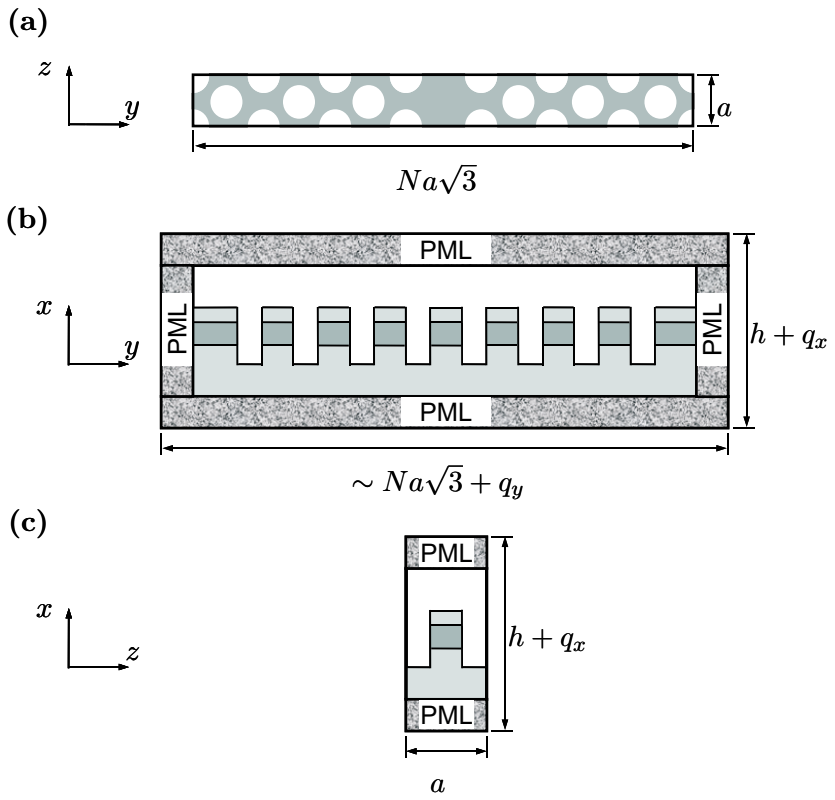

Figure 3.4: *Comparaison des trois domaines de calcul 2D qu'il est possible d'utiliser avec une méthode semi-analytique. Les traits en gras représentent des conditions aux limites pseudo-périodiques aux bornes du domaine de calcul. (a) Domaine utilisé dans [Vas02] et [And03]. Les conditions aux limites pseudo-périodiques dans la direction y pourraient être remplacées par des PMLs afin de remplir correctement les conditions d'ondes sortantes. (b) Domaine utilisé dans [Lal02]. Les largeurs des PMLs sont respectivement q_x et q_y dans les directions x et y. (c) Domaine utilisé avec l'approche développée dans cette thèse. Cette approche combine les deux plus petites dimensions des domaines de calcul utilisés dans les deux autres approches.*

aux modes radiatifs à l'aide de la règle d'or de Fermi. Cette méthode est approchée car les modes guidés du guide planaire ne forment pas une base complète. Par contre, elle peut être assez facilement généralisée au calcul de l'effet du désordre (rugosité, fluctuation de la taille des trous...) sur les pertes [Ger04].

Bilan comparatif

Par rapport aux approches de type FDTD, les méthodes semi-analytiques ne nécessitent qu'une discrétisation bidimensionnelle, moins coûteuse numériquement. Les deux dernières approches [Vas02, And03] ont en plus l'avantage de supprimer la nécessité d'utiliser des couches absorbantes dans l'air et dans le substrat.

Par contre, l'utilisation d'une super-cellule introduit un couplage artificiel entre des guides adjacents. Ce couplage fait apparaître dans le calcul de l'atténuation

des variations rapides et non-physiques qui doivent être lissées en moyennant les résultats des calculs obtenus pour différentes tailles de super-cellule. D'autre part, en générant une structure périodique dans la direction y, la technique super-cellule empêche le calcul des pertes sous la ligne de lumière qui sont purement dues à un effet de taille finie. L'évaluation de ces pertes n'est pas purement anecdotique, comme nous le verrons dans la section 3.1.4.

Il faut noter qu'*aucune de ces approches*, semi-analytique ou non, *n'évite la discrétisation de la grande dimension de l'objet* suivant la direction y. Or c'est précisément cette discrétisation qui constitue la principale difficulté de la modélisation d'un guide à cristaux photoniques. Nous proposons une approche qui contourne habilement cette difficulté.

3.1.3 Approche originale développée

Principe de l'approche proposée

Revenons à la Figure 3.3 et aux deux approches semi-analytiques classiques permettant de calculer le vecteur d'onde complexe d'un mode guidé. L'exemple du guide périodique que nous avons considéré est un problème bidimensionnel, invariant dans la direction y. Il n'y a donc qu'une direction longitudinale — c'est la direction de propagation du mode — et une direction transverse. Par contre, une structure tridimensionnelle comme le guide à cristaux photoniques possède deux directions transverses à la propagation : la direction x, qui est utilisée dans les travaux [Vas02, And03], et la direction y. Il est donc possible de *calculer les modes du guide à cristaux photoniques en calculant les pôles complexes $\tilde{k}$ de la matrice de diffraction* S définie suivant la direction y, voir Figure 3.1. Cette matrice relie les amplitudes du champ électromagnétique dans les plans P et P'. Ce constat est la base de la méthode transverse que nous avons développée pour calculer les pertes de propagation des guides à cristaux photoniques.

Pour calculer la matrice S, nous sommes confrontés au problème de la *diffraction par un réseau unidimensionnel intégré dans un guide d'onde planaire*. Ce réseau est périodique de période a dans la direction z. Le « milieu incident » et le « substrat » de ce problème de diffraction correspondent au guide planaire non-gravé situé à gauche et à droite du cristal photonique, voir Figure 3.1. Les ondes incidentes et diffractées par le réseau qui sont reliées par la matrice de diffraction sont donc les modes (guidés et radiatifs) du guide planaire.

La méthode modale de Fourier généralisée, en utilisant des couches absorbantes dans la direction x, est parfaitement adaptée à la résolution de ce type de problème de diffraction en optique intégrée. Elle a d'ailleurs été utilisée antérieurement à mes travaux pour calculer la diffraction d'une onde guidée incidente sur un cristal photonique bidimensionnel sans défaut [Lal01]. Le mode incident est le mode fondamental TE_0 du guide planaire. La composante de son vecteur d'onde suivant z est notée k. La matrice $\mathrm{S}(k)$ est calculée de façon récursive, comme décrit à la section 1.1.3, en découpant le cristal photonique en un empilement de fines couches dans lesquelles la permittivité est invariante par translation suivant y. Le mode du guide à cristaux photoniques est alors calculé en faisant varier k dans le plan complexe et en cher-

chant le pôle $\tilde{k}$ de la matrice S. A notre connaissance, ce travail est le premier à étendre la pologie aux problèmes de la diffraction d'ondes guidées par des réseaux.

Cette approche originale nous permet d'intégrer analytiquement les équations de Maxwell dans la direction y, voir section 1.1.1. Ainsi, la taille du domaine de calcul à discrétiser est considérablement réduite par rapport aux autres approches semi-analytiques présentes dans la littérature. La Figure 3.4 compare les cellules de calcul à discrétiser dans le cas de notre approche et dans le cas des approches utilisées dans les références [Lal02], [Vas02] et [And03]. Un autre avantage de notre approche est de poser rigoureusement les conditions aux limites aux bornes du domaine de calcul. Ce sont des conditions aux limites pseudo-périodiques suivant la direction z et des conditions d'ondes sortantes suivant la direction x.

Pour valider une méthode numérique, il faut vérifier au moins les deux points suivants :

1. Le calcul doit converger.
2. Le calcul doit converger vers la bonne valeur.

Le deuxième point est validé dans la section 3.1.4, où nous comparons les résultats obtenus à des résultats expérimentaux ainsi qu'à des résultats numériques obtenus avec d'autres méthodes de calcul. Nous allons maintenant étudier la vitesse de convergence du calcul. Cette étude valide le premier point et montre l'efficacité de la méthode.

Etude de la convergence du calcul

Nous considérons dans cette section un guide d'onde gravé dans une membrane de silicium d'épaisseur $h = 0.6a$ et d'indice $n = 3.4$, supposé indépendant de la fréquence. Le paramètre de maille et le rayon des trous sont respectivement $a = 390nm$ et $r = 0.3a$. Le nombre de rangées de trous de part et d'autre du guide est $N = 7$.

Nous avons étudié la variation du vecteur d'onde complexe $\tilde{k}$ en fonction des nombres de termes de Fourier m_x et m_z retenus dans la décomposition en ondes planes du champ dans les directions x et z, voir le domaine à discrétiser dans l'espace de Fourier représenté sur la Figure 3.4(c). Le nombre total d'ondes planes est $m_x \times m_z$. La précision obtenue pour la partie réelle k est principalement gouvernée par m_z, alors que la précision obtenue pour la partie imaginaire α est gouvernée par m_x. Il est important de distinguer les deux régions au-dessus et en-dessous de la ligne de lumière puisque l'origine physique des pertes y est différente. En particulier, il faut prêter une attention particulière au calcul des pertes sous la ligne de lumière qui peuvent être très faibles.

Nous nous plaçons tout d'abord à la fréquence normalisée $a/\lambda = 0.3$ pour laquelle le mode de Bloch opère au-dessus de la ligne de lumière et fuit hors du plan de la membrane, voir Figure 3.2. La variation de la constante de propagation k en fonction de $1/m_z^2$ est représentée sur la Figure 3.5(a) pour $m_x = 35$ termes de Fourier dans la direction verticale et la variation de l'atténuation[1] α en fonction de $1/m_x$ est

[1] L'atténuation est exprimée en dB/cm : $\alpha(\text{dB}/cm) = \frac{20}{\ln(10)}\alpha(cm^{-1})$

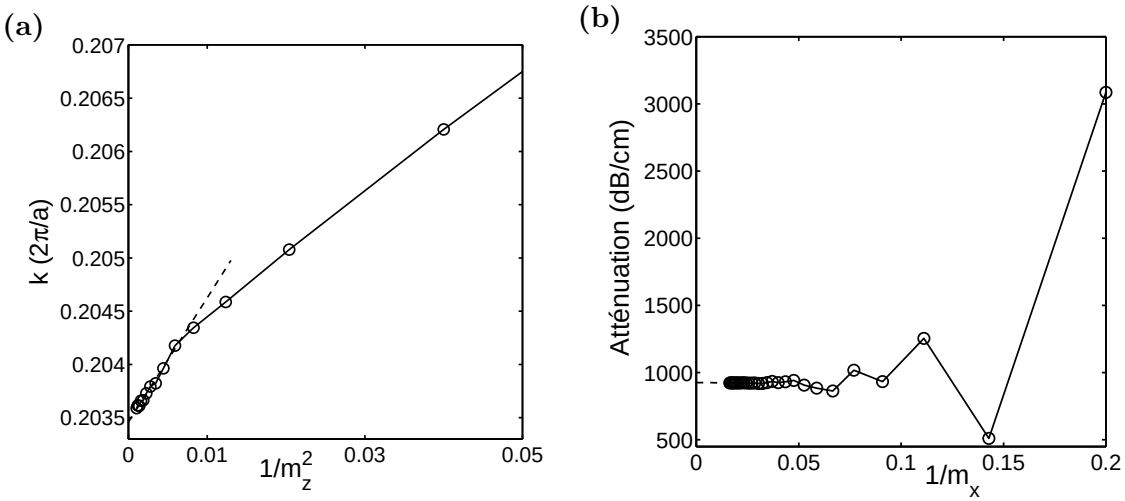

Figure 3.5: *Illustration de la convergence obtenue pour un mode opérant au-dessus de la ligne de lumière. (a) Variation de k en fonction de $1/m_z^2$ pour $m_x = 35$. Les pointillés montrent l'extrapolation linéaire de la courbe pour $m_z \to \infty$. (b) Variation de α en fonction de $1/m_x$ pour $m_z = 17$. Les pointillés montrent l'extrapolation linéaire de la courbe pour $m_x \to \infty$.*

représentée sur la Figure 3.5(b) pour $m_z = 17$. Des extrapolations linéaires de k pour $m_z \to \infty$ et de α pour $m_x \to \infty$ montrent que le calcul converge lorsque le nombre d'ondes planes retenues dans la décomposition du champ tend vers l'infini. Ces extrapolations conduisent à $k = 0.2035(2\pi/a)$ et $\alpha = 926\text{dB}/cm$, voir Figure 3.5. Il est ainsi possible d'évaluer l'incertitude d'un calcul réalisé avec un nombre fini de termes de Fourier.

Les couches absorbantes utilisées sont caractérisées par deux paramètres : la largeur q de la région sur laquelle opère le changement de coordonnées et son coefficient complexe γ [Hug05b]. Le choix de ces deux paramètres influe essentiellement sur la vitesse à laquelle la partie imaginaire de $\tilde{k}$ converge vers la valeur extrapolée. Les paramètres utilisés pour calculer la courbe de la Figure 3.5(b) ($q_x = 3h$ et $\gamma_x = \frac{1}{1-i}$) ont été choisis pour optimiser la vitesse de convergence.

Nous nous plaçons maintenant à la fréquence normalisée $a/\lambda = 0.267$ pour laquelle le mode opère en-dessous de la ligne de lumière, voir Figure 3.2. A cette fréquence, la variation de la constante de propagation k en fonction de m_z est comparable à sa variation au-dessus de la ligne de lumière. Nous ne nous intéressons donc qu'à la variation de l'atténuation en fonction de m_x.

L'imprécision du calcul de α pour un nombre fini de termes de Fourier est due essentiellement à l'absorption de la PML utilisée dans la direction x. Or, sous la ligne de lumière, l'atténuation du mode de Bloch fondamental du guide est due uniquement à un effet tunnel à travers l'épaisseur finie du cristal photonique entourant la rangée manquante. Il n'y a donc pas de lumière diffractée hors du plan de la membrane, le mode est purement évanescent dans l'air. Il est ainsi possible de remplacer la PML par une simple technique de type super-cellule, à condition d'éloigner

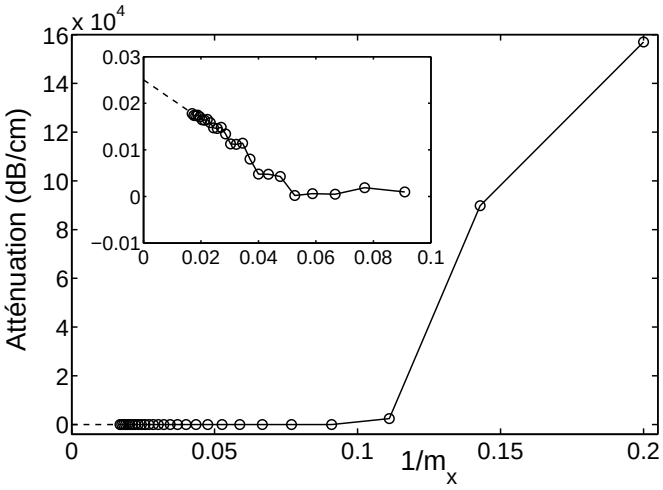

Figure 3.6: *Illustration de la convergence obtenue pour un mode opérant en-dessous de la ligne de lumière : variation de α en fonction de $1/m_x$ pour $m_z = 17$. Les pointillés montrent l'extrapolation linéaire de la courbe pour $m_x \to \infty$.*

suffisamment les membranes périodisées les unes des autres[2]. Afin de minimiser la taille du domaine de calcul dans la direction x, nous avons choisi d'employer une transformée de coordonnées réelle opérant sur la même largeur que la PML utilisée au-dessus de la ligne de lumière ($q_x = 3h$).

La variation de α obtenue avec cette stratégie est représentée sur la Figure 3.6 pour $m_z = 17$. Une extrapolation linéaire de α pour $m_x \to \infty$ montre que le calcul converge lorsque le nombre d'ondes planes retenues dans la décomposition du champ tend vers l'infini. Cette extrapolation conduit à $\alpha = 0.025\text{dB}/cm$, voir Figure 3.6. Il est ainsi possible d'évaluer l'incertitude d'un calcul réalisé avec un nombre fini de termes de Fourier.

Bilan : performances de l'approche proposée

A l'issue de cette étude, nous avons choisi de retenir dans le calcul $m_x = 35$ termes de Fourier dans la direction verticale et $m_z = 17$ termes de Fourier dans la direction z. Avec ce choix,

- l'incertitude sur la constante de propagation est $\Delta k \approx 3 \times 10^{-4}$ (en unités $\frac{2\pi}{a}$).
- sous la ligne de lumière, l'incertitude sur l'atténuation est $\Delta\alpha \approx 0.01\text{dB}/cm$.
- au-dessus de la ligne, l'incertitude sur l'atténuation est $\Delta\alpha \approx 3\text{dB}/cm$.

Ces chiffres montrent que l'approche que nous avons développée pour calculer les pertes de propagation des guides à cristaux photoniques permet, d'une part, de calculer les pertes au-dessus de la ligne de lumière avec une très bonne précision et, d'autre part, d'évaluer de très faibles pertes sous la ligne de lumière. Ces valeurs de l'incertitude sont principalement limitées par la valeur de m_z. Il est bien sûr possible

[2]Ce raisonnement est erroné pour tous les modes de Bloch radiatifs de la structure. Ainsi, avec une transformée de coordonnées réelle, seul le mode recherché est correctement calculé.

d'obtenir une meilleure précision en prenant m_z plus grand, mais ce sera au prix d'une augmentation du temps de calcul. Pour 35×17 termes de Fourier, le temps de calcul de $\tilde{k}$ à une longueur d'onde donnée est de 1h30 avec un PC dont le processeur est un Pentium IV 3Ghz, c'est-à-dire un ordinateur de bureau courant.

3.1.4 Validation des résultats numériques obtenus

Nos calculs sont validés dans cette section en les comparant à des résultats expérimentaux obtenus par A. Talneau au Laboratoire de Photonique et de Nanostructures puis à des résultats obtenus à l'aide d'autres méthodes numériques.

Comparaison à des résultats expérimentaux

Nous considérons ici un guide d'onde gravé dans une hétérostructure d'InP. Cette hétérostructure est formée d'un cœur de $500nm$ d'épaisseur (indice de réfraction 3.36) reposant sur un substrat (indice de réfraction 3.17) et recouvert d'une couche de $200nm$ d'épaisseur (indice de réfraction 3.17). Des photos prises au microscope électronique à balayage montrent que les trous ont une profondeur d'environ $3\mu m$ et un rayon $r = 150nm$, et que le paramètre de maille du cristal est $a = 450nm$. Les mesures de l'atténuation ont été réalisées au moyen d'un montage fibre à fibre en polarisation TE pour différentes longueurs de guide. Le lecteur intéressé par les détails de la fabrication et de la caractérisation de l'échantillon pourra se référer à l'article [Tal03]. Avec cette géométrie, l'intégralité de la courbe de dispersion du mode fondamental est située au-dessus de la ligne de lumière du substrat.

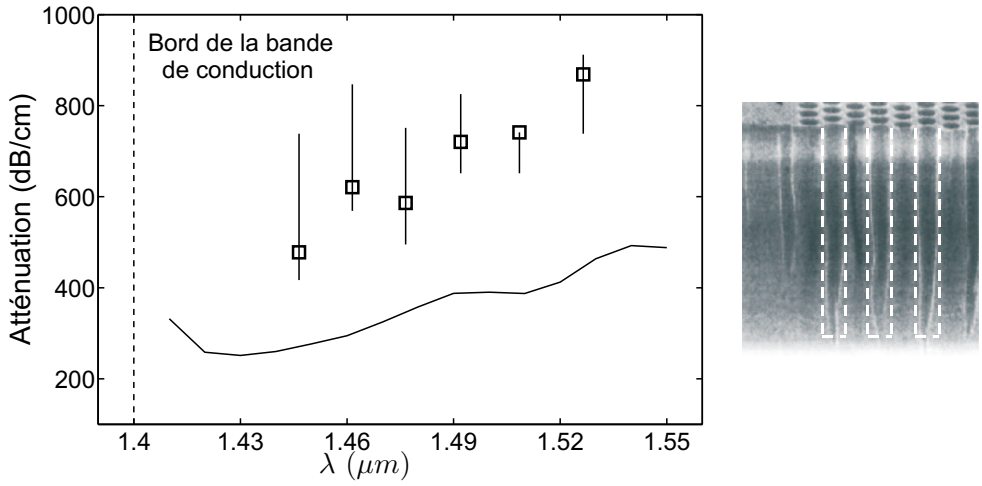

Figure 3.7: *Comparaison entre les résultats numériques obtenus avec la méthode proposée et des données expérimentales obtenues par A. Talneau pour un guide à cristaux photoniques gravé dans une hétérostructure d'InP. Les barres d'erreur des prédictions numériques sont très faibles et n'ont pas été représentées. La photo d'une coupe verticale de la structure prise au microscope électronique à balayage* [Tal03] *illustre l'écart entre la forme des trous modélisés (pointillés blancs) et la forme des trous réels.*

La Figure 3.7 montre que le calcul numérique reproduit qualitativement la tendance générale des résultats expérimentaux, c'est-à-dire une augmentation des pertes avec la longueur d'onde. Il y a cependant un désaccord systématique entre théorie et expérience de 200–300 dB/cm sur tout le spectre. Nous pensons que ce désaccord est dû à des facteurs non pris en compte dans la modélisation, comme la rugosité, la fluctuation de taille des trous ou leur forme conique. L'écart entre la forme réelle des trous et la forme cylindrique utilisée pour le calcul est illustré sur la Figure 3.7.

Comparaison à d'autres résultats numériques

Nous considérons maintenant un guide d'onde gravé dans une membrane de silicium d'épaisseur $h = 0.6a$ et d'indice $n = 3.4$, supposé indépendant de la fréquence. Le paramètre de maille et le rayon des trous sont respectivement $a = 390nm$ et $r = 0.3a$. Il y a $N = 7$ rangées de trous de part et d'autre de la rangée manquante. C'est sur ce problème qu'a porté l'étude de convergence.

L'atténuation a été calculée sur toute la plage spectrale correspondant à la bande du mode guidé. Sur la Figure 3.8, nos résultats (courbe en gras) sont comparés aux résultats obtenus dans les articles [Cry05] (courbe en trait fin), [Lal02] (triangles) et [And03] (pointillés discontinus). Un très bon accord est obtenu entre les quatre méthodes pour le calcul des pertes au-dessus de la ligne de lumière, pour $k \leqslant 0.283$. Pour les pertes en-dessous de la ligne de lumière, la méthode utilisée dans l'article [And03] ne fournit pas de résultats puisqu'elle ne permet pas de modéliser un guide de taille finie, et il n'y a pas vraiment d'accord entre les autres méthodes. En s'appuyant sur l'étude de la convergence que nous avons réalisée, cela peut s'expliquer par le fait que les PMLs utilisées dans les deux autres calculs ont une absorption non nulle sous la ligne de lumière [Lal02, Cry05].

Pour tester la pertinence de nos résultats sous la ligne de lumière, nous avons refait le calcul pour différents nombres de rangées, $N = 7$, 8 et 12. Les résultats obtenus, présentés sur la Figure 3.9, montrent la décroissance exponentielle attendue des pertes en fonction du nombre de rangées. Nos calculs reproduisent donc parfaitement l'atténuation induite par un effet tunnel à travers le cristal photonique de taille finie. Il est important de noter qu'il est impensable de réaliser ces calculs avec une méthode différente, du fait de la dimension considérable des objets dans la direction y.

Discussion des pertes sous la ligne de lumière

Le fait de calculer l'atténuation du mode guidé sous la ligne de lumière peut sembler anecdotique puisque cette atténuation peut être rendue arbitrairement faible en augmentant la taille du cristal de part et d'autre du guide. Il n'en est rien car *l'évaluation de ces pertes par effet tunnel permet de quantifier le taux de couplage (diaphonie) entre deux guides adjacents.* Et la connaissance de cette diaphonie est primordiale au moins dans les deux problèmes suivants :

- Maximiser le degré d'intégration d'une éventuelle puce à cristaux photoniques.
- Optimiser le couplage évanescent entre un guide et une cavité pour la réalisation de filtres add-drop performants [Chu01].

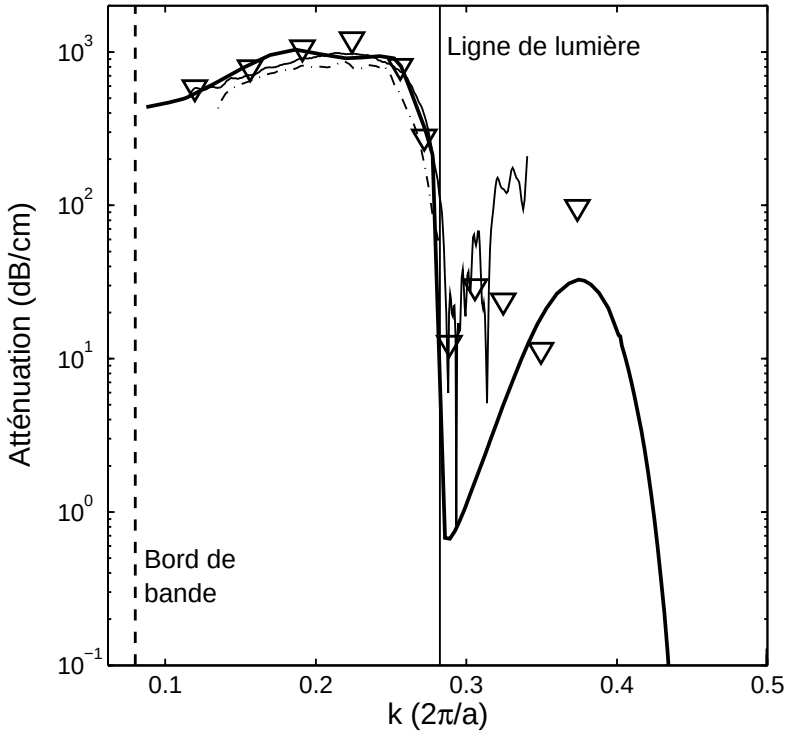

Figure 3.8: *Comparaison de différentes prédictions numériques concernant l'atténuation du mode fondamental d'un guide à cristaux photoniques. Courbe en gras, résultats obtenus avec la méthode proposée ; courbe en trait fin, résultats obtenus par M. Cryan [Cry05] ; triangles, résultats obtenus par P. Lalanne [Lal02] ; pointillés discontinus, résultats obtenus par L. C. Andreani [And03]. Les deux lignes verticales indiquent les vecteurs d'onde pour lesquels la courbe de dispersion du mode traverse le bord de la bande de conduction (pointillés) et la ligne de lumière (trait plein).*

L'atténuation sous la ligne de lumière présente deux particularités importantes : *un pic à* $k \approx 0.37$ dont la position dépend peu du nombre de rangées, et *une divergence en bord de zone de Brillouin* pour $k \rightarrow \frac{\pi}{a}$, qui est due à l'annulation de la vitesse de groupe du mode, voir section 3.3.

La présence du pic peut s'expliquer en considérant le diagramme de dispersion de la Figure 3.2. Pour $k \approx 0.37$, la distance entre la courbe de dispersion du mode fondamental du guide et le bord de la bande de valence est minimale. Or, le bord de la bande de valence correspond à l'existence d'une onde propagative dans le cristal photonique, c'est-à-dire à une onde dont la longueur de pénétration dans le cristal est infinie. On comprend donc bien intuitivement que plus la courbe de dispersion du mode est proche du bord de bande, plus la longueur de pénétration de l'onde dans le cristal est grande, et plus l'atténuation du mode est forte. Ce raisonnement étant indépendant du nombre N de rangées, il justifie également que la position du pic dépende peu de ce paramètre.

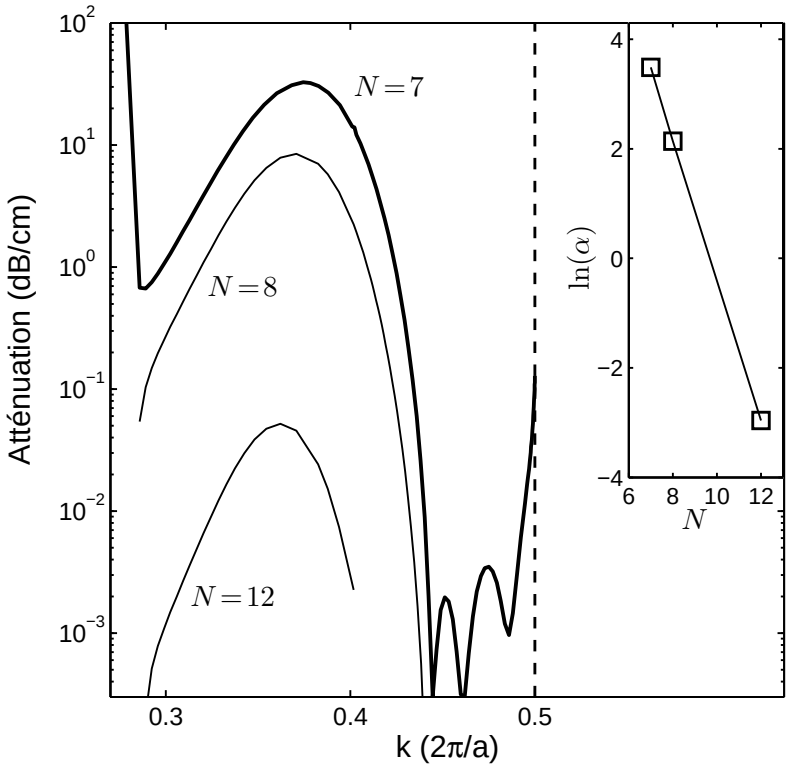

Figure 3.9: *Atténuation sous la ligne de lumière pour différents nombres N de rangées de trous. La ligne verticale en pointillés indique le bord de la zone de Brillouin. Tous les calculs sont faits avec la méthode développée dans cette thèse. L'encart montre que la valeur du pic d'atténuation (pour $k \approx 0.37$) décroît exponentiellement avec le nombre de rangées. L'atténuation diverge pour $k = 0.5$.*

Il est intéressant de comparer la valeur du pic d'atténuation que nous prédisons avec les plus faibles pertes observées expérimentalement sous la ligne de lumière. Ces pertes sont dues principalement au désordre de la structure fabriquée (rugosité, fluctuation de la taille des trous), qui possède un grand nombre de rangées de trous de part et d'autre du guide. Le record en la matière est détenu par le groupe de M. Notomi à NTT Corporation avec une atténuation de 6dB/cm mesurée pour un guide gravé dans une membrane de silicium [Not04].

Ainsi, pour que les pertes de propagation soient limitées par la fabrication, et non par la taille finie du cristal photonique, il faut que le guide soit entouré d'au moins 10 rangées de trous, voir Figure 3.9. Du point de vue de l'intégration cela correspond à un espacement entre les deux guides d'un peu plus de $3\mu m$, une valeur assez importante compte tenu du fort contraste d'indice utilisé dans les guides à cristaux photoniques. Il est à noter qu'une diaphonie comparable est obtenue pour une distance inter-guides 10 fois plus petite avec des guides rubans en SOI (Silicon On Insulator). Pour améliorer cette intégration il est nécessaire d'abaisser le pic d'atténuation, ce qui peut être fait en éloignant la courbe de dispersion du mode du bord de la bande de valence. Une solution consiste à diminuer la largeur du guide.

3.2 Modèle Fabry-Perot de la résonance transverse

Dans la section précédente, nous avons présenté une approche originale et efficace pour calculer l'atténuation du mode fondamental d'un guide à cristaux photoniques. Nous allons voir maintenant que cette approche, qui est basée sur le calcul rigoureux de la résonance transverse associée au mode, permet une interprétation physique des comportements observés. En effet, *en décrivant la résonance transverse à l'aide d'un modèle Fabry-Perot, il est possible d'exprimer analytiquement le vecteur d'onde complexe et de mettre ainsi en évidence les paramètres physiques dont dépend l'atténuation.*

Ce travail représente un développement plus poussé vers une solution analytique des travaux précédents essentiellement numériques. Il a été motivé par un article récent de Z.-Y. Li et K.-M. Ho qui rapporte l'observation d'un phénomène « anormal » concernant l'atténuation d'un guide à cristaux photoniques [Li04]. En nous plaçant dans la même géométrie, nous montrons au contraire que l'atténuation est reliée à des paramètres physiques classiques bien identifiés et que le comportement « anormal » peut être expliqué simplement. Ce travail sera publié prochainement sous forme d'un commentaire dans la revue Physical Review Letters [Sau05a].

3.2.1 Géométrie considérée

Nous considérons la même géométrie bidimensionnelle que dans l'article [Li04]. Le cristal photonique est un réseau carré de cylindres diélectriques plongés dans l'air. Le paramètre de maille et le rayon des cylindres sont respectivement $a = 500nm$ et $r = 0.18a$. L'indice de réfraction des cylindres, supposé indépendant de la fréquence, est $n = 3.4$. Le guide d'onde est formé en enlevant une rangée de cylindres et il est entouré de N_w rangées de cylindres de part et d'autre, comme illustré sur la Figure 3.10(a). Nous nous plaçons dans le cas de polarisation où le champ électrique $\vec{E}$ est parallèle aux cylindres. Dans cette structure bidimensionnelle de taille finie, *l'atténuation du mode fondamental est uniquement due à une fuite de la lumière par effet tunnel à travers le cristal photonique.*

Ce guide a été étudié en détail par Z.-Y. Li et K.-M. Ho dans l'intervalle spectral correspondant à la bande interdite complète du cristal photonique. Les principaux résultats qu'ils ont obtenus sont représentés sur les Figures 3.10(b) et 3.10(c). La dispersion du mode fondamental, voir Figure 3.10(b), est relativement classique pour ce type de structure, avec une vitesse de groupe nulle au point Γ en $k = 0$ et une fréquence qui augmente avec le vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin.

L'atténuation, voir Figure 3.10(c), a été qualifiée d'« anormale » par les auteurs de l'article [Li04] car elle n'est pas minimale au centre de la bande interdite : elle décroît quand la fréquence augmente, y compris au voisinage de la bande de conduction. Puisque les pertes sont dues uniquement à l'épaisseur finie du cristal photonique, cela signifie que *le mode est moins confiné au centre qu'au bord de la bande interdite*, point qui a d'ailleurs été confirmé par des calculs électromagnétiques rigoureux [Li04].

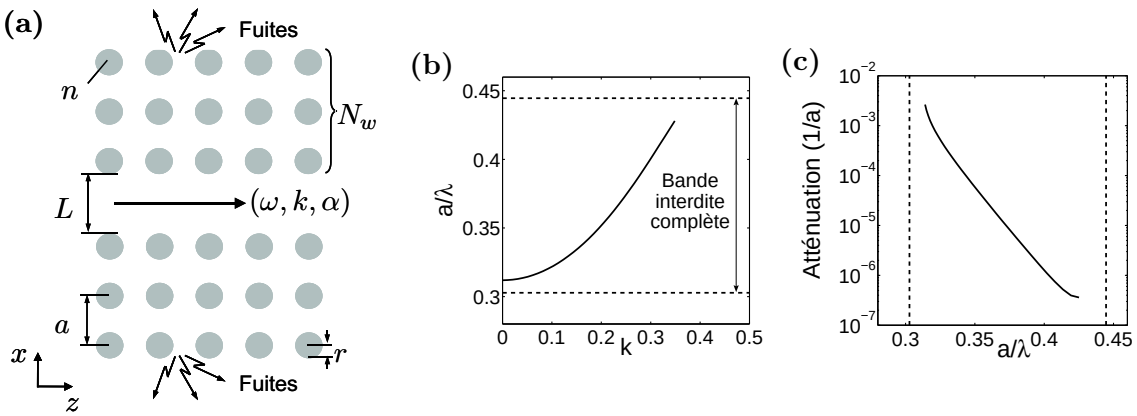

Figure 3.10: *(a) Géométrie du guide à cristaux photoniques étudié. Les paramètres géométriques sont :* $a = 500nm$, $r = 0.18a$, $n = 3.4$ *et* $L = 2a - 2r$. *(b) Courbe de dispersion* $\omega(k)$ *du mode. (c) Atténuation* $\alpha(\omega)$ *du mode. Les figures (b) et (c) ont été faites à partir des données numériques de [Li04] pour* $N_w = 4$. *Les lignes en pointillés représentent les bornes de la bande interdite complète.*

3.2.2 Modèle Fabry-Perot et courbe de dispersion

Le mode de Bloch du guide de la Figure 3.10(a) s'écrit sous la forme

$$\psi(x, z) = \exp(ikz) \sum_p \psi_p(x) \exp(ipKz), \tag{3.5}$$

où $K = \frac{2\pi}{a}$ et la fonction ψ est relative à l'une des trois composantes E_y, H_x ou H_z du mode. Dans toute région homogène, comme dans le cœur du guide au niveau de la rangée manquante, la fonction $\psi(x, z)$ se réduit à un développement en ondes planes. En outre, dans l'intervalle spectral d'intérêt, voir Figure 3.10(b), seul l'ordre $p = 0$ de ce développement correspond à une onde plane propagative. Chacun des deux cristaux photoniques entourant le guide se comporte donc comme un réseau de diffraction unidimensionnel dont tous les ordres de diffraction sont évanescents dans l'air, sauf l'ordre 0. Il est alors naturel de représenter la résonance transverse associée au mode du guide comme une onde plane « zigzagant » entre les deux miroirs à cristaux photoniques, comme illustré sur la Figure 3.11. L'angle d'incidence θ de l'onde plane sur les miroirs est relié à la fréquence et au vecteur d'onde du mode par la relation suivante :

$$k = k_0 \sin(\theta), \tag{3.6}$$

où $k_0 = \frac{\omega}{c}$. Autrement dit, *le résonateur considéré est une cavité Fabry-Perot classique, dans laquelle une onde plane inclinée fait des allers - retours entre deux miroirs distribués.* La seule approximation de ce modèle consiste à négliger l'effet des ondes planes évanescentes dans le transport de l'énergie entre les deux miroirs.

Pour un vecteur d'onde k donné, la fréquence de résonance ω de la cavité Fabry-Perot est donnée par la condition d'accord de phase

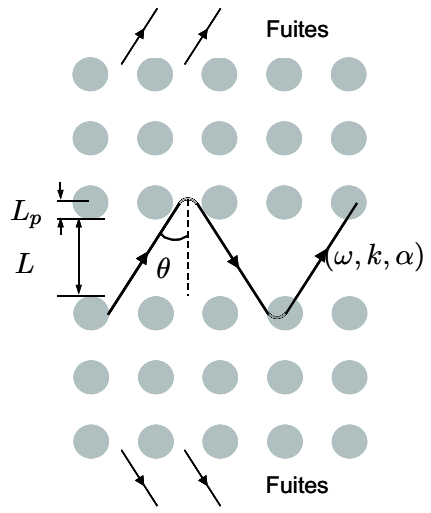

Figure 3.11: *Le mode du guide à cristaux photoniques est représenté de manière simplifiée comme une onde plane zigzagant entre deux miroirs à cristaux photoniques. Du fait de la réflexion distribuée, l'onde pénètre dans le cristal photonique sur une longueur L_p.*

$$\Phi_T(k,\omega) = \sqrt{k_0^2 - k^2}L + \phi_r(k,\omega) = p\pi, \tag{3.7}$$

où p est un entier relatif, Φ_T est la phase totale de l'onde plane après un demi aller-retour dans la cavité de longueur L et ϕ_r est la phase du coefficient de réflexion $r = \sqrt{R}\exp(i\phi_r)$ du miroir à cristaux photoniques éclairé par une onde plane incidente sous l'angle θ. La phase $\phi_r(k,\omega)$ est calculée trivialement avec un code réseau. Pour un entier p fixé, *l'équation* 3.7 *définit de façon implicite la relation de dispersion du mode fondamental du guide.* En résolvant cette équation pour différentes valeurs du vecteur d'onde, nous obtenons la courbe de dispersion $\omega(k)$ représentée sur la Figure 3.12.

Pour vérifier les prédictions du modèle Fabry-Perot, nous avons également calculé la courbe de dispersion à l'aide de la méthode rigoureuse présentée à la section 3.1.3. Les résultats des deux calculs sont quasi-identiques : $\forall k \in [0; \frac{\pi}{a}]$, l'écart relatif $\frac{\Delta\omega}{\omega}$ est inférieur à 10^{-8}. Le module carré du champ électrique du mode est également représenté sur la Figure 3.12 pour deux valeurs de la fréquence normalisée, $a/\lambda = 0.312$ ($k = 0$ et $v_g = 0$) et $a/\lambda = 0.42$ non loin de la bande de conduction. Le champ est symétrique par rapport à l'axe de propagation.

3.2.3 Expression analytique de l'atténuation

A la fréquence ω fixée, le vecteur d'onde complexe $\tilde{k} = k + i\alpha$ solution du problème vérifie la condition de résonance du Fabry-Perot

$$R(\tilde{k},\omega)e^{2i\Phi_T(\tilde{k},\omega)} = 1. \tag{3.8}$$

La partie réelle k vérifie la condition d'accord de phase donnée par l'équation 3.7 et nous cherchons l'expression de la partie imaginaire α.

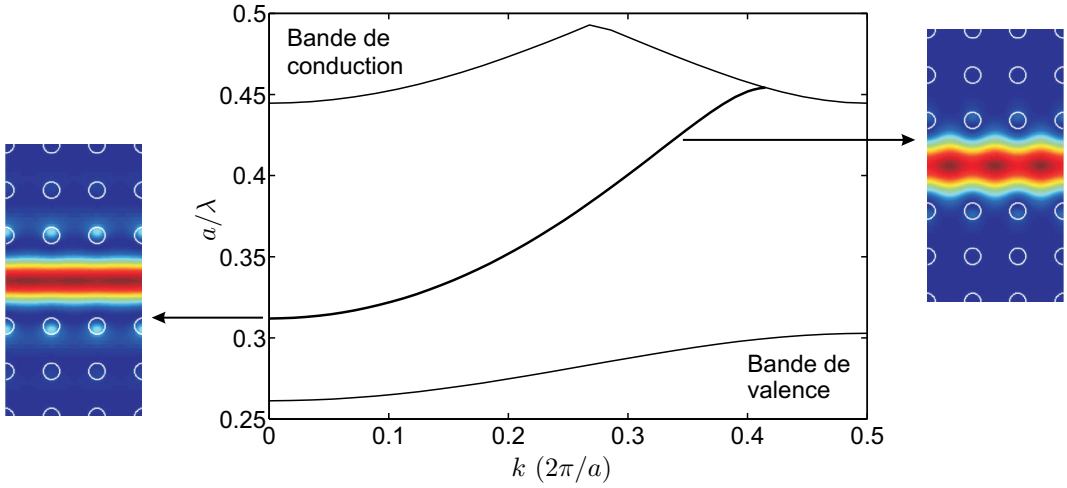

Figure 3.12: *Courbe de dispersion $\omega(k)$ du mode fondamental du guide à cristaux photoniques de la Figure 3.10(a). Les courbes en trait fin représentent les limites de la bande de valence et de la bande de conduction. Les deux tracés de champ correspondent à $|E|^2$ ($\vec{E}$ parallèle aux cylindres) pour $a/\lambda = 0.312$ ($k = 0$) et $a/\lambda = 0.42$.*

Faisons l'hypothèse que l'atténuation du mode fondamental est faible. Les fonctions $R(\tilde{k}, \omega)$ et $\Phi_T(\tilde{k}, \omega)$ peuvent alors être développées à l'ordre 1 autour de k :

$$R(\tilde{k}, \omega) = R(k, \omega) + i\alpha \left(\frac{\partial R}{\partial k}\right)_\omega , \tag{3.9}$$

$$\Phi_T(\tilde{k}, \omega) = \Phi_T(k, \omega) + i\alpha \left(\frac{\partial \Phi_T}{\partial k}\right)_\omega . \tag{3.10}$$

Dans ces équations, les dérivées partielles sont calculées à ω constant. En utilisant les expressions 3.9 et 3.10, ainsi que la condition d'accord de phase 3.7, l'équation 3.8 peut se réécrire de la façon suivante :

$$\left[R(k, \omega) + i\alpha \left(\frac{\partial R}{\partial k}\right)_\omega\right] \exp\left[-2\alpha \left(\frac{\partial \Phi_T}{\partial k}\right)_\omega\right] = 1. \tag{3.11}$$

Cette équation montre que la variation de la réflectivité avec le vecteur d'onde n'intervient dans le calcul de l'atténuation qu'à l'ordre 2 en α. Ainsi, à l'ordre 1, la résolution de l'équation 3.11 conduit à l'expression suivante de l'atténuation :

$$\alpha = \frac{1}{2\left(\frac{\partial \Phi_T}{\partial k}\right)_\omega} \ln(R), \tag{3.12}$$

où, d'après la condition d'accord de phase 3.7, la dérivée de la phase totale Φ_T vaut

$$\left(\frac{\partial \Phi_T}{\partial k}\right)_\omega = \frac{-kL}{\sqrt{k_0^2 - k^2}} + \left(\frac{\partial \phi_r}{\partial k}\right)_\omega . \tag{3.13}$$

Finalement, l'atténuation du mode fondamental du guide est donnée par l'expression

$$\alpha = -\frac{1}{2(L+2L_p)}\frac{\sqrt{k_0^2-k^2}}{k}\ln(R), \tag{3.14}$$

où la longueur de pénétration L_p de l'onde dans le cristal photonique est définie par la relation [Col95]

$$L_p = -\frac{\sqrt{k_0^2-k^2}}{2k}\left(\frac{\partial\phi_r}{\partial k}\right)_\omega. \tag{3.15}$$

En remarquant que la tangente de l'angle theta s'exprime en fonction du vecteur d'onde,

$$\tan(\theta) = \frac{k}{\sqrt{k_0^2-k^2}}, \tag{3.16}$$

il est possible de réécrire l'atténuation donnée par l'équation 3.14 sous une forme plus physique :

$$\alpha a = -\frac{1}{2}N\ln(R), \tag{3.17}$$

où le nombre N de réflexions subit par l'onde plane sur une période est donné par la relation

$$N(L+2L_p)\tan(\theta) = a. \tag{3.18}$$

L'équation 3.17 permet de se faire une image très simple de l'origine de l'atténuation du mode fondamental : l'onde plane, au cours de sa propagation en zigzag dans le guide, perd une fraction d'énergie $1-R$ à chaque réflexion. Ainsi, pour une même réflectivité, une onde peu inclinée est plus atténuée qu'une onde très inclinée puisqu'elle subit un nombre de réflexions plus grand sur une période.

Pour la géométrie considérée ici, nous avons vérifié numériquement que la longueur de pénétration de l'onde dans le cristal photonique reste faible : $L_p < L/20$ pour $a/\lambda < 0.44$. Nous la négligerons donc par la suite dans l'équation 3.18. La Figure 3.13 confirme que ce choix n'affecte que très peu l'atténuation prédite par le modèle.

L'atténuation prédite par l'équation 3.17 pour $N_w = 4$ est représentée sur la Figure 3.13 en fonction de la fréquence normalisée, sur tout l'intervalle spectral correspondant à la bande du mode guidé. Un très bon accord est obtenu avec les résultats d'un calcul rigoureux de la résonance transverse utilisant la méthode présentée à la section 3.1.3 (cercles). Ceci montre que *le modèle Fabry-Perot de la résonance transverse permet de décrire quantitativement la propagation de la lumière dans le guide à cristaux photoniques étudié.* Nous allons voir maintenant que ce modèle fournit une interprétation physique simple de toutes les caractéristiques du spectre d'atténuation.

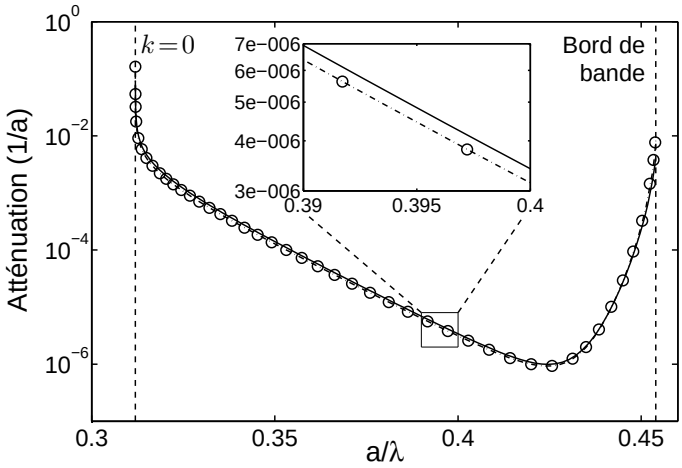

Figure 3.13: *Atténuation du guide à cristaux photoniques de la Figure 3.10(a). Courbe en trait plein, prédictions du modèle (équation 3.17) sans longueur de pénétration ; courbe en pointillés discontinus, prédictions du modèle (équation 3.17) avec longueur de pénétration ; cercles, calcul rigoureux de la résonance transverse réalisé avec la méthode présentée à la section 3.1.3.*

3.2.4 Interprétation physique du spectre d'atténuation

L'utilisation d'un modèle Fabry-Perot permet d'exprimer analytiquement l'atténuation du mode fondamental du guide à cristaux photoniques. Celle-ci dépend de deux quantités physiques, *la réflectivité R des miroirs et le nombre N de réflexions par période*, qui sont représentées sur la Figure 3.14 en fonction de la fréquence normalisée.

Au point Γ du diagramme de dispersion, pour $k = 0$, l'onde plane « n'avance » plus dans le guide, c'est une onde stationnaire dont le nombre de réflexions N par période diverge, voir Figure 3.14(a). La vitesse de groupe du mode est donc nulle et le modèle prédit une atténuation infinie. Cette divergence de l'atténuation est confirmée par le calcul rigoureux, voir Figure 3.13.

Les autres caractéristiques de la courbe d'atténuation s'interprètent en considérant la réflectivité des miroirs, voir Figure 3.14(b). Tout d'abord, l'augmentation rapide de l'atténuation au voisinage de la bande de conduction résulte de la chute de la réflectivité. Cette chute est tout à fait normale, elle est due à la sortie du mode guidé de la bande interdite photonique. Deuxièmement, la diminution progressive de l'atténuation pour $a/\lambda < 0.43$, qui a été qualifiée d'« anormale » [Li04], s'explique simplement à l'aide des propriétés d'un miroir de Bragg classique.

En effet, pour de faibles rapports a/λ, le cristal photonique peut être remplacé par un empilement de couches homogènes d'indices $n_L = 1$ et $2.46 \leqslant n_H(\lambda) \leqslant 2.82$, voir Figure 3.15. La procédure suivie pour homogénéiser le cristal photonique est la suivante : dans un premier temps les cylindres circulaires sont transformés en cylindres de section carrée et de même surface, puis chaque rangée de cylindres est homogénéisée comme décrit dans l'article [Lal96a]. La réflectivité du miroir de Bragg ainsi obtenu est représentée par la courbe en pointillés discontinus sur la

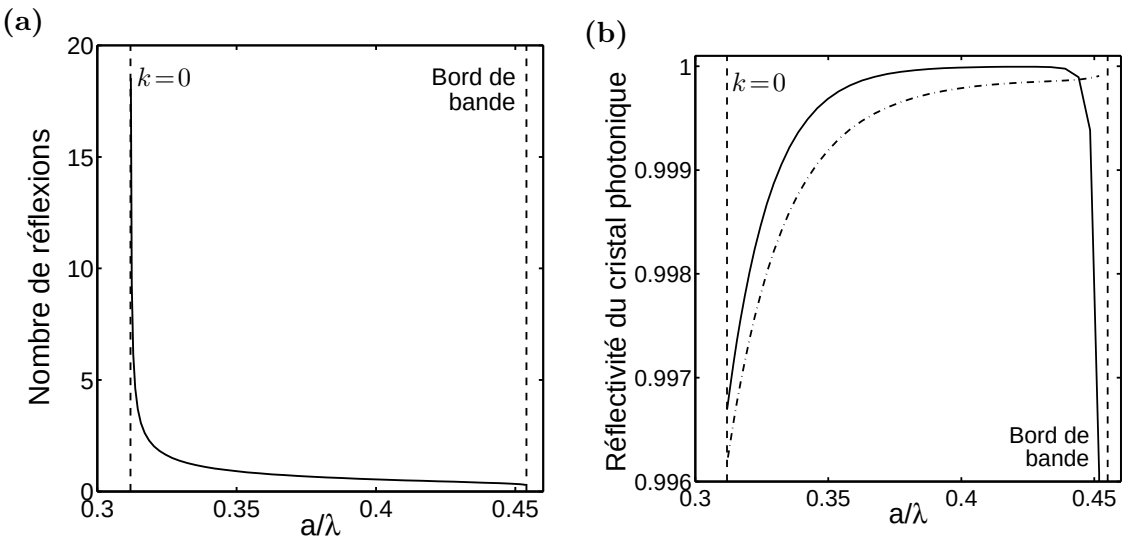

Figure 3.14: *Quantités physiques liées à l'atténuation du mode. (a) Nombre de réflexions par période. (b) Réflectivité du cristal photonique (courbe en trait plein) et du miroir de Bragg homogénéisé correspondant (pointillés discontinus).*

Figure 3.14(b). A l'exception de la chute rapide de R en bord de bande qui ne peut être expliquée qu'en considérant strictement la structure bidimensionnelle du cristal photonique, la tendance générale est bien reproduite, à savoir l'augmentation progressive de la réflectivité avec la fréquence. Lorsque la fréquence augmente, l'angle θ augmente également, voir Figure 3.12. *L'anomalie présentée dans* [Li04] *n'est donc rien d'autre que la conséquence d'une propriété classique des miroirs de Bragg* : l'augmentation de la réflectivité avec l'angle d'incidence [Yeh98].

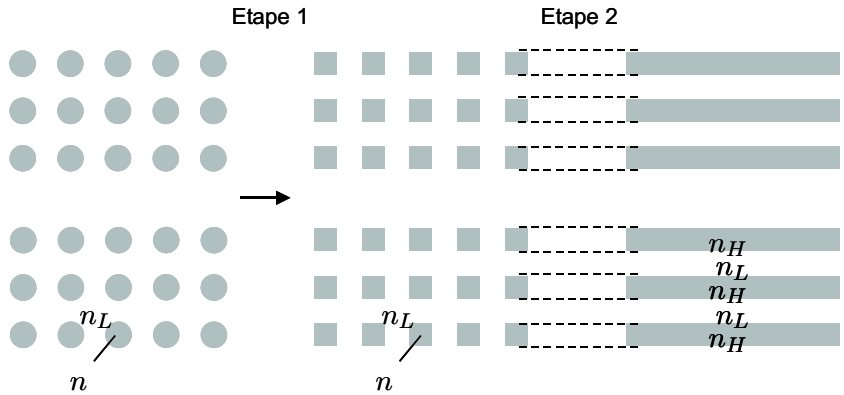

Figure 3.15: *Procédure d'homogénéisation du cristal photonique utilisée pour expliquer la diminution « anormale » de l'atténuation alors que la courbe de dispersion du mode se rapproche de la bande de conduction. Etape 1 : les cylindres circulaires sont transformés en cylindres de section carrée et de même surface. Etape 2 : chaque rangée est homogénéisée comme décrit dans l'article [Lal96a].*

3.2.5 Discussion des limites du modèle

En fournissant une expression analytique simple de l'atténuation, le modèle Fabry-Perot permet d'identifier clairement les mécanismes physiques qui gouvernent la propagation de la lumière dans les guides à cristaux photoniques. Il nous a donc permis d'interpréter simplement toutes les caractéristiques d'un spectre d'atténuation qui pouvait sembler étonnant au premier abord.

Bien sûr, la géométrie étudiée ici est elle-même simple, en particulier parce qu'elle n'est que bidimensionnelle. Mais *le modèle Fabry-Perot peut s'étendre facilement au cas d'une géométrie tridimensionnelle* dans laquelle le cristal photonique est gravé dans un empilement de couches minces. L'ordre $p = 0$ du développement en ondes planes de l'équation 3.5 devient alors le mode fondamental du guide planaire non gravé.

Par contre, *il est nécessaire que seul l'ordre 0 diffracté par le cristal photonique soit propagatif.* Cela impose une condition sur le vecteur d'onde k du mode du guide à cristaux photoniques :

$$\beta + k < \frac{2\pi}{a}, \tag{3.19}$$

où β est la constante de propagation du mode du guide planaire dans lequel le cristal photonique a été gravé. Dans le cas que nous avons étudié précédemment, $\beta = k_0$. Si le vecteur d'onde k ne vérifie pas cette condition, l'ordre -1 diffracté par le cristal photonique devient propagatif, et il est alors nécessaire d'inclure un deuxième mode guidé dans le modèle Fabry-Perot. La prise en compte de ce mode supplémentaire ne compliquerait pas le modèle outre mesure mais rendrait l'interprétation physique des équations plus laborieuse.

La dimensionnalité de la structure n'influe pas sur la condition 3.19, qui n'est *a priori* pas plus difficile à remplir en 3D qu'en 2D. Par contre cette condition est d'autant plus facile à remplir que le mode est guidé dans un milieu de faible indice. Dans les guides réels 3D à cristaux photoniques, le mode est en général guidé dans l'indice fort. Il existe cependant des structures fabriquées dans lesquelles la lumière est guidée dans un matériau de faible indice [Teo05], pour lesquelles le modèle Fabry-Perot garde tout son intérêt.

3.3 Calcul de la durée de vie

Pour les deux guides à cristaux photoniques que nous avons étudiés, l'atténuation du mode fondamental diverge quand sa vitesse de groupe tend vers zéro en bord de zone de Brillouin pour $k = 0$ ou $k = \frac{\pi}{a}$. Ces résultats incitent à se poser un certain nombre de questions auxquelles nous allons essayer de répondre. Cette divergence est-elle due à l'annulation de la vitesse de groupe ou à la position dans la zone de Brillouin ? Qu'advient-il de la durée de vie du mode en ces points ? A-t-elle un comportement régulier ou présente-t-elle une variation rapide avec la vitesse de groupe ?

3.3.1 Relation entre l'atténuation et la durée de vie

Nous avons vu dans les sections 3.1 et 3.2 que les modes d'un guide à cristaux photoniques correspondent à des résonances transverses, décrites par un vecteur d'onde complexe $\tilde{k} = k + i\alpha$ dont la partie imaginaire représente l'atténuation du mode. De la même façon que nous avons prolongé les équations de Maxwell dans le plan complexe pour le vecteur d'onde, il est possible de les prolonger pour la fréquence [Pet80]. Les résonances transverses peuvent donc être décrites par une fréquence complexe

$$\tilde{\omega} = \omega + i\omega'' \tag{3.20}$$

dont la partie imaginaire représente la durée de vie τ du mode ou le facteur de qualité Q de la résonance transverse :

$$\tau = \frac{Q}{\omega_0} = -\frac{1}{2\omega''}. \tag{3.21}$$

La relation de dispersion d'un mode est donc une fonction complexe d'une variable complexe, que nous noterons g :

$$\tilde{k} = g(\tilde{\omega}). \tag{3.22}$$

En pratique, on ne connaît souvent que deux projections de la fonction g : la projection sur l'axe $\tilde{k} \in \mathbb{R}$ et celle sur l'axe $\tilde{\omega} \in \mathbb{R}$. La première projection est obtenue en fixant k réel et en calculant la fréquence complexe qui est solution des équations de Maxwell :

$$k = g(\tilde{\omega}) = g(\omega + i\omega''). \tag{3.23}$$

La deuxième projection est obtenue en fixant ω réelle et en calculant le vecteur d'onde complexe qui est solution des équations de Maxwell :

$$\tilde{k} = k' + i\alpha = g(\omega). \tag{3.24}$$

A ce stade, deux questions se posent : est-ce-que $k = k'$? Quel est le lien entre ω'' et α ? Pour y répondre, intéressons nous à l'équation 3.23. Elle définit la partie réelle $\omega(k)$ de la relation de dispersion à laquelle nous sommes habitués, ainsi que sa partie imaginaire $\omega''(k)$. Faisons les trois hypothèses suivantes, qui seront vérifiées par la suite :

1. g est une fonction analytique d'une variable complexe.
2. Le facteur de qualité de la résonance transverse est grand, ce qui signifie que $\forall k$, $\omega''(k) \ll \omega(k)$.
3. La partie imaginaire de la relation de dispersion est plus plate que sa partie réelle, ce qui signifie que $\forall k$, $\dfrac{\mathrm{d}\omega''}{\mathrm{d}k} \ll \dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$.

Les hypothèses 1 et 2 nous permettent d'écrire un développement limité de l'équation 3.23 à l'ordre 1 autour de ω :

$$k = g(\tilde{\omega}) = g(\omega) + i\omega'' g'(\omega) + O(\omega''^{\,2}), \tag{3.25}$$

où g' est la dérivée première de la fonction g. En substituant l'équation 3.24 dans l'équation 3.25, nous obtenons

$$k = k' + i\alpha + i\omega'' g'(\omega) + O(\omega''^{\,2}). \tag{3.26}$$

La fonction g étant une fonction complexe, sa dérivée g' l'est également. Pour pouvoir séparer les parties réelles et les parties imaginaires dans l'équation 3.26, il faut donc évaluer $\mathrm{Re}(g')$ et $\mathrm{Im}(g')$. Pour cela, considérons deux vecteurs d'ondes réels k_1 et k_2 et les fréquences complexes associées $\tilde{\omega}_1$ et $\tilde{\omega}_2$. La dérivée de la fonction g s'écrit

$$g'(\omega) = \lim_{1\to 2} \frac{k_2 - k_1}{\tilde{\omega}_2 - \tilde{\omega}_1} = \lim_{1\to 2} \frac{\Delta k}{\Delta\omega}\left(1 + i\frac{\Delta\omega''}{\Delta k}\frac{\Delta k}{\Delta\omega}\right)^{-1}, \tag{3.27}$$

avec $\Delta k = k_2 - k_1$, $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ et $\Delta\omega'' = \omega_2'' - \omega_1''$. La dérivée de la fonction g s'exprime donc en fonction des dérivées des fonctions réelles $\omega(k)$ et $\omega''(k)$,

$$g'(\omega) = \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}\left(1 + i\frac{\mathrm{d}\omega''}{\mathrm{d}k}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}\right)^{-1}. \tag{3.28}$$

En utilisant l'hypothèse 3, l'équation 3.28 devient

$$g'(\omega) = \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}\left(1 - i\varepsilon\right), \tag{3.29}$$

où $\varepsilon \ll 1$. L'équation 3.29 met en évidence que la partie réelle de g' est un ordre 0 alors que sa partie imaginaire est un ordre 1. Ainsi, à l'ordre 1 sur les parties réelles et imaginaires, l'équation 3.26 devient :

$$k' = k, \tag{3.30}$$

$$\alpha = -\frac{\omega''}{v_g} = \frac{1}{2v_g\tau}. \tag{3.31}$$

Ces deux relations sont valables dans le cadre des trois hypothèses énoncées précédemment. L'équation 3.31 montre que *l'atténuation α du mode et sa durée de vie τ sont liées par la vitesse de groupe v_g*. Elle montre en particulier que l'atténuation diverge lorsque la vitesse de groupe s'annule. La durée de vie étant toujours positive, l'équation 3.31 définit bien toujours une atténuation, puisque lorsque la vitesse de groupe est positive, $\alpha > 0$, et lorsqu'elle est négative, $\alpha < 0$.

En introduisant la longueur caractéristique parcourue par le mode, $l = \frac{1}{2\alpha}$, l'équation 3.31 devient tout simplement

$$l = v_g\tau. \tag{3.32}$$

Cette relation signifie qu'un mode de vitesse de groupe v_g et de durée de vie τ se propage sur une distance caractéristique l avant de disparaître. Ainsi, pour une même durée de vie, un mode lent possède une extension spatiale plus petite qu'un mode plus rapide.

3.3.2 Durée de vie des modes des guides à cristaux photoniques

Nous considérons dans cette section un guide d'onde à cristaux photoniques du même type que celui étudié à la section 3.1, voir Figure 3.1, mais dont les paramètres géométriques diffèrent légèrement. Le cristal photonique est un réseau triangulaire de trous d'air de paramètre de maille $a = 560nm$ percés dans une membrane d'InP d'indice $n = 3.2$ et de hauteur $h = 250nm$. Le rayon des trous est $r = 0.37a$ et le guide d'onde est formé en enlevant une rangée de trous dans la direction ΓK du réseau triangulaire. Il y a 5 rangées de trous de part et d'autre de la rangée manquante.

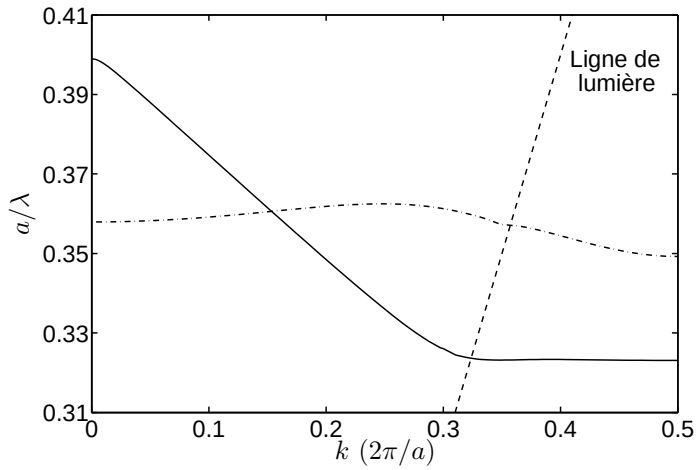

Figure 3.16: *Courbe de dispersion $\omega(k)$ des deux modes du guide à cristaux photoniques considéré à la section 3.3.2. La courbe en trait plein correspond au mode symétrique (le mode fondamental) et la courbe quasi-plate en pointillés discontinus correspond au mode antisymétrique. Les calculs ont été réalisés avec la méthode décrite à la section 3.1.3.*

Comme le guide d'onde étudié à la section 3.1, le guide considéré ici supporte deux modes à l'intérieur de la bande interdite du cristal. Les composantes prépondérantes de leur champ électromagnétique sont H_x et E_y, ce qui correspond à une polarisation quasi-TE, par référence au guide planaire non gravé. Les composantes H_x et E_y du premier mode sont symétriques par rapport à l'axe de propagation et celles du deuxième mode sont antisymétriques. Les courbes de dispersion de ces deux modes sont représentées sur la Figure 3.16. Le changement de paramètres géométriques nous permet d'obtenir un mode fondamental dont la courbe de dispersion reste dans la bande interdite pour tout k, du bord de bande en $k = \frac{\pi}{a}$ jusqu'au point Γ en $k = 0$.

Dans le calcul de l'atténuation et de la durée de vie, il faut distinguer les deux régions au-dessus et en-dessous de la ligne de lumière car les mécanismes physiques à l'origine des pertes intrinsèques y sont différents. Au-dessus de la ligne de lumière, la durée de vie des modes est limitée à la fois par une fuite de la lumière à travers le cristal photonique de taille finie entourant la rangée manquante et par une diffraction

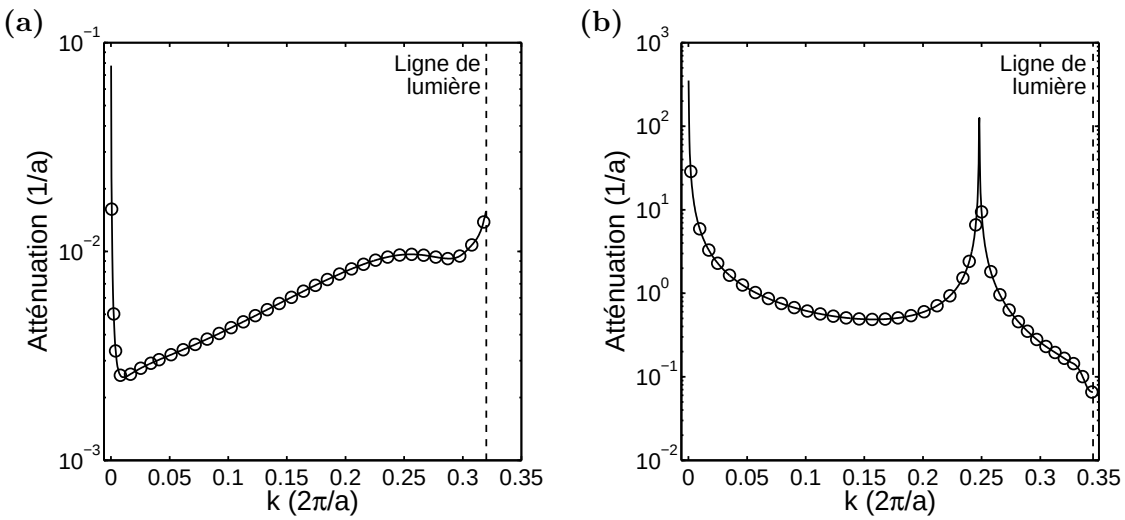

Figure 3.17: *Atténuation des deux modes du guide à cristaux photoniques dont la courbe de dispersion est représentée sur la Figure 3.16. (a) Atténuation du mode fondamental. (b) Atténuation du mode antisymétrique. Les cercles correspondent au calcul direct de la partie imaginaire du vecteur d'onde complexe $\tilde{k}$ et la courbe en trait plein correspond à l'équation 3.31 utilisant le calcul de la partie imaginaire de la fréquence complexe $\tilde{\omega}$.*

hors du plan de la membrane. Sous la ligne de lumière par contre, la durée de vie des modes est limitée uniquement par la taille finie du cristal photonique, comme dans une géométrie bidimensionnelle. Dans cette région, nous avons déjà observé une divergence de l'atténuation du mode fondamental lorsque la vitesse de groupe s'annule en bord de zone pour $k = 0.5$, voir Figure 3.9. Nous avons également observé une divergence de l'atténuation du mode fondamental pour $k = 0$ dans une géométrie 2D, voir Figure 3.13. Cette géométrie est physiquement similaire à une géométrie 3D sous la ligne de lumière.

Dans cette section, nous considérons les cas que nous n'avons pas encore étudiés, c'est-à-dire les points *au-dessus de la ligne de lumière* pour lesquels la vitesse de groupe s'annule. L'annexe B revient en détails sur les divergences de l'atténuation observées dans un guide à cristaux photoniques 2D.

Test de la relation entre l'atténuation et la durée de vie

Intéressons nous tout d'abord à l'atténuation des modes. Celle-ci est calculée de deux manières différentes : directement en calculant la partie imaginaire du vecteur d'onde complexe $\tilde{k}$ puis indirectement en utilisant l'équation 3.31 et en calculant la partie imaginaire de la fréquence complexe $\tilde{\omega}$ et la vitesse de groupe du mode. Tous ces calculs ont été réalisés en utilisant la méthode présentée à la section 3.1.3. Les Figures 3.17(a) et 3.17(b) montrent que les résultats obtenus sont superposés pour les deux modes sur toute la gamme de vecteurs d'onde, validant ainsi les trois hypothèses conduisant à l'équation 3.31.

L'atténuation diverge aux points où la vitesse de groupe s'annule, en $k = 0$ pour

le mode symétrique, voir Figure 3.17(a), en $k = 0$ et en $k = 0.248$ pour le mode antisymétrique, voir Figure 3.17(b). Dans le cas du mode antisymétrique, la vitesse de groupe change de signe au milieu de la zone de Brillouin pour $k = 0.248$, voir Figure 3.16. La partie imaginaire α du vecteur d'onde change donc également de signe en ce point et nous avons en fait représenté sur la Figure 3.17(b) la valeur absolue de l'atténuation.

Comparaison des durées de vie et des extensions spatiales des deux modes

Les Figures 3.18(a) et 3.18(b) comparent les facteurs de qualité des résonances transverses associées aux deux modes du guide, dans la gamme de vecteurs d'onde pour lesquels les modes sont situés au-dessus de la ligne de lumière. Deux points importants sont à noter. D'une part, les deux courbes présentent un comportement régulier, y compris aux points où la vitesse de groupe s'annule. D'autre part, la durée de vie du mode symétrique est 10 à 30 fois plus grande que celle du mode antisymétrique.

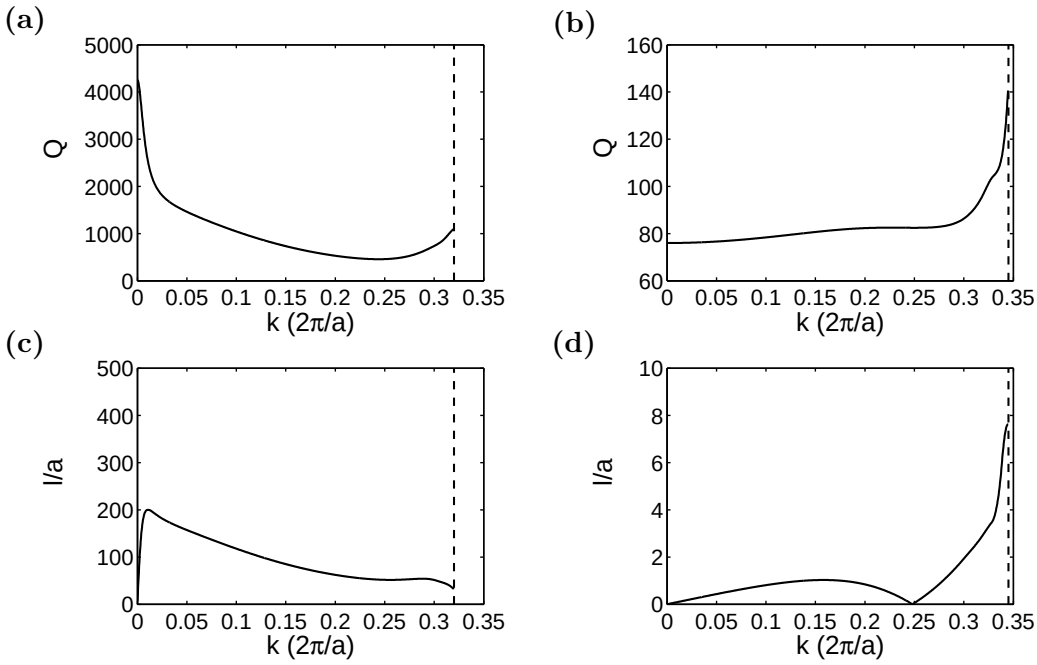

Figure 3.18: *Durée de vie et extension spatiale des deux modes du guide à cristaux photoniques dont la courbe de dispersion est représentée sur la Figure 3.16. (a) Facteur de qualité du mode symétrique. (b) Facteur de qualité du mode antisymétrique. (c) Extension spatiale normalisée du mode symétrique. (d) Extension spatiale normalisée du mode antisymétrique. Les lignes verticales en pointillés indiquent les vecteurs d'onde pour lesquels la courbe de dispersion du mode traverse la ligne de lumière.*

Les Figures 3.18(c) et 3.18(d) comparent les extensions spatiales normalisées l/a des deux modes du guide. Excepté en $k = 0$ où elle s'annule, l'extension spatiale du mode fondamental est 100 fois plus grande que celle du mode antisymétrique, qui

n'excède pas la dizaine de périodes. Le rapport Q/l entre la durée de vie et l'extension spatiale — lié au facteur de Purcell qui caractérise l'augmentation de l'émission spontanée d'un émetteur placé dans le guide [Pur46] — est donc environ 10 fois plus grand pour le mode antisymétrique que pour le mode fondamental. Ce rapport étant directement proportionnel à l'inverse de la vitesse de groupe, voir équation 3.32, cette différence entre les deux modes est due à la faible vitesse de groupe du mode antisymétrique sur tout la gamme de vecteurs d'onde, voir Figure 3.16.

3.3.3 Bilan

Dans cette section, nous avons établi la relation entre l'atténuation, la durée de vie et la vitesse de groupe d'un mode d'un guide à cristaux photoniques, voir équation 3.31. Nous avons testé numériquement cette relation en considérant le mode fondamental et le mode antisymétrique d'un guide à cristaux photoniques opérant au-dessus de la ligne de lumière.

Nous avons en particulier montré que l'atténuation d'un mode à faible vitesse de groupe diverge dès que ce mode est sujet à des pertes, quelle que soit leur origine. Nous ne nous sommes intéressés qu'à des pertes intrinsèques (pertes par diffraction hors du plan ou pertes par effet tunnel), mais le raisonnement s'applique également à des pertes extrinsèques, comme par exemple des pertes dues à des défauts de fabrication (rugosité, fluctuation de la taille des structures). Cela confirme certains résultats parus récemment dans la littérature montrant une divergence de l'atténuation d'un guide à cristaux photoniques imparfait [Ger04, Hug05a]. Lorsque la vitesse de groupe diminue, l'énergie se propage plus lentement dans le guide et elle a donc plus le temps de « sentir » toutes les sources de pertes, quelles qu'elles soient. Mais, bien qu'elle fluctue fortement d'un mode à l'autre, l'énergie qui s'échappe du guide par unité de temps reste approximativement la même.

3.4 Calcul de la réflectivité modale

3.4.1 Problème physique à résoudre

Nous considérons maintenant le problème illustré sur la Figure 3.19 dans lequel le guide à cristaux photoniques étudié à la section 3.1 est fermé à une extrémité par le cristal photonique sans défaut. Le mode fondamental symétrique du guide est alors réfléchi, puisque sa courbe de dispersion se situe à l'intérieur de la bande interdite photonique du cristal, et cette réflexion s'accompagne d'une diffraction de la lumière hors du plan, dans l'air et dans le substrat. Comme nous le verrons dans la troisième partie de la thèse, la résolution de ce problème de réflexion est essentielle à la compréhension du confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques.

La résolution numérique de ce problème est très difficile et, à notre connaissance, n'a pas été abordée dans la littérature avant nos travaux. Comme dans le cas du calcul de l'atténuation du mode guidé, il s'agit d'évaluer les pertes par diffraction hors du plan de l'hétérostructure, pour un objet de grande dimension dans la direction transverse y. Il y a cependant une difficulté supplémentaire : la dimension

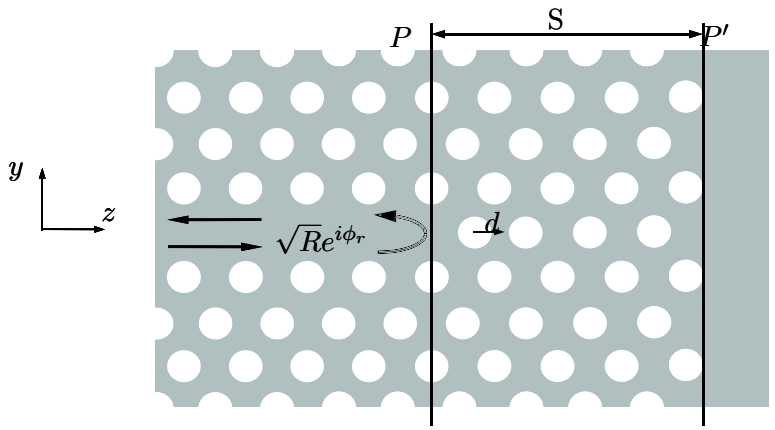

Figure 3.19: *Le mode fondamental d'un guide à cristaux photoniques est réfléchi par le cristal photonique sans défaut. La réflexion $r = \sqrt{R}e^{i\phi_r}$ est un des coefficients de la matrice de diffraction S qui relie les modes de Bloch du guide dans le plan P aux modes de la membrane non gravée dans le plan P'. Dans cet exemple, le miroir est composé de $M = 8$ rangées de trous. Le premier trou du miroir peut être déplacé et son déplacement est noté d.*

importante de la structure dans la direction longitudinale z, qui est fixée par l'épaisseur du miroir et qui est nécessairement grande pour approcher numériquement la réflexion d'un miroir infini.

D'autre part, en fonction de la géométrie de l'interface guide/miroir, les pertes par diffraction peuvent être très faibles et la réflectivité proche de l'unité [Sau05c]. Le calcul numérique doit donc être réalisé avec une très bonne précision.

3.4.2 Utilisation de la méthode modale de Fourier généralisée

La méthode modale de Fourier généralisée est parfaitement adaptée pour résoudre ce problème de réflexion puisqu'il ne s'agit ni plus ni moins que de calculer l'échange d'énergie entre les modes de Bloch du guide et ceux du cristal sans défaut. Au contraire, la résolution de ce problème avec la FDTD nécessiterait le calcul fastidieux de plusieurs intégrales de recouvrement. Nous avons vu que pour calculer l'atténuation du mode guidé, nous pouvions choisir la direction dans laquelle intégrer les équations de Maxwell analytiquement, voir section 3.1.3. Cela était dû au fait que nous calculions un mode de la structure, c'est-à-dire une solution des équations de Maxwell en l'absence d'onde incidente. Au contraire, le problème de la réflexion ne nous laisse pas le choix de la direction d'intégration : elle est fixée par la direction de propagation du mode de Bloch incident sur le miroir.

Nous calculons donc la matrice de diffraction du cristal photonique sans défaut qui relie les modes de Bloch du guide dans le plan P aux modes du guide planaire non-gravé dans le plan P' parallèle à P, voir Figure 3.19. Le calcul de cette matrice, notée S, est réalisé de façon récursive, comme décrit à la section 1.1.3, en découpant le cristal photonique en un empilement de fines couches dans lesquelles la permittivité est invariante par translation dans la direction z.

La matrice de diffraction contient tous les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude entre, d'une part, les modes de Bloch guidés et radiatifs du guide à cristaux photoniques et, d'autre part, les modes guidés et radiatifs du guide planaire, voir section 1.1.3. Elle contient donc en particulier les coefficients de réflexion r_{mn} du mode de Bloch du guide numéro m dans le mode de Bloch du guide numéro n. Parmi tous ces coefficients, c'est la réflexion r_{11} du mode fondamental du guide à cristaux photoniques sur lui-même qui nous intéresse. Par la suite, ce coefficient est noté $r = \sqrt{R}e^{i\phi_r}$.

Les modes de Bloch du guide à cristaux photoniques sont calculés avec l'approche développée dans [Lal02], en diagonalisant la matrice de diffraction T définie dans la direction z entre deux plans séparés par une période a, voir Figure 3.1. Dans l'intervalle spectral considéré, le mode de Bloch du guide se situe sous la ligne de lumière. Néanmoins, du fait de la diffraction se produisant à l'interface avec le miroir, nous sommes contraints de conserver les PMLs comme conditions aux limites aux bornes du domaine de calcul dans la direction x.

3.4.3 Etude de la convergence du calcul

Pour étudier la convergence du calcul, le cristal photonique que nous considérons est un réseau triangulaire de trous d'air de paramètre de maille $a = 420nm$ gravés dans une membrane de silicium d'épaisseur $h = 0.6a$ et d'indice $n = 3.42$, supposé indépendant de la fréquence. Le rayon des trous est $r = 0.29a$. Le guide d'onde est formé en enlevant une rangée de trous dans la direction ΓK du cristal photonique.

Nous calculons le coefficient de réflexion d'un miroir formé de $M = 15$ rangées de trous dont le premier trou a été déplacé de $d = 0.18a$ vers l'intérieur. Cette géométrie a été choisie pour tester la convergence de nos calculs car sa réflectivité est proche de l'unité [Sau05c].

L'utilisation de PMLs aux bornes du domaine de calcul dans la direction y garantit de remplir correctement les conditions d'ondes sortantes mais oblige à modéliser une structure de taille finie, comportant un certain nombre de rangées de trous de part et d'autre de la rangée manquante. Le mode fondamental du guide à cristaux photoniques, bien que sous la ligne de lumière, est alors atténué. Pour éviter les difficultés liées au calcul du coefficient de réflexion d'un mode atténué dans lui-même, comme par exemple l'obtention de réflectivités supérieures à 1, il est préférable de faire en sorte de modéliser une structure possédant une infinité de rangées de trous dans la direction y. Nous avons donc choisi d'utiliser une technique de type supercellule en périodisant la structure dans la direction y sans PMLs.

Nous avons réalisé les calculs pour des guides parallèles séparés de 10 rangées de trous. En faisant varier ce nombre de 8 à 12, nous n'avons pas observé de variation notable de la réflectivité. Nous avons en outre vérifié que l'utilisation d'une supercellule n'introduisait pas d'artefacts numériques, comme cela peut être le cas lors du calcul de l'atténuation du mode fondamental du guide, voir section 3.1.2.

La précision du calcul des pertes par diffraction hors de la membrane étant principalement liée au nombre de termes de Fourier m_x dans la direction verticale, nous avons étudié la variation de la réflectivité R en fonction de $1/m_x$, voir Figure 3.20. Le nombre de termes de Fourier dans la direction y est fixé à $m_y = 51$ et la PML

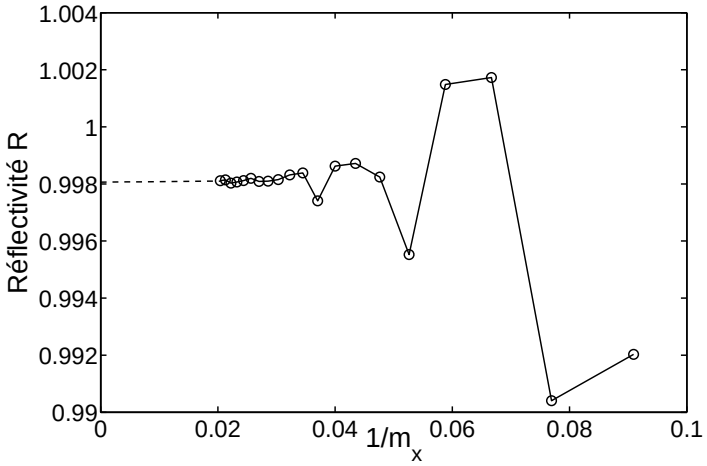

Figure 3.20: *Illustration de la convergence du calcul : variation de la réflectivité en fonction de* $1/m_x$ *pour* $m_y = 51$*. Les pointillés montrent l'extrapolation linéaire de la courbe pour* $m_x \to \infty$*.*

utilisée dans la direction verticale est la même que celle qui a été optimisée pour le calcul de l'atténuation du guide au-dessus de la ligne de lumière, $q_x = 3h$ et $\gamma_x = \frac{1}{1-i}$.

Une extrapolation linéaire de R pour $m_x \to \infty$ montre que le calcul converge lorsque le nombre d'ondes planes retenues dans la décomposition du champ tend vers l'infini. Cette extrapolation conduit à $R = 0.9981$, voir Figure 3.20. Il est ainsi possible d'évaluer l'incertitude d'un calcul réalisé avec un nombre fini de termes de Fourier : pour 29×51 termes de Fourier retenus dans le développement des champs électromagnétiques, l'incertitude sur la réflectivité vaut $\Delta R \approx 3 \times 10^{-4}$.

Nous avons donc vérifié que le calcul converge. Il reste à vérifier que la valeur prédite est bien correcte. Comme aucun autre calcul semblable n'a été publié par d'autres groupes à notre connaissance, cette vérification est faite indirectement dans le Chapitre 7 en considérant le facteur de qualité d'une cavité à cristaux photoniques. Nous comparons les valeurs du facteur de qualité prédites à partir du calcul de la réflectivité avec les valeurs mesurées expérimentalement par le groupe de S. Noda à l'Université de Kyoto [Aka03a]. Un très bon accord est obtenu.

3.5 Conclusion

Dans ce Chapitre, nous avons étudié les principales propriétés du mode fondamental des guides à cristaux photoniques en nous appuyant sur des travaux numériques poussés réalisés avec la méthode modale de Fourier généralisée. L'analyse a porté sur un système modèle, le guide à une rangée manquante, et sur trois quantités physiques essentielles de son mode fondamental, son atténuation, sa durée de vie et sa réflectivité modale sur un cristal photonique bidimensionnel. En outre, dans le cas particulier où le mode du guide est confiné dans un milieu de faible indice, nous avons pu dériver des expressions analytiques simples de l'atténuation qui permettent d'interpréter complètement des comportements non-triviaux.

L'optimisation des couches numériques absorbantes qui limitent le domaine de calcul ainsi que le choix judicieux de la direction d'intégration analytique ont permis de résoudre avec précision le problème tridimensionnel difficile que constitue le calcul de l'atténuation et de la durée de vie intrinsèques du mode fondamental des guides à cristaux photoniques. Ces calculs précis mettent en évidence la relation entre l'atténuation, la durée de vie et la vitesse de groupe du mode.

Conclusion de la première partie

Cette partie dédiée à la présentation et au test des outils numériques utilisés au cours de la thèse a permis de montrer comment certains calculs difficiles ont pu être réalisés avec précision.

Dans le Chapitre 1, nous avons présenté les grandes lignes de la méthode numérique utilisée au cours de cette thèse, c'est-à-dire la méthode modale de Fourier généralisée à la modélisation de structures non-périodiques. Nous avons en particulier insisté sur son principal point fort, qui est d'être basée sur le calcul des échanges d'énergie entre les différents modes de la structure. Cette caractéristique procure à la méthode numérique une signification physique forte.

Dans le Chapitre 2, nous avons traité de la stabilité et de la convergence des méthodes numériques basées sur une décomposition du champ électromagnétique dans une base de fonctions continues. Ce travail suggère que les résultats classiques concernant l'écriture du produit de fonctions discontinues dans la base des ondes planes peuvent être généralisés à de nombreuses autres bases de fonctions, laissant ainsi espérer une augmentation significative de la vitesse de convergence.

Dans le Chapitre 3, nous avons étudié les guides à cristaux photoniques en utilisant la méthode modale de Fourier généralisée. L'analyse a porté sur un système modèle, le guide à une rangée manquante, et sur trois quantités physiques essentielles, l'atténuation, la durée de vie et la réflexion sur un cristal photonique bidimensionnel du mode fondamental. Au-delà de la prouesse calculatoire, nous avons montré que, bien utilisé, l'outil numérique permet de comprendre finement les mécanismes physiques qui sont à la base de la propagation de la lumière dans les guides à cristaux photoniques. Dans la troisième partie de la thèse, nous aborderons de façon similaire le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques, en nous appuyant sur le calcul de la réflectivité modale présenté à la section 3.4.

Deuxième partie

Structures sub-λ pour l'optique diffractive large bande

Introduction de la deuxième partie

L'imprévu est toujours de mauvais goût.
O. Wilde, L'importance d'être constant, Acte IV

« La résolution d'un système d'imagerie est limitée par la diffraction. » Cette simple affirmation, si souvent entendue au détour d'un cours de physique, suffit à mesurer la crainte que la diffraction a longtemps inspirée à bon nombre d'opticiens. En effet, mis à part dans le domaine de la spectroscopie, la diffraction a souvent été considérée comme néfaste lors de la conception d'un système optique. Cette façon de voir s'est progressivement inversée depuis l'essor des micro et nanotechnologies. Cet essor a en effet changé notre façon d'appréhender les phénomènes de diffraction dans les systèmes d'imagerie [Swa89, Swa91].

En fait, la diffraction peut être utilisée à bon escient dans un système optique afin d'en améliorer les performances. Il faut entendre par là un gain dans le compromis permanent entre encombrement, poids, champ et qualité d'image. Le terme d'*optique diffractive* est apparue à la fin des années 80, la première conceptualisation poussée pouvant être largement attribuée à une équipe du Laboratoire Central de Recherche de Thomson CSF [Aur72]. Ce terme est employé pour dénommer la branche du génie optique qui consiste à concevoir des optiques dans lesquelles la diffraction joue un rôle dans la mise en forme des fronts d'onde. De telles optiques sont qualifiées de *diffractives*, par opposition à leurs aînées dites *réfractives*, dans lesquelles la mise en forme des fronts d'onde relève purement de la réfraction ou de la réflexion. L'incorporation d'optiques diffractives dans un système d'imagerie réfractif permet de corriger un certain nombre d'aberrations — en particulier des aberrations chromatiques — de façon peu coûteuse en termes d'encombrement et de poids. De tels systèmes optiques sont alors dits *hybrides*.

Malheureusement, les optiques diffractives souffrent de *deux limitations fondamentales* qui restreignent fortement leur champ d'application dans les systèmes d'imagerie. En effet, l'efficacité d'un composant diffractif idéal n'est de 100% que

1. pour de faibles angles d'incidence et de déviation.
2. pour une seule longueur d'onde, dite longueur d'onde de *blaze*.
   (longueur d'onde à laquelle le composant a été conçu pour opérer)

Autrement dit, il est difficile de réaliser des optiques diffractives efficaces qui aient une grande ouverture numérique et/ou qui soient spectralement large bande. La première limitation n'est pas gênante dans le cas d'optiques hybrides pour lesquelles la diffraction n'est utilisée que pour des corrections de fronts d'onde, c'est-à-dire dans le cas où le déphasage introduit par le composant varie lentement par rapport à la longueur d'onde. Mais à cause de la seconde limitation, cette correction ne peut pas être envisagée pour des applications large bande. C'est pourquoi les applications de l'optique diffractive à l'imagerie restent assez difficiles.

La première limitation a été levée par des travaux récents réalisés à l'Institut d'Optique en collaboration avec Thales Research and Technology et le Laboratoire de Microstructures et de Microélectronique [Lal98b, Lal99b, Lee01, Lee02]. Ces travaux ont montré que l'utilisation de nanostructures permet de réaliser des composants diffractifs efficaces de grande ouverture numérique. Le fonctionnement de ces composants est basé sur l'analogie entre des structures dont la taille est légèrement inférieure à la longueur d'onde — des structures sub-λ — et un matériau artificiel homogène [Sto91, Far92]. Ils sont dits *binaires* car les structures qui les composent sont obtenues par un processus de gravure binaire.

Les structures sub-λ possèdent d'autres propriétés optiques originales. L'objectif de ce travail est de montrer qu'il est possible de mettre à profit leurs propriétés de dispersion structurale pour réaliser des optiques diffractives efficaces sur une large plage spectrale.

Le premier Chapitre de cette partie est consacré à une rapide introduction au monde de l'optique diffractive. Quel est le lien entre un composant diffractif et son équivalent réfractif, comment varie son efficacité avec la longueur d'onde, comment fonctionne un composant diffractif binaire, sont autant de questions auxquelles nous essayerons de répondre simplement.

Dans le deuxième Chapitre, nous étudions en détail le comportement spectral des optiques diffractives binaires grâce à un modèle simple qui permet de prendre en compte de façon quasi-analytique les propriétés de dispersion structurale des structures sub-λ. Ce modèle montre en particulier qu'une utilisation judicieuse des propriétés de dispersion d'un matériau artificiel permet de concevoir des composants diffractifs binaires efficaces sur une large plage spectrale. Un calcul électromagnétique rigoureux complète l'analyse de ce fonctionnement large bande.

Le dernier Chapitre est consacré aux optiques diffractives binaires qui produisent un déphasage variant lentement à l'échelle de la longueur d'onde. Ces optiques possèdent à la fois des structurations fines à l'échelle de la longueur d'onde et des tailles caractéristiques beaucoup plus grandes que la longueur d'onde. Elles sont donc très difficiles à modéliser de façon rigoureuse, et il est important de disposer d'un modèle approché pour prédire leur comportement. Un tel modèle a déjà été développé pour des composants unidimensionnels dont la géométrie est invariante suivant une direction [Lee00a]. Dans le Chapitre 6, nous étendons le domaine d'application du modèle aux composants diffractifs bidimensionnels. Sa validité est testée à l'aide de calculs électromagnétiques rigoureux.

Chapitre 4

Introduction à l'optique diffractive

Les composants diffractifs considérés dans ce travail peuvent être classés en deux grandes familles : les composants diffractifs classiques présentant un profil continu de type échelette, et les composants diffractifs binaires formés de structures sub-λ obtenues par un processus de gravure binaire. Ces derniers sont nés des progrès des micro et nanofabrications et leur fonctionnement repose sur les concepts d'homogénéisation et de matériau artificiel [Lee01]. Le plan de ce chapitre reprend cette classification.

La première section introduit les principaux concepts de l'optique diffractive, pose le problème fondamental de la variation de l'efficacité avec la longueur d'onde et montre comment ce problème peut être surmonté dans le cadre de l'optique diffractive classique. La deuxième section montre une solution originale que nous avons développée en collaboration avec Thales Research and Technology dans laquelle des structures binaires sub-λ remplacent un profil continu. Ce travail se poursuit aujourd'hui pour des applications d'imagerie infrarouge avec la thèse Cifre de Céline Ribot.

4.1 Les optiques diffractives classiques

4.1.1 Equivalence entre composants réfractifs et composants diffractifs

Le composant diffractif le plus connu est sans doute le réseau échelette représenté à la Figure 4.1(b). Éclairé à la longueur d'onde λ_0, dite longueur d'onde de blaze, et pour des périodes très grandes devant λ_0, ce réseau diffracte la lumière avec une efficacité de 100% — aux pertes par réflexion de Fresnel près — dans un ordre de diffraction bien défini et de 0% dans tous les autres ordres. Ce réseau de diffraction est dit *blazé* à la longueur d'onde λ_0. A cette longueur d'onde, il ne fait que dévier la lumière : il est équivalent à un prisme. Plus généralement, nous allons voir qu'il est possible, sous certaines conditions, d'associer à un composant réfractif un composant diffractif équivalent.

Dans le cadre de l'approximation scalaire [Goo96], un composant optique peut être caractérisé pas sa *transmittance*, définie comme le rapport entre l'amplitude complexe de l'onde transmise et l'amplitude complexe de l'onde incidente. Dans les

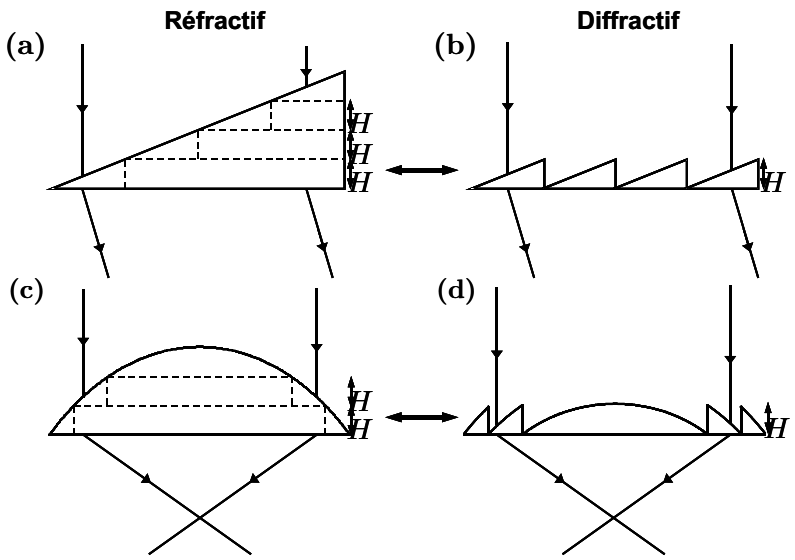

Figure 4.1: *Equivalence entre un composant réfractif et un composant diffractif. La hauteur* $H = \frac{m\lambda_0}{n-n_0}$ *correspond à un retard de phase de* $2m\pi$*. (a) Prisme. (b) Réseau échelette. (c) Lentille réfractive. (d) Lentille diffractive.*

conditions de l'optique paraxiale, la transmittance est intrinsèque au composant et elle est donnée par l'expression

$$t(x,y) = e^{i\phi(x,y)} = e^{i\frac{2\pi}{\lambda}(n-n_0)h(x,y)}, \tag{4.1}$$

où $\phi(x,y)$ est le retard de phase introduit par le composant, que nous appellerons phase pour simplifier, n et n_0 sont respectivement les indices de réfraction du matériau qui constitue le composant et du milieu incident, et $h(x,y)$ est le profil du composant. Dans cette expression, les pertes par réflexion de Fresnel ont été négligées. Les axes x et y permettent de repérer la position dans le plan du composant.

L'équation 4.1 montre que deux composants dont la phase diffère d'un nombre entier de fois 2π ont la même transmittance. Ainsi, enlever à un composant réfractif des blocs de hauteur $H = \frac{m\lambda_0}{n-n_0}$ permet d'obtenir un composant équivalent, puisque ces blocs correspondent à une phase de $2m\pi$ pour la longueur d'onde λ_0. Le composant diffractif ainsi obtenu est blazé dans l'ordre m à la longueur d'onde λ_0 : l'efficacité de diffraction dans l'ordre m est de 100% et aucune énergie n'est diffractée dans les autres ordres. L'ordre m est qualifié d'*ordre utile*.

La Figure 4.1 illustre ce principe de construction pour deux composants classiques, un prisme et une lentille convergente plan-convexe. Une des conséquences directes de cette construction est qu'un composant diffractif est formé de zones de différentes tailles appelées *zones de Fresnel* et séparées par des discontinuités. La hauteur H des discontinuités est du même ordre de grandeur que λ_0 et la largeur des zones est grande devant λ_0 puisque le composant dévie peu la lumière.

Finalement, un théorème d'équivalence entre composants réfractifs et composants diffractifs idéaux peut être formulé :

A la longueur d'onde de blaze λ_0, le composant réfractif et le composant diffractif transmettent le même front d'onde avec la même efficacité.

Ce théorème montre clairement l'intérêt des composants diffractifs, mais il stipule également leurs limitations. En effet, les conditions de validité de ce théorème sont restrictives : la longueur d'onde doit être la longueur d'onde de blaze et les conditions de l'approximation scalaire et de l'approximation paraxiale doivent être vérifiées. En particulier, la phase introduite par le composant doit être lentement variable à l'échelle de la longueur d'onde, c'est-à-dire que le composant se doit de peu dévier la lumière. C'est une des conditions nécessaires à la validité des approximations scalaire et paraxiale, même si ces deux approximations ne se réduisent pas à cette seule condition. Dans la suite de ce Chapitre ainsi que dans le Chapitre 5, nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation scalaire et de l'optique paraxiale.

4.1.2 Effet d'ombrage

La première limitation fondamentale des optiques diffractives classiques — le fonctionnement efficace avec une grande ouverture numérique — apparaît clairement dans les hypothèses du théorème d'équivalence puisqu'il n'est valable que dans le cadre de l'optique paraxiale et pour des composants qui dévient faiblement la lumière. Il suffit de faire un tracé de rayon pour comprendre qualitativement pourquoi un composant diffractif qui dévie fortement la lumière n'est plus blazé. Considérons le réseau échelette de la Figure 4.1(b) et traçons le trajet de deux rayons incidents, l'un au centre d'une zone de Fresnel et l'autre en bord de zone, voir Figure 4.2. Le rayon incident en milieu de zone est bien dévié dans la même direction qu'il aurait été dévié par un prisme, par contre le rayon incident en bord de zone subit une réflexion totale interne sur la paroi verticale ; il n'est donc pas dévié dans l'ordre utile.

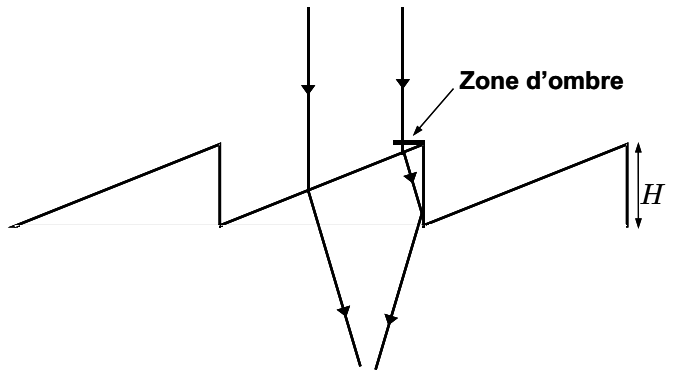

Figure 4.2: *Effet d'ombrage. Une fraction de l'énergie incidente est en réflexion totale interne sur les parois verticales séparant deux zones de Fresnel.*

Ce raisonnement très simple qui s'avère en fait quantitatif [Her97] permet de se rendre compte qu'une fraction de l'énergie incidente sur le composant diffractif ne participe pas de façon constructive aux interférences dans l'ordre utile. Ce phénomène est appelé *effet d'ombrage*, et la partie du composant dans laquelle il se produit

est appelé *zone d'ombre*. Bien sûr, la fraction relative d'énergie perdue est d'autant plus importante que la largeur relative de la zone d'ombre est grande par rapport à la largeur de la zone de Fresnel considérée. Ainsi, dans un composant qui dévie peu la lumière, la taille des zones de Fresnel est grande par rapport à leur hauteur H et donc grande par rapport à la zone d'ombre, et l'effet d'ombrage est négligeable. Au contraire, l'effet d'ombrage est très handicapant dans un composant qui dévie fortement la lumière, puisque la taille des zones de Fresnel devient comparable à leur hauteur.

Voilà pourquoi les profils continus de type échelette ne permettent pas de réaliser des optiques diffractives qui dévient fortement et efficacement la lumière. Il est à noter que les optiques hybrides, dans lesquelles la diffraction n'est utilisée que pour corriger le front d'onde, ne souffrent pas en principe de cette limitation.

4.1.3 Variation de l'efficacité avec la longueur d'onde

Lorsqu'un composant diffractif idéal est éclairé à la longueur d'onde de blaze λ_0, le théorème d'équivalence s'applique et toute l'énergie transmise est diffractée dans l'ordre utile : le composant est 100% efficace. Lorsque la longueur d'onde s'écarte de λ_0, le théorème d'équivalence n'est plus vérifié et l'efficacité du composant diminue. Cette diminution d'efficacité est due au fait qu'une partie de l'énergie transmise n'est plus diffractée dans l'ordre utile, ce qui se traduit par l'apparition de lumière parasite. C'est la deuxième limitation fondamentale des optiques diffractives classiques. Elle restreint considérablement leur utilisation dans des systèmes d'imagerie conçus pour fonctionner sur de larges plages spectrales [Bur92]. Dans cette section, nous allons quantifier ce comportement spectral.

Relation entre la phase du diffractif et la phase du réfractif

Nous considérerons dans la suite un composant diffractif idéal blazé dans l'ordre m à la longueur d'onde λ_0. Ce composant a été gravé dans un matériau d'indice n avec un profil $h(x, y)$ quelconque et il est placé dans un milieu d'indice n_0. Nous supposerons que l'indice de réfraction n du matériau utilisé ne varie pas avec la longueur d'onde. La transmittance de ce composant à la longueur d'onde λ est $t(x, y) = \exp(i\psi(x, y))$, où la phase $\psi(x, y)$ est donnée par

$$\psi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda}(n - n_0)h(x, y). \tag{4.2}$$

L'équation 4.2 définit la phase du composant diffractif à la longueur d'onde λ. A la longueur d'onde de blaze, cette phase est notée ψ_0. La phase du composant réfractif équivalent est notée $\phi(x, y)$ à la longueur d'onde λ et $\phi_0(x, y)$ à la longueur d'onde de blaze. D'après le théorème d'équivalence, les phases des deux composants à la longueur d'onde de blaze sont égales modulo $2m\pi$: $\psi_0(x, y) \equiv \phi_0(x, y) \pmod{2m\pi}$. En combinant cette relation avec l'équation 4.2, on obtient une relation entre $\psi(x, y)$ et $\phi_0(x, y)$,

$$\psi(x, y) \equiv \frac{\lambda_0}{\lambda}\phi_0(x, y) \pmod{2m\pi\frac{\lambda_0}{\lambda}}. \tag{4.3}$$

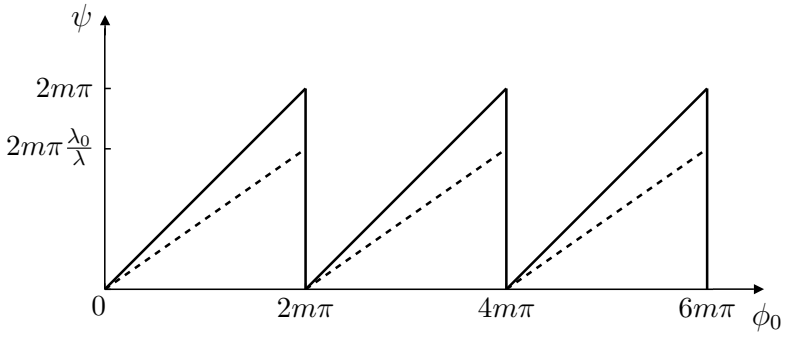

Figure 4.3: *Phase ψ du composant diffractif à λ_0 (trait plein) et à $\lambda > \lambda_0$ (pointillés) en fonction de la phase ϕ_0 du composant réfractif à λ_0.*

L'équation 4.3 montre que *la phase de tout composant diffractif à une longueur d'onde quelconque est une fonction périodique de ϕ_0* — phase du composant réfractif à la longueur d'onde de blaze — *de période* $2m\pi$. La Figure 4.3 illustre cette périodicité pour deux longueurs d'onde différentes, λ_0 et $\lambda > \lambda_0$. A la longueur d'onde de blaze l'équation 4.3 redonne bien le théorème d'équivalence puisqu'elle se traduit par l'égalité des phases des deux composants à $2m\pi$ près. A une longueur d'onde différente de λ_0, la phase ψ du composant diffractif est toujours une fonction périodique de ϕ_0 de période $2m\pi$ mais les deux phases ne sont plus égales. Du fait de ce déphasage, il n'y a plus équivalence entre le composant diffractif et le composant réfractif.

Décomposition de la transmittance en ordres de diffraction

La phase ψ étant une fonction périodique de la variable ϕ_0, la transmittance t du composant diffractif à la longueur d'onde λ l'est également. Elle peut donc être décomposée en série de Fourier,

$$t(\phi_0) = e^{i\psi(\phi_0)} = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} c_p e^{i\frac{p}{m}\phi_0}, \tag{4.4}$$

$$\text{avec} \quad c_p = \frac{1}{2m\pi}\int_0^{2m\pi} t(\phi_0) e^{-i\frac{p}{m}\phi_0}\,\mathrm{d}\phi_0. \tag{4.5}$$

Sur l'intervalle $[0, 2m\pi]$, la transmittance du composant diffractif est simplement donnée par $t(\phi_0) = \exp\left(i\frac{\lambda_0}{\lambda}\phi_0\right)$, voir Figure 4.3. Les coefficients c_p donnés par l'équation 4.5 peuvent donc être calculés facilement en fonction de la longueur d'onde :

$$|c_p|^2 = \mathrm{sinc}^2\left(p - m\frac{\lambda_0}{\lambda}\right), \tag{4.6}$$

où la fonction sinus cardinal est définie par $\mathrm{sinc}(x) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi x}$.

L'équation 4.4 est capitale. Elle est due à G. J. Swanson [Swa89] et montre que le front d'onde transmis par un composant diffractif est, de façon générale, une superposition de différents fronts d'onde pondérés par les coefficients c_p. Chacun de

ces fronts d'onde représente un ordre de diffraction et l'efficacité de diffraction de l'ordre p est donnée par l'équation 4.6.

Bien sûr, à la longueur d'onde de blaze λ_0, tous les coefficients c_p sont nuls pour $p \neq m$ et $|c_m|^2 = 1$. Toute l'énergie transmise est diffractée dans l'ordre m et le front d'onde transmis par le composant diffractif est identique à celui transmis par le composant réfractif équivalent,

$$t_0(x, y) = e^{i\phi_0(x,y)}. \tag{4.7}$$

Pour une longueur d'onde λ différente de λ_0, les autres ordres de diffraction ne sont plus nuls et l'équivalence réfractif/diffractif n'est plus stricte. Pour comprendre ce qui se passe, réécrivons la transmittance du composant diffractif en introduisant la phase $\phi(x, y)$ du composant réfractif à λ dans l'équation 4.4 :

$$t(x, y) = c_m e^{i\frac{\lambda}{\lambda_0}\phi(x,y)} + \sum_{p \neq m} c_p \, e^{i\frac{p}{m}\frac{\lambda}{\lambda_0}\phi(x,y)}. \tag{4.8}$$

L'équation 4.8 montre que le front d'onde transmis par le composant diffractif à la longueur d'onde λ est composé :

1. d'un front d'onde $\exp(i\frac{\lambda}{\lambda_0}\phi(x, y))$ pondéré par le coefficient c_m. C'est le front d'onde de l'ordre utile. Il ne diffère du front d'onde du composant réfractif que par le rapport $\frac{\lambda}{\lambda_0}$.
2. de la lumière parasite formée de la superposition de tous les autres ordres de diffraction, dont les fronts d'onde se déduisent simplement du front d'onde de l'ordre utile.

Illustrons cette constatation générale en considérant l'exemple d'une lentille diffractive. La phase de la lentille réfractive équivalente [Goo96] est donnée par

$$\phi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{x^2 + y^2}{2f}, \tag{4.9}$$

où f est la focale de la lentille considérée. En combinant les équations 4.8 et 4.9, on trouve que le front d'onde diffracté dans l'ordre p par la lentille diffractive est identique au front d'onde transmis par une lentille de focale

$$f_p = \frac{m\lambda_0}{p\lambda} f. \tag{4.10}$$

Autrement dit, une lentille diffractive blazée à λ_0 et éclairée à λ est équivalente à une superposition de différentes lentilles convergentes et divergentes de focales f_p. Les ordres négatifs correspondent à des lentilles divergentes et les ordres positifs correspondent à des lentilles convergentes. L'ordre utile m correspond à une lentille de focale $f\frac{\lambda_0}{\lambda}$.

L'équation 4.8 souligne donc l'importance de la variation de $|c_m|^2$ avec la longueur d'onde. Tant que l'efficacité de diffraction dans l'ordre utile reste proche de 1, les autres ordres de diffraction n'emportent que peu d'énergie et le composant diffractif reste blazé en première approximation. Mais l'effet des autres ordres se fait rapidement sentir en pratique [Bur92, Sau99] car l'équation 4.8 est une somme

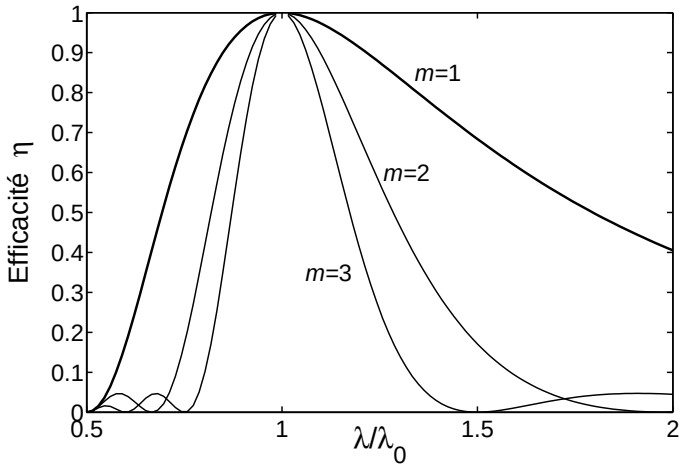

Figure 4.4: *Efficacité η d'une optique diffractive en fonction de la longueur d'onde, pour un composant blazé dans l'ordre $m = 1, 2$ et 3.*

cohérente en amplitude qui engendre de fortes modulations d'intensité pour une détection quadratique. Plus que la baisse de l'efficacité de diffraction dans l'ordre utile, c'est surtout la présence de cette lumière parasite qui rend le composant inutilisable. C'est cet effet, auquel l'œil est sensible, qui a par exemple bloqué le développement de jumelles très légères vers la fin des années 90.

Efficacité de diffraction dans l'ordre utile

Dans toute la suite, l'efficacité de diffraction du composant diffractif dans l'ordre utile sera notée η. Elle est donnée par l'équation 4.6 avec $p = m$, soit

$$\eta(\lambda) = \mathrm{sinc}^2\left(m - m\frac{\lambda_0}{\lambda}\right). \tag{4.11}$$

Sa variation avec la longueur d'onde est représentée sur la Figure 4.4 pour $m = 1$, 2 et 3. Ces courbes servent de références pour tous les composants diffractifs puisque leur variation en sinus cardinal est universelle [Swa89], indépendante de la fonction de phase du composant ou du matériau considéré — si on néglige sa dispersion généralement faible.

La Figure 4.4 illustre deux conclusions importantes. Tout d'abord, si l'application recherchée nécessite un fonctionnement large bande, il est plus intéressant de considérer un composant blazé dans un ordre faible, l'ordre 1 par exemple. Plus l'ordre utile m est faible, plus le déphasage induit par le décalage en longueur d'onde est faible, voir Figure 4.3, et plus la variation de l'efficacité sera lente autour de λ_0, voir Figure 4.4. Pour cette raison, nous considérerons dans toute la suite des composants diffractifs blazés dans l'ordre $m = 1$.

La deuxième conclusion déduite de la Figure 4.4 est que, sans effort particulier, il est impossible d'avoir un composant diffractif efficace sur une large plage spectrale. Par exemple, l'efficacité descend en-dessous de 90% dans chacune des trois bandes classiques qui concernent la plupart des systèmes d'imagerie, le visible et les bandes

3–5μm et 8–12μm de l'infrarouge. Nous allons voir maintenant comment il est possible de rendre l'efficacité d'une optique diffractive à profil continu insensible à la longueur d'onde sur une large plage spectrale.

4.1.4 Optiques diffractives insensibles à la longueur d'onde

Un composant diffractif classique n'est blazé qu'à la longueur d'onde λ_0 parce que le saut de phase entre deux zones de Fresnel n'est égal à 2π que pour $\lambda = \lambda_0$. Si ce saut de phase restait égal à 2π sur un certain intervalle spectral, alors le composant serait blazé sur tout cet intervalle et son efficacité serait de 100%. Pour *achromatiser* un composant diffractif — faire en sorte que $\eta(\lambda)$ soit une constante — il faut donc compenser la variation du saut de phase lorsque la longueur d'onde s'écarte de λ_0.

Jusqu'à présent, nous avons négligé la dispersion du matériau en considérant un indice de réfraction n constant. Lorsque cette dispersion est prise en compte, la relation entre la phase du composant diffractif et celle du composant réfractif à la longueur d'onde de blaze, donnée par l'équation 4.3, devient

$$\psi(x,y) \equiv \frac{\lambda_0 \Delta n(\lambda)}{\lambda \Delta n(\lambda_0)} \phi_0(x,y) \pmod{2\pi \frac{\lambda_0 \Delta n(\lambda)}{\lambda \Delta n(\lambda_0)}}, \tag{4.12}$$

où $\Delta n(\lambda) = n(\lambda) - n_0$. La dispersion naturelle d'un matériau étant assez faible, la variation de cette fonction avec la longueur d'onde est trop petite pour pouvoir compenser la variation du saut de phase. Nous verrons que cette conclusion ne tient plus dans le cas de l'optique diffractive binaire puisque la dispersion à prendre en compte est alors celle d'un matériau artificiel, mais restons dans le cadre de l'optique diffractive classique.

L'équation 4.12 suggère qu'il est possible de modifier la conception du composant diffractif de façon à ce que la fonction $\Delta n(\lambda)$ soit différente et que sa variation avec la longueur d'onde ne soit plus négligeable. Nous allons brièvement passer en revue quelques travaux antérieurs qui se sont appuyés sur cette constatation pour achromatiser des composants diffractifs.

Tout d'abord, S. M. Ebstein a eu l'idée en 1996 d'utiliser deux matériaux différents pour réaliser un composant diffractif, comme illustré sur la Figure 4.5 [Ebs96]. La fonction Δn devient dans ce cas $\Delta n(\lambda) = n_1(\lambda) - n_2(\lambda)$ et il est possible de maintenir constant le saut de phase dans un certain intervalle spectral en choisissant judicieusement les deux matériaux. Cette idée a été reprise et améliorée en 1999 par le groupe de H. P. Herzig à l'Université de Neuchâtel [Sch99] : intercaler une couche d'air entre les deux matériaux permet de disposer d'un degré de liberté supplémentaire (l'épaisseur d'air) pour maintenir le saut de phase constant, voir Figure 4.5.

Enfin, Canon a joliment mis en oeuvre ce principe pour réaliser une lentille diffractive dont l'efficacité est supérieure à 90% sur l'ensemble du spectre visible [Nak02]. Cette lentille, dont la fabrication est largement protégée par pas moins de 7 brevets, a été utilisée dans un téléobjectif d'appareil photographique pour corriger des aberrations chromatiques et sphériques. Ce téléobjectif a été commercialisé en 2001 sous le nom EF 400mm f/4 DO IS USM, les initiales DO signifiant Diffractive Optics, et la documentation de Canon [Can] fait état d'une réduction de taille de 25% et

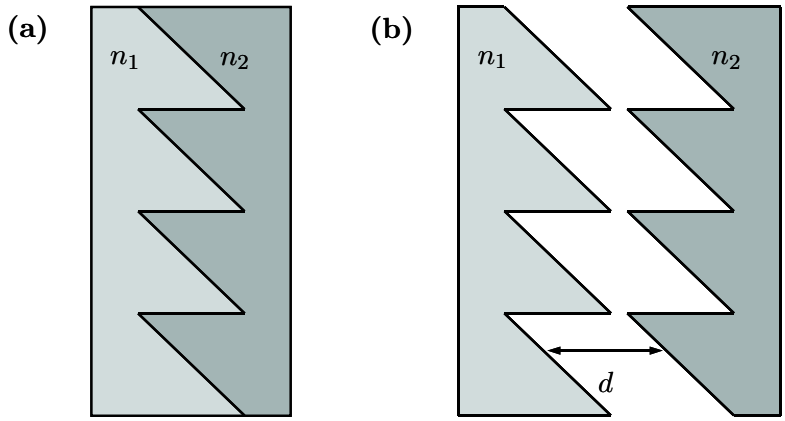

Figure 4.5: *Achromatisation d'une optique diffractive à profil continu en utilisant la différentielle de dispersion de deux ou trois matériaux. (a) En utilisant deux matériaux d'indices n_1 et n_2. (b) En utilisant deux matériaux d'indices n_1 et n_2 séparés par une épaisseur d'air d.*

d'une réduction de poids de 30%, à qualité d'image égale, par rapport à un téléobjectif purement réfractif. C'est une très belle application de l'optique diffractive à l'imagerie visible, rendue possible par la conception d'un composant diffractif large bande.

4.2 Les optiques diffractives binaires

Nous avons vu que les optiques diffractives classiques sont formées avec des profils continus séparés par des discontinuités marquant les limites des zones de Fresnel. La fonction de phase $\psi(x, y)$ désirée est ainsi réalisée avec un indice de réfraction constant et une hauteur variable, voir équation 4.2. Une solution alternative consiste à considérer un indice de réfraction variable et une hauteur constante. Les deux solutions sont strictement équivalentes, aux pertes par réflexion de Fresnel près, pourvu que l'égalité des chemins optiques soit réalisée : $[n_b(x, y) - n_0]h_b = (n_a - n_0)h_a(x, y)$, où les indices a et b font référence aux deux solutions. Pour mettre en oeuvre cette deuxième solution, il faut donc concevoir un matériau présentant un gradient d'indice de réfraction parallèle au substrat.

En pratique, réaliser parfaitement un gradient d'indice parallèle à un substrat avec des discontinuités d'indice en bord de zone est extrêmement difficile. C'est pour contourner cette difficulté qu'intervient le concept de matériau artificiel. Un matériau structuré à une échelle plus petite que la longueur d'onde et dont la taille des structurations varie permet de synthétiser un tel gradient d'indice et donc de réaliser des composants diffractifs [Sto91, Far92].

Cette section est composée de trois parties. La première introduit de façon intuitive le concept d'indice effectif à la base du fonctionnement d'un composant diffractif binaire. La deuxième en donne une définition plus quantitative, et finalement la dernière partie s'intéresse aux avantages apportés par l'utilisation de structures sub-λ par rapport à l'utilisation d'un profil continu plus classique.

4.2.1 Principe

Le principe des optiques diffractives binaires repose sur le concept de matériau artificiel. Une onde électromagnétique de longueur d'onde λ ne résout pas — au sens du champ lointain — des structures dont la taille est inférieure à λ et « ressent » un matériau homogène. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer un réseau de diffraction dont la période est plus petite que la longueur d'onde. En incidence normale, seul les ordres 0 réfléchis et transmis sont propagatifs, tous les autres ordres étant évanescents. Ce réseau formé de structures sub-λ peut donc, en première approximation, être remplacé par un matériau homogène artificiel caractérisé par un *indice effectif*.

Le terme d'homogénéisation est employé pour décrire cette analogie. L'indice effectif peut se comprendre intuitivement comme un indice moyen dont la valeur dépend de la géométrie et surtout de la taille des structures. En faisant varier progressivement cette taille, c'est-à-dire en changeant la fraction de matériau gravée, il est possible de créer artificiellement un matériau dont l'indice de réfraction varie. Ce principe rend possible la réalisation de profils de phase quelconques avec une hauteur constante et un indice variable.

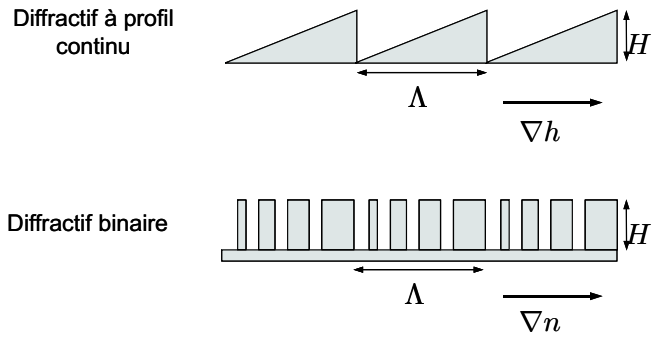

Figure 4.6: *Optique diffractive binaire. La variation de phase dans une zone de Fresnel est réalisée à l'aide d'un gradient d'indice au lieu d'un gradient de profil. Le gradient d'indice parallèle au substrat est obtenu en variant graduellement la taille des structures sub-λ.*

La Figure 4.6 illustre notre propos. En modulant la largeur des traits d'un simple réseau binaire dont la période Λ_s est plus petite que la longueur d'onde, il est possible de réaliser un gradient d'indice constant et de créer une fonction de phase similaire à celle d'un réseau blazé de type échelette. Dans les zones où la fraction de matériau gravée est importante, l'onde électromagnétique « ressent » plutôt un indice proche de celui de l'air, et dans les zones où cette fraction est faible, l'onde électromagnétique « ressent » plutôt un indice proche de celui du matériau. La structure du bas de la Figure 4.6 est appelée réseau blazé binaire.

Dans le domaine optique, la fabrication de structures dont la taille est légèrement inférieure à la longueur d'onde, typiquement 100–300nm dans le visible, est délicate même avec des moyens de laboratoire. C'est la raison pour laquelle les premiers travaux autour du concept d'optique diffractive binaire n'ont débuté qu'au début des années 90 dans l'infrarouge thermique [Sto91, Far92, Hai93a, Hai93b]. De nombreux

travaux théoriques et expérimentaux ont suivi et le lecteur intéressé par un passage en revue des travaux les plus marquants pourra se référer au Chapitre 1 de la thèse de M-S. L. Lee [Lee01].

4.2.2 Indice effectif et modes de Bloch

Nous allons maintenant définir de façon plus quantitative l'indice effectif associé à des structures périodiques sub-λ. Nous nous intéressons plus particulièrement aux structures périodiques bidimensionnelles, dont la Figure 4.7(a) donne deux exemples. Ces structures sont périodiques dans les directions x et y, et invariantes dans la direction z.

Nous nous plaçons tout d'abord dans le cadre de la limite statique, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde est très grande par rapport à la période des structures. Cette limite est un cas important pour lequel il existe des résultats analytiques généraux issus de la *théorie des milieux effectifs*, Effective Medium Theory en anglais. Nous abordons ensuite le cas plus général où la longueur d'onde peut être du même ordre de grandeur que la période. Ce cas est plus proche des structures qui sont réellement fabriquées mais nécessite le recours à la résolution numérique des équations de Maxwell. Nous introduisons le concept de *mode de Bloch* d'une structure périodique, puis nous faisons le lien entre les deux approches, c'est-à-dire entre modes de Bloch et théorie des milieux effectifs.

Théorie des milieux effectifs

Le principal résultat de la théorie des milieux effectifs est de démontrer, dans la limite des grandes longueurs d'onde, l'équivalence entre une structure périodique et un matériau artificiel homogène. En général, ce matériau artificiel est anisotrope. Des structures périodiques unidimensionnelles sont équivalentes à un matériau uniaxe, c'est la biréfringence de forme [Bor64], et des structures périodiques bi- ou tridimensionnelles sont équivalentes à un matériau biaxe.

Pour des structures unidimensionnelles, il existe des expressions simples donnant les indices effectifs ordinaire n_o et extraordinaire n_e du matériau artificiel :

$$n_o = \sqrt{\langle \varepsilon \rangle} \quad \text{et} \quad n_e = \left(\sqrt{\left\langle \frac{1}{\varepsilon} \right\rangle} \right)^{-1}, \tag{4.13}$$

où ε est la permittivité relative de la structure périodique et les crochets font référence à la moyenne spatiale.

Pour des structures bidimensionnelles, il n'existe pas d'expressions analogues, sauf dans le cas particulier d'une onde polarisée suivant la direction z et se propageant dans le plan de périodicité (x, y) pour laquelle l'indice effectif vaut $\sqrt{\langle \varepsilon \rangle}$. Pour le cas qui nous intéresse plus particulièrement, celui d'une onde se propageant dans la direction z, il existe des expressions simples donnant une borne inférieure et une borne supérieure pour les deux indices effectifs principaux [Cor68].

Pour disposer de résultats quantitatifs dans le cas de structures bidimensionnelles et parce que la limite statique reste un cas d'école, même pour les techniques de

nanofabrication les plus performantes, il est nécessaire d'avoir recours au calcul numérique pour évaluer l'indice effectif.

Modes de Bloch d'une structure périodique

Les modes propres d'une structure périodique bidimensionnelle, voir Figure 4.7(a), sont des modes de Bloch, c'est-à-dire des fonctions pseudo-périodiques en x et en y. Chaque composante du champ électromagnétique est de la forme

$$\psi(x, y, z) = \sum_{m,p} c_{mp}\, e^{i[(k_x+mK_x)x+(k_y+pK_y)y]}\, e^{ik_z z}, \tag{4.14}$$

où $\vec{K} = K_x\vec{u}_x + K_y\vec{u}_y$ est le vecteur réseau et k_x, k_y et k_z sont les trois composantes du vecteur d'onde.

Dans la littérature, il est souvent fait la distinction entre les modes de Bloch se propageant dans le plan de périodicité, avec $k_z = 0$, et ceux se propageant perpendiculairement à ce plan, avec $k_z \neq 0$. Cette distinction vient de la communauté des cristaux photoniques qui s'est formée dans les années 90 [Joa95]. En effet, pour les ondes se propageant dans le plan (x, y) et pour certaines valeurs de longueur d'onde, il n'existe pas de modes propagatifs dans la structure, tous les modes de Bloch sont évanescents. Cet intervalle de longueurs d'onde est appelé *bande interdite photonique*. Cette bande se rétrécit puis disparaît complètement lorsque la valeur de k_z augmente [Mar94, Rob96]. Pour le constater, il suffit de calculer la longueur d'onde λ des modes propagatifs pour k_x, k_y et k_z fixés.

Le problème qui nous intéresse ici est différent : la structure est éclairée par une onde plane de longueur d'onde λ dont l'incidence est définie par les deux composantes k_x et k_y de son vecteur d'onde. Il s'agit donc de calculer les vecteurs d'onde $k_z \neq 0$ des modes de Bloch se propageant dans la structure pour λ, k_x et k_y fixés. La résolution numérique de ce problème fournit tous les modes de Bloch de la structure, à la fois les modes propagatifs (k_z réel) et les modes évanescents (k_z complexe). Dans le cas de structures diélectriques, il existe toujours au moins un mode propagatif, il n'y a donc pas de bande interdite.

Equivalence entre un réseau sub-λ et un matériau artificiel homogène

Le lien entre les modes de Bloch et l'indice effectif de la théorie des milieux effectifs apparaît naturellement lorsque l'on se pose la question de l'équivalence entre un réseau bidimensionnel de hauteur h et une couche homogène de même hauteur. Si les trois conditions suivantes sont remplies :

1. Seul l'ordre 0 du réseau est propagatif,
2. La hauteur h est suffisamment grande pour pouvoir négliger l'influence des modes évanescents,
3. Un seul mode de Bloch est propagatif dans le réseau,

alors la réflexion et la transmission du réseau en champ lointain sont semblables à celles d'une couche homogène de même hauteur et dont l'indice effectif n est égal à la constante de propagation normalisée de l'unique mode de Bloch propagatif,

soit $k_z = \frac{2\pi}{\lambda}n$. Autrement dit, le réseau peut être vu comme un matériau artificiel homogène.

Le nombre de modes de Bloch propagatifs dépend bien sûr de tous les paramètres du problème : n_g, Λ_s, k_x, k_y, λ, d, ainsi que la géométrie du réseau. Lorsque le réseau est sub-λ ($\Lambda_s<\lambda$), il n'y a qu'un petit nombre de modes propagatifs, et lorsque Λ_s est plus petit qu'une certaine valeur Λ_c appelée *cut-off structurel*, il n'y a qu'un seul mode de Bloch propagatif [Lal98b, Lal99b].

De façon générale, le cut-off Λ_c est plus petit que λ. Pour des réseaux carrés éclairés en incidence normale ($k_x = k_y = 0$), tels que ceux considérés ici, on démontre analytiquement que le cut-off structurel vaut $\Lambda_c = \lambda/n_g$ quelle que soit la taille des structures qui composent le réseau. La valeur de Λ_c est très importante : elle définit la période limite au-dessus de laquelle le concept de matériau artificiel n'est plus valable.

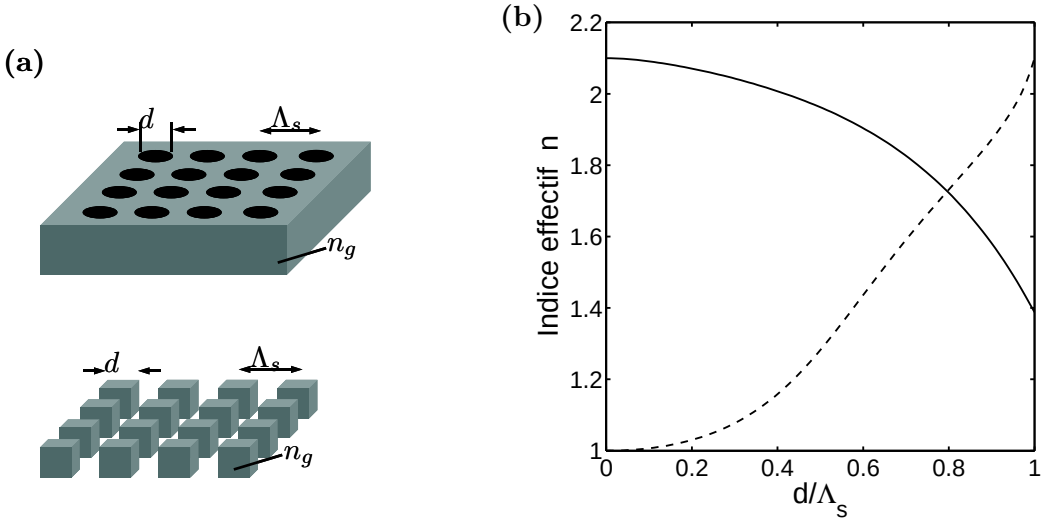

Figure 4.7: *Indice effectif d'un matériau artificiel en fonction de la fraction de matériau gravé, pour $k_x = k_y = 0$. (a) Illustration des géométries calculées. Un réseau carré de trous d'air ronds et un réseau carré de piliers carrés gravés dans un matériau d'indice $n_g = 2.1$ avec une période $\Lambda_s = \frac{\lambda_0}{n_g}$, d est le diamètre des trous ou le côté des piliers. (b) Indice effectif du réseau de trous (trait plein) et du réseau de piliers (pointillés) en fonction de d/Λ_s.*

Dans toute la suite de la deuxième partie de la thèse, l'indice effectif n d'un matériau artificiel est défini comme la constante de propagation normalisée du mode de Bloch fondamental. Il est calculé en résolvant le problème aux valeurs propres défini dans la référence [Li97].

La Figure 4.7(b) montre la variation de l'indice effectif en fonction de la taille d des structures pour deux types de réseaux très importants en pratique : un réseau carré de trous ronds (Figure 4.7(a) en haut) et un réseau carré de piliers carrés (Figure 4.7(a) en bas). Le calcul a été réalisé pour $k_x = k_y = 0$.

Cette figure illustre parfaitement le principe sur lequel repose le fonctionnement des optiques diffractives binaires. En contrôlant localement la fraction de matériau gravée, il est possible de réaliser une variation graduelle de l'indice, et par conséquent une variation graduelle de la phase.

4.2.3 Les optiques diffractives binaires en pratique

Les structures sub-λ possèdent des propriétés optiques originales qui procurent un certain nombre d'avantages aux optiques diffractives binaires par rapport aux optiques diffractives de type échelette. Mais ces avantages doivent être pondérés par les difficultés de fabrication.

Difficultés de fabrication

La fabrication d'optiques diffractives binaires utilise des techniques de nanofabrication qui restent pour l'instant des techniques de laboratoire. Par exemple dans le domaine visible, le dessin de motifs plus petits que la longueur d'onde impose le recours à la lithographie électronique. Et quel que soit le domaine spectral considéré, il faut graver des structures plus petites que la longueur d'onde sur des hauteurs comparables à la longueur d'onde, c'est-à-dire des structures possédant de grands rapports d'aspect. Cela nécessite des techniques de gravure performantes et fortement anisotropes.

Malgré cela, la réalisation d'optiques diffractives binaires n'est pas utopique. Un article récent a montré la possibilité d'utiliser des techniques de photolithographie, une technologie relativement bon marché, pour fabriquer des composants diffractifs binaires pour l'imagerie thermique dans la bande 8–12μm [Lee04]. En ce qui concerne le domaine visible, la Figure 4.8 montre la photo prise au microscope électronique à balayage d'un réseau blazé binaire formé de structures bidimensionnelles gravées dans de l'oxyde de titane TiO_2.

Avantages de l'utilisation de structures sub-λ

Réaliser des optiques diffractives en utilisant des structures sub-λ présente un certain nombre d'avantages par rapport à l'utilisation d'un profil continu plus classique. Tout d'abord, il est possible d'obtenir des composants blazés faiblement sensibles à la polarisation en utilisant des structures bidimensionnelles [Che95, Che96, Lal98b, Lal99b].

Mais le plus gros intérêt de l'utilisation de nanostructures réside dans la possibilité d'obtenir des composants diffractifs efficaces de grande ouverture numérique. Ainsi, des efficacités supérieures à celles théoriquement accessibles à des optiques diffractives classiques ont été démontrées expérimentalement, pour des réseaux de petite période [Lal98b, Lee00b] et pour des lentilles diffractives de grande ouverture numérique [Lal99b, Lee02]. La Figure 4.9 montre la photo prise au microscope électronique à balayage d'une telle lentille.

C'est une propriété optique originale des structures sub-λ qui permet de s'affranchir de l'effet d'ombrage dont souffrent les composants diffractifs de type échelette. En effet, dans un composant binaire semblable à celui de la Figure 4.6, les gros piliers

Figure 4.8: *Réseau blazé binaire formé de piliers d'oxyde de titane sur un substrat de verre et conçu pour fonctionner dans le visible. Ce réseau a été fabriqué au Laboratoire de Microstructures et de Microélectronique par Edmond Cambril.*

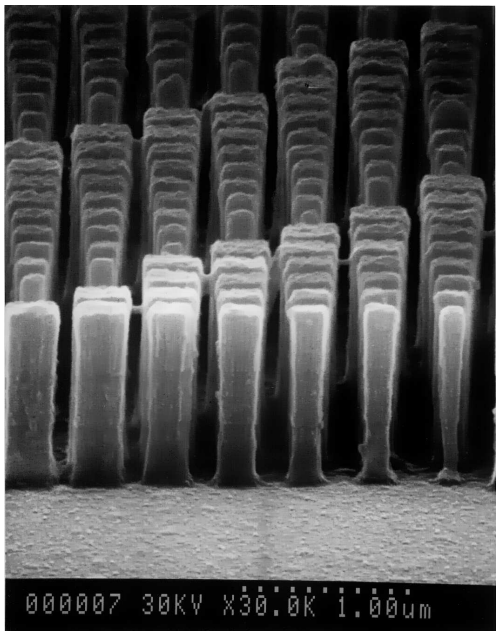

Figure 4.9: *Lentille diffractive hors-axe formée de piliers d'oxyde de titane sur un substrat de verre et conçue pour fonctionner dans le visible à* $\lambda_0 = 860nm$. *La focale de la lentille est de* $400\mu m$ *et sa taille est de* $200\mu m$. *Cette lentille a été fabriquée au Laboratoire de Microstructures et de Microélectronique par Edmond Cambril.*

jouent le rôle de guides d'onde : l'énergie incidente dans la zone d'ombre est ainsi canalisée dans l'ordre de diffraction utile alors qu'elle serait perdue par réflexion totale interne dans le cas d'un composant à profil continu. C'est cet effet de guidage propre aux optiques diffractives binaires qui permet d'obtenir de grandes efficacités aux grandes ouvertures numériques ou en incidence oblique [Lal99a].

4.3 Conclusion

Nous avons introduit dans ce Chapitre les principaux concepts de l'optique diffractive. En particulier, nous avons mis en évidence les deux limitations fondamentales des optiques diffractives classiques à profil continu : l'effet d'ombrage et la diminution de l'efficacité quand la longueur d'onde s'écarte de la longueur d'onde de blaze. Nous avons ensuite introduit le concept de matériau artificiel à la base de l'optique diffractive binaire. Nous avons défini quantitativement l'indice effectif associé à des structures sub-λ et nous avons vu que la conception d'optiques diffractives à l'aide de telles structures présentait un certain nombre d'avantages, en particulier la possibilité de s'affranchir de l'effet d'ombrage.

Les structures sub-λ possèdent d'autres propriétés optiques originales qui peuvent être utilisées dans le cadre de l'optique diffractive, en particulier leurs propriétés de dispersion. Nous allons voir dans le Chapitre suivant comment utiliser cette dispersion pour réaliser des composants diffractifs efficaces sur une large plage spectrale et s'affranchir ainsi d'une autre limitation fondamentale des optiques diffractives classiques.

Chapitre 5

Fonctionnement large bande grâce à la dispersion des matériaux artificiels

Les matériaux artificiels décrits au Chapitre précédent ne sont rien d'autre que des cristaux photoniques bidimensionnels opérant en-dehors de leur bande interdite. Ces structures peuvent présenter des dispersions très différentes de celles d'un matériau homogène classique [Lin96, Not00] et ce constat a déjà été le point de départ de nombreux travaux. En particulier, des prismes très dispersifs ont été réalisés [Kos98, Wu02], ainsi que des structures présentant une dispersion négative [Cub03, Ber04] ou une dispersion permettant le guidage de la lumière par autocollimation [Kos99, Wu03, Yu03]. Dans toutes ces applications, c'est la dispersion ressentie par une onde se propageant dans le plan de périodicité qui a été utilisée.

Ces structures présentent également une dispersion forte pour une onde se propageant perpendiculairement au plan de périodicité. Ainsi, le comportement spectral d'un composant diffractif binaire peut être très différent de celui d'un composant à profil continu. L'objet de ce Chapitre est de concevoir des optiques diffractives efficaces sur une large plage spectrale en utilisant les propriétés de dispersion des matériaux artificiels. Ce travail a fait l'objet d'un dépôt de brevet en collaboration avec Thales Research and Technology [Lee05] ainsi que d'une publication dans la revue Optics Letters [Sau04c].

Nous allons tout d'abord développer un modèle approché qui permet d'appréhender simplement les paramètres physiques essentiels à la conception d'optiques diffractives large bande. Ce modèle constitue un véritable outil qui peut tenir compte d'un certain nombre de contraintes technologiques. Des calculs numériques rigoureux viennent compléter cette analyse et permettent de tester la validité du modèle.

5.1 Modèle simplifié pour l'efficacité des optiques diffractives binaires

Afin de comprendre en détail le rôle joué par la dispersion du matériau artificiel, nous reprenons point par point le raisonnement de la section 4.1.3 qui a conduit à

l'expression de l'efficacité des composants à profil continu de type échelette. Moyennant deux approximations qui seront détaillées ultérieurement, nous proposons un modèle simplifié qui permet d'obtenir une expression analytique de l'efficacité de diffraction des optiques diffractives binaires. L'intérêt de ce modèle est de mettre en évidence les paramètres physiques essentiels à la conception.

5.1.1 Expression analytique de l'efficacité

Le cadre de la démonstration est donc celui de l'approximation scalaire et de l'optique paraxiale, auxquelles s'ajoute la condition de validité du concept de matériau artificiel. Considérons un composant diffractif binaire idéal blazé dans l'ordre 1 à la longueur d'onde λ_0. Sa fonction de phase a été synthétisée en faisant varier l'indice effectif du matériau artificiel entre une valeur minimale $n_{min}(\lambda_0)$ et une valeur maximale $n_{max}(\lambda_0)$ d'une extrémité à l'autre de chaque zone de Fresnel. La hauteur de gravure des structures vaut donc $h = \lambda_0/[n_{max}(\lambda_0) - n_{min}(\lambda_0)]$. La Figure 5.1 illustre cette construction par un exemple. Les structures sub-λ utilisées pour synthétiser n_{min} (resp. n_{max}) sont des trous de diamètre $d = 0.7\Lambda_s$ (resp. $d = 0.4\Lambda_s$). Les indices effectifs intermédiaires sont réalisés en faisant varier le diamètre des trous entre ces deux valeurs.

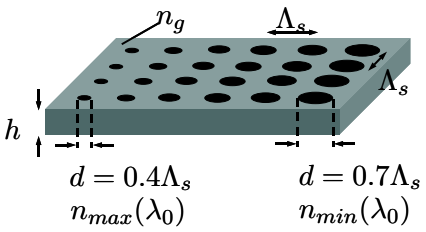

Figure 5.1: *Illustration d'une zone de Fresnel d'un composant diffractif binaire gravé dans un matériau d'indice n_g. Les structures sub-λ utilisées pour synthétiser les indices effectifs sont des trous dont le diamètre varie entre $d = 0.4\Lambda_s$ et $d = 0.7\Lambda_s$.*

La transmittance du composant diffractif binaire est $t(x, y) = \exp(i\psi(x, y))$ et sa phase $\psi(x, y)$ peut s'écrire sous la forme suivante en fonction de l'indice effectif du matériau artificiel :

$$\psi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda}[n(x, y, \lambda) - n_{min}(\lambda)]h, \tag{5.1}$$

où $n(x, y, \lambda)$ est l'indice effectif au point (x, y) et à la longueur d'onde λ. Comme dans la section 4.1.3, on cherche à exprimer la phase du composant diffractif $\psi(x, y)$ en fonction de la phase du composant réfractif à la longueur d'onde de blaze $\phi_0(x, y)$. Pour cela, écrivons la relation entre $\psi_0(x, y)$ et $\phi_0(x, y)$ d'une part et entre $\psi(x, y)$ et $\psi_0(x, y)$ d'autre part :

$$\psi_0(x, y) \equiv \phi_0(x, y) \pmod{2\pi}. \tag{5.2}$$

$$\psi(x, y) = \frac{\lambda_0[n(x, y, \lambda) - n_{min}(\lambda)]}{\lambda[n(x, y, \lambda_0) - n_{min}(\lambda_0)]}\psi_0(x, y). \tag{5.3}$$

L'équation 5.3 met en évidence la principale différence par rapport au cas d'un composant diffractif classique : le coefficient de proportionnalité entre $\psi(x, y)$ et

$\psi_0(x,y)$ dépend du point (x,y) considéré. Ainsi, sans approximation supplémentaire, il n'est pas possible de poursuivre le calcul analytiquement et l'efficacité ne peut être obtenue que de façon numérique. Nous allons donc supposer que le rapport $[n(x,y,\lambda) - n_{min}(\lambda)]/[n(x,y,\lambda_0) - n_{min}(\lambda_0)]$ ne dépend que faiblement de la position. Nous considérerons dans la suite qu'il est constant et égal à $[n_{max}(\lambda) - n_{min}(\lambda)]/[n_{max}(\lambda_0) - n_{min}(\lambda_0)]$. Cette approximation, la première de notre modèle, sera validée dans la section 5.3.

Moyennant cette approximation, la relation entre la phase du composant diffractif $\psi(x,y)$ et celle du composant réfractif à la longueur d'onde de blaze $\phi_0(x,y)$ est donnée par

$$\psi(x,y) \equiv \frac{\lambda_0 \Delta n(\lambda)}{\lambda \Delta n(\lambda_0)} \phi_0(x,y) \pmod{2\pi \frac{\lambda_0 \Delta n(\lambda)}{\lambda \Delta n(\lambda_0)}}, \tag{5.4}$$

$$\text{avec} \quad \Delta n(\lambda) = n_{max}(\lambda) - n_{min}(\lambda). \tag{5.5}$$

Le raisonnement développé dans la section 4.1.3 s'applique donc parfaitement aux composants diffractifs binaires. Tout calcul fait, l'efficacité de diffraction dans l'ordre p est donnée par

$$|c_p|^2 = \mathrm{sinc}^2 \left(p - \frac{\lambda_0 \Delta n(\lambda)}{\lambda \Delta n(\lambda_0)} \right). \tag{5.6}$$

L'efficacité d'un composant diffractif binaire s'exprime donc de la même façon que celle d'un composant à profil continu, hormis que la dispersion naturelle du matériau doit être remplacée par la dispersion du matériau artificiel.

Il a été montré [Lal96b] que, dans le cas de structures périodiques de période Λ_s et éclairées en incidence normale, la dispersion du matériau artificiel se met sous la forme

$$n(\lambda) = n(\lambda_\infty) + n_2 \left(\frac{\Lambda_s}{\lambda} \right)^2 + O\left(\frac{\Lambda_s}{\lambda} \right)^4, \tag{5.7}$$

où $n(\lambda_\infty)$ est l'indice effectif du matériau artificiel dans la limite statique $\lambda \to \infty$ et n_2 est un paramètre dépendant de la géométrie considérée. Grâce à ce développement asymptotique de l'indice effectif, la fonction $\Delta n(\lambda)$ s'écrit sous la forme

$$\Delta n(\lambda) = \left[(1+\alpha) - \alpha \left(\frac{\lambda_0}{\lambda} \right)^2 \right] \Delta_n(\lambda_0), \tag{5.8}$$

où le paramètre α est défini par

$$\alpha = \frac{[n_{min}(\lambda_0) - n_{min}(\lambda_\infty)] - [n_{max}(\lambda_0) - n_{max}(\lambda_\infty)]}{n_{max}(\lambda_0) - n_{min}(\lambda_0)}. \tag{5.9}$$

Finalement, en substituant $\Delta n(\lambda)$ de l'équation 5.8 dans l'équation 5.6 pour $p = 1$, on obtient l'efficacité d'un composant diffractif binaire blazé dans l'ordre 1 à la longueur d'onde λ_0 :

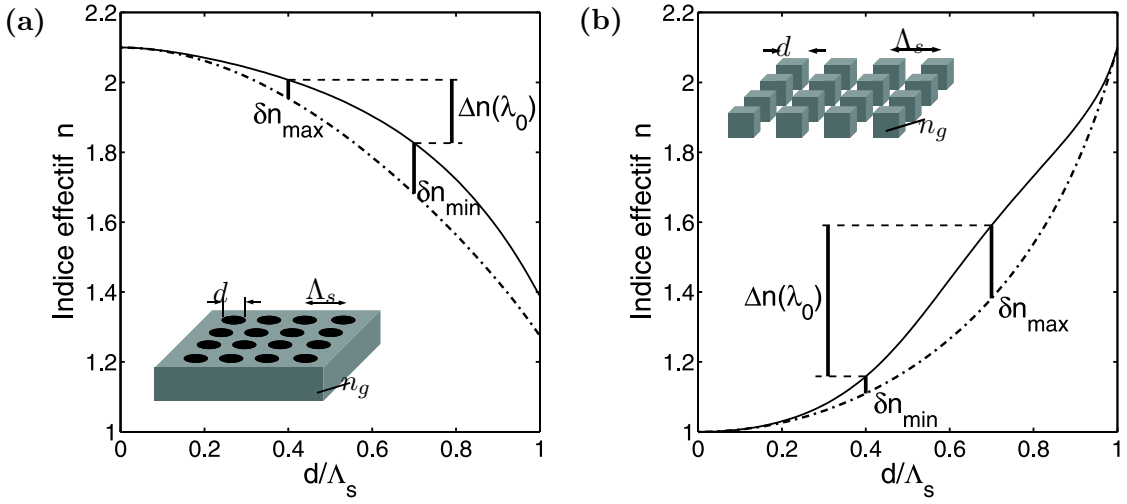

Figure 5.2: *Dispersion d'un matériau artificiel et grandeurs physiques intervenant dans le calcul du paramètre α. La courbe en trait plein correspond à $\lambda = \lambda_0 = n_g\Lambda_s$ et celle en pointillés discontinus correspond à $\lambda \gg \Lambda_s$. (a) Réseau de trous. (b) Réseau de piliers. Dans les deux cas, l'indice du matériau homogène est $n_g = 2.1$.*

$$\eta(\lambda) = \mathrm{sinc}^2\left[1 - (1+\alpha)\left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right) + \alpha\left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right)^3\right]. \tag{5.10}$$

L'équation approchée 5.10 montre que les propriétés spectrales d'un composant diffractif binaire sont complètement déterminées par un seul paramètre α. Ce paramètre met en avant les deux structures sub-λ utilisées pour synthétiser les indices effectifs n_{min} et n_{max} et dépend de trois quantités physiques importantes :

1. la dispersion $\delta n_{min} = n_{min}(\lambda_0) - n_{min}(\lambda_\infty)$ des structures synthétisant n_{min},
2. la dispersion $\delta n_{max} = n_{max}(\lambda_0) - n_{max}(\lambda_\infty)$ des structures synthétisant n_{max},
3. la différence $\Delta n(\lambda_0) = n_{max}(\lambda_0) - n_{min}(\lambda_0)$.

Les deux premières quantités dépendent de la période Λ_s, du contraste d'indice et de la géométrie des structures utilisées pour synthétiser n_{min} et n_{max}. La troisième quantité physique est un paramètre de conception important lié aux contraintes technologiques puisqu'il détermine la hauteur de gravure.

Les trois grandeurs physiques intervenant dans le calcul du paramètre α sont représentées sur la Figure 5.2 pour deux matériaux artificiels, l'un formé d'un réseau de trous et l'autre formé d'un réseau de piliers.

Pour conclure, rappelons les approximations qui ont été réalisées pour aboutir à l'équation 5.10, en plus des conditions nécessaires à la validité de l'approximation scalaire et de l'optique paraxiale :

1. Le rapport des indices effectifs dépend faiblement de la position.
2. La longueur d'onde λ est grande par rapport à la période Λ_s du matériau artificiel.

La deuxième approximation va de pair avec le concept de matériau artificiel.

5.1.2 Influence du paramètre α sur l'efficacité

Grâce au modèle approché, les propriétés spectrales de l'efficacité d'un composant diffractif binaire se déduisent simplement de l'étude des racines du polynôme en $\frac{\lambda_0}{\lambda}$ contenu dans l'équation 5.10. En effet, l'efficacité du composant est de 100% pour chaque racine de ce polynôme de degré 3. En voici les principales propriétés.

Quelle que soit la valeur de α, le polynôme admet toujours 1 comme racine, c'est-à-dire que l'efficacité est toujours de 100% à la longueur d'onde de blaze λ_0. Pour $\alpha = 0$, l'équation 5.10 devient $\eta(\lambda) = \text{sinc}^2\left(1 - \frac{\lambda_0}{\lambda}\right)$ et correspond à l'expression classique de l'efficacité d'un composant à profil continu donnée à la section 4.1.3. Pour $\alpha \leqslant 0$, le polynôme n'admet qu'une seule racine réelle positive $\lambda_1 = \lambda_0$: le composant n'est blazé qu'à une seule longueur d'onde λ_0. Enfin, la propriété la plus intéressante est la suivante : le polynôme admet deux racines réelles positives pour $\alpha > 0$, $\lambda_1 = \lambda_0$ et $\lambda_2 \neq \lambda_0$. Cette deuxième racine est donnée par

$$\lambda_2 = \frac{2\lambda_0}{\sqrt{\dfrac{\alpha+4}{\alpha} - 1}}. \tag{5.11}$$

Autrement dit, une optique diffractive binaire peut être blazée à deux longueurs d'onde différentes. L'écart entre ces deux longueurs d'onde permet d'ajuster la largeur spectrale sur laquelle le composant reste blazé.

	$\alpha < 0$	$\alpha = 0$	$0 < \alpha < 0.5$	$\alpha = 0.5$	$\alpha > 0.5$
Racines réelles positives	1	1	2	2	2
1re racine λ_1	λ_0	λ_0	λ_0	λ_0	λ_0
2e racine λ_2	$\emptyset$	$\emptyset$	$< \lambda_0$	$= \lambda_0$	$> \lambda_0$

Tableau 5.1: *Etude des racines du polynôme de degré 3 en* $\frac{\lambda_0}{\lambda}$.

Les propriétés du polynôme sont résumées dans le Tableau 5.1 et illustrées sur la Figure 5.3. On retiendra en particulier que lorsque $\alpha < 0$ l'efficacité du composant binaire est plus étroite que celle d'un composant à profil continu autour de λ_0, alors qu'elle est plus large lorsque $\alpha > 0$. La condition pour avoir un composant diffractif efficace sur une large plage spectrale est donc la suivante :

$$\delta n_{min} > \delta n_{max}. \tag{5.12}$$

Cette condition nous fournit une règle importante pour la conception d'optiques diffractives large bande utilisant des structures sub-λ : les structures utilisées pour synthétiser n_{max} doivent être moins dispersives que celle utilisées pour synthétiser n_{min}. C'est le cas par exemple pour les trous de la Figure 5.2(a).

5.2 Conception d'optiques diffractives large bande

Jusqu'à présent, nous ne nous sommes posé aucune question sur la valeur du paramètre α. Nous allons voir maintenant quelles sont les valeurs de α intéressantes

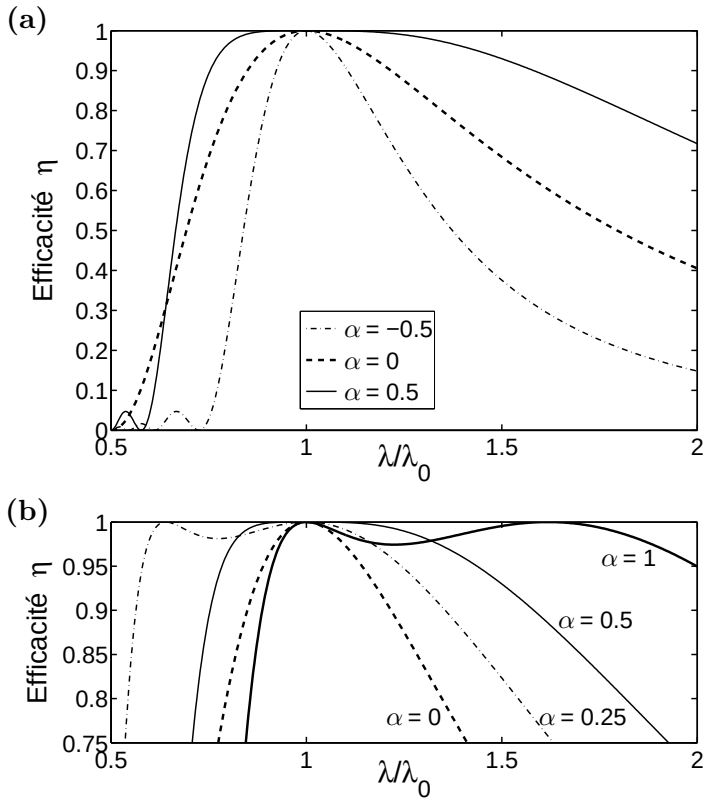

Figure 5.3: *Prédictions du modèle pour l'efficacité des optiques diffractives binaires pour différentes valeurs de α. La courbe en pointillés gras ($\alpha = 0$) correspond à l'efficacité d'un composant à profil continu.*

et quelles sont les valeurs accessibles compte tenu des contraintes technologiques. Nous verrons ensuite un exemple de conception d'une optique diffractive binaire large bande.

5.2.1 Contraintes technologiques et valeurs du paramètre α

La propriété spectrale d'un composant binaire la plus intéressante pour réaliser des optiques diffractives large bande est la possibilité d'avoir deux longueurs d'onde de blaze proches l'une de l'autre. La Figure 5.3(b) donne une idée des valeurs de α pertinentes. Pour fixer les idées, l'intervalle $0.25 \leqslant \alpha \leqslant 1$ représente un choix judicieux, car la valeur du minimum d'efficacité entre les deux longueurs d'onde λ_1 et λ_2 reste très élevée, supérieure à 98%.

En pratique, mieux vaut essayer d'obtenir une valeur de α la plus proche de 1 possible. En effet, pour $\alpha < 0.5$, l'élargissement spectral est obtenu essentiellement pour des longueurs d'onde inférieures à λ_0. Or le modèle cesse d'être valide à ces longueurs d'onde, comme nous le verrons dans la section 5.3. Et d'autre part, aux courtes longueurs d'onde, l'analogie du matériau artificiel n'est plus correcte et les structures deviennent le siège de phénomènes de résonance ayant des effets sur l'efficacité du composant, comme nous le verrons dans la section 6.3.

Géométries compatibles avec les contraintes technologiques

Ces valeurs de α sont-elles réalisables en pratique ? C'est ce que nous allons voir maintenant. Revenons pour cela aux deux matériaux artificiels classiques que sont le réseau carré de trous et le réseau carré de piliers. Leur dispersion est représentée sur la Figure 5.2. Nous avons vu que pour avoir $\alpha > 0$, il faut que les structures sub-λ utilisées pour synthétiser n_{max} soient moins dispersives que celles utilisées pour synthétiser n_{min}, voir équation 5.12. En se plaçant dans un cas de figure où $\delta n_{max} = 0$, cette condition est forcément remplie puisque δn_{min} est toujours positif. En effet, l'indice effectif d'un matériau artificiel diminue quand la longueur d'onde augmente. Cette constatation n'a jamais été démontrée, mais elle n'a jamais été mise en défaut à notre connaissance.

On se place donc dans l'une des deux configurations suivantes : l'indice n_{max} est réalisé en ne gravant pas le matériau, dont la dispersion est négligée ($n_{max}(\lambda_0) = n_{max}(\lambda_\infty) = n_g$), et les autres indices effectifs sont réalisés soit uniquement avec des trous, soit à la fois avec des trous et des piliers. Cette dernière configuration n'est pas irréaliste puisqu'il est possible de faire varier continûment l'indice effectif en passant d'un réseau de trous à un réseau de piliers, voir Figure 4.7(b). Dans ces deux cas, le paramètre α se met sous la forme simplifiée

$$\alpha = \delta n_{min} \frac{h}{\lambda_0}, \tag{5.13}$$

où $h = \lambda_0/\Delta n(\lambda_0)$ est la hauteur de gravure. Il est impossible technologiquement de graver des structures avec des grands rapports d'aspect (rapport entre la hauteur et la taille des structures). L'équation 5.13 montre donc que la paramètre α ne peut pas être choisi arbitrairement grand. En pratique, la configuration n'utilisant que des trous n'est pas envisageable car les valeurs de $\Delta n(\lambda_0)$ accessibles conduisent à des hauteurs de gravure trop grandes. Cependant, en utilisant à la fois des trous et des piliers, la différence $\Delta n(\lambda_0)$ peut être plus grande et par conséquent la hauteur h plus petite.

Valeurs du paramètre α

Après toutes ces considérations, les valeurs possibles du paramètre α sont déterminées par trois variables : l'indice de réfraction n_g du matériau, la période normalisée $\frac{\Lambda_s}{\lambda_0}$ du réseau et la taille normalisée $\frac{d_{min}}{\lambda_0}$ des plus petits piliers qui vont être utilisés pour synthétiser n_{min}. Simplifions encore le problème en prenant une période égale au cut-off structurel, $\Lambda_s = \Lambda_c = \frac{\lambda_0}{n_g}$.

Cette hypothèse se justifie très bien puisqu'en pratique la période ne peut pas être très différente de cette valeur. Elle ne peut pas être beaucoup plus petite pour des raisons technologiques d'une part, et parce que la dispersion du matériau artificiel deviendrait négligeable d'autre part, voir équation 5.7. Enfin la période ne peut pas être beaucoup plus grande que le cut-off structurel parce que le concept de matériau artificiel cesse d'être valide : plusieurs modes de Bloch sont alors propagatifs dans les structures sub-λ.

Comme la taille du plus petit pilier est directement liée à la hauteur de gravure par l'intermédiaire de $\Delta n(\lambda_0)$, il suffit de fixer le matériau utilisé (ce qui fixe dans

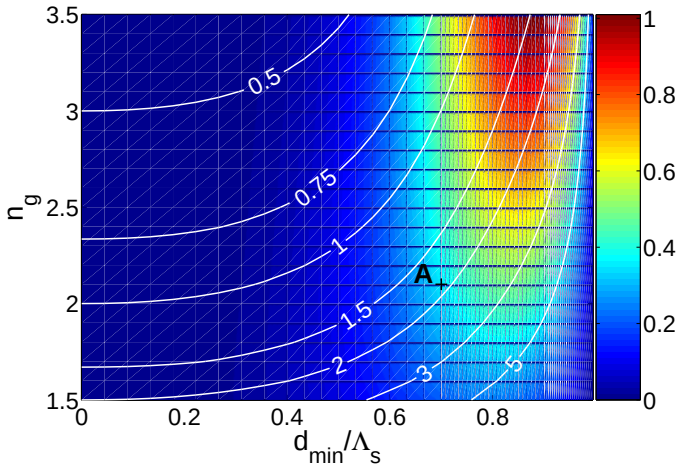

Figure 5.4: *Valeurs du paramètre α pour un composant diffractif composé de trous et de piliers, en fonction de la taille du plus petit pilier $\frac{d_{min}}{\Lambda_s}$ et de l'indice de réfraction du matériau homogène n_g. La période est égale au cut-off structurel, $\Lambda_s = \frac{\lambda_0}{n_g}$. Les courbes de niveau blanches représentent les hauteurs de gravure correspondantes, en unités de λ_0. Le point A correspond au composant diffractif discuté à la section 5.2.2.*

une certaine mesure la bande spectrale considérée) et la taille du plus petit pilier pour avoir la valeur du paramètre α ainsi que la hauteur de gravure nécessaire. Ceci est illustré sur la Figure 5.4. Les valeurs du paramètre α sont représentées en fonction de la taille du plus petit pilier normalisée à la période et de l'indice de réfraction du matériau. Les hauteurs (en unités de λ_0) sont représentées par les courbes de niveau blanches.

La Figure 5.4 est un outil de conception important. Elle montre que dans les conditions considérées ici, la valeur maximale du paramètre α est voisine de 1. Cette valeur ne peut être atteinte qu'en utilisant des matériaux de fort indice tels que des semiconducteurs, c'est-à-dire plutôt dans les bande 3–5μm et 8–12μm. D'autre part, les valeurs maximales de α sont malheureusement obtenues pour des grandes tailles de piliers ($d_{min} > 0.8\Lambda_s$) qu'il n'est aujourd'hui pas possible de fabriquer. Enfin, la Figure 5.4 montre que la contrainte technologique de la hauteur de gravure est moins gênante pour des matériaux de fort indice.

La conception d'optiques diffractives binaires large bande est donc en grande partie un problème de compromis entre les contraintes de fabrication et la largeur spectrale de blaze.

5.2.2 Exemple de conception

Voyons un exemple d'utilisation de la Figure 5.4. On cherche à réaliser un composant diffractif large bande autour de 0.8μm gravé dans du nitrure de silicium Si_3N_4, soit $n_g = 2.1$. Les contraintes technologiques sont les suivantes : hauteur de gravure maximale de 1.5μm pour des plus petites structures de l'ordre de 100nm, c'est-à-dire $h \leqslant 1.9\lambda_0$ et $d_{min} < 0.74\Lambda_s$. La Figure 5.4 montre que pour maximiser

α tout en respectant les contraintes technologiques, il faut utiliser des plus petits piliers de taille $d_{min} = 0.7\Lambda_s$. Cela conduit à la hauteur limite de $1.9\lambda_0$. Ce point de fonctionnement est représenté par le point A sur la Figure 5.4. Le paramètre α correspondant est $\alpha = 0.35$. Ces valeurs sont résumées dans le Tableau 5.2.

n_g	Λ_s	h	d_{min}	α
2.1	$\frac{\lambda_0}{n_g}$	$1.9\lambda_0$	$0.33\lambda_0$	0.35
2.1	$1.05\frac{\lambda_0}{n_g}$	$1.9\lambda_0$	$0.34\lambda_0$	0.39

Tableau 5.2: *Valeurs de α pour deux composants diffractifs large bande en nitrure de silicium constitués de trous et de piliers. La période, la hauteur de gravure et la taille du plus petit pilier sont respectivement Λ_s, h et d_{min}. La première ligne correspond au composant représenté par le point A sur la Figure 5.4. Sa période est égale au cut-off structurel.*

Il est possible de jouer un peu avec la valeur de la période Λ_s pour changer la valeur de α. Pour des valeurs de Λ_s plus petites que le cut-off Λ_c, la dispersion du matériau artificiel sera plus petite autour de λ_0, voir équation 5.7, et les valeurs de α accessibles seront donc plus faibles. Au contraire, pour des valeurs de Λ_s plus grandes que Λ_c, la dispersion sera plus importante et les valeurs de α seront plus grandes. Le Tableau 5.2 donne un exemple d'un tel composant, dont la période vaut $1.05\frac{\lambda_0}{n_g}$. Augmenter encore Λ_s pour augmenter la valeur de α et/ou relaxer les contraintes de fabrication n'est pas possible car les structures sub-λ cesseraient alors d'être monomodes.

5.3 Calcul électromagnétique rigoureux

Nous avons testé la validité de l'approche présentée dans les sections 5.1 et 5.2 en comparant les prédictions du modèle avec les résultats d'un calcul numérique rigoureux. Pour cela, nous avons utilisé les résultats de la section 5.2 pour concevoir un réseau blazé binaire efficace sur une large plage spectrale gravé dans du nitrure de silicium Si_3N_4 d'indice $n_g = 2.1$.

Ce composant est composé de 35 trous et de 15 piliers. Sa géométrie est illustrée sur la Figure 5.5, ainsi que les principaux paramètres du réseau : $\Lambda_s = 0.5\lambda_0$, $\Lambda = 25\lambda_0$ et $h \approx 1.9\lambda_0$. Le nombre total de structures sur une période du réseau a été choisi pour avoir une bonne convergence des calculs numériques tout en restant dans l'hypothèse d'une phase lentement variable ($\Lambda \gg \lambda$). La période Λ_s des réseaux sub-λ a été choisie légèrement plus grande que le cut-off structurel, $\Lambda_s = 1.05\lambda_0/n_g$, de façon à avoir une valeur de α aussi grande que possible ($\alpha = 0.39$). La taille des plus petits piliers vaut $d_{min} = 0.34\lambda_0$ et correspond à un indice effectif $n_{min}(\lambda_0) \approx 1.57$. Ces valeurs sont regroupées dans le Tableau 5.2. Sur une période du réseau, la taille des structures est choisie de façon à synthétiser une variation graduelle d'indice effectif de $n_{min}(\lambda_0)$ à $n_{max}(\lambda_0) = n_g$, réalisé avec des trous de diamètre nul.

Les efficacités de diffraction de tous les ordres transmis par ce réseau sont calculées à l'aide de la méthode modale de Fourier [Li97], avec 111×11 termes de

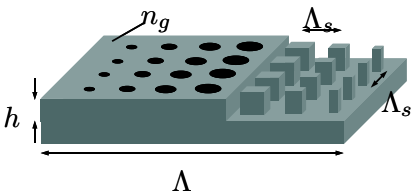

Figure 5.5: *Illustration d'une période d'un réseau blazé binaire constitué de 35 trous et 15 piliers gravés dans du nitrure de silicium* Si_3N_4 *($n_g = 2.1$). Les principaux paramètres du réseau sont :* $\Lambda_s = 0.5\lambda_0$, $\Lambda = 25\lambda_0$ *et* $h \approx 1.9\lambda_0$.

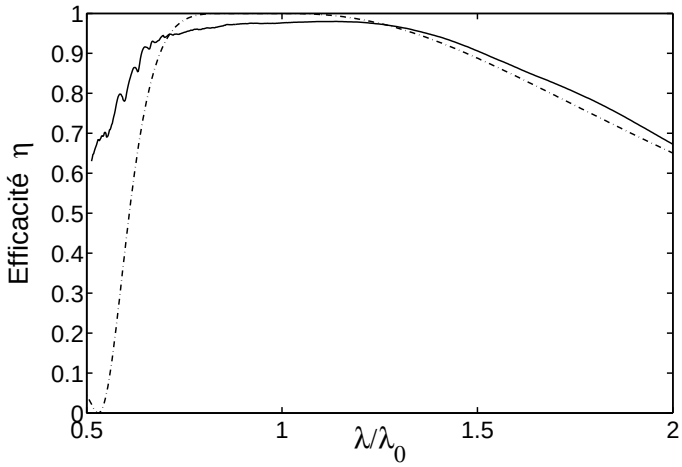

Figure 5.6: *Validation du modèle : efficacité du réseau blazé binaire constitué de trous et de piliers de la Figure 5.5. Pour cette structure,* $\alpha = 0.39$. *Le réseau est éclairé en incidence normale depuis le substrat de* Si_3N_4. *Trait plein, calcul électromagnétique rigoureux ; pointillés discontinus, prédictions du modèle.*

Fourier. Avec ces valeurs, l'erreur absolue est inférieure à 0.01 pour toutes les efficacités. Le réseau est éclairé en incidence normale depuis le substrat ($n_s = n_g = 2.1$) en lumière non-polarisée. L'efficacité transmise dans l'ordre 1 est représentée sur la Figure 5.6. Elle est normalisée par la somme de toutes les efficacités transmises de façon à s'affranchir des pertes par réflexion — qui ont été négligées dans le modèle. L'accord avec les prédictions du modèle pour $\alpha = 0.39$ est bon sur tout le spectre, démontrant une efficacité supérieure à 95% sur plus d'une octave.

Il y a cependant des écarts entre le modèle et le calcul électromagnétique rigoureux. A la longueur d'onde de blaze λ_0, l'efficacité calculée est inférieure à 100%. La déviation d'environ 2.5% est due, d'une part à un léger effet d'ombrage ($< 1\%$) qui provient de la taille finie de la période du réseau [Lee02] et, d'autre part, à une diffusion locale résiduelle ($\approx 1.5\%$) qui provient de la zone de transition entre les trous et les piliers pour laquelle le concept de matériau artificiel cesse d'être valide. On s'attend à ce que ces deux effets disparaissent pour les périodes Λ plus grandes qui sont mises en œuvre dans les optiques hybrides et qui ne peuvent être simulées par la méthode modale de Fourier. Pour $\lambda < 0.7\lambda_0$, le modèle sous-estime largement l'efficacité du composant et ne prédit pas les oscillations observées sur les résultats numériques. Pour ces courtes longueurs d'onde, l'approximation réalisée à l'équa-

tion 5.7 cesse d'être valide, ainsi que le concept même de matériau artificiel, puisque les structures sub-λ deviennent multimodes pour certaines valeurs de d.

5.4 Conclusion

Nous avons étudié dans ce Chapitre le comportement spectral des optiques diffractives binaires à l'aide d'un modèle simple qui met en avant les propriétés de dispersion des structures sub-λ. Ce comportement diffère largement de celui des optiques diffractives à profil continu. Le modèle nous a permis de concevoir des composants efficaces sur une large plage spectrale en utilisant la forte dispersion structurale des matériaux artificiels. Nous avons vu que cette dispersion était d'autant plus importante que l'indice de réfraction du matériau homogène était grand. Les prédictions du modèle ont été validées par des calculs électromagnétiques rigoureux qui montrent qu'il est possible d'obtenir une efficacité supérieure à 95% sur près d'une octave, et ceci en utilisant des paramètres compatibles avec les contraintes de fabrication.

Toutes les prédictions de fonctionnement large bande réalisées dans ce Chapitre s'appliquent à des composants diffractifs dont la taille des zones de Fresnel est beaucoup plus grande que la longueur d'onde, c'est-à-dire dont la phase varie lentement à l'échelle de λ. Mais si le modèle simple développé ici permet de comprendre les phénomènes physiques mis en jeux et de choisir de bonnes valeurs des paramètres pour la conception, les approximations faites sont trop fortes pour obtenir une analyse vraiment quantitative. D'autre part, lorsque la taille des zones de Fresnel dépasse la trentaine de longueurs d'onde, il devient très difficile de modéliser rigoureusement les composants comme cela a pu être fait sur l'exemple de la Figure 5.6 pour tester le modèle. Pour surmonter ces deux difficultés, il est nécessaire de développer un modèle qui permette de calculer avec précision l'efficacité d'un composant diffractif de phase lentement variable. C'est l'objet du Chapitre suivant.

Chapitre 6

Efficacité d'un composant diffractif de phase lentement variable

Dans les optiques hybrides, la diffraction ne joue que le rôle de correcteur de front d'onde, l'objectif étant de corriger certaines aberrations — en particulier des aberrations chromatiques. Les composants diffractifs utilisés dans ces optiques sont formés de zones de Fresnel dont la largeur est grande devant la longueur d'onde, c'est-à-dire que la phase du composant varie lentement à l'échelle de λ. Du fait de cette grande taille caractéristique, ces composants sont très difficiles à modéliser sans approximation. Ceci est d'autant plus vrai pour les optiques diffractives binaires qui possèdent à la fois des structurations fines à l'échelle de λ et des tailles caractéristiques grandes par rapport à λ. Il est donc important de disposer d'un modèle approché permettant de calculer l'efficacité de ces composants.

En se plaçant dans le cadre de l'approximation scalaire et de l'optique paraxiale, c'est-à-dire en ajoutant quelques approximations à l'hypothèse de la phase lentement variable, il est possible d'obtenir une expression analytique de l'efficacité. Nous avons dérivé cette expression pour des optiques diffractives à profil continu de type échelette dans le Chapitre 4 et pour des optiques diffractives binaires dans le Chapitre 5. Ce dernier calcul a nécessité l'ajout de deux approximations supplémentaires, voir section 5.1.1. Ces expressions analytiques sont très importantes en pratique. En particulier, l'expression obtenue au Chapitre 5, voir équation 5.10, nous a permis de concevoir des optiques diffractives efficaces sur une large plage spectrale. Mais il peut être intéressant de prédire le comportement d'un composant diffractif de phase lentement variable en dehors du domaine de validité de ces expressions analytiques.

Par exemple, il est important de savoir comment évolue le comportement large bande présenté au Chapitre 5 avec l'angle d'incidence, c'est-à-dire en dehors du domaine paraxial. D'autre part, nous avons vu que la dispersion des structures sub-λ était d'autant plus grande que la longueur d'onde était proche de la période Λ_s. Dans l'optique de réaliser des composants efficaces sur une large plage spectrale, il est donc intéressant de connaître avec précision l'efficacité aux longueurs d'onde voisines de Λ_s pour lesquelles l'analogie du matériau artificiel n'est plus valide. Enfin, des travaux récents réalisés par le groupe de J. Turunen à l'Université de Joensuu en Finlande [Ter00, Hon00, Ter03] ont montré qu'il était possible d'augmenter l'efficacité d'un composant diffractif en utilisant le degré de liberté lié à la polarisation, c'est-à-dire

en s'affranchissant de l'approximation scalaire.

Ce Chapitre présente un modèle approché de l'efficacité des optiques diffractives dont la largeur des zones de Fresnel est grande par rapport à la longueur d'onde. Ce modèle est en particulier valable hors du domaine paraxial, pour des composants formés de structures sub-λ qui ne peuvent être strictement approchées par un matériau artificiel et il prend en compte les effets de polarisation.

Le modèle est développé dans la première section, puis il est validé dans la deuxième section à l'aide de calculs électromagnétiques rigoureux. Dans la troisième section nous étudions le comportement des optiques diffractives binaires aux courtes longueurs d'onde, pour lesquelles l'analogie du matériau artificiel cesse d'être valide.

6.1 Modèle : approximation de la phase lentement variable

Le modèle présenté ici est une généralisation de celui développé par Laure Lee au cours de sa thèse [Lee00a], qui ne s'appliquait qu'aux optiques diffractives unidimensionnelles dont la géométrie est invariante suivant une direction.

6.1.1 Construction du composant diffractif

L'objectif est de synthétiser à l'aide d'un composant diffractif une phase $\phi_0(x, y)$ variant lentement à l'échelle de la longueur d'onde. Nous supposerons que cette phase nominale peut être associée à celle d'un composant réfractif éclairé à une certaine longueur d'onde λ_0 et sous une certaine incidence θ_0. C'est en général le cas lors de l'utilisation d'un outil de conception comme Code V, par exemple.

Dans les Chapitres 4 et 5, tous les composants diffractifs considérés étaient idéaux dans le sens où ils étaient conçus pour synthétiser réellement la phase ϕ_0 lorsqu'ils étaient éclairés à λ_0 et sous l'incidence θ_0. Autrement dit, la *géométrie* du composant — le profil $h(x, y)$ dans le cas d'une optique de type échelette et la répartition d'indice effectif $n(x, y)$ dans le cas d'une optique binaire — était choisie pour que le composant soit effectivement blazé à la longueur d'onde λ_0 pour l'incidence θ_0.

Dans ce modèle, nous adoptons un point de vue plus général. Le composant diffractif est construit à l'aide d'une fonction F qui, à chaque phase ϕ_0 (mod 2π), associe une géométrie $g = F(\phi_0)$, comme illustré sur la Figure 6.1. Par rapport aux Chapitres précédents, la géométrie choisie est quelconque, dans le sens où elle peut ne pas synthétiser la phase ϕ_0 lorsqu'elle est éclairée à la longueur d'onde λ_0.

La seule hypothèse concernant le choix de la fonction F est que la géométrie $g(x, y) = F \circ \phi_0(x, y)$ résultant de cette opération doit être lentement variable à l'échelle de la longueur d'onde à l'intérieur de chaque zone de Fresnel. Autrement dit, deux phases ϕ_1 et ϕ_2 proches doivent être associées à deux géométries g_1 et g_2 similaires. En pratique, chaque « discontinuité » de géométrie, comme par exemple le passage d'un réseau sub-λ de trous à un réseau sub-λ de piliers, introduit une diffusion locale résiduelle qui ne sera pas prise en compte dans le modèle.

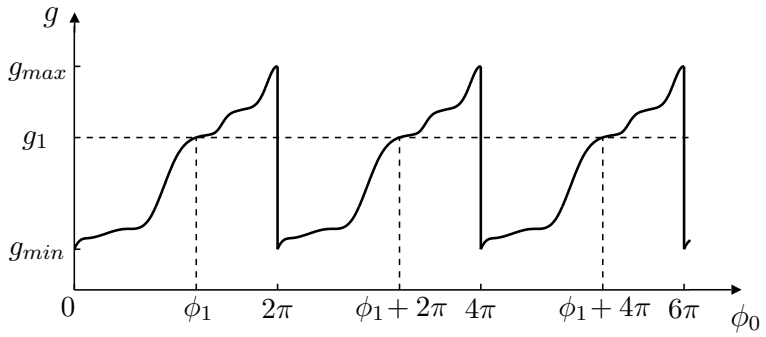

Figure 6.1: *Fonction $g = F(\phi_0)$ qui permet de construire le composant diffractif en associant une géométrie g à chaque valeur de la phase ϕ_0* (mod 2π)*. Par exemple, la géométrie g_1 est associée aux phases ϕ_1, $\phi_1 + 2\pi$, $\phi_1 + 4\pi$, etc.*

Ce point de départ très général présente de nombreux d'avantages puisqu'il est possible :

- de modéliser aussi bien un composant à profil continu de type échelette qu'un composant formé de structures sub-λ,
- de tenir compte des erreurs de fabrication, comme par exemple les erreurs sur la taille des structures ou le fait que les petits trous ne soient pas gravés aussi profondément que les grands,
- de modéliser un composant diffractif binaire dont les structures sub-λ ne vérifient pas l'approximation du matériau artificiel,
- de modéliser un composant diffractif binaire formé de structures sub-λ unidimensionnelles — des traits — dont l'orientation varie lentement, tels que ceux étudiés dans l'article [Ter03].

Finalement, nous cherchons à prédire l'efficacité d'une optique diffractive dont la géométrie g est une fonction périodique de la variable ϕ_0, lentement variable sur une période, c'est-à-dire à l'intérieur de chaque zone de Fresnel.

6.1.2 Ordres diffractés par le composant

Nous nous intéressons au comportement optique du composant diffractif défini à la section précédente pour une onde incidente quelconque. Cette dernière pouvant être décomposée en une somme d'ondes planes, il suffit de résoudre le problème élémentaire dans lequel le composant est éclairé par une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}_{inc}$ donné. Le composant ne faisant que corriger le front d'onde incident (sa géométrie varie lentement à l'échelle de la longueur d'onde), toutes les composantes du développement en ondes planes du champ diffracté sont contenues dans un petit angle solide Ω autour de la direction $\vec{k}_t$, comme illustré sur la Figure 6.2. Cette direction se déduit de $\vec{k}_{inc}$ grâce aux lois de Descartes.

Il est donc judicieux de décomposer le champ électromagnétique transmis dans la base directe $(\vec{u}_{TE}, \vec{u}_{TM}, \vec{u})$ liée à la direction $\vec{k}_t$ et définie sur la Figure 6.2. En effet, les composantes suivant $\vec{u}$ des champs électrique et magnétique sont négligeables par rapport aux composantes transverses. Le champ magnétique pouvant être calculé à

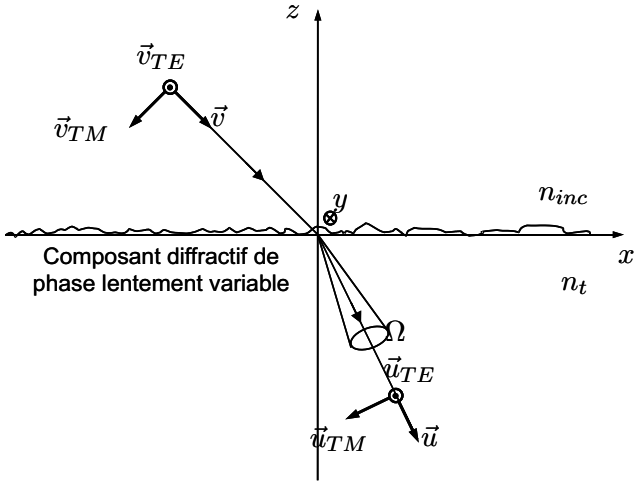

Figure 6.2: *Diffraction d'une onde plane par un composant diffractif de phase lentement variable. Les composantes du développement en ondes planes du champ diffracté sont contenues dans le petit angle solide* Ω *autour de la direction* $\vec{u}$*, qui se déduit de la direction* $\vec{v}$ *par les lois de Descartes. La base* $(\vec{u}_{TE}, \vec{u}_{TM}, \vec{u})$ *(resp.* $(\vec{v}_{TE}, \vec{v}_{TM}, \vec{v})$*) est liée à l'onde transmise (resp. incidente). Cette base est formée du vecteur unitaire* $\vec{u} = \vec{k}_t/\|\vec{k}_t\|$ *(resp.* $\vec{v} = \vec{k}_{inc}/\|\vec{k}_{inc}\|$*), du vecteur unitaire* $\vec{u}_{TE}$ *(resp.* $\vec{v}_{TE}$*) perpendiculaire au plan* $(\vec{k}_t, \vec{u}_z)$ *(resp.* $(\vec{k}_{inc}, \vec{u}_z)$*) et du vecteur unitaire* $\vec{u}_{TM} = \vec{u} \wedge \vec{u}_{TE}$ *(resp.* $\vec{v}_{TM} = \vec{v} \wedge \vec{v}_{TE}$*).*

partir du champ électrique grâce aux équations de Maxwell, le champ diffracté peut donc être représenté par un vecteur $\vec{E}$ de dimension 2 contenant les composantes transverses du champ électrique E_{TE} et E_{TM}. Ce raisonnement s'applique bien sûr à l'onde plane incidente dans la base $(\vec{v}_{TE}, \vec{v}_{TM}, \vec{v})$, voir Figure 6.2.

Du fait de la structuration bidimensionnelle du composant à l'échelle de la longueur d'onde, la nature vectorielle de la lumière ne peut être ignorée, et les effets du composant sur l'onde plane incidente sont décrits par une matrice de Jones [Hua93] qui relie le champ transmis $\vec{E}(x,y) = E_{TE}(x,y)\vec{u}_{TE} + E_{TM}(x,y)\vec{u}_{TM}$ au champ incident $\vec{E}^{(inc)} = E_{TE}^{(inc)}\vec{v}_{TE} + E_{TM}^{(inc)}\vec{v}_{TM}$:

$$\begin{pmatrix} E_{TE}(x,y) \\ E_{TM}(x,y) \end{pmatrix} = \boldsymbol{T}(x,y) \begin{pmatrix} E_{TE}^{(inc)} \\ E_{TM}^{(inc)} \end{pmatrix}, \tag{6.1}$$

où $\boldsymbol{T}(x,y)$ est une matrice 2×2 dont les éléments sont notés T_{ij} dans la suite. Cette matrice est une généralisation de la transmittance complexe définie habituellement dans le cadre de l'approximation scalaire [Goo96] et que nous avons utilisée dans les Chapitres 4 et 5.

La géométrie du composant étant une fonction périodique de la variable ϕ_0, voir Figure 6.1, sa matrice transmittance l'est également. Elle peut donc être décomposée en série de Fourier, de sorte que le champ électrique transmis par le composant est une fonction de ϕ_0 qui s'écrit sous la forme

$$\vec{E}(\phi_0) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \vec{D}^p \, e^{ip\phi_0} \,, \tag{6.2}$$

$$\text{avec} \quad \vec{D}^p = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \boldsymbol{T}(\phi_0) \vec{E}^{(inc)} e^{-ip\phi_0} \, \mathrm{d}\phi_0 \,. \tag{6.3}$$

L'équation 6.2 est l'extension vectorielle de l'équation 4.4 et montre que le champ transmis par le composant diffractif est une superposition de différents fronts d'onde pondérés par les coefficients $\vec{D}^p$. Chacun de ces fronts d'onde représente un ordre de diffraction. L'efficacité de diffraction dans l'ordre p est donnée par le rapport des flux des vecteurs de Poynting transmis et incident à travers une surface perpendiculaire à l'axe z, soit

$$\eta_p = \vec{D}^p.\vec{D}^{p^*} \frac{\vec{k}_t.\vec{u}_z}{\vec{k}_{inc}.\vec{u}_z} = \left(|D^p_{TE}|^2 + |D^p_{TM}|^2\right) \frac{\vec{k}_t.\vec{u}_z}{\vec{k}_{inc}.\vec{u}_z} \,, \tag{6.4}$$

pour un champ incident normé vérifiant $|E^{(inc)}_{TE}|^2 + |E^{(inc)}_{TM}|^2 = 1$. Si à la longueur d'onde λ_0 et pour l'incidence θ_0 seule l'efficacité de diffraction dans l'ordre 1 est non nulle, alors le composant diffractif est blazé et synthétise la phase ϕ_0.

D'après l'équation 6.3, les composantes du vecteur $\vec{D}^p$ s'expriment en fonction des coefficients de Fourier c^p_{ij} associés aux coefficients T_{ij} de la matrice transmittance $\boldsymbol{T}$. L'efficacité de diffraction dans l'ordre p de l'équation 6.4 est donc également donnée par

$$\eta_p = \left(|c^p_{11}\, E^{(inc)}_{TE} + c^p_{12}\, E^{(inc)}_{TM}|^2 + |c^p_{21}\, E^{(inc)}_{TE} + c^p_{22}\, E^{(inc)}_{TM}|^2\right) \frac{\vec{k}_t.\vec{u}_z}{\vec{k}_{inc}.\vec{u}_z} \,, \tag{6.5}$$

$$\text{avec} \quad c^p_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} T_{ij}(\phi_0) e^{-ip\phi_0} \, \mathrm{d}\phi_0 \,. \tag{6.6}$$

Les efficacités de diffraction dans tous les ordres sont calculées en intégrant numériquement le second membre de l'équation 6.6, pour les quatre valeurs du couple (i, j). Cette intégration, qui nécessite la connaissance de la matrice transmittance $\boldsymbol{T}(\phi_0)$, est explicitée dans la section suivante.

6.1.3 Calcul de l'efficacité : transmittance locale

La géométrie du composant varie lentement à l'échelle de la longueur d'onde. Ainsi, localement, l'onde plane incidente voit la même géométrie g sur une distance de plusieurs longueurs d'onde. Pour chaque phase ϕ_0, la matrice transmittance du composant diffractif est donc égale à la matrice transmittance de la géométrie g associée à ϕ_0,

$$\boldsymbol{T}(\phi_0) = \boldsymbol{t}(g) = \boldsymbol{t}[F(\phi_0)]. \tag{6.7}$$

La matrice $\boldsymbol{t}(g)$ représente la réponse de la géométrie g ; elle relie le champ transmis par cette géométrie au champ incident par une relation du même type que celle de l'équation 6.1. Cependant, à la différence de la transmittance $\boldsymbol{T}$ du composant, la

matrice $\boldsymbol{t}$ peut être facilement calculée de façon numérique puisqu'elle représente, par exemple, la transmittance d'un réseau de diffraction sub-λ[1].

L'hypothèse de la phase lentement variable qui est à la base du modèle suppose que le composant diffractif ne fasse que corriger le front d'onde incident. Localement, cela se traduit par le fait que chaque géométrie g ne doit diffracter la lumière que dans un seul ordre, l'ordre 0. C'est le cas par exemple lorsque g est un réseau éclairé en incidence normale à une longueur d'onde plus grande que la période. Par contre, dès que la géométrie g admet d'autres ordres de diffraction propagatifs, le modèle ne les prend pas en compte.

Finalement, l'intégration de l'équation 6.6 à l'aide d'une méthode numérique quelconque ne nécessite rien d'autre que *le calcul numérique de la transmission dans l'ordre 0 d'un nombre fini de géométries élémentaires* g_i. Ces géométries sont choisies à l'aide de la fonction $g = F(\phi_0)$ qui caractérise le composant diffractif modélisé, voir Figure 6.1. Bien que nous ne nous soyons intéressés dans cette section qu'au calcul des ordres transmis par le composant diffractif, un raisonnement similaire s'applique aux ordres réfléchis. Ces derniers s'obtiennent simplement en calculant le champ réfléchi dans l'ordre 0 par les géométries g_i.

6.2 Validation du modèle en incidence normale

Le modèle développé à la section précédente est validé en comparant ses prédictions à un calcul électromagnétique rigoureux. Nous considérons pour cela un réseau blazé binaire efficace sur une large plage spectrale, similaire à celui étudié à la section 5.3. La phase ϕ_0 est alors celle d'un prisme éclairé en incidence normale à la longueur d'onde λ_0. La fonction $g = F(\phi_0)$ utilisée pour construire le composant diffractif est représentée sur la Figure 6.3. La géométrie g, composée à la fois de réseaux sub-λ de trous et de piliers, a été choisie sans prendre en compte d'éventuelles erreurs de fabrication pour que le composant diffractif soit effectivement blazé en incidence normale à la longueur d'onde λ_0.

Nous étudions le comportement spectral de ce réseau blazé binaire, éclairé en incidence normale depuis le substrat.

6.2.1 Expression de l'efficacité en incidence normale

Nous considérons le cas de l'incidence normale car c'est le cas le plus simple. En effet, la géométrie g considérée étant constituée de réseaux bidimensionnels carrés dont les motifs sont centrosymétriques, elle ne couple pas les polarisations. D'autre part, la réponse de cette géométrie est la même que l'onde incidente soit polarisée TE ou TM. Ainsi, la matrice transmittance $\boldsymbol{T}(\phi_0)$ possède les propriétés suivantes :

$$T_{12} = T_{21} = 0, \tag{6.8}$$

$$T_{11} = T_{22} = T. \tag{6.9}$$

[1]Dans le cas d'une optique diffractive binaire. Dans le cas d'une optique à profil continu de type échelette, $\boldsymbol{t}$ est la matrice transmittance d'une couche homogène.

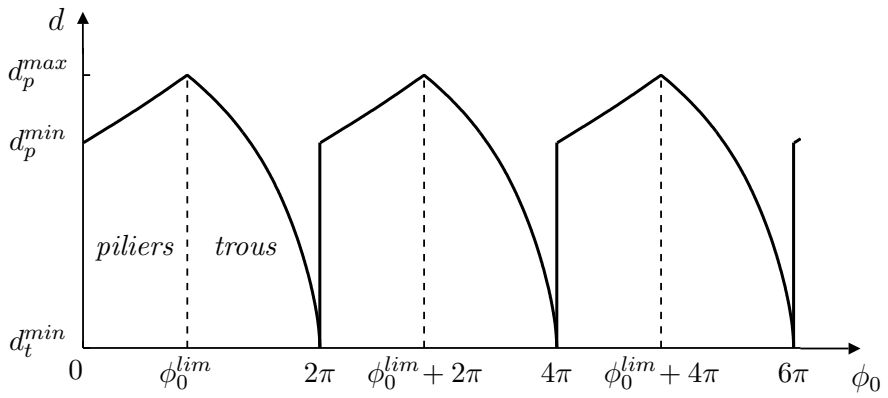

Figure 6.3: *Fonction $g = F(\phi_0)$ considérée pour la validation du modèle. La géométrie g est constituée de réseaux carrés de période $\Lambda_s = 0.5\lambda_0$ gravés dans un film d'indice $n_g = 2.1$ et de hauteur $h = 1.5\lambda_0$ déposé sur un substrat d'indice $n_{sub} = 1.52$. La taille d des motifs des réseaux sub-λ a été utilisée comme paramètre quantitatif représentant la géométrie g. Ces motifs peuvent être des trous ronds ou des piliers carrés. Les phases plus grandes (resp. plus petites) que ϕ_0^{lim} sont associées à des réseaux de trous (resp. de piliers). La taille des trous varie entre $d_t^{min} = 0$ et $d_t^{max} = 0.4\lambda_0$; la taille des piliers varie entre $d_p^{min} = 0.3\lambda_0$ et $d_p^{max} = d_t^{max}$. Quelle que soit leur taille, les motifs sont réalisés en gravant toute la hauteur du film de* Si_3N_4.

Le problème devient donc scalaire et l'équation 6.5 donnant l'efficacité du composant se réduit à

$$\eta_p = |c_p|^2 \frac{n_t}{n_{inc}}, \tag{6.10}$$

$$\text{avec} \quad c_p = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} T(\phi_0) e^{-ip\phi_0} \, \mathrm{d}\phi_0 \,, \tag{6.11}$$

où $T(\phi_0)$ est la transmission dans l'ordre 0 du réseau sub-λ associé à la phase ϕ_0 par la fonction F, voir Figure 6.3. Le rapport des composantes des vecteurs d'onde suivant l'axe z apparaissant dans l'équation 6.5 se réduit au rapport des indices dans l'équation 6.10 puisque nous sommes en incidence normale.

6.2.2 Validation

Le calcul électromagnétique rigoureux du réseau blazé binaire caractérisé par la fonction F donnée à la Figure 6.3 a été réalisé pour une période $\Lambda = 25\lambda_0$. Cela correspond à 50 motifs qui se répartissent en 28 trous et 22 piliers. Cette valeur a été choisie pour obtenir une bonne convergence des calculs numériques tout en restant dans l'hypothèse d'une phase lentement variable ($\Lambda \gg \lambda$). Les efficacités de diffraction de tous les ordres transmis par ce réseau sont calculées à l'aide de la méthode modale de Fourier [Li97], avec 111×11 termes de Fourier. Avec ces valeurs, l'erreur absolue est inférieure à 0.01 pour toutes les efficacités.

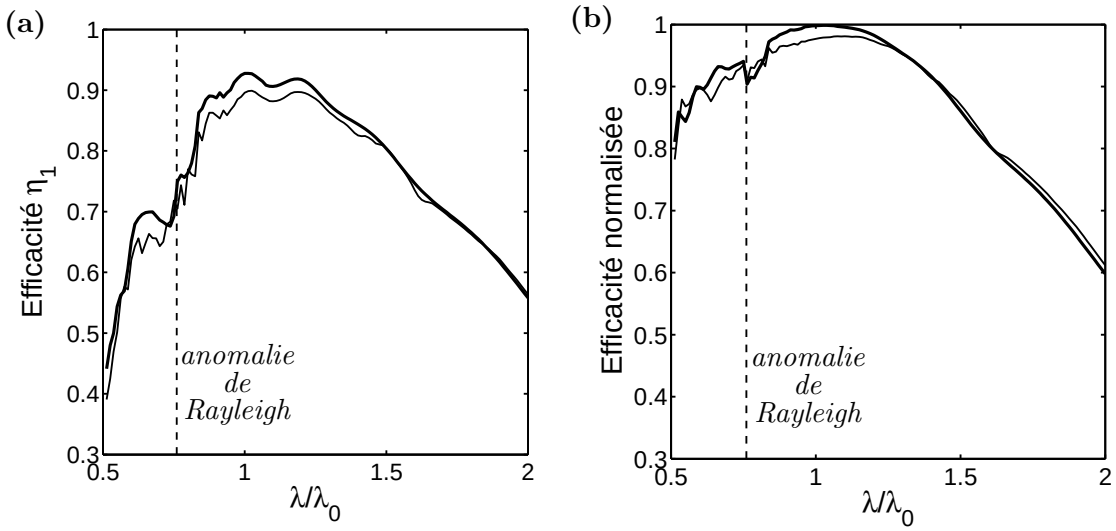

Figure 6.4: *Validation du modèle. (a) Efficacité de transmission dans l'ordre 1 du réseau blazé binaire caractérisé par la fonction F donnée à la Figure 6.3. (b) Efficacité normalisée par la somme de toutes les efficacités transmises. Le réseau est éclairé en incidence normale depuis le substrat. Courbe en gras, prédictions du modèle ; courbe en trait fin, calculs électromagnétiques rigoureux pour une période $\Lambda = 25\lambda_0$. Les pointillés montrent la longueur d'onde pour laquelle les ordres réfléchis ± 1 des réseaux sub-λ deviennent propagatifs dans le substrat de verre.*

L'efficacité transmise dans l'ordre 1 est représentée sur la Figure 6.4(a), et l'efficacité normalisée par la somme de toutes les efficacités transmises est représentée sur la Figure 6.4(b). Le réseau est éclairé en incidence normale depuis le substrat de verre en polarisation TE.

L'accord avec les prédictions du modèle données par l'équation 6.10 est quantitatif sur tout le spectre. La somme des efficacités transmises prédite par le modèle est calculée en appliquant le théorème de Parseval-Bessel à la fonction périodique $T(\phi_0)$:

$$\sum_{p=-\infty}^{+\infty} |c_p|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |T(\phi_0)|^2 \, \mathrm{d}\phi_0 \,. \tag{6.12}$$

Cela permet d'éviter l'intégration des fonctions $\exp(-ip\phi_0)$ qui varient rapidement pour de grandes valeurs de p. Pour $\lambda < \lambda_0$, l'énergie qui n'est pas transmise dans l'ordre 1 est essentiellement réfléchie, alors que pour $\lambda > \lambda_0$ elle est principalement transmise dans les autres ordres.

Il y a cependant un léger écart entre le modèle et le calcul électromagnétique. A la longueur d'onde de blaze λ_0, l'efficacité normalisée calculée rigoureusement est inférieure à 100%, voir Figure 6.4(b). Les raisons de cette déviation d'environ 2.5% sont les mêmes que celles énoncées à la section 5.3. La déviation est due, d'une part, à un léger effet d'ombrage ($< 1\%$) qui provient de la taille finie de la période du réseau [Lee02] et, d'autre part, à une diffusion locale résiduelle ($\approx 1.5\%$) qui provient

de la discontinuité de géométrie entre les réseaux de trous et les réseaux de piliers. Ces deux effets sont aussi à l'origine de l'écart entre modèle et calcul rigoureux observé sur l'efficacité non-normalisée autour de λ_0, voir Figure 6.4(a). On s'attend à ce qu'ils disparaissent pour les périodes Λ plus grandes qui sont mises en œuvre dans les optiques hybrides mais qui ne peuvent être simulées par la méthode modale de Fourier.

Pour $\lambda < 0.76\lambda_0$, les ordres réfléchis ± 1 des réseaux sub-λ deviennent propagatifs dans le substrat de verre. Cette anomalie de Rayleigh est représentée par les pointillés verticaux sur les Figures 6.4(a) et 6.4(b). Elle se traduit par une redistribution de l'énergie, localement dans tous les ordres de diffraction des réseaux sub-λ, mais aussi globalement dans tous les ordres du composant diffractif. Le modèle met bien en évidence une variation rapide de l'efficacité pour $\lambda = 0.76\lambda_0$, voir Figures 6.4(a) et 6.4(b). En outre, il est étonnant de constater que le modèle reste quantitatif à ces longueurs d'ondes pour lesquelles les réseaux sub-λ locaux ne diffractent pas seulement la lumière dans l'ordre 0.

Il est intéressant de noter qu'aux courtes longueurs d'onde, l'efficacité de diffraction présente des variations rapides qui ne peuvent être attribuées à des anomalies de Rayleigh, voir Figure 6.4. Ces variations apparaissent aussi bien sur les résultats du calcul électromagnétique que sur les prédictions du modèle. Ce comportement est analysé dans la section suivante.

6.3 Comportement aux courtes longueurs d'onde

L'efficacité du composant diffractif aux courtes longueurs d'onde a été calculée rigoureusement sur un maillage spectral plus fin. Elle est représentée sur la Figure 6.5(a). L'efficacité présente des variations très rapides, en particulier dans l'intervalle spectral $0.75\lambda_0 \leqslant \lambda \leqslant 0.95\lambda_0$. L'encart de la Figure 6.5(a) montre que ces variations sont formées d'un grand nombre de résonances très fines ($\Delta\lambda \approx 0.002\lambda_0$). En nombre restreint, ces résonances fines ne poseraient sûrement pas de problème en pratique, mais étant donné leur grand nombre, on peut craindre qu'elles soient préjudiciables pour des applications à l'imagerie.

La Figure 6.5(b) reprend un détail de la Figure 6.5(a) dans l'intervalle spectral $0.84\lambda_0 \leqslant \lambda \leqslant 0.94\lambda_0$ (courbe en trait fin) et montre que le modèle et le calcul rigoureux prédisent tous les deux un comportement spectral très chaotique. Nous allons donc utiliser le modèle pour analyser ce comportement et chercher à le supprimer.

6.3.1 Etude de la fonction $T(\phi_0)$

Dans le cadre du modèle, les efficacités de diffraction dans tous les ordres sont données par l'intégration de la fonction $T(\phi_0)$, voir équation 6.11. Le comportement chaotique observé sur la Figure 6.5 est donc entièrement contenu dans le comportement de la transmission $T(\phi_0)$. Son module est représenté sur la Figure 6.6 en fonction de la phase ϕ_0 et de la longueur d'onde λ. La ligne noire horizontale sépare deux régions spectrales dans lesquelles le comportement de la transmission est différent : $\lambda > n_g\Lambda_s$ et $\lambda < n_g\Lambda_s$. Ces régions sont notées respectivement I et II.

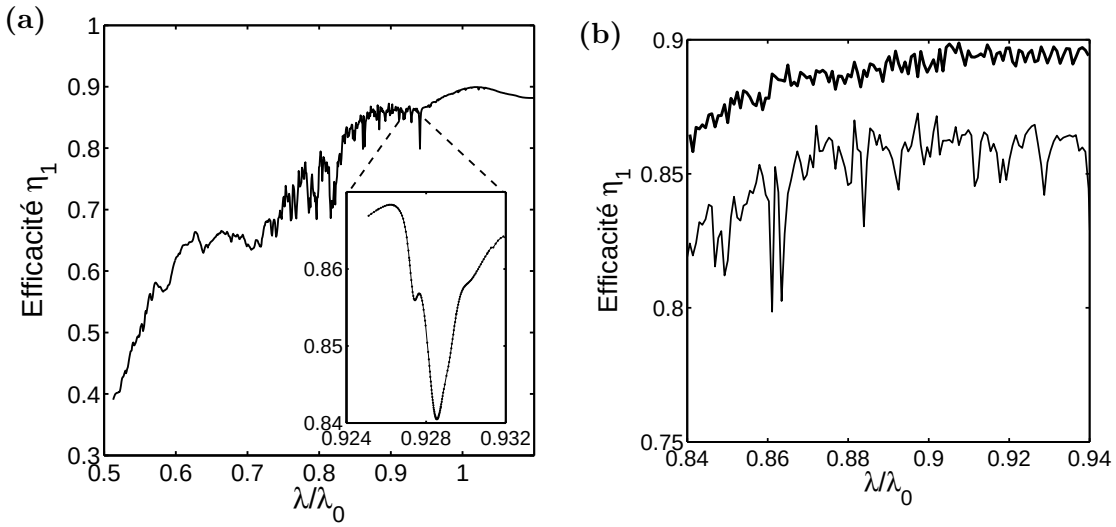

Figure 6.5: *Comportement aux courtes longueurs d'onde de l'efficacité du réseau blazé binaire caractérisé par la fonction F donnée à la Figure 6.3. (a) Calcul rigoureux de l'efficacité de transmission dans l'ordre 1. L'encart montre le détail d'une résonance. (b) Détail pour $0.84\lambda_0 \leqslant \lambda \leqslant 0.94\lambda_0$ (courbe en trait fin) et comparaison avec les prédictions du modèle (courbe en gras).*

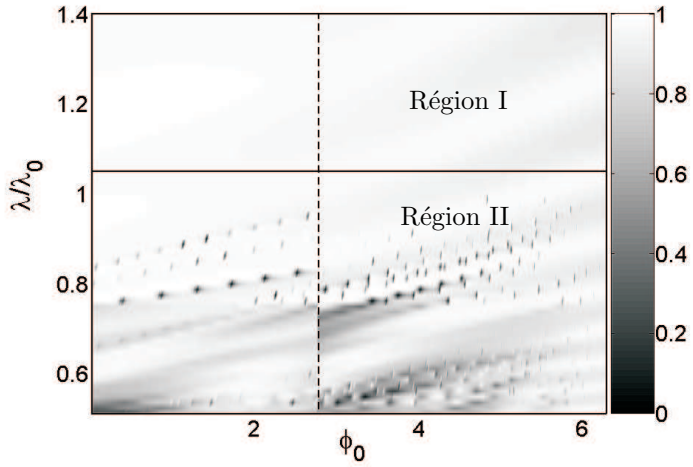

Figure 6.6: *Module de la transmission T dans l'ordre 0 des réseaux sub-λ en fonction de la phase ϕ_0 et de λ. La ligne horizontale délimite les régions spectrales* I *et* II*. Les pointillés verticaux marquent la phase ϕ_0^{lim} qui sépare les réseaux de trous (pour $\phi_0 > \phi_0^{lim}$) des réseaux de piliers (pour $\phi_0 < \phi_0^{lim}$).*

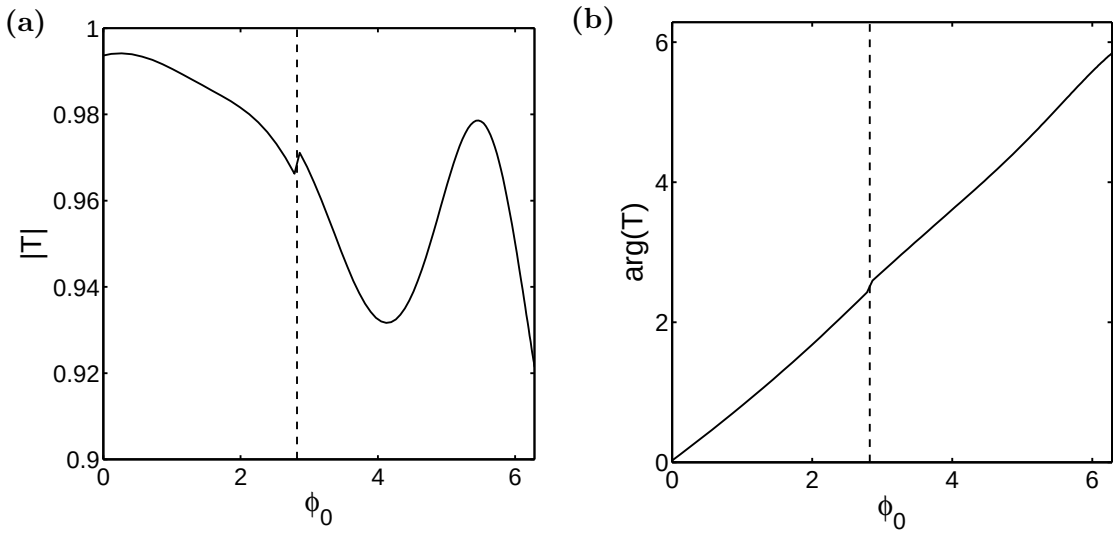

Figure 6.7: *Variation de la transmission T des réseaux sub-λ en fonction de la phase ϕ_0 pour $\lambda = 1.2\lambda_0$. (a) Module. (b) Argument. Les pointillés verticaux marquent la phase ϕ_0^{lim}.*

Région I : $\lambda > n_g\Lambda_s$

Pour des longueurs d'onde $\lambda > n_g\Lambda_s$, la période des réseaux sub-λ est plus petite que le cut-off structurel. Il n'y a donc qu'un seul mode de Bloch propagatif et la transmission T du réseau est celle d'une couche homogène dont l'indice est égal à l'indice effectif n de ce mode de Bloch. Les fonctions $|T(\phi_0)|$ et $\arg(T(\phi_0))$ présentent donc un comportement régulier, voir Figures 6.6 et 6.7. La Figure 6.7(b) illustre bien la validité du concept de matériau artificiel pour ces longueurs d'onde : la phase introduite par le composant diffractif est linéaire pour $0 \leqslant \phi_0 \leqslant 2\pi$, atteignant une valeur inférieure à 2π pour $\phi_0 = 2\pi$, comme dans le cas d'un composant diffractif à profil continu, voir Figure 4.3.

Région II : $\lambda < n_g\Lambda_s$

Pour les longueurs d'onde $\lambda < n_g\Lambda_s$, la transmission T des réseaux s'éloigne de plus en plus de celle d'une couche homogène et des résonances très fines apparaissent, voir Figures 6.6 et 6.8. Ces résonances sont bien connues de la communauté des réseaux. Elles résultent de l'excitation de modes guidés dans le plan du réseau, qui se comporte comme un guide d'onde périodique, et sont décrites avec précision par l'analyse des pôles et des zéros de la matrice de diffraction du problème [Pen75, Pop93, Nev95].

En réalité, les modes concernés, qui sont des modes de Bloch, ne sont pas purement guidés puisqu'ils sont couplés aux ondes planes se propageant dans le substrat ($n_{sub} = 1.52$) et dans le superstrat (l'air). Nous les appellerons donc modes *quasi-guidés* (leaky modes en anglais) pour ne pas les confondre avec les modes de Bloch se propageant verticalement dans le réseau, voir section 4.2.2. Dans notre cas, les modes quasi-guidés sont excités en incidence normale et correspondent donc au point Γ du diagramme de dispersion $\omega(k_x, k_y)$, c'est-à-dire à $k_x = k_y = 0$.

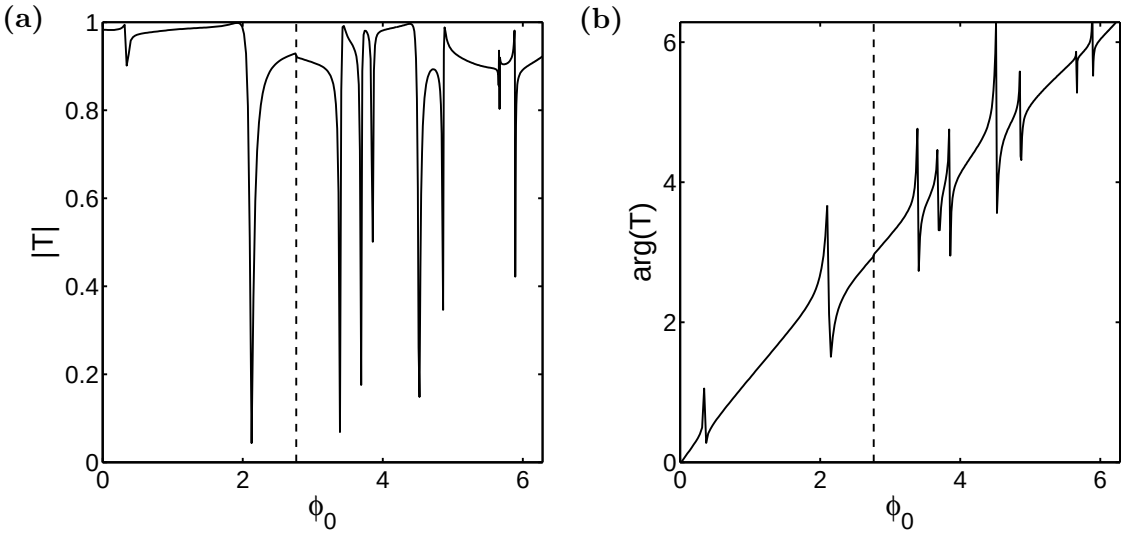

Figure 6.8: *Variation de la transmission T des réseaux sub-λ en fonction de la phase ϕ_0 pour $\lambda = 0.8\lambda_0$. (a) Module. (b) Argument. Les pointillés verticaux marquent la phase ϕ_0^{lim}.*

Ces résonances peuvent également être rattachées au fait que plusieurs modes de Bloch (avec $k_z \neq 0$) sont propagatifs dans les réseaux pour $\lambda < n_g\Lambda_s$. En effet, les modes quasi-guidés qui se propagent dans le plan du réseau peuvent être décrits comme des résonances transverses (dans la direction z) de type Fabry-Perot impliquant plusieurs modes de Bloch couplés [Lal05].

Cette façon de voir permet d'établir que la longueur d'onde délimitant les régions I et II de la Figure 6.6 est égale au cut-off structurel des réseaux sub-λ : $\lambda_{lim} = n_g\Lambda_s$. Cette limite dépend bien sûr de l'angle d'incidence.

6.3.2 Comment empêcher l'excitation de modes guidés ?

L'étude des transmissions $T(\phi_0)$ des réseaux sub-λ montre que le comportement chaotique de la Figure 6.5(a) est dû à l'excitation résonante de modes quasi-guidés. Une solution pour supprimer ces excitations est de considérer une structure dans laquelle les modes quasi-guidés n'existent plus, ou plus précisément, deviennent très radiatifs.

Lorsque la fraction de matériau gravé tend vers 0, les modes quasi-guidés tendent vers les modes guidés de l'empilement non gravé verre/Si_3N_4/air. Intuitivement, en considérant un empilement qui ne possède pas de modes guidés, on s'attend donc à ce que les modes quasi-guidés disparaissent, quelle que soit la fraction de matériau gravé. En prenant $n_{sub} = n_g$, l'empilement non-gravé se limite à l'interface entre deux milieux semi-infinis diélectriques. Comme il n'y a pas de modes guidés à l'interface, il n'y a pas de modes quasi-guidés dans la structure gravée. En réalité, les modes quasi-guidés n'ont pas complètement disparu mais sont devenus très radiatifs, ce qui devrait se traduire pas une disparition presque totale des résonances.

Ce raisonnement simple, qui montre comment supprimer les résonances, est validé par les Figures 6.9 et 6.10. La transmission $T(\phi_0)$ des réseaux sub-λ gravés

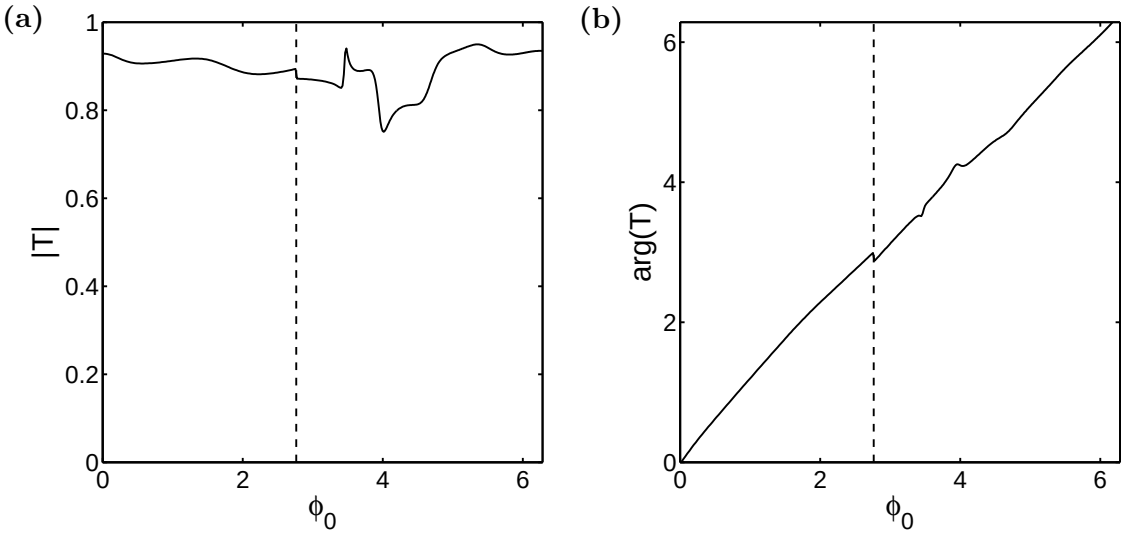

Figure 6.9: *Variation de la transmission T des réseaux sub-λ en fonction de la phase ϕ_0 pour $\lambda = 0.8\lambda_0$. L'indice du substrat est maintenant $n_{sub} = 2.1$. (a) Module. (b) Argument. Les pointillés verticaux marquent la phase ϕ_0^{lim}.*

sur un substrat d'indice $n_{sub} = n_g = 2.1$ est représentée sur la Figure 6.9 pour $\lambda = 0.8\lambda_0$. Par rapport à la Figure 6.8 correspondant à un substrat de verre d'indice $n_{sub} = 1.52$, les résonances ont presque complètement disparu et les deux résonances restantes, autour de $\phi_0 = 4$, sont beaucoup plus larges.

Sur la Figure 6.10 sont représentées les efficacités normalisées de deux réseaux blazés binaires calculées rigoureusement. La courbe en trait plein correspond au réseau de la Figure 6.5(a) considéré jusqu'à présent, avec un substrat de verre d'indice $n_{sub} = 1.52$; et la courbe en pointillés discontinus correspond au même réseau mais avec un substrat de Si_3N_4 d'indice $n_{sub} = n_g = 2.1$. Là encore, les résonances ont disparu. Nous avons considéré la transmission normalisée pour éliminer de la discussion les différences de réflexion entre les deux réseaux. Bien que la valeur du cut-off structurel soit différente, on s'attend à ce que ce raisonnement simple reste valable en incidence oblique.

6.4 Conclusion

Nous avons développé dans ce Chapitre un modèle approché pour prédire l'efficacité des optiques diffractives dont les zones de Fresnel sont grandes par rapport à la longueur d'onde. Ce modèle n'utilise que l'approximation de la phase lentement variable et s'applique donc à une grande variété de cas pratiques. Il a été validé à l'aide de calculs électromagnétiques rigoureux, dans le cas d'un réseau blazé binaire efficace sur une large plage spectrale et éclairé en incidence normale. De manière surprenante, nous avons montré que le modèle reste quantitatif aux petites longueurs d'onde, loin du régime d'homogénéisation. A ces longueurs d'ondes, les réseaux sub-λ locaux peuvent supporter plusieurs modes de Bloch propagatifs et peuvent même

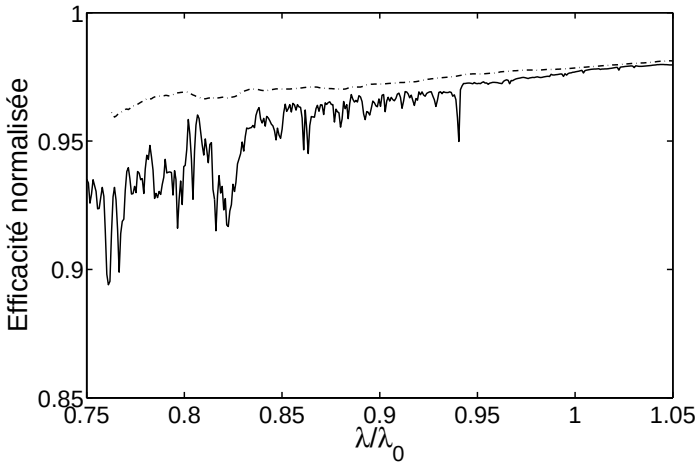

Figure 6.10: *Efficacité de transmission dans l'ordre 1 normalisée par la somme de toutes les efficacités. Trait plein,* $n_{sub} = 1.52$ *; pointillés discontinus,* $n_{sub} = 2.1$.

diffracter de la lumière dans leurs ordres ± 1. Pour autant, le modèle reste valable et le composant blazé binaire reste efficace.

Nous avons mis en évidence que l'efficacité d'un composant diffractif binaire formé de structures sub-λ multimodes présente de nombreuses résonances fines. Ces résonances sont prédites par le modèle, ce qui confirme sa capacité à prendre en compte le caractère multimode des structures sub-λ. Le modèle nous a d'ailleurs permis d'interpréter ces résonances comme des excitations de modes quasi-guidés dans le réseau. Un raisonnement simple basé sur cette interprétation a montré qu'il était possible de supprimer ces résonances en utilisant un substrat de même indice de réfraction n_g que le matériau dans lequel les structures binaires ont été gravées. Ceci montre que le choix du substrat est capital pour pouvoir envisager l'utilisation des optiques diffractives binaires à des longueurs d'onde plus petites que le cut-off structurel.

Conclusion de la deuxième partie

Nous avons montré dans cette partie que l'utilisation de structures sub-λ permet de surmonter la principale limitation des optiques diffractives, à savoir leur utilisation efficace sur une large plage spectrale. Le modèle simple développé au Chapitre 5 montre que cette possibilité est due essentiellement aux propriétés de dispersion structurale particulières des matériaux artificiels. Si ce travail ne constitue pas une étude vraiment exhaustive des optiques diffractives binaires large bande, au moins fournit-il les deux outils permettant de la réaliser :

- Le modèle simple développé au Chapitre 5 montre comment utiliser la dispersion des structures sub-λ pour concevoir des composants large bande.
- Le modèle approché de l'efficacité des composants diffractifs de phase lentement variable développé au Chapitre 6 permet de prédire quantitativement le comportement spectral et angulaire des optiques diffractives binaires large bande, ainsi que les conséquences d'inévitables erreurs de fabrication.

Nous avons introduit dans le Chapitre 4 les principaux concepts de l'optique diffractive. En particulier, nous avons mis en évidence les deux limitations fondamentales des optiques diffractives classiques à profil continu : l'effet d'ombrage et la diminution de l'efficacité quand la longueur d'onde s'écarte de la longueur d'onde de blaze. Nous avons ensuite introduit le concept de matériau artificiel qui est à la base de l'optique diffractive binaire.

Dans le Chapitre 5, le comportement spectral des optiques diffractives binaires a été étudié à l'aide d'un modèle simple qui met en avant les propriétés de dispersion des structures sub-λ. Ce modèle permet de concevoir des composants efficaces sur une large plage spectrale en utilisant la forte dispersion structurale des matériaux artificiels. Les prédictions du modèle ont été validées par des calculs électromagnétiques rigoureux qui montrent qu'il est possible d'obtenir une efficacité supérieure à 95% sur près d'une octave, et ceci en utilisant des paramètres compatibles avec les contraintes de fabrication.

Nous avons développé dans le Chapitre 6 un modèle approché pour prédire l'efficacité des optiques diffractives dont les zones de Fresnel sont grandes par rapport à la longueur d'onde. Ce modèle est général et s'applique à une grande variété de géométries couramment utilisées telles que les structures à profil continu de type échelette. Il permet en particulier d'étudier quantitativement le comportement des optiques binaires lorsque l'approximation du matériau artificiel n'est plus valide, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde devient comparable à la taille des nanostructures.

Troisième partie

Confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques

Introduction de la troisième partie

Gardons les pieds sur terre,
restons dans le plan complexe.
J.-P. Hugonin, Maximes diverses

Depuis l'avènement des nanotechnologies, parvenir à confiner longtemps la lumière dans des volumes de l'ordre de λ^3 est devenu un enjeu majeur en optique intégrée. Les applications de ce confinement ultime sont nombreuses et vont de la conception de filtres add-drop très compacts à la réalisation d'expériences d'électrodynamique quantique à l'état solide, mais l'objectif phare du domaine est sans doute le contrôle de l'émission spontanée [Yab87]. En effet, depuis l'article fondateur de E. M. Purcell [Pur46], de nombreux travaux ont porté sur la modification de l'émission spontanée d'un émetteur placé en cavité en vue de réaliser de nouvelles sources de lumière aux fonctionnalités originales, d'abord pour des transitions atomiques dans le domaine des radiofréquences et des micro-ondes [Har89], puis dans le domaine optique depuis le début des années 90 [Yok92, Yam93].

Il existe plusieurs types de microcavités optiques possédant chacune leurs particularités [Vah03]. Elles sont illustrées sur la Figure 6.11. Dans les microsphères, les microdisques et les microtores, *le confinement de la lumière est purement réfractif* : les modes propres de la cavité sont des modes de galerie confinés à la périphérie par réflexion totale interne. Dans les micropiliers, les cavités de type air-bridge et les cavités basées sur un cristal photonique bidimensionnel gravé dans une hétérostructure, *le confinement de la lumière est hybride et repose à la fois sur la réfraction et sur la diffraction*, ou plus précisément sur la réflexion totale interne et sur un effet de bande interdite photonique. Dans le micropilier et la cavité de type air-bridge, le confinement est diffractif dans la direction du miroir de Bragg et réfractif dans les deux autres directions, alors que dans la cavité à cristaux photoniques 2D, le confinement est réfractif dans la direction verticale perpendiculaire à l'hétérostructure et diffractif dans les deux directions latérales.

Un émetteur placé dans une cavité en régime de couplage faible peut voir son taux d'émission inhibé ou au contraire augmenté par rapport à son taux d'émission dans un milieu homogène. L'augmentation maximale du taux d'émission, appelée *facteur de Purcell* et notée F_p, dépend de deux caractéristiques électromagnétiques de la cavité, son facteur de qualité Q et son volume modal V :

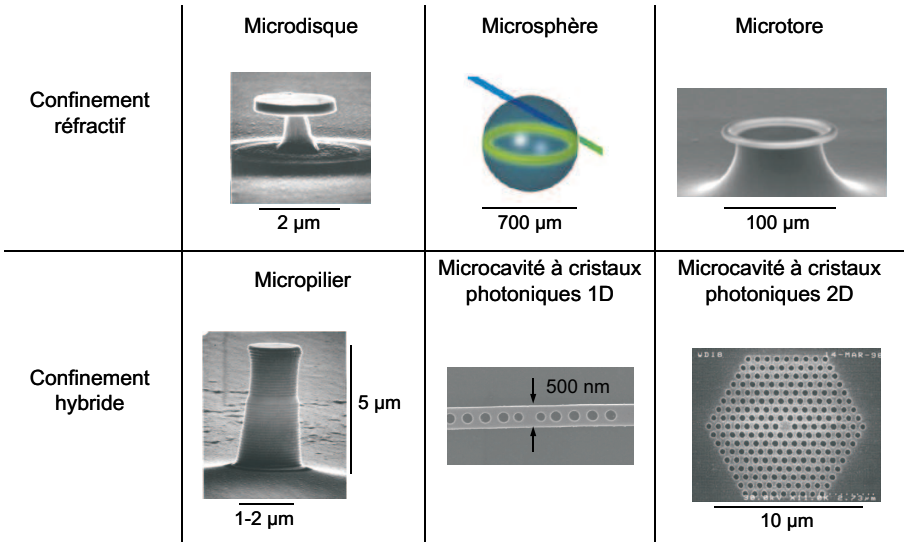

Figure 6.11: *Illustration des différents types de microcavités optiques avec leurs tailles caractéristiques. Dans les microdisques [Gay99], microsphères [Vah03] et microtores [Kip04], le confinement de la lumière est purement réfractif, dû à la réflexion totale interne. Dans les micropiliers [Riv99], les cavités de type air-bridge (cavités à cristaux photoniques 1D) et les cavités à cristaux photoniques 2D [Pai99], le confinement de la lumière est hybride, dû à la fois à la réflexion totale interne et à un effet de bande interdite photonique. La cavité air-bridge a été fabriquée au Laboratoire de Photonique et de Nanostructures dans le cadre de la thèse de Michele Belotti.*

$$F_p = \frac{3}{4\pi^2}\left(\frac{\lambda_0}{n}\right)^3 \frac{Q}{V},$$

où n est l'indice de réfraction du milieu dans lequel est placé l'émetteur et λ_0 est la longueur d'onde de résonance. L'expression du facteur de Purcell montre qu'une analyse purement électromagnétique d'une cavité permet d'avoir une idée de sa capacité à modifier l'émission spontanée et que les deux paramètres Q et V constituent des facteurs de mérite pertinents.

Parmi toutes les microcavités illustrées sur la Figure 6.11, nous nous sommes intéressés exclusivement, au cours de cette thèse, aux cavités à cristaux photoniques. Ce sont elles qui possèdent les plus petits volumes modaux, inférieurs à $(\lambda/n)^3$ [For97, Par01, Aka03a], et des travaux récents sur lesquels nous reviendrons plus en détail ont montré qu'il était possible d'obtenir de très grands facteurs de qualité [Aka03a, Son05]. Ce sont donc des géométries très prometteuses pour parvenir à confiner longtemps la lumière dans des volumes ultimes.

Malheureusement, dans les cavités à cristaux photoniques, et même dans les micropiliers, *la durée de vie intrinsèque* — obtenue pour des miroirs semi-infinis — *est limitée par des pertes radiatives.* Du fait de la nature hybride du confinement de la lumière, l'origine précise de ces pertes n'est pas facile à identifier. En effet, les

structures à base de cristaux photoniques utilisées dans ces cavités supportent en général plusieurs modes propagatifs et radiatifs et des analyses électromagnétiques détaillées ont montré que, dans certains cas, le confinement était le résultat de couplages entre ces différents modes [Lal04a, Lal04b]. L'objectif de ce travail est de comprendre en profondeur les mécanismes physiques qui gouvernent le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques 2D. Ceci va nous conduire à porter un regard critique sur l'approche théorique la plus répandue actuellement pour analyser ces microcavités et à proposer une nouvelle approche.

Le premier Chapitre de cette partie est consacré à l'analyse des mécanismes physiques qui gouvernent le confinement de la lumière dans les cavités à cristaux photoniques 2D. Dans un premier temps, nous portons un jugement critique sur l'approche théorique la plus répandue pour analyser ce confinement. Nous mettons en évidence que cette approche, basée sur l'analyse par transformée de Fourier du champ [Vuc02a, Sri02, Aka03a], ne fournit aucune information sur l'origine physique des pertes radiatives et ne permet pas de prédire la valeur du facteur de qualité. Elle constitue en fait simplement une analyse du spectre angulaire des pertes d'une cavité donnée. Dans un deuxième temps, nous développons un modèle Fabry-Perot qui met en évidence les paramètres physiques essentiels du problème et dont la validité s'étend étonnamment jusqu'aux cavités ultimes formées en enlevant un seul trou dans un cristal photonique. Ce modèle permet d'interpréter des résultats expérimentaux récents qui montrent qu'un léger déplacement des trous entourant la cavité peu induire une forte augmentation du facteur de qualité [Aka03a]. Nous mettons en évidence deux phénomènes physiques importants qui n'avaient pas été mentionnés dans l'interprétation originale : une diminution des pertes radiatives à l'interface des miroirs et une diminution de la vitesse de groupe du mode de Bloch à l'intérieur de la cavité.

Le deuxième Chapitre revient sur l'importance des pertes radiatives qui se produisent à l'interface guide/miroir. Il reprend l'intégralité d'un article publié dans la revue Optics Express [Sau05c]. Nous montrons tout d'abord que l'origine physique des pertes radiatives est une désadaptation de profil de mode, c'est-à-dire une différence entre le profil du mode guidé incident et le profil du mode de Bloch évanescent du miroir. Puis, en nous appuyant sur ces résultats, nous présentons des règles de conception qui permettent de réduire les pertes radiatives en modifiant légèrement la géométrie de l'interface guide/miroir. Ces règles sont validées par des calculs numériques tridimensionnels et sont utilisées pour concevoir des miroirs dont la géométrie permet de réduire les pertes radiatives de plusieurs ordres de grandeur.

Chapitre 7

Analyse des mécanismes physiques du confinement

L'objet de ce Chapitre est d'identifier clairement les mécanismes physiques qui gouvernent le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques 2D, voir Figure 6.11, afin d'être capables de concevoir des structures qui limitent les pertes radiatives. De nombreux travaux récents, aussi bien théoriques qu'expérimentaux, ont souligné l'importance de la géométrie entourant la cavité. Ces travaux ont montré qu'en modifiant légèrement cette géométrie, il est possible d'obtenir de très grands facteurs de qualité [Par01, Vuc02a, Aka03a, Ryu03, Sri04, Zha04, Son05]. A l'exception des travaux présentés dans cette thèse, toutes les approches théoriques ayant interprété ce phénomène sont basées sur *une analyse globale du mode de la cavité* nécessitant un calcul tridimensionnel complet du champ électromagnétique [Joh01, Vuc02a, Sri02, Aka03a, Kar04]. Malheureusement, en traitant le problème dans sa globalité, *ces approches ne permettent pas d'identifier individuellement les paramètres physiques qui régissent le confinement de la lumière.*

Or, pour pouvoir fixer les limites d'un phénomène physique ou le transposer à d'autres structures, la compréhension fine du phénomène incriminé est indispensable. Nous avons donc développé un modèle Fabry-Perot pour mettre en avant les paramètres physiques qui sont masqués par une analyse globale du mode de la cavité. Nous verrons que le modèle met l'accent sur *l'importance des miroirs qui entourent la cavité* ainsi que sur *la vitesse de groupe du mode à l'intérieur de la cavité.*

Dans la première section de ce Chapitre, nous présentons brièvement deux résultats expérimentaux obtenus par le groupe de S. Noda à l'Université de Kyoto. Ces résultats constituent l'état de l'art dans la course aux grands facteurs de qualité dans les microcavités à cristaux photoniques 2D.

Après avoir rappelé dans la deuxième section quelques notions d'électromagnétisme concernant le facteur de qualité d'une cavité, nous nous intéressons en détail, dans la troisième section, à l'approche la plus utilisée pour analyser le confinement de la lumière. Nous montrons en particulier que cette approche, basée sur une transformée de Fourier du champ électromagnétique du mode [Vuc02a, Sri02, Aka03a], ne permet pas de prédire la valeur du facteur de qualité. Elle se limite à analyser le spectre angulaire des pertes de la cavité, sans fournir d'informations sur leur origine physique.

La quatrième section est consacrée à la présentation et à la validation du modèle Fabry-Perot. Nous insistons sur le caractère prédictif du modèle qui met en avant les paramètres physiques essentiels du confinement et nous montrons qu'il permet une interprétation simple de l'effet de la modification de la géométrie autour de la cavité. Deux phénomènes physiques importants qui n'ont pas été mentionnés dans les interprétations précédentes sont mis en évidence : une diminution des pertes radiatives à l'interface des miroirs et une diminution de la vitesse de groupe du mode de Bloch à l'intérieur de la cavité. Ce travail a fait l'objet de deux publications : l'une dans la revue Nature [Sau04b] et l'autre plus détaillée dans la revue Physical Review B [Sau05b].

7.1 Etat de l'art des cavités à cristaux photoniques

Le tableau 7.1 présente quelques résultats ayant marqué l'évolution des facteurs de qualité mesurés dans des microcavités à cristaux photoniques. Il montre en particulier que la durée de vie des modes a été multipliée par un facteur 100 au cours de ces deux dernières années, pour un volume modal constant. En 2005, le groupe de l'Université de Kyoto a franchi un cap important en publiant un facteur de qualité de 600 000 [Son05], battant ainsi son propre record de 45 000 publié 18 mois plus tôt [Aka03a]. Ces cavités avec de très grands facteurs de qualité ne s'obtiennent pas en introduisant un simple défaut ponctuel dans le cristal photonique, comme enlever quelques trous par exemple : *elles sont le résultat d'une ingénierie fine de la géométrie entourant le défaut.*

Date	Q	V [en unités $(\lambda/n)^3$]	Groupe	Référence
Novembre 1997	265	0.57	MIT[1]	[For97]
Novembre 2001	1 900	0.56	KAIST[2]	[Par01]
Octobre 2002	2 000	0.5	Caltech[3]	[Lon02]
Août 2003	6 400	1	Kyoto	[Aka03b]
Septembre 2003	13 000	1.2	Caltech	[Sri03]
Octobre 2003	45 000	0.76	Kyoto	[Aka03a]
Août 2004	40 000	0.9	Caltech	[Sri04]
Mars 2005	600 000	1.2	Kyoto	[Son05]

Tableau 7.1: *Evolution des facteurs de qualité mesurés dans des cavités à cristaux photoniques. Les valeurs des volumes modaux ont été calculées, sauf celle de [Sri04] qui a été mesurée. Tous les résultats ont été obtenus dans des microcavités à cristaux photoniques 2D, sauf celui de [For97] où la cavité est formée en gravant un cristal photonique 1D dans un guide ruban en SOI.*
[1]*Massachusetts Institute of Technology,* [2]*Korea Advanced Institute of Science and Technology,* [3]*California Institute of Technology.*

Il est intéressant de noter que les plus grands facteurs de qualité prédits théori-

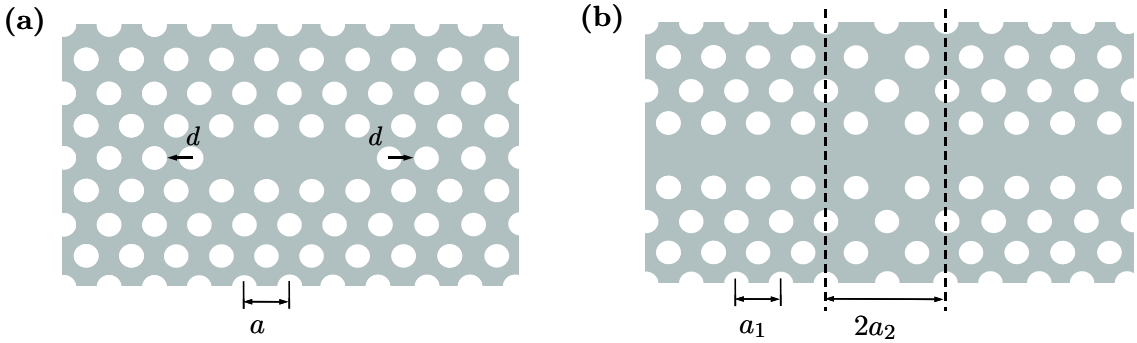

Figure 7.1: *Illustration des deux cavités étudiées par le groupe de l'Université de Kyoto, gravées dans une membrane de silicium d'épaisseur* $h = 250nm$. *(a) Vue de dessus de la cavité dont le facteur de qualité vaut* $Q = 45\,000$ *[Aka03a]. Le paramètre de maille et le rayon des trous sont respectivement* $a = 420nm$ *et* $r = 0.29a$. *Le déplacement des deux trous extrêmes est* $d = 0.15a$. *(b) Vue de dessus de la cavité « double hétérostructure » dont le facteur de qualité vaut* $Q = 600\,000$ *[Son05]. Les paramètres de maille sont* $a_1 = 410nm$ *et* $a_2 = 420nm$. *Tous les trous ont un rayon* $r = 0.29a_2$.

quement dans des microcavités à cristaux photoniques 2D ont récemment dépassé le million [Ryu03, Zha04, Son05].

Les géométries des deux cavités record du groupe de Kyoto sont représentées sur la Figure 7.1. Le dénominateur commun entre ces deux structures est l'emploi d'un cristal photonique à maille triangulaire gravé dans une membrane de silicium de hauteur $h = 250nm$. Le paramètre de maille du cristal est noté a.

La cavité de la Figure 7.1(a) est formée en enlevant trois trous dans la direction ΓK du cristal photonique. Le paramètre de maille du cristal est $a = 420nm$ et le rayon des trous est $r = 0.29a$. En l'état, le facteur de qualité de la cavité est d'environ 5 000. En déplaçant progressivement les deux trous extrêmes vers l'extérieur de la cavité, voir Figure 7.1(a), deux changements importants ont été mesurés [Aka03a] :

1. Un décalage de la longueur d'onde de résonance de la cavité vers le rouge.
2. Une forte augmentation du facteur de qualité.

Pour un déplacement des trous de seulement $60nm$, *le facteur de qualité est multiplié par un facteur presque* 10. Puis, lorsque le déplacement continue d'augmenter, le facteur de qualité chute rapidement.

La géométrie de la cavité représentée sur la Figure 7.1(b), appelée « double hétérostructure » par les auteurs [Son05], est plus originale. La structure de base de la cavité est un simple guide d'onde à cristaux photoniques à une rangée manquante, de paramètre de maille $a_1 = 410nm$. Un défaut ponctuel est introduit dans ce guide en élargissant la période longitudinale du cristal sur une petite distance (2 périodes) et en gardant la période transversale constante de façon à conserver l'accord entre les mailles, voir Figure 7.1(b). *Une déformation de seulement* $10nm$ *(*$a_2 = 420nm$*) forme une cavité dont le facteur de qualité vaut* 600 000 [Son05].

Ces deux travaux illustrent parfaitement l'impact d'un léger changement de la

géométrie entourant la cavité sur l'efficacité du confinement de la lumière. Les auteurs ont interprété leurs résultats en s'appuyant sur une analyse globale du mode basée sur le calcul de la transformée de Fourier du champ [Aka03a, Son05]. Dans cette approche, le calcul tridimensionnel complet du mode est réalisé en utilisant la FDTD. Après avoir rappelé quelques notions d'électromagnétisme concernant le facteur de qualité d'une cavité, nous discutons en détail cette interprétation, dans la section 7.3, en insistant sur son caractère global qui n'apporte en fait que peu d'informations sur l'origine physique du confinement de la lumière. Par opposition, nous présentons dans la section 7.4 un modèle Fabry-Perot qui identifie individuellement les paramètres physiques dont dépend le confinement.

7.2 Rappels d'électromagnétisme sur le facteur de qualité d'une cavité

Dans cette section, nous définissons tout d'abord les modes propres d'une cavité à l'aide du concept de fréquence complexe. La partie réelle correspond à la fréquence propre du mode et la partie imaginaire correspond à sa durée de vie. Nous rappelons ensuite que la durée de vie peut s'exprimer à l'aide d'un bilan énergétique, en fonction de l'énergie électromagnétique contenue dans un volume et de la puissance qui s'en échappe. L'analyse du spectre angulaire de cette puissance constitue le diagramme de rayonnement de la cavité.

7.2.1 Equations de Maxwell dans un milieu matériel

Dans un milieu matériel, les équations de Maxwell vérifiées par une onde électromagnétique monochromatique de fréquence ω sont :

$$\vec{\nabla}.\vec{B} = 0, \tag{7.1}$$
$$\vec{\nabla}.\vec{D} = \rho, \tag{7.2}$$
$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = i\omega\vec{B}, \tag{7.3}$$
$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{j} - i\omega\vec{D}. \tag{7.4}$$

Dans ces équations, ρ et $\vec{j}$ sont respectivement les densités volumiques de charges et de courants libres, et les vecteurs $\vec{E}$, $\vec{H}$, $\vec{D}$ et $\vec{B}$ sont les amplitudes complexes des champs, définies de la façon suivante :

$$\vec{\mathcal{H}}(\vec{r},t) = \mathrm{Re}\left[\vec{H}(\vec{r})e^{-i\omega t}\right]. \tag{7.5}$$

Nous considérons dans la suite des milieux linéaires, isotropes, inhomogènes et sans pertes dont les relations constitutives sont

$$\vec{D}(\vec{r}) = \varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}), \tag{7.6}$$
$$\vec{B}(\vec{r}) = \mu_0\mu(\vec{r})\vec{H}(\vec{r}), \tag{7.7}$$

où les fonctions réelles $\varepsilon(\vec{r})$ et $\mu(\vec{r})$ sont respectivement la permittivité relative et la perméabilité relative du milieu.

Dans l'optique de réaliser des bilans d'énergie, nous sommes intéressés par les moyennes temporelles de la densité locale d'énergie électromagnétique et du vecteur de Poynting. En régime harmonique et compte tenu des équations 7.6 et 7.7, ces moyennes s'expriment de la façon suivante [Jac74] :

$$\langle u \rangle = \frac{1}{4}\varepsilon_0\varepsilon|E|^2 + \frac{1}{4}\mu_0\mu|H|^2, \tag{7.8}$$

$$\langle \vec{P} \rangle = \frac{1}{2}\,\mathrm{Re}\Big(\vec{E} \wedge \vec{H}^*\Big)\,. \tag{7.9}$$

Dans toute la suite, nous omettrons les crochets faisant référence à la moyenne temporelle pour simplifier les notations.

7.2.2 Définition d'un mode propre

Considérons une structure définie par une certaine distribution $(\varepsilon(\vec{r}), \mu(\vec{r}))$ de permittivité et de perméabilité relatives. Nous définissons les modes de cette structure de la façon suivante :

> *Les modes propres de la structure sont les triplets $(\vec{E}, \vec{H}, \omega)$ qui vérifient les équations de Maxwell en l'absence de sources ainsi que les conditions d'ondes sortantes.*

Les modes propres de l'objet sont donc solutions des équations

$$\vec{\nabla}.(\mu\vec{H}) = 0, \tag{7.10}$$

$$\vec{\nabla}.(\varepsilon\vec{E}) = 0, \tag{7.11}$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = i\omega\mu_0\mu\vec{H}, \tag{7.12}$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon\vec{E}. \tag{7.13}$$

Cette définition montre que *l'excitation des modes d'une structure se traduit par des résonances*. En effet, une source monochromatique de fréquence proche de la fréquence du mode et placée au voisinage d'un ventre de champ produit un champ diffracté résonant semblable au mode. C'est le cas par exemple de la transmission d'une cavité Fabry-Perot, qui présente des résonances centrées sur les différentes fréquences propres.

Les modes d'une structure sans pertes possèdent une durée de vie infinie. La réponse spectrale d'un tel système à l'excitation d'une source polychromatique est donc un ensemble de fonctions de Dirac $\delta(\omega - \omega_0)$ centrées sur les fréquences propres de la structure. Lorsque la structure possède des pertes, la durée de vie des modes devient finie. Par conséquent, *les résonances s'élargissent spectralement* et deviennent des lorentziennes $\mathcal{L}(\omega)$ centrées sur ω_0 et dont les largeurs à mi-hauteur $\Delta\omega$ définissent les facteurs de qualité Q des résonances :

$$\mathcal{L}(\omega) = \frac{\mathcal{L}_{max}}{1 + \dfrac{4Q^2}{\omega_0^2}(\omega - \omega_0)^2}. \tag{7.14}$$

Les modes propres d'une structure à pertes sont donc caractérisés par deux quantités physiques, leur *fréquence de résonance* ω_0 et leur *facteur de qualité* Q qui représente une mesure des pertes et qui est lié à la durée de vie τ par la relation $\tau = \frac{Q}{\omega_0}$. En réécrivant l'expression de la lorentzienne sous la forme

$$\mathcal{L}(\omega) = \frac{\mathrm{Im}(\tilde{\omega})^2 \mathcal{L}_{max}}{|\omega - \tilde{\omega}|^2}, \tag{7.15}$$

nous faisons apparaître la fréquence complexe $\tilde{\omega}$ du mode, définie par la relation

$$\tilde{\omega} = \omega_0 - i\frac{\omega_0}{2Q}. \tag{7.16}$$

Il est ainsi possible de *regrouper les deux quantités réelles qui caractérisent un mode propre en une seule quantité complexe.* La dépendance temporelle du champ étant en $\exp(-i\omega t)$, la partie imaginaire de $\tilde{\omega}$ est nécessairement négative et elle est liée à la durée de vie τ du mode par la relation

$$\mathrm{Im}(\tilde{\omega}) = -\frac{1}{2\tau} = -\frac{\omega_0}{2Q}. \tag{7.17}$$

L'équation 7.17 définit le facteur de qualité du mode à partir de sa fréquence complexe qui est solution des équations 7.10 à 7.13.

7.2.3 Définition énergétique du facteur de qualité

Nous allons voir maintenant que la partie imaginaire de la fréquence complexe peut être exprimée en fonction de la densité d'énergie électromagnétique u et du vecteur de Poynting $\vec{P}$ du mode. Considérons pour cela une cavité quelconque définie par une certaine distribution de permittivité et de perméabilité relatives $(\varepsilon(\vec{r}), \mu(\vec{r}))$, voir Figure 7.2. Considérons deux modes de la structure $(\vec{E}_1, \vec{H}_1, \tilde{\omega}_1)$ et $(\vec{E}_2, \vec{H}_2, \tilde{\omega}_2)$ et appliquons le théorème de Green-Ostrogradski au vecteur $\vec{E}_1 \wedge \vec{H}_2 - \vec{H}_1 \wedge \vec{E}_2$ *dans un volume* $\mathcal{V}$ *quelconque.* En utilisant les équations 7.12 et 7.13 vérifiées par les deux modes, il est facile de dériver l'égalité suivante, appelée *théorème de réciprocité de Lorentz* :

$$\oint_{\mathcal{S}} \left(\vec{E}_1 \wedge \vec{H}_2 - \vec{H}_1 \wedge \vec{E}_2\right).\mathrm{d}\vec{S} = [i\tilde{\omega}_1 + i\tilde{\omega}_2] \int_{\mathcal{V}} \left(\varepsilon_0 \varepsilon \vec{E}_1.\vec{E}_2 + \mu_0 \mu \vec{H}_1.\vec{H}_2\right) \mathrm{d}^3\vec{r}, \tag{7.18}$$

où $\mathcal{S}$ est la surface fermée délimitant le volume $\mathcal{V}$.

Si le triplet $(\vec{E}, \vec{H}, \tilde{\omega})$ vérifie les équations 7.10 à 7.13, alors le triplet $(\vec{E}^*, \vec{H}^*, \tilde{\omega}^*)$ les vérifie également[1]. En appliquant l'équation 7.18 à ces deux solutions des équations de Maxwell sans sources, on obtient

[1] C'est ici qu'intervient l'hypothèse que les milieux sont sans pertes, c'est-à-dire avec une permittivité ε et une perméabilité μ réelles.

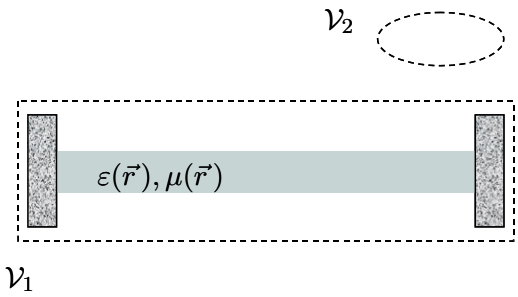

Figure 7.2: *Illustration schématique d'une cavité formée d'une distribution* $(\varepsilon(\vec{r}), \mu(\vec{r}))$ *de permittivité et de perméabilité. Les deux volumes* $\mathcal{V}_1$ *et* $\mathcal{V}_2$ *peuvent être utilisés pour appliquer le théorème de réciprocité de Lorentz.*

$$\oint_{\mathcal{S}} \left(\vec{E} \wedge \vec{H}^* - \vec{H} \wedge \vec{E}^*\right).\mathrm{d}\vec{S} = [i\tilde{\omega} - i\tilde{\omega}^*] \int_{\mathcal{V}} \left(\varepsilon_0 \varepsilon |E|^2 + \mu_0 \mu |H|^2\right) \mathrm{d}^3\vec{r}. \tag{7.19}$$

Comme le terme sous l'intégrale du membre de gauche vaut $2\mathrm{Re}(\vec{E} \wedge \vec{H}^*)$, l'équation 7.19 peut s'exprimer en fonction de l'énergie électromagnétique U contenue dans le volume $\mathcal{V}$ et de la puissance Φ sortant à travers la surface $\mathcal{S}$,

$$\Phi = -2\mathrm{Im}(\tilde{\omega})U, \tag{7.20}$$

$$\text{avec} \quad U = \int_{\mathcal{V}} u(\vec{r})\, \mathrm{d}^3\vec{r}, \tag{7.21}$$

$$\text{et} \quad \Phi = \oint_{\mathcal{S}} \vec{P}.\mathrm{d}\vec{S}, \tag{7.22}$$

Les équations 7.17 et 7.20 montrent que *le facteur de qualité du mode peut s'exprimer en fonction de l'énergie électromagnétique contenue dans le volume* $\mathcal{V}$ *et de la puissance sortant de ce volume* :

$$Q = \omega_0 \frac{U}{\Phi} = \omega_0 \frac{\displaystyle\int_{\mathcal{V}} u(\vec{r})\, \mathrm{d}^3\vec{r}}{\displaystyle\oint_{\mathcal{S}} \vec{P}.\mathrm{d}\vec{S}}. \tag{7.23}$$

Il est important de noter que le théorème de réciprocité de Lorentz, et donc l'équation 7.23, s'applique à tout volume $\mathcal{V}$. Celui-ci peut englober la structure, comme c'est le cas du volume $\mathcal{V}_1$ de la Figure 7.2, ou être choisi de façon totalement arbitraire, comme c'est le cas du volume $\mathcal{V}_2$ de la Figure 7.2.

7.2.4 Diagramme de rayonnement de la cavité

Nous considérons ici le cas d'une microcavité à cristaux photoniques gravée dans une membrane, voir Figure 7.3, mais le raisonnement qui suit peut facilement être étendu à une géométrie quelconque. Le facteur de qualité de la cavité peut être

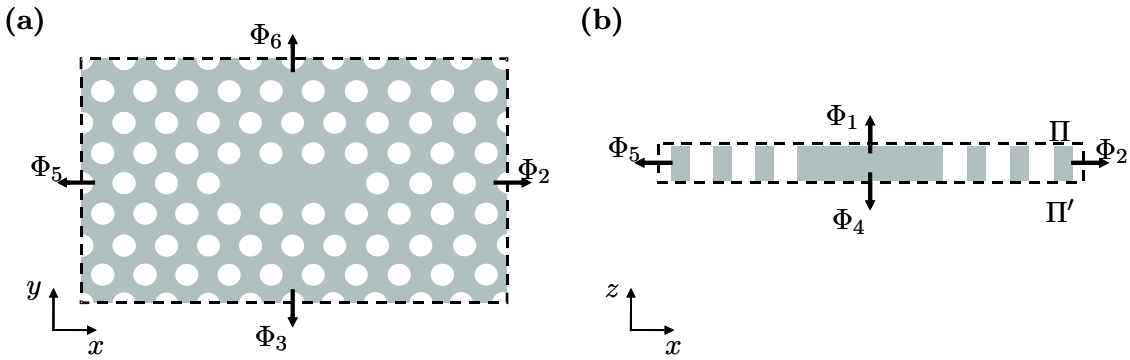

Figure 7.3: *Puissance s'échappant d'une microcavité à cristaux photoniques. (a) Vue de dessus et (b) vue de côté de la cavité considérée. Les pointillés délimitent la boîte rectangulaire utilisée pour calculer Q. La puissance s'échappant de la cavité est la somme des 6 flux Φ_i, $i = 1 \ldots 6$, sortant par chacune des 6 faces du parallélépipède entourant la structure. Les 2 flux Φ_1 et Φ_4 s'expriment en fonction de la transformée de Fourier du champ dans les plans Π et Π'.*

calculé en appliquant l'équation 7.23 à la boîte rectangulaire représentée sur la Figure 7.3 :

$$Q = \omega_0 \frac{U}{\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4 + \Phi_5 + \Phi_6}, \tag{7.24}$$

où les flux Φ_i sont les flux du vecteur de Poynting sortant à travers les 6 faces du parallélépipède. Du fait de la symétrie de la cavité et de la boîte, Φ_i=Φ_{i+3}.

Nous supposons que le cristal photonique entourant la cavité est infini. Ainsi, en faisant tendre les quatre faces du parallélépipède x = constante et y = constante vers l'infini, les quatre flux Φ_2, Φ_3, Φ_5 et Φ_6 s'annulent puisque le champ électromagnétique est nul à l'intérieur du cristal photonique. L'équation 7.24 se réduit ainsi à

$$Q = \omega_0 \frac{U}{2\Phi_1}, \tag{7.25}$$

où Φ_1 est le flux du vecteur de Poynting à travers le plan Π, voir Figure 7.3.

La durée de vie du mode n'est donc limitée que par l'énergie s'échappant verticalement à travers les deux plans Π et Π'. Le spectre angulaire de ces pertes verticales, qui s'obtient en utilisant la transformée de Fourier du champ dans le plan Π, constitue le diagramme de rayonnement de la cavité.

Dans tout le demi-espace uniforme $z > \frac{h}{2}$, le champ électromagnétique peut s'écrire comme une superposition continue d'ondes planes [Jac74]

$$\vec{E}(x, y, z > h/2) = \iint_{\mathbb{R}^2} \vec{\tilde{E}}(k_x, k_y, z = h/2)\, e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y\,. \tag{7.26}$$

Dans l'équation 7.26, l'amplitude de chaque onde plane est donnée par la transformée de Fourier du champ dans le plan Π,

$$\vec{\tilde{E}}(k_x, k_y, z = h/2) = \iint_{\mathbb{R}^2} \vec{E}(x, y, z = h/2)\, e^{-i(k_x x + k_y y)} \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y \,, \tag{7.27}$$

et la composante suivant z du vecteur d'onde de chaque onde plane vérifie

$$k_z = \begin{cases} \sqrt{k_0^2 - k_x^2 - k_y^2} & \text{si} \quad k_0^2 \geqslant k_x^2 + k_y^2 \\ i\sqrt{k_x^2 + k_y^2 - k_0^2} & \text{si} \quad k_0^2 < k_x^2 + k_y^2 \end{cases} \tag{7.28}$$

où $k_0 = \frac{\omega_0}{c}$. La décomposition en ondes planes de l'équation 7.26 contient donc à la fois des ondes propagatives pour lesquelles k_z est réel et des ondes évanescentes pour lesquelles k_z est imaginaire pur.

D'après l'équation 7.26, le vecteur de Poynting dans le demi-espace $z > \frac{h}{2}$ peut s'écrire comme la superposition des vecteurs de Poynting $\vec{P}(k_x, k_y)$ des ondes planes d'amplitudes $\tilde{E}(k_x, k_y, z = h/2)$ et de vecteurs d'onde $\vec{k} = k_x\vec{u}_x + k_y\vec{u}_y + k_z\vec{u}_z$:

$$\vec{P} = \iint_{\mathbb{R}^2} \vec{P}(k_x, k_y) \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y \,, \tag{7.29}$$

$$\text{avec} \quad \vec{P}(k_x, k_y) = \frac{1}{2}\varepsilon_0 c |\tilde{E}(k_x, k_y, z = h/2)|^2 \frac{\mathrm{Re}(\vec{k})}{k_0}. \tag{7.30}$$

Le vecteur de Poynting est donc uniforme dans tout le demi-espace $z > \frac{h}{2}$ et dépend de la transformée de Fourier du champ dans le plan Π.

Finalement, le flux Φ_1 du vecteur de Poynting sortant à travers le plan Π est donné par le produit de la surface S du plan par la composante P_z du vecteur de Poynting :

$$\Phi_1 = P_z.S = \frac{S\varepsilon_0 c}{2k_0} \iint_{\mathbb{R}^2} |\tilde{E}(k_x, k_y, z = h/2)|^2 \,\mathrm{Re}(k_z) \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y \,. \tag{7.31}$$

Du fait de la partie réelle, le domaine d'intégration se limite au cône de lumière $k_x^2 + k_y^2 \leqslant k_0^2$, ce qui signifie que *seules les ondes planes propagatives interviennent dans le calcul des pertes verticales.* L'équation 7.31 se réécrit donc sous la forme

$$\Phi_1 = \frac{S\varepsilon_0 c}{2k_0} \iint_{k_x^2 + k_y^2 \leqslant k_0^2} |\tilde{E}(k_x, k_y, z = h/2)|^2 \sqrt{k_0^2 - k_x^2 - k_y^2}\, \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y \,. \tag{7.32}$$

Cette équation relie les pertes verticales à la transformée de Fourier du champ dans un plan situé à l'extérieur de la structure. L'équation 7.32, qui ne constitue ni plus ni moins que le *diagramme de rayonnement de la cavité*, exprime la quantité d'énergie qui s'échappe de la cavité dans chaque direction (k_x, k_y), autrement dit *le spectre angulaire des pertes.*

7.3 Critique de l'approche basée sur l'analyse de Fourier du mode

L'analyse de Fourier du mode n'est pas la seule approche théorique visant à interpréter le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques, mais nous avons choisi de nous y intéresser en détail pour deux raisons. D'une part, son principe de base est le même que celui de toutes les autres approches, c'est-à-dire l'analyse globale du mode de la cavité [Joh01, Vuc02a, Sri02, Aka03a, Kar04]. D'autre part, c'est l'approche la plus répandue dans la littérature, peut-être parce que les microcavités à l'état de l'art ont toutes été analysées à l'aide de cette approche [Aka03a, Sri04, Son05].

Historiquement, les premiers travaux sur les cavités à cristaux photoniques 2D ayant utilisé cette approche basée sur l'analyse de Fourier du mode ont été effectués au Caltech [Vuc02a, Sri02]. Mais ce sont les facteurs de qualité records obtenus par le groupe de l'Université de Kyoto [Aka03a] qui ont marqué le début de l'utilisation systématique de l'analyse de Fourier pour interpréter le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques 2D [Ryu03, Zha04, Sri04, Son05].

Dans cette section, nous prenons un peu de recul pour porter un regard critique sur les informations que fournit réellement l'analyse de Fourier. Nous commençons par rappeler son principe [Sri02, Aka03a]. Ensuite, en nous appuyant sur les rappels d'électromagnétisme de la section 7.2, nous formulons deux critiques à l'encontre de l'analyse de Fourier. D'une part, *elle ne constitue pas une approche prédictive* puisqu'elle ne permet ni de prédire la valeur du facteur de qualité, ni d'obtenir des informations sur l'origine physique des pertes qui le limitent. D'autre part, dans sa version la plus utilisée, *elle cache des approximations pas toujours vérifiées*. Ce deuxième point est illustré par deux contre-exemples simples qui mettent en défaut les conclusions de l'analyse de Fourier [Sau04b, Asa04].

7.3.1 Présentation de l'analyse de Fourier

L'analyse de Fourier a été détaillée par le groupe de l'Université de Kyoto pour une cavité à cristaux photoniques 2D gravée dans une membrane [Aka03a]. Nous reprenons ici cette présentation. L'analyse de Fourier repose sur la transformée de Fourier spatiale du champ électrique dans un plan situé à l'intérieur de la cavité, au centre de la membrane. En interprétant cette transformée de Fourier comme une décomposition en ondes planes et en considérant que la composante du vecteur d'onde parallèle à l'interface de la membrane est conservée, les auteurs arrivent à la conclusion que les pertes radiatives sont dues aux composantes de Fourier du champ qui vérifient l'inégalité

$$k_x^2 + k_y^2 \leqslant k_0^2. \tag{7.33}$$

Autrement dit, pour augmenter le facteur de qualité d'un mode, il faut diminuer les composantes de Fourier de son champ situées sous le cône de lumière de l'air. Cela peut être fait en modifiant l'enveloppe du champ. La Figure 7.4, qui correspond à la Figure 2 de l'article [Aka03a], montre qu'un mode dont l'enveloppe est une fonction

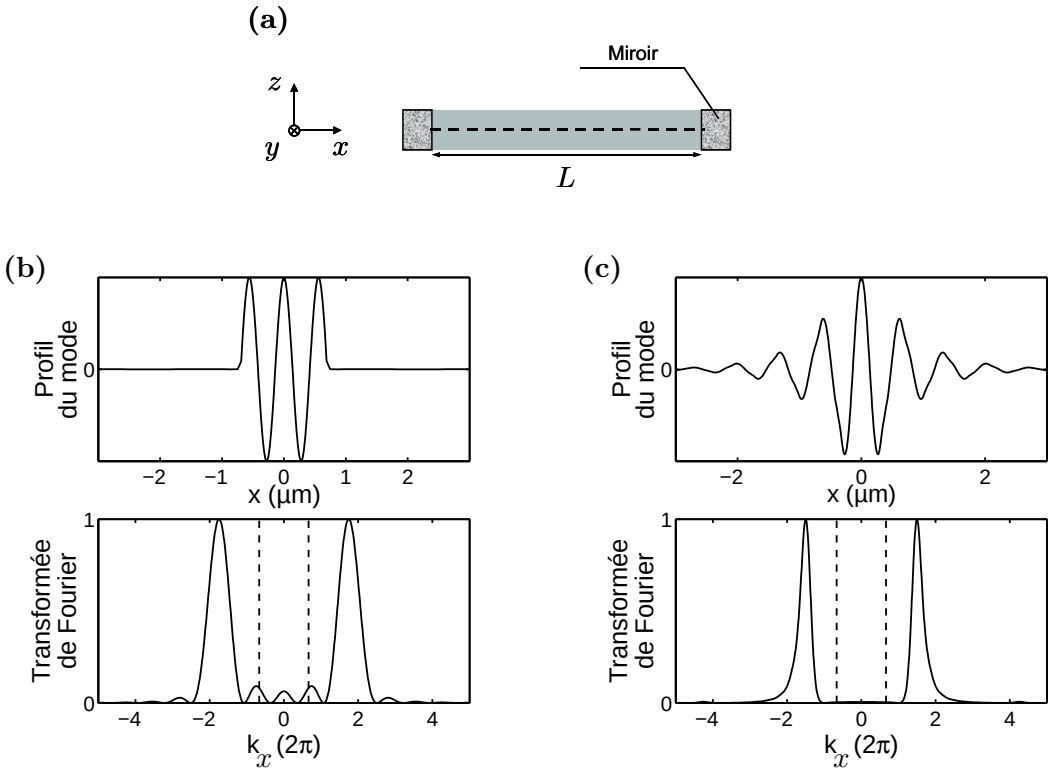

Figure 7.4: *Principe de l'analyse de Fourier. Cette figure reprend la Figure 2 de l'article [Aka03a]. (a) Schéma de la cavité considérée, formée d'une membrane diélectrique fermée par deux miroirs. Le champ est étudié dans le plan $z = 0$ représenté par les pointillés horizontaux. (b) Profil du champ électrique E_y et module carré de sa transformée de Fourier pour des miroirs en métal parfait. L'enveloppe du champ est une fonction rectangle. (c) Profil du champ électrique E_y avec une enveloppe moins abrupte et module carré de sa transformée de Fourier. Les lignes verticales en pointillés délimitent le cône de lumière.*

rectangle possède beaucoup plus de composantes de Fourier sous le cône qu'un mode dont l'enveloppe est moins abrupte. A partir de cette constatation, les auteurs ont énoncé une règle de conception : « we have described the important design rule that light should be confined gently to obtain high Q factors ». Autrement dit, en modifiant la géométrie de façon à rendre l'enveloppe du mode moins « abrupte », on augmente le facteur de qualité.

7.3.2 Critique du choix de la position du plan

Comme nous venons de le voir, l'analyse de Fourier est basée sur l'interprétation de la transformée de Fourier du champ dans un plan comme une décomposition en ondes planes. En toute rigueur, cette interprétation de la transformée de Fourier du champ n'est vraie que dans un plan situé à l'extérieur de la cavité, dans un milieu homogène. Or, dans sa version la plus utilisée, l'analyse de Fourier est réalisée dans le plan situé au centre de la membrane [Sri02, Aka03a]. L'interprétation du

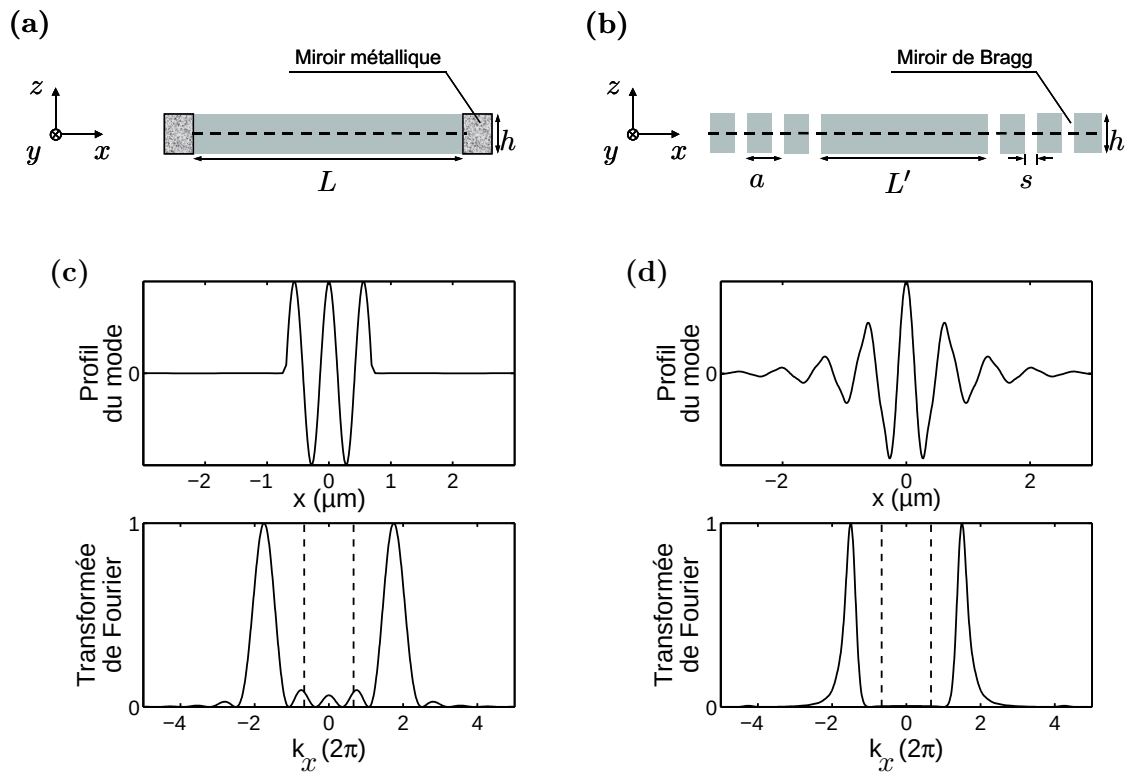

Figure 7.5: *Premier contre-exemple : un confinement plus doux de la lumière dans le plan $z = 0$ ne se traduit pas nécessairement par un plus grand facteur de qualité. (a) Schéma de la cavité de référence avec des miroirs métalliques parfaits. (b) Schéma de la cavité avec des miroirs de Bragg. (c) et (d) Profils du champ électrique E_y et modules carré de leur transformée de Fourier. Les lignes verticales en pointillés délimitent le cône de lumière. L'indice de réfraction de la membrane est $n = 3.4$ et les deux cavités résonnent à $\lambda_0 = 1.5\mu m$. Les paramètres géométriques sont $h = 200nm$, $L = 1.38\mu m$, $L' = 650nm$, $s = 100nm$ et $a = 350nm$.*

confinement de la lumière basée sur l'analyse de Fourier est donc en général fausse. Elle peut s'avérer approchée dans certains cas particuliers, mais les approximations nécessaires n'ont jamais été clairement discutées dans la littérature. Les deux contre-exemples qui suivent illustrent ce point en mettant en défaut les conclusions de l'analyse de Fourier.

Nous considérons comme référence la même cavité que celle considérée par les auteurs de [Aka03a], une cavité bidimensionnelle fermée par deux miroirs en métal parfait, voir Figure 7.5(a). Nous nous plaçons dans le cas de polarisation TE, c'est-à-dire que le champ électrique $\vec{E}$ est dirigé suivant y. Le profil du mode et sa transformée de Fourier sont représentés sur la Figure 7.5(c). L'enveloppe du mode est une fonction rectangle et par conséquent les composantes de Fourier du champ sous le cône de lumière sont importantes.

Premier contre-exemple

Considérons la cavité fermée par deux miroirs de Bragg qui résonne à la même longueur d'onde que la cavité de référence, voir Figure 7.5(b). Du fait de la réflexion distribuée, le confinement de la lumière est plus « doux » : l'enveloppe du mode est moins abrupte aux extrémités de la cavité et la transformée de Fourier possède beaucoup moins de composantes sous le cône de lumière, voir Figure 7.5(d). On s'attend donc à ce que le facteur de qualité de la cavité à miroirs distribués soit beaucoup plus grand que celui de la cavité à miroirs métalliques. Il n'en est rien. Les deux facteurs de qualité sont comparables et valent respectivement $Q_{metal} = 350$ et $Q_{Bragg} = 450$.

Ainsi, *un confinement plus doux de la lumière à l'intérieur de la cavité ne se traduit pas nécessairement par un plus grand facteur de qualité.*

Deuxième contre-exemple

Le deuxième contre-exemple montre exactement le phénomène inverse : *deux cavités dont les profils des modes dans un plan sont identiques peuvent avoir des facteurs de qualité complètement différents.* Nous considérons la même cavité de référence, voir Figures 7.6(a) et 7.6(c). Nous conservons les miroirs métalliques mais nous augmentons leur épaisseur de façon à ce qu'ils s'étendent de part et d'autre de la membrane, voir Figure 7.6(b). Le mode de la cavité reste quasiment inchangé durant l'opération. Sa transformée de Fourier est donc identique, voir Figure 7.6(d), et pourtant le facteur de qualité de la cavité a été multiplié par un facteur 300 pour une épaisseur $e = 500nm$. Plus l'épaisseur e est grande et plus le facteur de qualité de la cavité augmente.

Une telle augmentation du facteur de qualité peut s'expliquer en considérant la réflexion du mode fondamental du guide planaire sur les miroirs métalliques. Ce mode est formé d'un cosinus et de deux exponentielles décroissantes de part et d'autre de la membrane. Dans la cavité de la Figure 7.6(a), la queue d'exponentielle est diffractée par les bords du miroir lors de la réflexion, entraînant des pertes d'énergie. Au contraire, dans la cavité de la Figure 7.6(b), une fraction de la queue d'exponentielle étant réfléchie par le miroir, les pertes par diffraction sont moins importantes et le facteur de qualité de la cavité est plus grand. Cette interprétation montre que dans la limite d'un miroir infini, le facteur de qualité de la cavité est infini.

7.3.3 Caractère non-prédictif de l'analyse de Fourier

La critique que nous venons de formuler concernant la version de l'analyse de Fourier la plus répandue dans la littérature peut être détournée facilement en considérant la transformée de Fourier du champ dans un plan situé à l'extérieur de la cavité, comme c'est le cas dans les travaux de J. Vuckovic [Vuc02a]. D'après la section 7.2.4, l'analyse de Fourier s'interprète alors comme le diagramme de rayonnement de la cavité. *Elle fournit donc des informations sur la répartition angulaire des pertes, mais sans faire apparaître leur origine physique.*

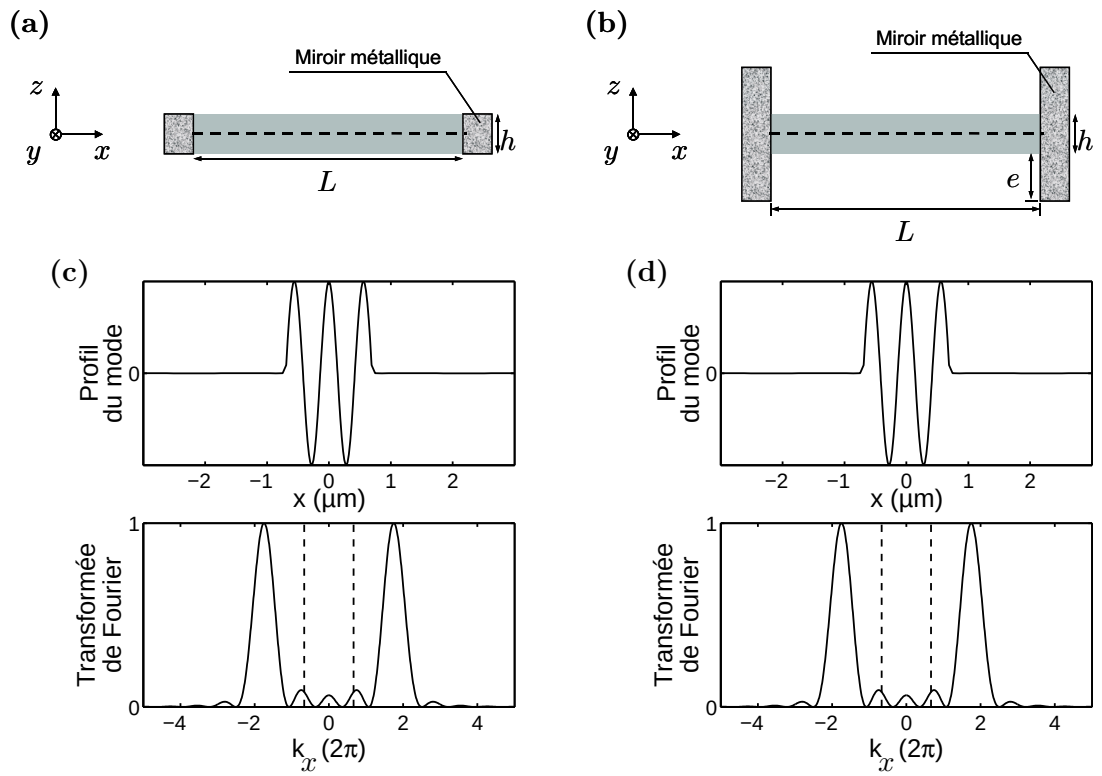

Figure 7.6: *Deuxième contre-exemple : deux cavités dont les profils des modes sont identiques dans le plan $z = 0$ peuvent avoir des facteurs de qualité complètement différents. (a) Schéma de la cavité de référence avec des miroirs métalliques parfaits. (b) Schéma de la cavité avec des miroirs métalliques parfaits allongés. (c) et (d) Profils du champ électrique E_y et modules carré de leur transformée de Fourier. Les lignes verticales en pointillés délimitent le cône de lumière. L'indice de réfraction de la membrane est $n = 3.4$ et les deux cavités résonnent à $\lambda_0 = 1.5\mu m$. Les paramètres géométriques sont $h = 200nm$, $L = 1.38\mu m$, $e = 500nm$.*

Il reste que, quel que soit le plan considéré, l'analyse de Fourier n'est en rien prédictive puisqu'*elle nécessite au préalable le calcul tridimensionnel complet du mode de la cavité*. Dans tous les travaux utilisant cette approche, ce calcul numérique est réalisé à l'aide de la méthode FDTD (Finite Difference Time Domain). En outre, en se limitant à l'étude du champ électromagnétique dans un plan, *l'analyse de Fourier ne permet pas de prédire la valeur du facteur de qualité* puisque ce calcul nécessite l'évaluation de l'énergie électromagnétique U contenue dans un volume, voir équation 7.23.

Ainsi, parmi plusieurs géométries, l'analyse de Fourier permet d'identifier celle dont les pertes sont les plus faibles, globalement ou dans une direction donnée, mais elle ne fournit pas d'intuitions sur la modification de géométrie à apporter pour augmenter le facteur de qualité d'une cavité donnée. L'analyse de Fourier constitue en fait simplement une analyse *a posteriori* du spectre angulaire des pertes d'une cavité.

Nous avons formulé deux critiques importantes concernant l'analyse de Fourier. Tout d'abord, cette analyse est souvent appliquée de façon approximative en considérant la transformée de Fourier du champ au centre de la membrane. Nous avons montré grâce à deux exemples simples que cette façon de procéder est en général fausse et aboutit à des conclusions erronées concernant le confinement de la lumière. Mais même lorsqu'elle est appliquée rigoureusement, l'analyse de Fourier ne permet pas de prédire la valeur du facteur de qualité. Elle constitue une analyse du spectre angulaire des pertes mais ne fournit aucune information sur leur origine physique.

7.4 Modèle Fabry-Perot

Le modèle Fabry-Perot que nous avons développé pour interpréter le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques 2D constitue une approche radicalement différente de l'analyse de Fourier. Au lieu d'appréhender le mode dans sa globalité, le modèle met en avant l'origine physique du confinement, à savoir la réflexion d'une onde guidée sur un miroir. Alors que l'utilisation d'un modèle Fabry-Perot vient naturellement à l'esprit pour analyser une cavité à cristaux photoniques 1D de type air-bridge ou micropilier [Lal03, Lal04b], elle n'avait jamais été étendue au cas d'une cavité à cristaux photoniques 2D avant nos travaux [Sau05b].

Le modèle Fabry-Perot est présenté puis validé dans le cas de la géométrie de la Figure 7.1(a), c'est-à-dire dans le cas de cavités formées en enlevant N trous dans la direction ΓK d'un cristal photonique 2D à maille triangulaire. Le modèle permet d'interpréter en détail les résultats expérimentaux obtenus par le groupe de S. Noda [Aka03a]. Nous mettons ainsi en évidence deux phénomènes physiques qui sont à l'origine de l'augmentation du facteur de qualité induite par le déplacement des trous : une diminution des pertes radiatives à l'interface des miroirs et une diminution de la vitesse de groupe à l'intérieur de la cavité. Nous verrons ensuite rapidement que le modèle Fabry-Perot permet également d'interpréter facilement les résultats expérimentaux obtenus dans la géométrie « double hétérostructure » [Son05].

7.4.1 Présentation du modèle

La cavité considérée est en fait un guide d'onde à cristaux photoniques à une rangée manquante fermé aux deux extrémités par deux miroirs à cristaux photoniques. *Le mode de la cavité est donc principalement formé par les allers - retours du mode de Bloch fondamental du guide entre les deux miroirs*, voir Figure 7.7(a), exactement comme dans une cavité Fabry-Perot classique. Ainsi, dans cette approche, deux quantités physiques suffisent à décrire le confinement de la lumière : la *constante de propagation* $k(\lambda)$ du mode fondamental du guide à cristaux photoniques et son *coefficient de réflexion modale* $r(\lambda) = \sqrt{R(\lambda)}\exp[i\phi_r(\lambda)]$ sur un cristal photonique bidimensionnel, voir Figure 7.7(b). La courbe de dispersion du mode fondamental du guide à cristaux photoniques qu'il faut considérer est représentée sur la Figure 3.2.

Avec ce modèle, l'identification de l'origine physique des pertes est immédiate. Comme le cristal photonique entourant la cavité est infini, les pertes dans le plan de

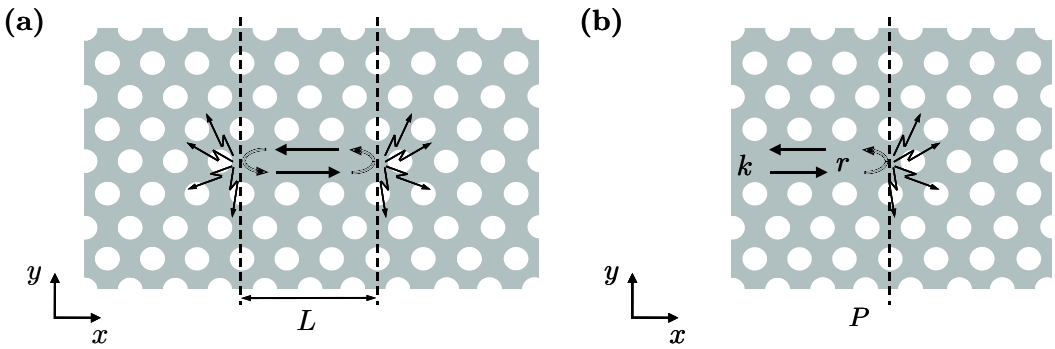

Figure 7.7: *Principe du modèle Fabry-Perot. (a) Le mode de la cavité est formé par les allers-retours du mode de Bloch fondamental du guide à cristaux photoniques entre les deux miroirs. Les seules pertes de la cavité sont les pertes verticales situées à l'interface des miroirs. La longueur de la cavité représentée est $L = 3a$. (b) Problème élémentaire sur lequel repose le modèle : réflexion d'un mode de Bloch guidé de constante de propagation $k(\lambda)$ sur un miroir à cristaux photoniques. L'énergie incidente est soit réfléchie avec un coefficient de réflexion $r(\lambda)$ (calculé dans le plan P) soit diffractée dans l'air de part et d'autre de la membrane.*

la membrane sont nulles et seules les pertes verticales limitent le facteur de qualité. D'autre part, dans l'intervalle spectral considéré, le mode fondamental du guide à cristaux photoniques est sous la ligne de lumière, voir Chapitre 3. La durée de vie du mode est donc limitée uniquement parce que la réflectivité modale $R(\lambda)$ est plus petite que l'unité, la quantité $L(\lambda) = 1 - R(\lambda)$ représentant les inévitables pertes par radiation qui se produisent lorsque le mode de Bloch est réfléchi par les miroirs. *La seule source de pertes présente dans la cavité se situe donc au niveau de l'interface des miroirs*, voir Figure 7.7(a).

Au lieu de considérer la cavité dans sa globalité, le modèle Fabry-Perot est donc basé sur le problème de réflexion représenté sur la Figure 7.7(b). Nous résolvons ce problème en utilisant la méthode modale de Fourier généralisée, comme explicité à la section 3.4. D'un point de vue numérique, la résolution de ce problème est plus simple que le calcul de la cavité complète.

7.4.2 Equations du Fabry-Perot : accord de phase et facteur de qualité

Après avoir résolu numériquement le problème de réflexion de la Figure 7.7(b), le calcul de la longueur d'onde de résonance λ_0 et du facteur de qualité Q de la cavité se fait en appliquant les équations classiques d'un résonateur Fabry-Perot [Col95].

Accord de phase

La longueur d'onde de résonance λ_0 est donnée par une condition d'accord de phase sur le mode de Bloch fondamental du guide à cristaux photoniques. Plus

précisément, la phase totale du mode de Bloch après un demi-tour dans la cavité doit être égale à un multiple de π :

$$\Phi_T(\lambda_0) = k(\lambda_0)L + \phi_r(\lambda_0) = p\pi, \tag{7.34}$$

où $L = Na$ est la longueur de la cavité et p est un entier relatif caractérisant l'ordre du mode considéré.

Facteur de qualité

Nous calculons le facteur de qualité d'une cavité Fabry-Perot en utilisant la longueur d'onde de résonance complexe $\tilde{\lambda}$ liée à la fréquence complexe discutée à la section 7.2.2 par la relation

$$\tilde{\lambda} = \frac{2\pi c}{\tilde{\omega}} = \lambda_0 + i\frac{\lambda_0}{2Q}. \tag{7.35}$$

Tous les calculs qui suivent pourraient être réalisés de manière équivalente en utilisant la fréquence complexe. La longueur d'onde complexe vérifie la condition de résonance du Fabry-Perot

$$R(\tilde{\lambda})e^{2i\Phi_T(\tilde{\lambda})} = 1. \tag{7.36}$$

La partie réelle λ_0 vérifie la condition d'accord de phase donnée par l'équation 7.34 et nous cherchons l'expression de la partie imaginaire qui est liée au facteur de qualité par l'équation 7.35.

Faisons l'hypothèse que le facteur de qualité de la cavité est grand. Les fonctions $R(\tilde{\lambda})$ et $\Phi_T(\tilde{\lambda})$ peuvent être développées à l'ordre 1 autour de λ_0 :

$$R(\tilde{\lambda}) = R(\lambda_0) + i\frac{\lambda_0}{2Q}\left.\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0}, \tag{7.37}$$

$$\Phi_T(\tilde{\lambda}) = \Phi_T(\lambda_0) + i\frac{\lambda_0}{2Q}\left.\frac{\mathrm{d}\Phi_T}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0}. \tag{7.38}$$

En utilisant les expressions 7.37 et 7.38, ainsi que la condition d'accord de phase 7.34, l'équation 7.36 peut être réécrite de la façon suivante :

$$\left[R(\lambda_0) + i\frac{\lambda_0}{2Q}\left.\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0}\right]\exp\left[-\frac{\lambda_0}{Q}\left.\frac{\mathrm{d}\Phi_T}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0}\right] = 1. \tag{7.39}$$

Cette équation montre que la variation de la réflectivité avec la longueur d'onde n'intervient dans le calcul du facteur de qualité qu'à l'ordre 2 en $\frac{1}{Q}$. Ainsi, à l'ordre 1, la résolution de l'équation 7.39 conduit à l'expression suivante du facteur de qualité :

$$Q = \frac{\lambda_0}{\ln[R(\lambda_0)]}\left.\frac{\mathrm{d}\Phi_T}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0} = -\frac{\lambda_0}{1 - R(\lambda_0)}\left.\frac{\mathrm{d}\Phi_T}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0}, \tag{7.40}$$

où nous avons supposé que la réflectivité était proche de 1 à la résonance. D'après l'accord de phase donné par l'équation 7.34, la dérivée de la phase totale Φ_T vaut

$$\left.\frac{\mathrm{d}\Phi_T}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0} = \left.\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0} L + \left.\frac{\mathrm{d}\phi_r}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0} = -\frac{2\pi L}{\lambda_0^2} n_g(\lambda_0) + \left.\frac{\mathrm{d}\phi_r}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0}, \tag{7.41}$$

où $n_g = c/v_g$ est l'indice de groupe du mode de Bloch faisant des allers-retours dans la cavité. Finalement, le facteur de qualité d'une cavité Fabry-Perot est donné par l'expression

$$Q = \frac{\pi}{1 - R(\lambda_0)} \left[2\frac{L}{\lambda_0} n_g(\lambda_0) - \frac{\lambda_0}{\pi} \left.\frac{\mathrm{d}\phi_r}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda_0} \right], \tag{7.42}$$

où le terme proportionnel à la dérivée de la phase du coefficient de réflexion représente la longueur de pénétration de l'onde dans les miroirs distribués.

L'équation 7.42 met en évidence les deux paramètres physiques essentiels qui gouvernent le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques : la réflectivité modale et la vitesse de groupe du mode fondamental du guide. Une première stratégie pour augmenter le facteur de qualité d'une cavité est donc d'*utiliser les meilleurs miroirs possibles*, c'est-à-dire des miroirs dont les pertes radiatives sont faibles.

Une alternative est de *ralentir la lumière dans la cavité*. Les photons ne peuvent s'échapper de la cavité qu'au niveau des miroirs. Mais plus les photons mettent de temps pour parcourir la distance séparant les deux miroirs, plus la durée de vie du mode sera grande, même si les pertes radiatives des miroirs sont importantes. Le facteur entre crochets dans l'équation 7.42 représente le temps de parcours des photons entre les deux miroirs, compte tenu de leur longueur de pénétration dans le cristal photonique.

Dans un guide d'onde classique, la vitesse de groupe du mode est comparable à sa vitesse de phase et le temps de parcours des photons n'a pas un impact important sur le facteur de qualité. C'est la raison pour laquelle, dans les ouvrages de référence [Col95, Yeh98], l'indice de groupe n_g est pratiquement toujours remplacé par l'indice de réfraction dans l'équation 7.42. En revanche, dans un guide d'onde à cristaux photoniques, la vitesse de groupe peut être très faible, voir Chapitre 3 et [Not01], et par conséquent le temps de parcours des photons peut devenir très grand. Le fait de mettre en avant ce phénomène physique est un résultat important du modèle Fabry-Perot.

7.4.3 Validation du modèle

Pour valider le modèle Fabry-Perot, nous considérons trois cavités formées de $N = 1, 2$ et 3 trous manquants. Les paramètres géométriques considérés sont les mêmes que ceux donnés dans [Aka03a], voir section 7.1. L'indice de réfraction de la membrane de silicium est $n = 3.42$; il est supposé indépendant de la fréquence dans la gamme spectrale étudiée. Les longueurs d'onde de résonance et les facteurs de qualité de ces cavités sont représentés sur la Figure 7.8 en fonction du déplacement d des deux trous extrêmes. Les courbes en trait plein correspondent aux prédictions

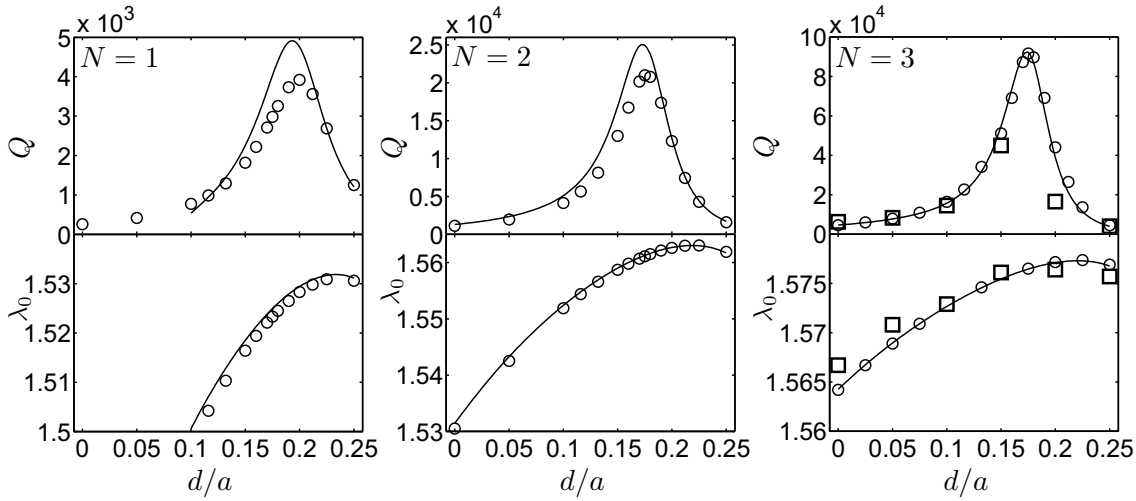

Figure 7.8: *Validation du modèle Fabry-Perot. Facteurs de qualité et longueurs d'onde de résonance en fonction du déplacement normalisé d/a pour trois cavités avec $N = 1$, 2 et 3 trous manquants. Courbes en trait plein, prédictions du modèle ; cercles, calculs électromagnétiques rigoureux ; carrés, résultats expérimentaux du groupe de Kyoto [Aka03a]. Pour $N = 1$, les prédictions du modèle ne sont pas représentées pour $d < 0.1a$. Aux longueurs d'onde de résonance correspondantes, le mode de Bloch fondamental du guide à une rangée manquante se situe au-dessus de la ligne de lumière, voir Figure 3.2.*

du modèle Fabry-Perot obtenues en appliquant les équations 7.34 et 7.42 et les cercles correspondent à un calcul électromagnétique rigoureux de la longueur d'onde complexe, réalisé en utilisant la méthode modale de Fourier généralisée présentée au Chapitre 1. Un très bon accord est obtenu, à la fois pour la longueur d'onde de résonance et pour le facteur de qualité.

Pour la cavité formée de $N = 3$ trous manquants, les prédictions du modèle Fabry-Perot sont également comparées avec les résultats expérimentaux obtenus par le groupe de l'Université de Kyoto [Aka03a]. Là encore, un très bon accord est obtenu, voir Figure 7.8. Les calculs montrent que le facteur de qualité est multiplié par un facteur 20 pour un déplacement $d \approx 0.18a$, une valeur légèrement plus grande que le déplacement $d = 0.15a$ pour lequel une augmentation d'un facteur 9 a été observée expérimentalement. L'accord entre le calcul et les résultats expérimentaux, sachant que les paramètres géométriques n'ont pas été ajustés, montre que les inévitables pertes radiatives dues aux imperfections de fabrication sont maintenues à un niveau très faibles dans l'expérience.

La Figure 7.8 valide le modèle Fabry-Perot et illustre deux points importants. D'une part, les effets du déplacement des trous sont les mêmes pour les trois cavités : un décalage de la longueur d'onde de résonance vers le rouge et un pic asymétrique du facteur de qualité dont le maximum Q_{max} est obtenu pour $d \approx 0.18a$. La valeur de Q_{max} augmente rapidement avec la longueur de la cavité, passant de 4 000 pour $N = 1$ à 92 000 pour $N = 3$. Comme nous le verrons dans la section suivante, ces caractéristiques s'interprètent facilement grâce au modèle Fabry-Perot.

D'autre part, les prédictions du modèle sont précises même pour une cavité ultime formée en enlevant un seul trou dans le cristal photonique. Cette constatation est assez surprenante. En effet, le modèle Fabry-Perot suppose que le transport de l'énergie entre les deux miroirs n'est assuré que par le mode fondamental propagatif du guide à cristaux photoniques, les effets des autres modes de Bloch du guide étant négligés. Ces modes de Bloch sont tous évanescents dans l'intervalle spectral considéré, ce qui assure que leur impact sur la durée de vie du mode diminue lorsque N augmente. Cependant, cela n'exclut pas l'apparition d'un couplage évanescent dans les toutes petites cavités. Il a en effet été démontré que, dans certaines conditions, le transport de l'énergie par ondes évanescentes n'est pas négligeable et peut même modifier considérablement les performances de toutes petites cavités de type air-bridge [Lal04b], permettant ainsi d'obtenir de grands facteurs de qualité avec des miroirs de qualité moyenne. La Figure 7.8 montre que cet effet peut être négligé dans la géométrie bidimensionnelle considérée ici.

En conclusion, le modèle Fabry-Perot prédit quantitativement les propriétés électromagnétiques des microcavités à cristaux photoniques bidimensionnels, y compris les cavités ultimes formées en enlevant un seul trou dans le cristal photonique. Nous allons maintenant utiliser le modèle pour interpréter en détail les effets du déplacement des trous observés dans [Aka03a].

7.4.4 Interprétation de l'effet du déplacement des trous

Nous utilisons le modèle Fabry-Perot pour interpréter les effets du déplacement des deux trous extrêmes : un décalage de la longueur d'onde de résonance vers le rouge et une augmentation du facteur de qualité, voir Figure 7.8.

Décalage de la longueur d'onde de résonance vers le rouge

Le décalage de la longueur d'onde de résonance s'interprète simplement en considérant la condition d'accord de phase du Fabry-Perot, voir équation 7.34. La Figure 7.9 montre la variation de la phase totale Φ_T en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs du déplacement, $d = 0, 0.05, 0.1, 0.15$ et $0.25a$, et pour une cavité avec $N = 3$. Comme l'ordre p du mode est le même pour toutes les valeurs de d ($p = 4$), le déplacement des trous se traduit par un décalage vers le rouge de la longueur d'onde de résonance λ_0. L'origine physique de ce décalage est une augmentation de la longueur effective $L + 2d$ de la cavité.

Augmentation du facteur de qualité

La variation du facteur de qualité avec le déplacement des trous s'interprète entièrement en considérant les variations des quantités physiques présentes dans l'équation 7.42. Ces variations sont représentées sur les Figures 7.10(a), 7.10(b) et 7.10(c).

Le premier mécanisme physique est *une augmentation progressive de la réflectivité modale* à la résonance $R(\lambda_0)$, voir Figure 7.10(c). Cette augmentation est suivie d'une chute rapide pour $d > 0.18a$ qui explique l'observation d'un pic asymétrique

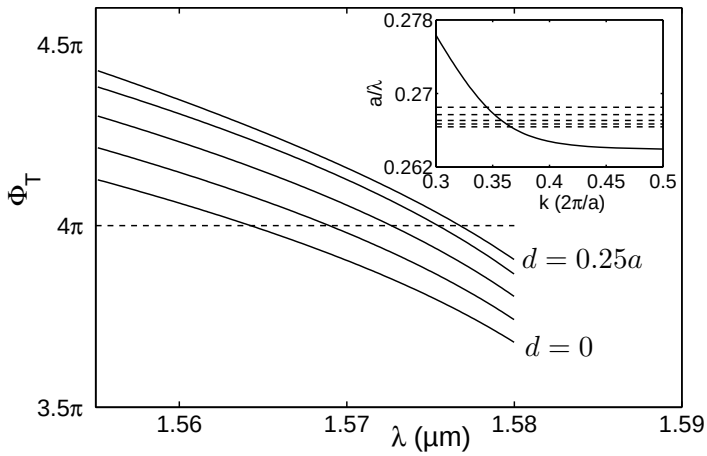

Figure 7.9: *Mise en évidence du décalage de la longueur d'onde de résonance. La phase totale Φ_T du mode de Bloch a été représentée pour $d = 0, 0.05, 0.1, 0.15$ et $0.25a$ et pour $N = 3$. L'accord de phase est obtenu pour $\Phi_T(\lambda_0) = 4\pi$ (pointillés horizontaux). L'encart montre un agrandissement de la courbe de dispersion du mode de Bloch. Les lignes horizontales en pointillés correspondent aux longueurs d'onde de résonances des 5 cavités considérées. La valeur de d augmente de haut en bas.*

pour le facteur de qualité. Nous comparons sur la Figure 7.10(d) les réflectivités $R(\lambda)$ du miroir à cristal photonique pour deux déplacements différents, $d = 0$ et $d = 0.18a$. L'intervalle spectral considéré couvre toute la gamme des longueurs d'onde de résonance des trois cavités. Les deux tendances importantes sont une augmentation de la réflectivité avec la longueur d'onde et une augmentation supplémentaire due au déplacement du trou qui se traduit par une *diminution des pertes radiatives d'environ un facteur 5 sur tout le spectre.*

L'augmentation de la réflectivité est due à une *conversion modale* s'opérant dans la région non-périodique du miroir : le déplacement du trou a pour effet de diminuer la différence entre le profil du mode de Bloch propagatif du guide et le profil du mode de Bloch évanescent du miroir. Cet effet a déjà été interprété dans le cas d'un miroir à cristaux photoniques 1D [Pal01, Lal03] et nous y revenons en détail dans le Chapitre 8 pour des géométries bidimensionnelles.

Le deuxième mécanisme physique à l'origine de la variation du facteur de qualité est *une augmentation de l'indice de groupe et de la longueur de pénétration* à la résonance, voir Figures 7.10(a) et 7.10(b). Cette augmentation, qui est due à la forte dispersion du guide à cristaux photoniques ainsi qu'à la rupture de périodicité à l'interface du miroir, se traduit physiquement par la *propagation dans la cavité d'une onde plus lente sur une distance plus longue.* Le temps de parcours des photons entre les deux miroirs et la durée de vie du mode sont donc plus grands.

Alors que l'augmentation de réflectivité est à peu près la même pour les trois cavités ($N = 1, 2$ et 3), l'effet de faible vitesse de groupe dépend fortement de la longueur initiale de la cavité. Pour $N = 3$ trous manquants, la vitesse de groupe

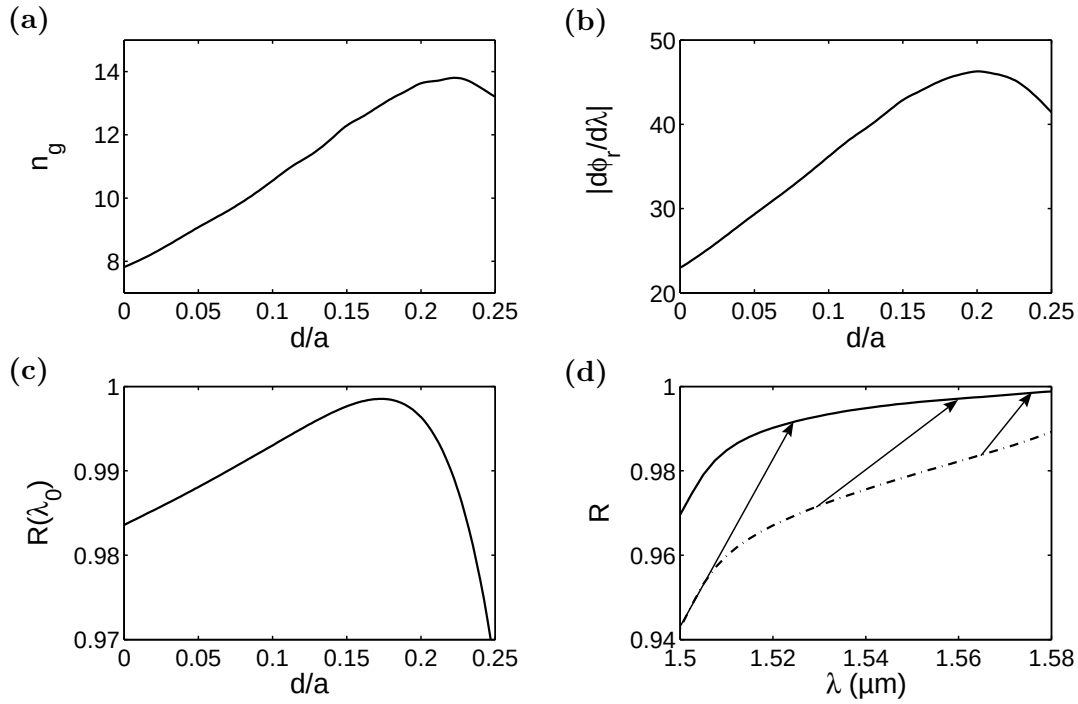

Figure 7.10: *Interprétation de l'augmentation du facteur de qualité. (a), (b) et (c) Effet du déplacement des trous sur les principaux paramètres physiques intervenant dans l'équation 7.42 pour $N = 3$. (d) Réflectivité $R(\lambda)$ du cristal photonique pour deux déplacements $d = 0$ (pointillés discontinus) et $d = 0.18a$ (courbe en trait plein). Les flèches indiquent l'augmentation de réflectivité pour les trois cavités. De gauche à droite, $N = 1$, 2 et 3.*

du mode de Bloch est environ divisée par deux lorsque les trous sont déplacés alors qu'elle reste pratiquement inchangée dans le cas de la cavité avec $N = 1$.

Origine du grand facteur de qualité de la cavité « double hétérostructure »

Le modèle Fabry-Perot met en avant l'importance de la réflectivité des miroirs pour obtenir un grand facteur de qualité. Cette réflectivité est imparfaite à cause de la différence entre le profil du mode de Bloch évanescent du miroir et le profil du mode de Bloch propagatif du guide, comme nous le verrons en détail dans le Chapitre 8. Partant de là, l'origine physique du très grand facteur de qualité de la cavité « double hétérostructure » ($Q = 600\,000$) apparaît très clairement sur la Figure 7.1(b) : les géométries du guide et du miroir étant extrêmement proches, *l'adaptation entre les deux profils de mode est quasiment parfaite.*

Cette intuition se vérifie numériquement. Nous avons calculé la réflectivité modale dans le cas de la « double hétérostructure » et le résultat, à la limite de la convergence que nous avons pu obtenir, montre une très grande valeur de la réflectivité modale, $R = 0.9999 \pm 0.0001$. Nous avons également évalué la vitesse de groupe à l'intérieur de la cavité à partir de la courbe de dispersion du mode fondamental du

guide déformé à une rangée manquante. Elle est du même ordre que dans la cavité avec $N = 3$ trous manquants et $d \approx 0.18a$ [Aka03a]. En appliquant l'expression analytique de Q donnée par l'équation 7.42 avec ces valeurs de R et de n_g, on obtient un facteur de qualité du même ordre de grandeur que celui observé expérimentalement. *La très grande valeur de Q est donc principalement due à l'emploi de très bons miroirs qui possèdent peu de pertes radiatives intrinsèques.*

7.5 Conclusion

Nous avons analysé dans ce Chapitre les mécanismes physiques qui gouvernent le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques bidimensionnels. Pour mettre en évidence l'originalité de notre travail, nous avons porté un regard critique sur l'analyse de Fourier, une approche théorique très utilisée dans la littérature visant à interpréter le confinement de la lumière dans ces cavités. Nous avons vu que cette approche ne fournit aucune information sur l'origine physique des pertes qui limitent la durée de vie du mode et ne permet pas de prédire la valeur du facteur de qualité. Elle constitue en fait une analyse *a posteriori* du spectre angulaire des pertes d'une cavité donnée. Nous avons également montré à travers deux exemples que la plupart des travaux utilisant l'analyse de Fourier comportent des approximations cachées et non clairement identifiées.

Nous avons ensuite développé un modèle Fabry-Perot « classique » qui met en évidence les paramètres physiques essentiels du problème. Ce modèle a été validé en le comparant à des résultats de calculs électromagnétiques rigoureux ainsi qu'à des résultats expérimentaux. Son domaine de validité s'étend étonnamment jusqu'aux cavités ultimes formées en enlevant un seul trou dans le cristal photonique. En fournissant une expression analytique du facteur de qualité, le modèle Fabry-Perot fournit une règle de conception générale : l'interface entre la cavité et le cristal photonique doit être traitée de façon à diminuer les pertes radiatives et la fréquence de résonance doit correspondre à un mode de Bloch propagatif sous la ligne de lumière.

Le modèle Fabry-Perot nous a permis d'interpréter des résultats expérimentaux récents qui montrent qu'un léger déplacement des trous entourant la cavité peu induire une forte augmentation du facteur de qualité [Aka03a]. Deux phénomènes physiques importants qui n'avaient pas été mentionnés dans l'interprétation originale ont été mis en évidence : une diminution des pertes radiatives à l'interface des miroirs et une diminution de la vitesse de groupe du mode de Bloch à l'intérieur de la cavité.

Le lien entre la performance des miroirs à cristaux photoniques et la géométrie de l'interface est étudié en détail dans le Chapitre 8. L'effet de faible vitesse de groupe, bien que relativement faible dans l'exemple considéré, est important et doit être considéré avec attention en vue de futures conceptions. Il constitue un avantage important des structures à cristaux photoniques qui peuvent supporter des modes de Bloch très dispersifs. Par exemple, pour la géométrie considérée dans ce travail, le modèle Fabry-Perot prédit un facteur de qualité de 250 000 avec une vitesse de groupe de l'ordre de $c/25$ pour une cavité formée en enlevant $N = 4$ trous.

Chapitre 8

Etude de la réflectivité modale des miroirs à cristaux photoniques

Le modèle Fabry-Perot présenté dans le Chapitre 7 montre que les miroirs à cristaux photoniques jouent un rôle primordial pour confiner efficacement la lumière dans une microcavité à cristaux photoniques. En effet, l'augmentation du facteur de qualité due à une modification de la géométrie entourant la cavité s'interprète principalement comme une augmentation de la réflectivité modale. Même pour les géométries dans lesquelles le modèle Fabry-Perot est mis en défaut [Lal04b], la règle simple qui consiste à dire qu'une cavité avec de bons miroirs aura un bon facteur de qualité reste valable.

L'objet de ce Chapitre est d'étudier en détail les effets d'une ingénierie de la géométrie du miroir sur sa réflectivité modale. Il reprend l'intégralité de l'article publié dans la revue Optics Express sous le titre *Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in photonic crystal microcavities* [Sau05c].

Nous considérons des structures à base de cristaux photoniques gravés dans un empilement de couches minces opérant dans la bande interdite du cristal. Lorsqu'une onde guidée est incidente sur le cristal photonique, une fraction de la lumière est diffractée dans l'air et dans le substrat au lieu d'être réfléchie. Nous présentons dans ce Chapitre une étude théorique et numérique de ce problème pour plusieurs géométries tridimensionnelles qui sont importantes pour le confinement de la lumière dans des micropiliers, des microcavités de type air-bridge ou des microcavités à cristaux photoniques 2D. Nous montrons que l'origine des pertes radiatives est une désadaptation de profil de mode, c'est-à-dire une différence entre le profil du mode guidé incident et le profil du mode de Bloch évanescent du miroir. Cette étude généralise à des modes évanescents le concept d'intégrale de recouvrement utilisé en optique intégrée pour des modes propagatifs.

En nous appuyant sur ces résultats, nous présentons des règles de conception qui permettent de réduire la désadaptation de profil de mode en modifiant légèrement la géométrie de l'interface guide/miroir. Cette modification introduit entre le guide et le miroir périodique une petite zone non-périodique — un « taper » — dans laquelle s'effectue une conversion modale. Ces règles sont validées par des calculs numériques tridimensionnels et sont utilisées pour concevoir des miroirs dont la géométrie permet de réduire les pertes radiatives de plusieurs ordres de grandeur.

8.1 Introduction

One of the greatest challenges in Photonic Crystal (PC) research is the construction of optical microcavities with small modal volumes and large quality factors for an efficient confinement of light and for efficient light-matter interaction. Besides standard applications of these structures as lasers or frequency filters, they can potentially be used in solid-state quantum electrodynamics or in nonlinear light-control experiments [Vah03].

For cavity geometries like microtoroids or microdisks, the confinement is purely refractive. These geometries will not be discussed hereafter. Over the past decade, many research groups have focused their efforts on PC cavities which can be fabricated with standard planar technologies [Zha96, For97, Kra98, Bab96, Lit98, Aka03b, Par01, Gér99, Sol01]. In all these systems, see Figure 8.1, the light confinement has a hybrid character : it relies on refraction (total internal reflection) and diffraction. For air-bridge [Zha96, For97] or micropillar cavities [Gér99, Sol01] shown in Figures 8.1(a) and 8.1(b), light is confined by refraction in two orthogonal directions and by two 1D PC mirrors in the third direction. For the membrane structure [Aka03b, Par01] shown in Figure 8.1(c), light is confined in two in-plane directions by diffraction and in the vertical direction by refraction. The main consequence of this hybrid confinement is the presence of far-field radiation in the air-clads, which limits the cavity mode lifetime.

Previous theoretical works devoted to the analysis of the radiation problem for enhancing the cavity mode lifetime emphasize a global property of the cavity mode. They all begin with a preliminary calculation of the mode pattern followed by an interpretation of this pattern through a multipole expansion [Joh01] or a Fourier decomposition [Sri02, Vuc02a, Aka03a]. The approach we adopt here is largely different since we emphasize an intrinsic property of the mirrors, namely their modal reflectivity. Looking at mirrors properties is all the more natural since the use of mirrors with a high modal reflectivity guarantees a high performance cavity.

For the geometries of Figures 8.1(a) and 8.1(b), the modal reflectivity we consider is that of a guided mode impinging onto a 1D Bragg mirror, see Figures 8.5(b) and 8.6(a), and for the geometry of Figure 8.1(c) we consider the modal reflectivity of a guided Bloch mode impinging onto a 2D PC mirror, see Figure 8.5(a). Our purpose is not to understand the cavity mode in these ultrasmall cavities as simply resulting from the bouncing of a guided wave between two mirrors ; counterexamples of such simplistic approaches are known [Lal04b]. We rather intend to explain the physical origin for the imperfect (< 1) modal reflectivity and to derive engineering tools to increase it or equivalently to reduce the radiation losses down to a very low level ($< 0.1\%$ of the incident energy). Similar concepts have been developed earlier for 2D geometries composed of 1D Bragg mirrors in planar waveguides [Pal01, Lal03], and this work represents an extension to several 3D geometries which are conceptually more difficult to handle and also more relevant for applications.

The origin of the finite mirror reflectivity, namely a transverse mode-profile mismatch at the mirror termination, is theoretically analyzed in Section 8.2 for the air-bridge geometry. From this analysis, we propose in Section 8.3 design rules for reducing the mode-profile mismatch. In Section 8.4, these rules are validated with

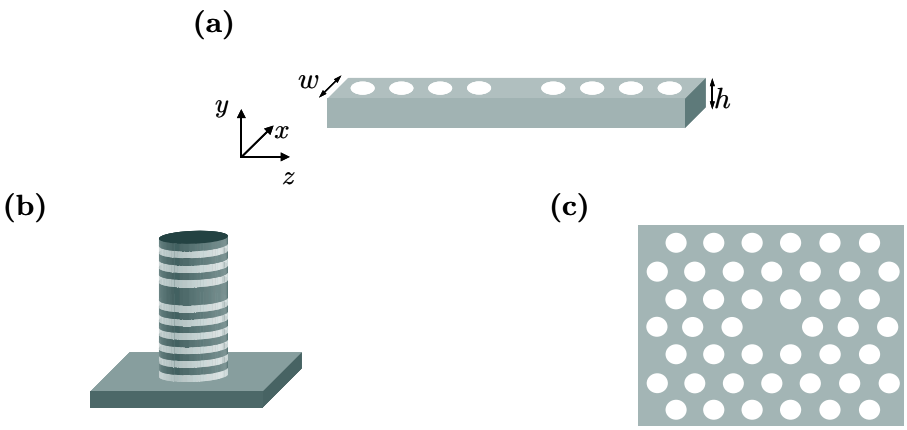

Figure 8.1: *Optical microcavities considered in this work. (a) Air-bridge microcavity. (b) Micropillar. (c) Single defect PC microcavity in a semiconductor membrane (top view).*

three-dimensional computational results obtained for several mirror geometries, including 1D Bragg mirrors in cylindrical and rectangular photonic wires and 2D PC mirrors in membranes.

In the following, the calculations of the modal reflectivities are performed with a 3D frequency-domain modal method relying on Fourier expansion techniques [Sil01, Cao02]. In brief, the Fourier-expansion method relies on an analytical integration of Maxwell's equations along one direction (usually the longitudinal direction of the waveguide) and on a supercell approach in the other two transversal directions. Perfectly-Matched-Layers [Che94] are used in those directions to carefully handle the far-field radiation losses and to satisfy outgoing wave conditions at the supercell boundaries. Since these layers absorb non-evanescent radiations, the electromagnetic fields are null on the boundaries of the supercell and are thus periodic functions of the transversal coordinates. This allows the calculation of the radiated and guided modes in a Fourier (plane-wave) basis in each layer and the integration in the longitudinal direction by relating recursively the modes amplitudes in the different layers using a S-matrix approach [Cha94]. We use the mathematically-sound Fourier factorization rules [Li96b] which are known to drastically improve the convergence performance of Fourier-expansion techniques for Bloch waves computation in periodic media [Lal96c, Li97, Lal98a, Pop00]. This 3D frequency-domain modal method has been checked for different geometries through comparison with other numerical methods [Cty02, Sau03] and with experimental data [Sil01].

8.2 Mode-profile mismatch problem

In this Section, we consider the air-bridge geometry of Figure 8.1(a) and evidence the physical reason for the radiation losses occurring when light guided in the bridge reflects onto the semi-infinite mirror. The computational results are obtained for a $340nm$-thick, $500nm$-wide air-bridge, and the periodicity constant and the hole diameter of the mirror are $a = 420nm$ and $d = 230nm$, respectively. The

semiconductor refractive index ($n = 3.48$) is assumed to be independent of the wavelength, an approximation largely inessential for the following discussion. In the wavelength range of interest, the waveguide supports a single TE-like mode (electric field primarily horizontal at the center of the waveguide) with a double mirror symmetry. Figure 8.2(a) shows the calculated modal reflectivity R of the PC mirror as a function of the wavelength over the entire band gap from $\lambda = 1.39$ to $1.84\mu m$. The modal reflectivity does not reach unity, and $L = 1 - R$ simply represents radiation losses in the air-clad.

Before considering reflectivity enhancement through hole tuning, let us evidence that the cause of the non-perfect reflectivity of the semi-infinite mirror is a mode-profile mismatch at the waveguide-mirror interface between the air-bridge guided mode and the Bloch mode of the mirror (sometimes called impedance mismatch). For that purpose, we use an analytical model developed earlier for simpler 2D geometries [Pal01]. Within the model, light reflection on a PC mirror is interpreted as a triple scattering process and the radiation losses L are shown to be equal to $1 - \eta^2$, where

$$\eta = \frac{\mathrm{Re}\left\{\left[\iint\left(\vec{E}_1 \wedge \vec{H}_T^*\right).\vec{u}_z\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \iint\left(\vec{E}_T \wedge \vec{H}_1^*\right).\vec{u}_z\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right] / \left[\iint\left(\vec{E}_T \wedge \vec{H}_T^*\right).\vec{u}_z\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right]\right\}}{\mathrm{Re}\left[\iint\left(\vec{E}_1 \wedge \vec{H}_1^*\right).\vec{u}_z\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right]} \tag{8.1}$$

is an overlap integral between the incident guided mode and the half-Bloch wave of the mirror, an electromagnetic quantity associated to the fundamental evanescent Bloch mode of the mirror, see [Pal01] for a definition of half-Bloch waves. In Equation 8.1, $\vec{u}_z$ is the longitudinal unitary vector, $\vec{E}_1$ and $\vec{H}_1$ respectively represent the transverse electric and magnetic fields of the fundamental air-bridge mode and $\vec{E}_T$ and $\vec{H}_T$ represent those of the half-Bloch wave.

We have calculated these transverse fields with the Fourier modal method. Details concerning the calculation of the Bloch mode can be found in [Cao02, Lal02]. From those fields, we have computed the square of the overlap integral. The y-component of $\vec{H}_1$ and $\vec{H}_T$ is shown in Figures 8.2(b)-8.2(f) for several wavelengths over the whole bandgap of the PC mirror and the η^2 values are represented by circles in Figure 8.2(a). Clearly, a quantitative agreement with the exact numerical data (solid curve) is achieved.

From Figure 8.2(a), we note that the radiation losses increase as the wavelength decreases in the gap. This effect can be simply understood from classical results known for Bloch modes in thin-film stacks [Yeh98] : as the wavelength decreases in the gap, the fundamental Bloch mode of the air-bridge mirror becomes less and less confined in the high index material, and spreads out into the air clad and the holes. Thus the mode-profile mismatch between the Bloch mode and the air-bridge guided mode becomes more and more severe, as evidenced in Figures 8.2(b)-8.2(f).

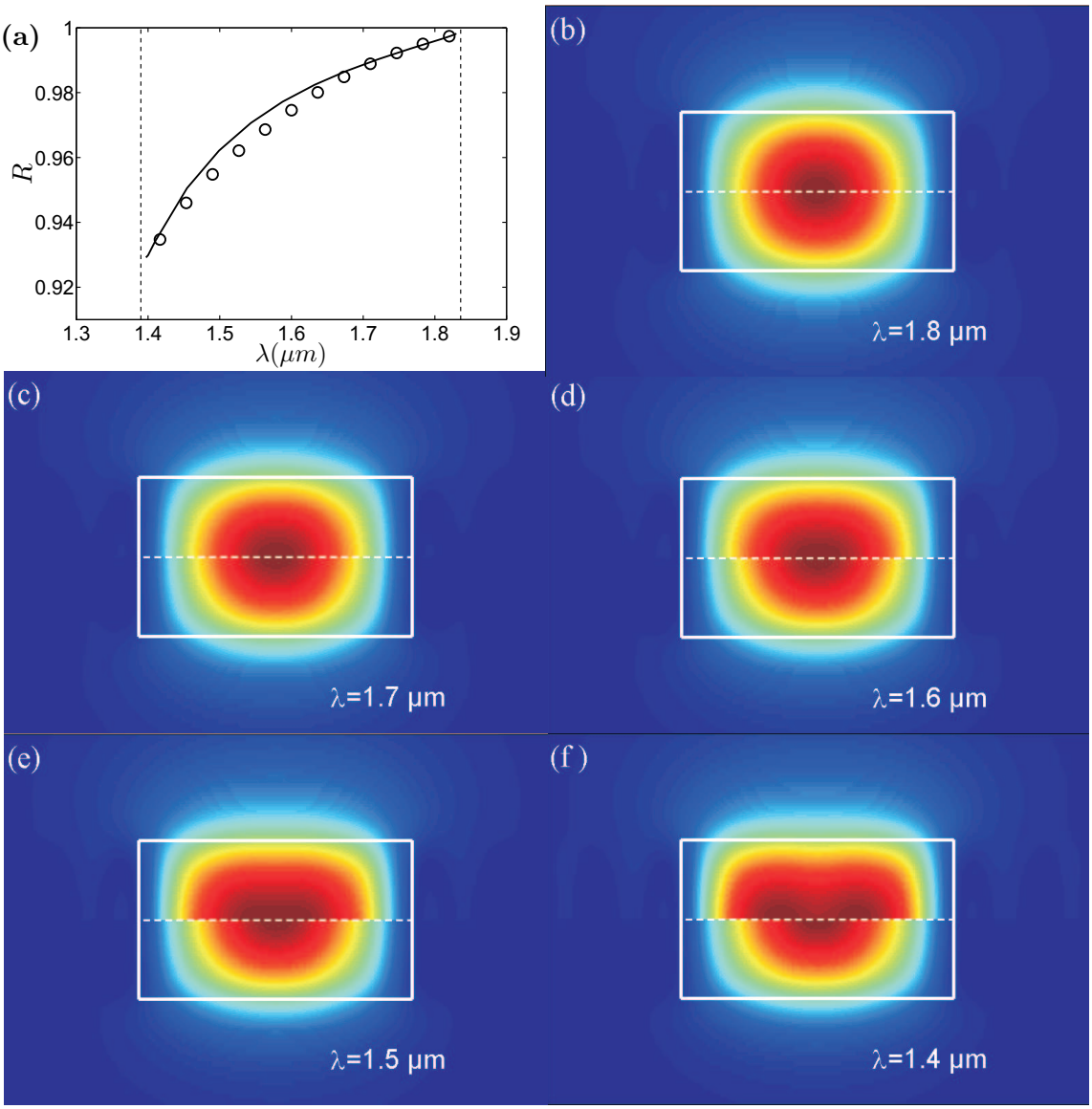

Figure 8.2: *Modal reflectivity and transverse mode-profile mismatch. (a) Modal reflectivity spectrum for the air-bridge mirror ($a = 420nm$ and $d = 230nm$). Solid curve : computational data using exact electromagnetic theory. Circles : square of the overlap integral η^2. The vertical dashed lines indicate the band edges. (b)-(f) Comparison between the y-component of the transverse magnetic field of the fundamental air-bridge mode $\vec{H}_1$ (bottom) and that of the half-Bloch wave $\vec{H}_T$ (top) for several wavelengths covering the whole bandgap. White solid lines indicate the semiconductor-air boundaries of the air-bridge. The transverse $\vec{H}_T$ field is calculated in a symmetry plane shown as vertical dashed lines in the left-hand side of Fig. 8.3.*

8.3 Bloch mode engineering for lowering radiation losses

The mode-profile mismatch problem shows the necessity of designing mirrors which incorporate modal conversion to reduce the radiation losses. This modal conversion can be implemented by a gradual variation of the mirror geometry aimed at tapering the incident guided mode into the fundamental evanescent Bloch mode of the mirror [Pal01, Lal03]. A mirror incorporating such a progressive variation between the air-bridge waveguide and the semi-infinite periodic Bragg mirror is shown in Figure 8.3.

To analyse this geometry, a convenient approach consists in identifying segments (delimited by vertical dashed lines in Figure 8.3) and considering the eigenstates of the transfer matrices associated to each segment. These eigenstates, whose transverse field distributions are invariant under the propagation over one segment, also represent the Bloch modes associated to the periodic structure formed by a series of identical segments [Lal03]. Within this picture, designing a taper amounts to implementing a progressive variation of the transverse Bloch mode profile through a series of segments, from the profile of the fundamental guided mode of the air-bridge to that of the evanescent Bloch mode associated to the periodic mirror. A more detailed analysis on the tapering by engineering evanescent Bloch modes can be found in [Lal03], where the key role played by the fundamental Bloch mode of every segment in the loss reduction has been quantitatively addressed for simpler 2D geometries.

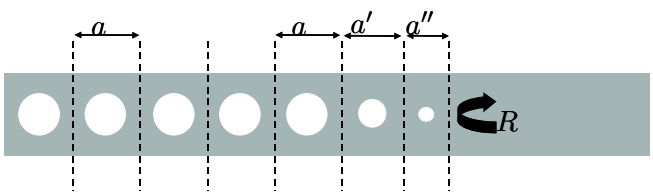

Figure 8.3: *Illustration of geometry tuning for tapering. Two segments of length a' and a'' are inserted between the PC mirror and the air-bridge.*

Apart from refractive index modulations, which may be difficult to implement in practice, two degrees of freedom can be varied for the taper design, namely the segment length and the hole diameter. Figure 8.4(a) shows the overlap integral ($1-\eta$ is shown in a logarithmic scale) between the air-bridge guided mode and the half-Bloch waves associated to three segments with different hole diameters, $d = 230$, 170 and $100nm$. The computation is performed for a given wavelength, $\lambda = 1.5\mu m$, and the displayed data correspond only to evanescent Bloch modes, i.e. Bloch modes operating in the gap. A priori, segments involving non-evanescent Bloch modes could be considered for the design. However, restricting a design to segments supporting only evanescent Bloch modes amounts to considering mirrors with short penetration length, a desirable feature for cavities with ultra small modal volume or very large finesse.

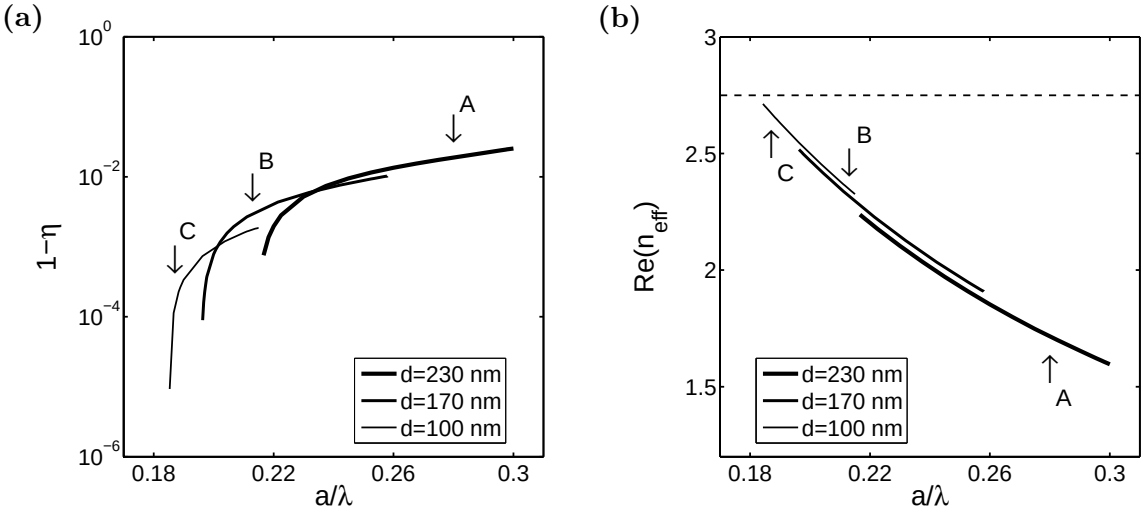

Figure 8.4: *Relevant quantities for the evanescent Bloch mode associated to three segments with different hole diameters,* $d = 230$, 170 *and* $100nm$, *for* $\lambda = 1.5\mu m$. *(a)* $1-\eta$ *as a function of the segment period. (b) Real part of the effective index* n_{eff} *of the Bloch mode of the segments. The curves for* $d = 230$ *and* $170nm$ *are down shifted by 0.07 and 0.03, respectively, for the sake of clarity (otherwise,* $\mathrm{Re}(n_{eff}) = \frac{\lambda}{2a}$*). The horizontal dashed line represents the effective index of the fundamental air-bridge guided mode. The vertical arrow labelled A indicates the location associated to the mirror with a 420-nm period. The vertical arrows labelled B and C indicate the location associated to the segments used in Section 8.4.2 to reduce the losses.*

The general trends in Figure 8.4(a) are rather intuitive : 1) for a given hole diameter, the overlap integral η increases as the segment length a decreases, see also Figure 8.2 and 2) η increases as the diameter decreases, an expected trend if one considers that the segment and the air-bridge becomes identical in the zero hole-diameter limit. If one associates to every η in Figure 8.4(a) a transverse mode profile, one easily realizes that a continuum of mode profiles can be envisioned for the tapering process, ranging from the Bloch mode profile of the Bragg mirror (vertical arrow labelled A in Figure 8.4(a)) to the air-bridge mode profile which is likely to be very similar to that of the segment with the smallest length and hole diameter.

Until now, we have considered the transverse mode profile of the half-Bloch wave since, strictly speaking, it is the primary quantity to be dealt with for the taper design. A simpler and more intuitive quantity, which may be more useful in practice although less quantitative, is the real part of the effective indices n_{eff} of the Bloch modes involved in the taper. These effective indices are shown in Figure 8.4(b). Their values, which are given by $n_{eff} = \frac{\lambda}{2a}$ for Bloch modes in the gap [Lal03, Yeh98], increase as the segment lengths decrease. If we admit that a progressive effective index variation is accompanied by a progressive variation of the transverse Bloch mode profiles, the design of the taper amounts to implementing a graded-index Bloch-mode stack from the effective index of the guided mode to that of the Bloch mode of the mirror. In the next Section, we will show that taper designs can be

basically hand-driven using the effective index approach.

8.4 Numerical evidence

In this Section, we provide numerical evidence of modal reflectivity enhancement through evanescent Bloch-mode engineering. For implementing a mirror taper, tuning both segment-length a and hole-diameter d have to be considered. Section 8.4.1 is concerned by tapers based on a simple hole shift at the mirror termination. Geometries such as 1D Bragg reflectors in rectangular photonic wires and 2D PC mirrors in membranes are considered. In Section 8.4.2, more sophisticated tapers involving a tuning of both a and d are considered for photonic wires.

8.4.1 Tuning hole position

The primary degree of freedom for modifying the transverse mode profile of evanescent Bloch modes operating in the gap is the periodicity constant. This assertion is derived from Figure 8.4(a), where the overlap integral is shown to vary by several order of magnitude by tuning the periodicity constant for a fixed hole diameter. In practice, when inserting a single segment between a periodic mirror and a waveguide, tuning the periodicity constant of the segment amounts to shifting the hole position, and implementing a graded variation of the transverse mode profile is achieved with a segment whose length is shorter than the periodicity of the mirror, see Figure 8.4. Hereafter, this simple design rule is studied for 1D Bragg reflectors in rectangular photonic wires and 2D PC mirrors in membranes.

Let us first consider the reflection problem shown in Figure 8.5(a), where a 2D PC mirror is illuminated by the fundamental Bloch mode of a single-line defect PC waveguide. We assume that the PC mirror is composed of a triangular lattice of air holes (lattice constant $a = 420nm$) etched into a silicon slab, whose refractive index $n = 3.42$ is assumed to be independent of the wavelength in the narrow spectral range of interest. The slab thickness and the air hole radius are $0.6a$ and $0.29a$, respectively.

For this set of parameters, the PC waveguide supports a single guided Bloch mode. This mode has been widely studied [Sau03, Chu00, Not01] : for $\lambda > 1.5\mu m$, it is a truly lossless guided mode operating below the light line of the air-clad. This guided mode is highly dispersive : its group velocity is $c/4.5$, $c/5.4$ and $c/30$ for $\lambda = 1.5$, 1.54 and $1.585\mu m$, respectively, and is null for $\lambda = 1.591\mu m$ at the edge of the first Brillouin zone. As long as the group velocity of the incident guided mode is close to $c/3$ (a situation referred to as refractive-index guided mode in [Not01]), the geometry of Figure 8.5(a) is conceptually similar to that of the air-bridge geometry shown in Figure 8.5(b). For instance, the Bloch mode profile of the PC waveguide is very close to the guided mode profile of the air-bridge. We therefore expect that the taper design rules presented in Section 8.3 remain valid for this 2D PC slab structure.

Figures 8.5(c)-8.5(f) summarize the impact of hole displacement on the mirror performance. As shown in Figure 8.5(c), the modal reflectivity R_1 slowly increases

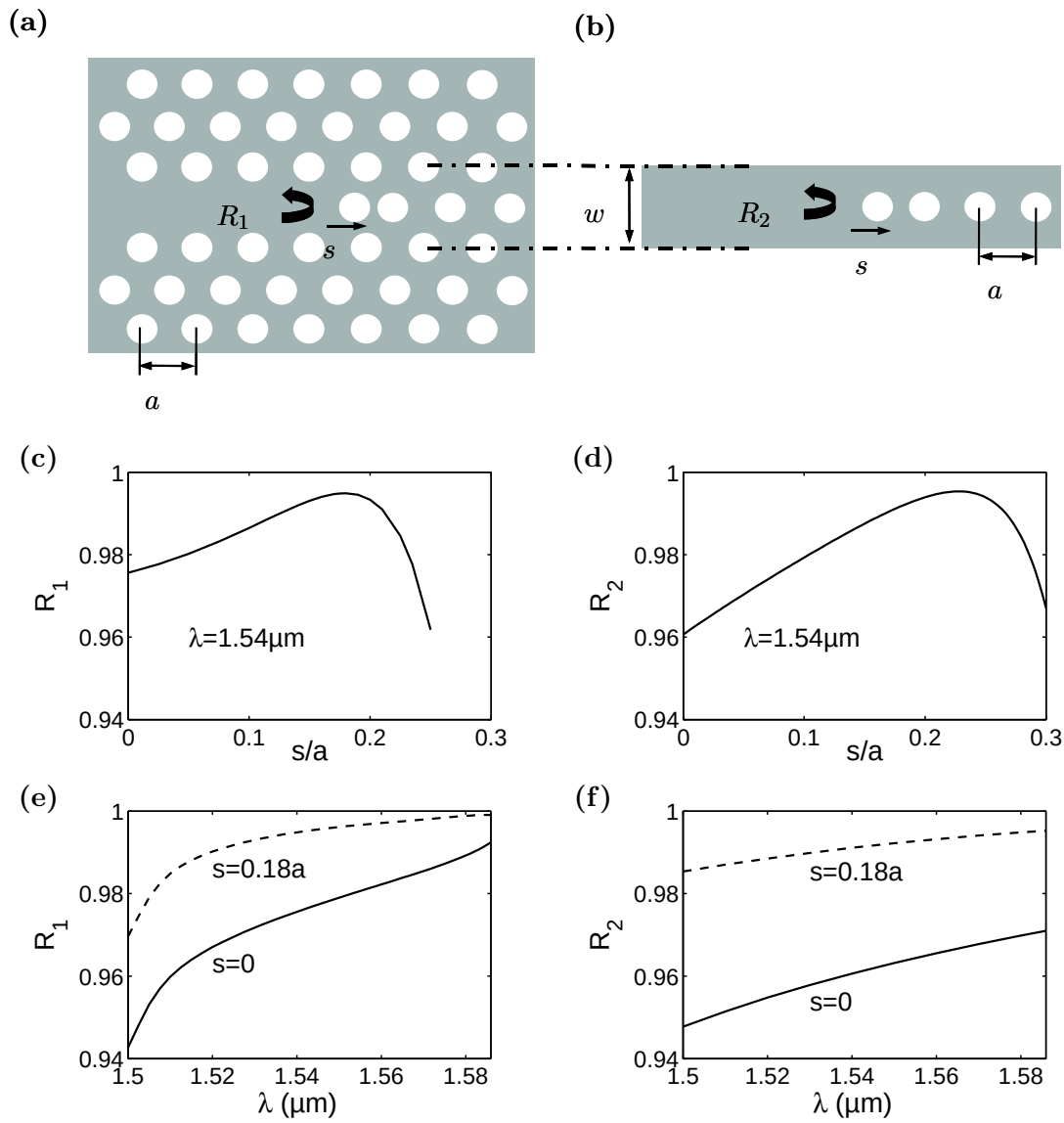

Figure 8.5: *Effect of hole shifting on the modal reflectivity of 1D and 2D PC mirrors. (a) 2D PC configuration. (b) Related air-bridge configuration. (c) and (d) Modal reflectivities R_1 and R_2 for $\lambda = 1.54\mu m$ as a function of the normalized hole shift s/a. (e) and (f) Corresponding modal reflectivity spectra. The solid and dashed curves are obtained for $s = 0$ and $s = 0.18a$, respectively.*

for small hole shifts, passes through a maximum for $s \approx 0.18a$ and then rapidly drops. Figure 8.5(e) shows the modal reflectivity spectrum $R_1(\lambda)$ for two hole shifts, $s = 0$ (periodic mirror) and $s = 0.18a$.

It is interesting to compare these trends with those obtained for an air-bridge mirror with similar geometrical parameters, see Figure 8.5(b). For the comparison, the parameters of the air-bridge mirror are chosen identical to those of the 2D PC slab, a hole periodicity of a, a bridge thickness of $0.6a$ and a hole radius of $0.29a$. The air-bridge width, $w = 1.6a$, is chosen so that the fundamental effective index of the

PC waveguide and that of the air-bridge waveguide are equal for $\lambda = 1.5\mu m$. The effect of hole shifts on the air-bridge-mirror reflectivity R_2 is shown in Figures 8.5(d) and 8.5(f).

The modal reflectivities R_1 and R_2 share many common trends : for $s = 0$, R_1 and R_2 both increase as the wavelength increases and they are both enhanced by small hole shifts before rapidly dropping for large s. This rapid drop is understood if one considers that for large hole shifts, the mode-profile engineering tool does not apply anymore since the fundamental Bloch mode of the additional segment of length $a-2s$ is no longer evanescent. Although R_1 and R_2 share many features, they also exhibit some differences. As shown by a comparative glance at Figures 8.5(e) and 8.5(f), R_1 is larger than R_2 (except for small wavelengths). One is naturally inclined to attribute this trend to the fact that some lateral radiation in the clad which is allowed in the air-bridge geometry is blocked by the 2D PC configuration. This interpretation might be true. However one has to additionally consider that, whereas the group velocity of the fundamental guided mode of the air-bridge waveguide is roughly constant over the whole spectral range of interest, that of the fundamental Bloch mode of the single-line defect PC waveguide drastically changes. In our opinion, this group velocity difference also impacts the modal reflectivity spectrum. Theoretically, it can be shown that, as $v_g \to 0$, the modal reflectivity of any guided (non-leaky) Bloch mode which approaches the edge of the first Brillouin zone is unity (the modal reflectivity coefficient is -1). The main physical reason is a degeneracy : the Bloch mode and its associated counter-propagating wave are identical. We have confirmed this through many computational results obtained for 2D grating waveguide geometries. For the 3D geometry of Figure 8.5(a), the calculation is much more technically difficult and we were unable to calculate the modal reflectivity R_1 for $\lambda > 1.585\mu m$ ($v_g = c/30$). But R_1 is expected to reach unity for $\lambda = 1.591\mu m$ ($v_g = 0$) and for any value of s.

Finally, let us note that the very high reflectivity observed for the 2D PC mirror ($R_1 \approx 0.998$) for $\lambda \approx 1.58\mu m$ and for $s = 0.18a$ is responsible for the very high Q factor in excess of 45,000 observed experimentally [Aka03a] with a cavity formed by removing three holes in a 2D PC etched into a silicon membrane, as discussed in [Sau04b]. We also believe that the recent observation [Par01, Ryu04] of quality factor enhancement in single-hole defect cavities in a 2D PC membrane by hole tuning around the defect is likely to be related to the mode-profile matching approach described here.

8.4.2 Tuning hole position and diameter

In this subsection, we consider more sophisticated tapers involving one or two segments with a tuning of both the segment length and the hole diameter. We first consider 1D Bragg reflectors in the micropillar geometry of Figure 8.1(b). While the mode lifetime of micropillars with small refractive-index modulations (like those manufactured with quarter-wave stacks in the GaAs/AlAs system) weakly suffers from mode-profile mismatch problems [Lal04a], the problem is radically different for high refractive index modulations. For example, for the GaAs/AlOx system, the transverse mode profile of the HE_{11} (i.e. fundamental) guided mode of the cylindrical

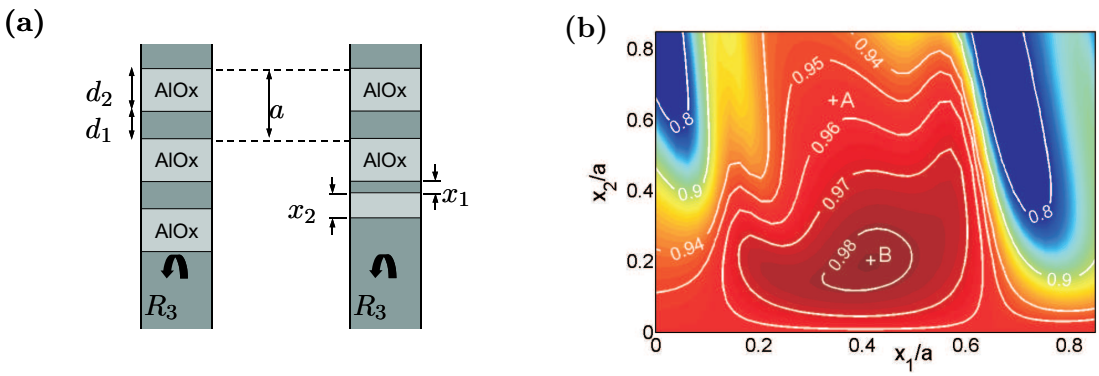

Figure 8.6: *Single-segment tapers for micropillar Bragg reflectors. (a) Reflector geometry ($a = d_1 + d_2 = 228nm$). Dark and light regions correspond to GaAs and AlOx materials. (b) Modal reflectivity as a function of the normalized thicknesses x_1/a and x_2/a of the first GaAs and AlOx layers for $\lambda = 0.95\mu m$. Points A and B correspond to geometries with periodic and optimized mirrors, respectively.*

photonic wire (the cavity spacer in Figure 8.1(b)) strongly differs from that of the associated Bloch mode in the Bragg reflector. Thus a strong mode-profile mismatch exists and large cavity quality factors are prohibited. Although not argued in these terms, numerical results have confirmed this prediction [Vuc02b].

This mode-profile mismatch can be reduced with a single segment taper. To confirm this, we consider a 1D Bragg reflector formed in a $800nm$-diameter pillar composed of GaAs and AlOx layers, with refractive indices 3.495 and 1.515 and thicknesses $d_1 = 78nm$ and $d_2 = 150nm$, respectively. For this set of parameters, see Figure 8.6(a), a $420nm$ wide bandgap is obtained around a centre wavelength $\lambda = 0.95\mu m$.

For a semi-infinite Bragg reflector, we have calculated the modal reflectivity R_3 of the HE_{11} guided mode of the cylindrical photonic wire for the midgap frequency and for several values of the first GaAs and AlOx layers thicknesses, noted x_1 and x_2, respectively. The modal reflectivity of the periodic mirror ($x_1 = d_1$ and $x_2 = d_2$) is 95.7%, see the point A in Figure 8.6(b) ; a maximum reflectivity of 98.3% is achieved for $x_1 = 95nm$ and $x_2 = 50nm$ (point B). Thus by varying both x_1 and x_2, the radiation loss $L = 1 - R_3$ are reduced by roughly a factor 3. This implies that the quality factor of a cavity formed by the association of two mirrors would be increased by the same amount.

We now consider two-segment tapers formed in the air-bridge geometry of Figure 8.3 and report on a drastic reduction of the radiations losses in comparison to single-segment tapers formed in the same geometry. For a nominal wavelength of $1.5\mu m$, two designs are reported.

The first one is hand-driven and exploits the data of Figure 8.4. We have selected two segments with $a = 320nm$ and $d = 170nm$, and $a = 280nm$ and $d = 100nm$. These segment geometries are shown by the vertical arrows labelled B and C in Figures 8.4(a) and 8.4(b). The choice is largely arbitrary, but the choice of the first segment is motivated by the realization of a taper with very low losses, see

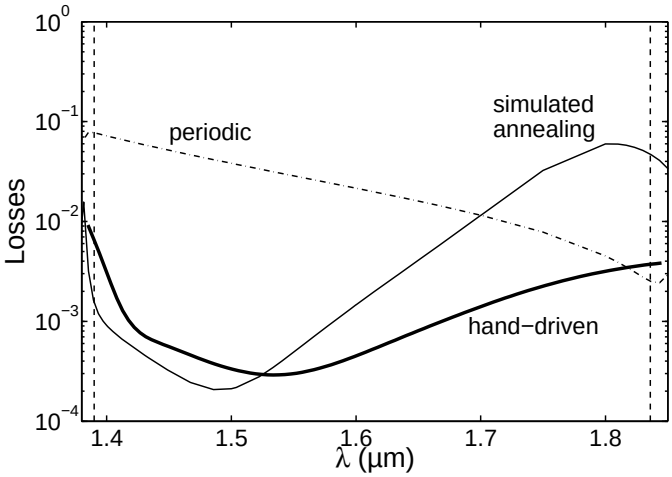

Figure 8.7: *Radiation loss spectra $L = 1 - R$ for air-bridge mirrors with two-segment tapers. Bold curve : hand-driven design for segments defined by $(a', d) = (320, 170)nm$, and $(a'', d) = (280, 100)nm$. Thin curve : optimized design for segments defined by $(a', d) = (240, 210)nm$, and $(a'', d) = (414, 100)nm$. The dashed-dotted curve corresponds to the modal reflectivity of the periodic mirror and the vertical dashed lines indicate the band edge.*

Figure 8.4(a), and the choice of the second segment is mainly motivated by the realization of a graded-index operation. With the Fourier modal method, we have calculated the modal reflectivity spectrum of the mirror, bold curve in Figure 8.7.

For the second design, we have used Simulated-Annealing [Aar89] procedure and have optimized the modal reflectivity. In the optimization, four degrees of freedom are used : the two hole diameters and the two hole positions, under the constraint that the hole diameters remain larger than $100nm$. Because of the large amount of computational loads required for the optimisation, we have not explored thoroughly the configuration space. Several taper geometries with very high reflectivities at the design wavelength have been obtained. The mirror reflectivity spectrum of one of these optimized tapers is shown as the thin curve in Figure 8.7.

These numerical results clearly evidence the beneficial effect of two-segment tapering processes : a loss reduction by a factor larger than 200 at the design wavelength and by one order of magnitude ($L < 10^{-3}$) over a broad spectral range. We believe that many different taper geometries may lead to a drastic reduction of the radiation losses and therefore that tapers designed by use of a graded mode-profile variation are not very sensitive to fabrication errors of the hole diameters, as shown in [Lal03] for related 2D geometries.

8.5 Conclusion

The modal reflectivities of several PC mirrors, including 1D Bragg reflectors in cylindrical and rectangular photonic wires and 2D PC mirrors in membranes, have been theoretically studied. The deviation of the modal reflectivity from unity,

which represents radiation losses in the cladding materials, has been shown to result from a transverse mode-profile mismatch at the waveguide-mirror interface. Indeed, losses derived from overlap integral considerations show excellent agreement with those predicted by a full 3D calculation. Design tools based on an engineering of the Bloch modes in the mirrors through geometry tuning have been proposed for reducing these losses. Efficient tapered mirrors providing a loss reduction by one or two orders of magnitude have been validated through 3D computational results. The design tools can be applied to enhance the quality factor of various optical microcavities like air-bridge microcavities, micropillars and 2D PC microcavities in membranes. In addition, because the tapering process relies on evanescent Bloch modes operating in the gap, the penetration length into the engineered mirrors is kept at a rather low level. Thus the modal volumes of cavities formed by two engineered mirrors are not substantially increased in comparison to those of cavities formed by fully periodic mirrors.

Conclusion de la troisième partie

Nous avons réalisé dans cette partie une étude théorique du confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques. Le fil conducteur de ce travail a été d'acquérir une compréhension fine des mécanismes physiques à l'origine de ce confinement. Nous avons pour cela adopté une approche radicalement différente de celles qui reposent sur une analyse globale du mode de la cavité et qui sont traditionnellement utilisées par les groupes leaders dans le domaine, O. Painter au Caltech, J. D. Joannopoulos au MIT et S. Noda à l'Université de Kyoto. Notre approche, qui s'appuie sur un modèle Fabry-Perot, a permis de dégager les deux quantités physiques qui peuvent être utilisées pour augmenter la durée de vie des modes dans des cavités de dimensions ultimes : la qualité intrinsèque des miroirs qui ferment la cavité et la vitesse de groupe du mode guidé qui « tourne » entre les miroirs.

Dans le Chapitre 7, nous avons présenté deux approches permettant d'analyser le confinement de la lumière dans les microcavités à cristaux photoniques. La première approche, très utilisée dans la littérature, est basée sur une analyse globale du champ électromagnétique par transformée de Fourier. Nous avons mis en évidence qu'elle ne fournit aucune information sur les origines physiques des pertes et qu'elle ne permet pas de prédire la valeur du facteur de qualité. Elle constitue en fait une analyse *a posteriori* du spectre angulaire des pertes d'une cavité donnée. La seconde approche, développée au cours de la thèse [Sau05b], est basée sur un modèle Fabry-Perot. Elle fournit une expression analytique du facteur de qualité qui met en évidence les paramètres physiques essentiels dont dépend la durée de vie des modes de la cavité. Le modèle Fabry-Perot a permis d'interpréter des résultats expérimentaux récents qui montrent qu'un léger déplacement des trous entourant la cavité peut induire une forte augmentation du facteur de qualité [Aka03a]. Deux phénomènes physiques importants qui n'avaient pas été mentionnés dans l'interprétation originale ont été mis en évidence : une diminution des pertes radiatives à l'interface des miroirs et une diminution de la vitesse de groupe du mode de Bloch à l'intérieur de la cavité.

Après avoir constaté le rôle important joué par les miroirs à cristaux photoniques dans le confinement de la lumière, nous avons étudié en détail, dans le Chapitre 8, l'origine physique des pertes radiatives se produisant à l'interface du miroir. Nous avons montré que ces pertes proviennent d'une désadaptation de profil de mode, c'est-à-dire d'une différence entre le profil transverse du mode guidé incident et le profil transverse du mode de Bloch évanescent du miroir. En nous appuyant sur ces résultats, nous avons présenté des règles de conception qui permettent de réduire les pertes radiatives en modifiant légèrement la géométrie de l'interface guide/miroir.

Cette modification de géométrie constitue essentiellement une ingénierie de modes de Bloch évanescents visant à adapter progressivement les profils transverses des modes pour réduire les pertes radiatives. Les règles de conception ont été validées par des calculs numériques tridimensionnels et ont été utilisées pour concevoir des miroirs dont la géométrie permet de réduire les pertes radiatives de plusieurs ordres de grandeur.

Utiliser un modèle Fabry-Perot est l'idée qui vient naturellement à l'esprit pour concevoir une cavité, quelle que soit sa dimension. Cependant, avant nos travaux, aucune analyse reposant sur ce type de modèle n'a été ébauchée dans la littérature pour les microcavités à cristaux photoniques 2D. Toutes les autres analyses rendent plutôt mystérieuse la physique du confinement de la lumière dans ces cavités alors que l'utilisation d'un modèle Fabry-Perot défend une idée classique du confinement. Celui-ci s'interprète simplement comme une onde guidée oscillant entre deux miroirs, y compris dans le cas de cavités ultimes formées en enlevant un seul trou dans le cristal photonique. Cette interprétation montre que des réflectivités aussi grandes que 99.8% [Aka03a] et même 99.99% [Son05] peuvent être obtenues aujourd'hui dans le silicium grâce à des microgravures. Ces chiffres sont assez surprenants, car c'est la première fois que des techniques de lithographie développées pour les circuits intégrés silicium permettent de dépasser les performances ultimes atteintes avec les techniques de dépôt de couches minces.

Conclusion

Les trois études théoriques et numériques réalisées au cours de cette thèse nous ont permis de *comprendre en détail plusieurs phénomènes liés aux interactions de la lumière avec des cristaux photoniques* gravés dans un empilement de couches minces : l'atténuation du mode fondamental d'un guide à cristaux photoniques et son lien avec la vitesse de groupe, la variation avec la longueur d'onde de l'efficacité d'une optique diffractive utilisant des cristaux photoniques, les pertes radiatives d'une cavité à cristaux photoniques.

L'étude de la propagation de la lumière dans des guides à cristaux photoniques présentée dans la première partie a porté sur un système modèle, le guide à une rangée manquante, et sur trois quantités physiques essentielles, *l'atténuation, la durée de vie et la réflexion* sur un cristal photonique bidimensionnel du mode fondamental. Nous avons développé une approche numérique originale pour calculer ces quantités, basée sur une application judicieuse de la méthode modale de Fourier généralisée. Cette approche nous a permis de résoudre avec précision le problème tridimensionnel difficile que constitue le calcul de l'atténuation et de la durée de vie intrinsèques du mode fondamental des guides à cristaux photoniques. Nous avons également montré que, bien utilisé, l'outil numérique permet de comprendre finement les mécanismes physiques qui sont à la base de la propagation de la lumière dans ces guides.

L'étude d'optiques diffractives blazées sur une large plage spectrale présentée dans la deuxième partie a montré que *l'utilisation de cristaux photoniques permet de surmonter la principale limitation des optiques diffractives, à savoir leur utilisation efficace sur une large plage spectrale.* Cette étude met en avant une utilisation originale des propriétés des cristaux photoniques hors du domaine traditionnel de l'optique guidée. Les deux contributions principales de notre travail sont deux modèles approchés de l'efficacité des optiques diffractives utilisant des structures sub-λ. Le premier reste qualitatif mais permet *une conception rapide de composants diffractifs qui restent efficaces sur une large bande spectrale.* Le second modèle est, lui, beaucoup moins approché. Il permet d'étudier quantitativement le comportement spectral et angulaire de composants diffractifs de phase lentement variable, des composants difficiles à modéliser puisqu'ils possèdent deux échelles spatiales, l'une comparable à la longueur d'onde et l'autre bien supérieure. A l'aide de ces deux modèles, un réseau blazé dont l'efficacité reste supérieure à 95% sur près d'une octave a été conçu, et ceci en utilisant des paramètres compatibles avec les contraintes de fabrication.

L'étude du confinement de la lumière dans des microcavités à cristaux photo-

niques présentée dans la troisième partie a permis de mettre en évidence *l'importance des miroirs entourant la cavité*. Toutes les approches antérieures visant à interpréter le confinement sont basées sur une analyse globale du mode, comme par exemple l'analyse par transformée de Fourier du champ électromagnétique. Nous avons pris le contre-pied de ces travaux en montrant qu'*un modèle Fabry-Perot classique permet de prédire quantitativement le facteur de qualité d'une cavité à cristaux photoniques*, y compris une cavité ultime formée en enlevant un seul trou dans le cristal photonique. Ce modèle nous a permis d'interpréter des résultats expérimentaux récents qui montrent qu'un léger déplacement des trous entourant la cavité peut induire une forte augmentation du facteur de qualité [Aka03a]. Nous avons mis en évidence deux phénomènes physiques importants qui n'avaient pas été mentionnés dans l'interprétation originale : *une diminution des pertes radiatives à l'interface des miroirs et une diminution de la vitesse de groupe du mode de Bloch à l'intérieur de la cavité*.

Nous nous sommes ensuite intéressés en détail à l'origine physique des pertes radiatives qui se produisent lorsqu'une onde guidée est réfléchie par un cristal photonique. Nous avons montré que ces pertes proviennent d'*une désadaptation de profil de mode*, c'est-à-dire d'une différence entre le profil du mode guidé incident et le profil du mode de Bloch évanescent du miroir. En nous appuyant sur ces résultats, nous avons présenté des règles de conception qui permettent de réduire les pertes radiatives en modifiant légèrement la géométrie de l'interface guide/miroir. Ces règles, qui consistent essentiellement en une ingénierie de modes de Bloch évanescents, ont été utilisées pour concevoir des miroirs dont la géométrie permet de réduire les pertes radiatives de plusieurs ordres de grandeur.

La conception de ces miroirs peut être réalisée aussi bien pour des cavités à cristaux photoniques 1D de type air-bridge que pour des cavités à cristaux photoniques 2D [Sau05c] qui font aujourd'hui l'objet d'un bien plus grand nombre d'études. Si l'on néglige les pertes extrinsèques, comme par exemple les pertes dues à des défauts de fabrication (rugosité, fluctuation de la taille des structures), il n'apparaît donc pas clairement que les cristaux photoniques 2D soient la solution idéale au problème du confinement efficace de la lumière dans les nanocavités. Mentionnons en outre que les guides à cristaux photoniques ne constituent en rien une étape décisive vers la miniaturisation des circuits intégrés puisque, du point de vue des applications passives, les performances (pertes en ligne, pertes en virage, diaphonie) des guides rubans sont du même ordre voire même meilleures que celles des guides à cristaux photoniques [Not04, Vla04].

Par contre, la piste qui consiste à *emprisonner un mode lent en cavité* semble plus novatrice. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre 7, le facteur de qualité d'une cavité utilisant un mode lent est plus grand que celui de la même cavité utilisant un mode plus rapide. Les cristaux photoniques 2D offrent sans doute ici une flexibilité de conception difficilement accessible avec des géométries plus traditionnelles de type ruban.

Les résultats obtenus au cours de cette thèse soulignent deux points importants liés à la problématique de la maîtrise du confinement et de la propagation de la lumière à des échelles de quelques λ^3. Le premier point est l'importance du concept de mode de Bloch dans la compréhension de l'interaction de la lumière avec des

matériaux nanostructurés. En effet, la synthèse de gradients d'indice présentée dans la partie concernant l'optique diffractive et le convertisseur servant à augmenter la réflectivité des miroirs à cristaux photoniques réalisé dans le Chapitre 8 mettent en évidence que les modes de Bloch sont définis et se manipulent à l'échelle de la longueur d'onde. Ils constituent donc un concept puissant pouvant être utilisé pour développer une ingénierie des matériaux complexes formés de motifs sub-λ.

Deuxièmement, les travaux effectués au cours de cette thèse ont montré que la maîtrise de la propagation et du confinement de la lumière à des échelles de quelques λ^3 passe essentiellement par des approches classiques. En effet, tant que le fonctionnement des composants repose sur les propriétés d'un mode fondamental, les idées classiques de résonance transverse, de cavité Fabry-Perot, de conversion modale empruntées à l'optique intégrée continuent à être d'une aide précieuse pour la conception de composants, même lorsque les dimensions de ces derniers ne dépassent pas quelques longueurs d'onde.

Annexe A

Calculation of the matrices E, A and K_x in the Hermite-Gauss basis

In this Appendix, the analytical expressions of the matrices E, A and K_x used in the numerical example of Section 2.3 are calculated. Hermite-Gauss functions $\psi_n(x)$ form an orthonormal complete basis of $\mathbb{L}^2$ for the scalar product $\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) \mathrm{d}x$.

To derive the coefficients K_{xnm}, it is necessary to first calculate the derivative of the functions $\psi_n(x)$. This is straightforward by using the appropriate properties of Hermite polynomials [Abr72] :

$$\frac{d\psi_m}{dx} = \frac{1}{2w}\left(\sqrt{m}\,\psi_{m-1} - \sqrt{m+1}\,\psi_{m+1}\right). \tag{A.1}$$

We find then that K_x is an antisymmetric tridiagonal matrix, with zeros on the main diagonal, and that the coefficients K_{xnm} are given by

$$K_{xnm} = \frac{1}{k_0}\left\langle \psi_n \left| \frac{d}{dx} \right| \psi_m \right\rangle = \frac{1}{2wk_0}\left(\sqrt{m}\,\delta_{nm-1} - \sqrt{m+1}\,\delta_{nm+1}\right). \tag{A.2}$$

The coefficients of the matrices E and A depend on the permittivity distribution. For lamellar structures, $\varepsilon(x)$ is a piecewise constant function which can be expressed as a sum of Heaviside functions $H(x)$. For the symmetrical waveguide considered in Section 2.3, $\varepsilon(x)$ can be written as

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)H(x - x_1) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)H(x - x_2), \tag{A.3}$$

where x_1 and x_2 are the boundary locations. With this expression, the calculation of the coefficients E_{nm} is straightforward. We find

$$E_{nm} = \varepsilon_1 \delta_{nm} + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) I^1_{nm} + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) I^2_{nm}, \tag{A.4}$$

with $I^j_{nm} = \int_{x_j}^{+\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)\mathrm{d}x$, $j = 1, 2$. The coefficients I^j_{nm} are calculated numerically by using a Gauss algorithm. Finally, the coefficients A_{nm} are simply derived by changing ε_i in $\frac{1}{\varepsilon_i}$ in Equation A.4,

$$A_{nm} = \frac{1}{\varepsilon_1}\delta_{nm} + \left(\frac{1}{\varepsilon_2} - \frac{1}{\varepsilon_1}\right) I^1_{nm} + \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - \frac{1}{\varepsilon_2}\right) I^2_{nm}. \tag{A.5}$$

Annexe B

Atténuation et durée de vie des modes d'un guide à cristaux photoniques

Dans cette Annexe, nous étudions l'atténuation et la durée de vie des modes d'un guide à cristaux photoniques formé de cylindres infinis. Dans cette géométrie bidimensionnelle pour laquelle les calculs numériques sont beaucoup plus simples, nous obtenons des résultats similaires à ceux présentés à la section 3.3. Nous montrons en outre que l'atténuation du mode fondamental peut s'annuler pour certaines fréquences.

Le cristal photonique considéré est un réseau triangulaire de cylindres d'air de paramètre de maille $a = 560nm$ placés dans un milieu d'indice $n = 2.63$. Cet indice correspond à l'indice effectif du mode fondamental TE d'une membrane d'InP (n=3.2) de $250nm$ d'épaisseur à la longueur d'onde $\lambda = 1.55\mu m$. Le rayon des cylindres d'air est $r = 0.37a$, et nous nous plaçons dans le cas de polarisation où le champ magnétique $\vec{H}$ est parallèle à l'axe des cylindres. Le guide d'onde est formé en enlevant une rangée de cylindres dans la direction ΓK du réseau triangulaire.

Le diagramme de dispersion du guide est représenté sur la Figure B.1, ainsi que le champ magnétique des trois modes présents dans la bande interdite. Le mode fondamental est symétrique par rapport à l'axe du guide et les deux autres modes sont antisymétriques. La bande du premier mode antisymétrique (celui de basse fréquence) est quasi-plate. Sa vitesse de groupe s'annule aux deux extrémités de la zone de Brillouin, ainsi que pour $k = 0.285$. En ce point, la vitesse de groupe change de signe. Nous considérons dans la suite un guide possédant 5 rangées de trous de part et d'autre de la rangée manquante. La durée de vie des modes est donc limitée à cause d'une fuite de la lumière par effet tunnel à travers le cristal photonique d'épaisseur finie.

Atténuation des trois modes du guide

Intéressons nous tout d'abord à l'atténuation des modes. Celle-ci est calculée de deux manières différentes : directement en calculant la partie imaginaire du vecteur d'onde complexe $\tilde{k}$ puis indirectement en utilisant l'équation 3.31 et en calculant la

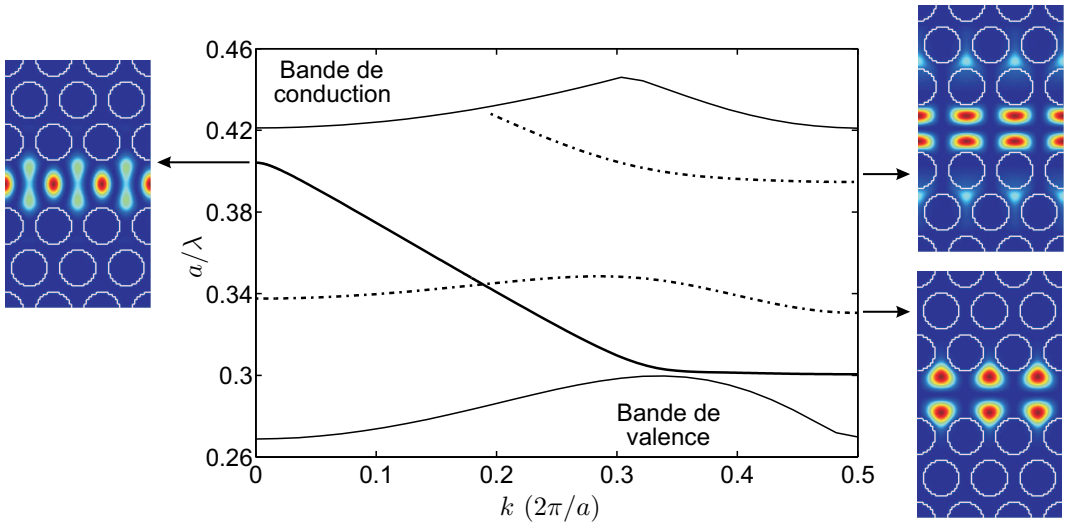

Figure B.1: *Courbe de dispersion $\omega(k)$ des trois modes du guide à cristaux photoniques 2D considéré ici. La courbe en trait plein correspond au mode fondamental et les courbes en pointillés discontinus correspondent à des modes antisymétriques. Les tracés de champ correspondent à $|H|^2$ ($\vec{H}$ parallèle aux cylindres). Le champ du mode symétrique a été représenté en $k = 0$, et les champs des deux modes antisymétriques ont été représentés en $k = 0.5$. Les calculs ont été réalisés avec la méthode présentée à la section 3.1.3.*

partie imaginaire de la fréquence complexe $\tilde{\omega}$ et la vitesse de groupe du mode. Tous ces calculs ont été réalisés en utilisant la méthode présentée à la section 3.1.3. Les Figures B.2(a), B.2(b) et B.2(c) montrent que les résultats obtenus sont superposés pour les trois modes sur toute la gamme de vecteurs d'onde, validant ainsi les trois hypothèses conduisant à l'équation 3.31.

L'atténuation diverge aux points où la vitesse de groupe s'annule, en $k = 0$ et en $k = 0.5$ pour le mode fondamental, voir Figure B.2(a), en $k = 0$, $k = 0.285$ et $k = 0.5$ pour le premier mode antisymétrique, voir Figure B.2(b), et en $k = 0.5$ pour le deuxième mode antisymétrique, voir Figure B.2(c). Dans le cas du premier mode antisymétrique, la vitesse de groupe change de signe au milieu de la zone de Brillouin en $k = 0.285$, voir Figure B.1. La partie imaginaire α du vecteur d'onde change donc également de signe en ce point et nous avons en fait représenté sur la Figure B.2(b) la valeur absolue de l'atténuation.

Deux caractéristiques intéressantes sont à noter sur le spectre d'atténuation du mode fondamental. D'une part, l'atténuation passe par un maximum pour $k \approx 0.38$, au point où la courbe de dispersion est très proche du bord de la bande de valence. Nous avons déjà observé ce comportement sur l'atténuation du guide à cristaux photoniques 3D étudié à la section 3.1. D'autre part, l'atténuation s'annule[1] pour $k \approx 0.18$. Nous avons constaté que cette annulation n'apparaissait que pour un nombre impair de rangées de cylindres de part et d'autre de la rangée manquante. Dans le cadre du modèle Fabry-Perot développé à la section 3.2, elle est due à une

[1]Nous avons calculé une atténuation inférieure à 10^{-12}.

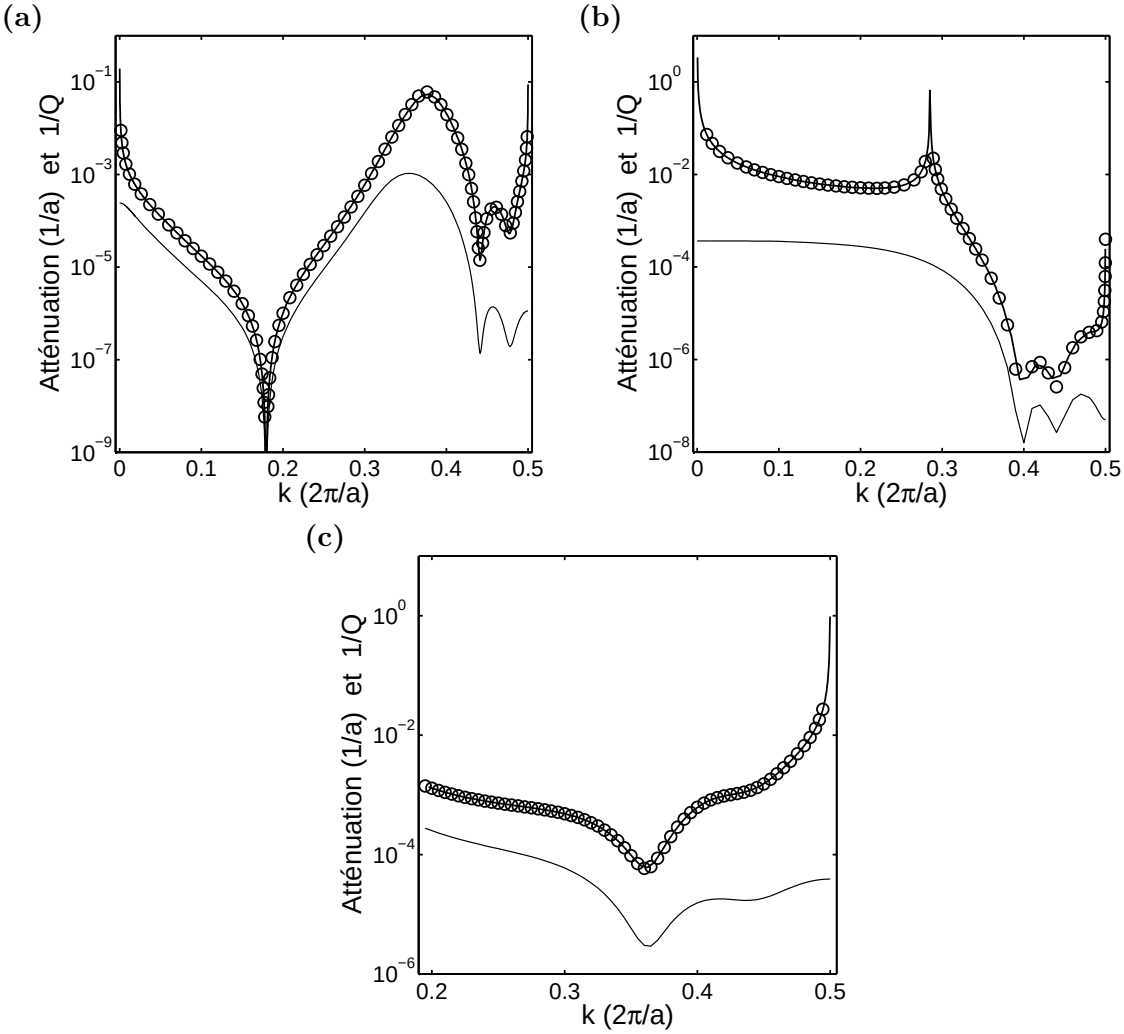

Figure B.2: *Atténuation des trois modes du guide à cristaux photoniques de la Figure B.1. (a) Atténuation du mode fondamental. (b) Atténuation du premier mode antisymétrique. (c) Atténuation du deuxième mode antisymétrique. Les cercles correspondent au calcul direct de la partie imaginaire du vecteur d'onde complexe et la courbe en trait plein correspond à l'équation 3.31 utilisant le calcul de la partie imaginaire de la fréquence complexe. La courbe en trait fin correspond à l'inverse du facteur de qualité.*

annulation du coefficient de transmission ($R = 1$) du cristal photonique pour la fréquence et l'angle d'incidence correspondant à ce point de la courbe de dispersion.

Durée de vie des trois modes du guide

L'inverse du facteur de qualité Q est représenté sur les Figures B.2(a), B.2(b) et B.2(c) pour les trois modes considérés. La variation du facteur de qualité est régulière et suit la variation de l'atténuation, excepté aux points où la vitesse de groupe s'annule. En particulier, le facteur de qualité du mode fondamental est minimal pour $k \approx 0.38$ et il est infini pour $k \approx 0.18$, voir Figure B.2(a).

Bibliographie

[Aar89] E. Aarts and J. Korst, *Simulated Annealing and Boltzmann Machine* (John Wiley, New York, 1989).

[Abr72] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Chapitre 22 (Dover Publications, New York, 1972).

[Aka03a] Y. Akahane, T. Asano, B. S. Song and S. Noda, *High-Q photonic nanocavity in two-dimensional photonic crystal*, Nature **425**, 944–947 (2003).

[Aka03b] Y. Akahane, T. Asano, B.-S. Song and S. Noda, *Investigation of high-Q channel drop filters using donor-type defects in two-dimensionnal photonic crystal slabs*, Appl. Phys. Lett. **83**(8), 1512–1514 (2003).

[And03] L. C. Andreani and M. Agio, *Intrinsic diffraction losses in photonic crystal waveguides with line defects*, Appl. Phys. Lett. **82**(13), 2011–2013 (2003).

[Asa04] T. Asano and S. Noda, *Tuning holes in photonic crystal nanocavities : reply*, Nature **429**, doi :10.1038/nature02603 (2004).

[Aur72] L. d'Auria, J.-P. Huignard, A. M. Roy and E. Spitz, *Photolithographic fabrication of thin film lenses*, Opt. Commun. **5**, 232–235 (1972).

[Bab96] T. Baba, M. Hamasaki, N. Watanabe, P. Kaewplung, A. Matsutani, T. Mukaihara, F. Koyama and K. Iga, *A novel short-cavity laser with deep-grating distributed bragg reflectors*, Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 1390–1394 (1996).

[Ber04] A. Berrier, M. Mulot, M. Swillo, M. Qiu, L. Thylen, A. Talneau and S. Anand, *Negative refraction at infrared wavelengths in a two-dimensional photonic crystal*, Phys. Rev. Lett. **93**(7), 073902 (2004).

[Bie02] P. Bienstman and R. Baets, *Advanced boundary conditions for eigenmode expansion models*, Opt. Quantum Electron. **34**(5), 523–540 (2002).

[Boo92] R. C. Booton, *Computational methods for electromagnetics and microwaves*, p. 113 (John Wiley, New York, 1992).

[Bor64] M. Born and E. Wolf, *Principle of Optics*, 6th ed. (Macmillan, New York, 1964).

[Bér94] J. P. Bérenger, *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, J. Comput. Phys. **114**(2), 185–200 (1994).

[Bur92] D. A. Buralli and G. M. Morris, *Effect of diffraction efficiency on the modulation transfer function of diffractive lens*, Appl. Opt. **31**(22), 4389–4396 (1992).

[Can] *Site internet de canon*, http ://www.canon.com/do-info/index.html.

[Cao02] Q. Cao, P. Lalanne and J. P. Hugonin, *Stable and efficient Bloch-mode computational method for one-dimensional grating waveguide*, J. Opt. Soc. Am. A **19**(2), 335–338 (2002).

[Cha80] J. Chandezon, D. Maystre and G. Raoult, *A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application*, J. Opt. (Paris) **11**, 235–241 (1980).

[Cha94] N. Chateau and J.-P. Hugonin, *Algorithm for the rigorous coupled wave analysis of grating diffraction*, J. Opt. Soc. Am. A **11**(4), 1321–1331 (1994).

[Che94] W. C. Chew and W. H. Weedon, *A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates*, Microwave Opt. Technol. Lett. **7**(13), 599–604 (1994).

[Che95] F. T. Chen and H. G. Craighead, *Diffractive phase elements based on two-dimensional artificial dielectrics*, Opt. Lett. **20**(2), 121–123 (1995).

[Che96] F. T. Chen and H. G. Craighead, *Diffractive lens fabricated with mostly zeroth-order gratings*, Opt. Lett. **21**(3), 177–179 (1996).

[Chu00] A. Chutinan and S. Noda, *Waveguides and waveguide bends in two-dimensional photonic crystal slabs*, Phys. Rev. B **62**(7), 4488–4492 (2000).

[Chu01] A. Chutinan, M. Mochizuki, M. Imada and S. Noda, *Surface-emitting channel drop filters using single defects in two-dimensionnal photonic crystal slabs*, Appl. Phys. Lett. **79**(17), 2690–2692 (2001).

[Col95] L. A. Coldren and S. W. Corzine, *Diode lasers and photonic integrated circuits*, Chapitres 3 et 7 (John Wiley, New York, 1995).

[Cor68] S. R. Coriell and J. L. Jackson, *Bound on transport coefficients of two-phase materials*, J. Appl. Phys. **39**, 4733–4736 (1968).

[Cry05] M. J. Cryan, D. C. L. Wong, I. J. Craddock, S. Y. J. Rorison and C. J. Railton, *Calculation of losses in 2D photonic crystal membrane waveguides using the 3D FDTD method*, IEEE Photon. Technol. Lett. **17**(1), 58–60 (2005).

[Cty02] J. Ctyroky, S. Helfert, R. Pregla, P. Bienstman, R. Baets, R. de Ridder, R. Stoffer, G. Klaasse, J. Petracek, P. Lalanne, J.-P. Hugonin and R. M. De La Rue, *Bragg waveguide grating as a 1D photonic bandgap structure : cost 268 modeling task*, Opt. Quantum Electron. **34**(5), 455–470 (2002).

[Cub03] E. Cubukcu, K. Aydin, E. Ozbay, S. Foteinopolou and C. M. Soukoulis, *Subwavelength resolution in a two-dimensional photonic-crystal-based superlens*, Phys. Rev. Lett. **91**(20), 207401 (2003).

[Dés02] Y. Désières, T. Benyattou, R. Orobtchouk, A. Morand, P. Benech, C. Grillet, C. Seassal, X. Letartre, P. Rojo-Romeo and P. Viktorovitch, *Propagation losses od the fundamental mode in a single-line-defect photonic crystal waveguide on an InP membrane*, J. Appl. Phys. **92**(5), 2227–2234 (2002).

[Ebs96] S. M. Ebstein, *Nearly index-matched optics for aspherical, diffractive and achromatic-phase diffractive elements*, Opt. Lett. **21**(18), 1454–1456 (1996).

[Eno01] S. Enoch, E. Popov and M. Nevière, *3D photonic crystal dispersion relation : improved convergence using fast Fourier factorization method*, Proceedings SPIE, vol. 4438, 183 (2001).

[Far92] M. W. Farn, *Binary gratings with increased efficiency*, Appl. Opt. **31**(22), 4453–4458 (1992).

[For97] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrera, E. R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J. D. Joannopoulos, L. C. Kimerling, H. I. Smith and E. P. Ippen, *Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides*, Nature **390**, 143–145 (1997).

[Gal91] R. L. Gallawa, I. C. Goyal, Y. Tu and K. Ghatak, *Optical waveguide modes : an approximate solution using Galerkin method with Hermite-Gauss basis functions*, IEEE J. Quantum Electron. **27**(3), 518–522 (1991).

[Gay85] T. K. Gaylord and M. G. Moharam, *Analysis and application of optical diffraction by grating*, Proceedings IEEE, vol. 73, 894 (1985).

[Gay99] B. Gayral, J.-M. Gérard, A. Lemaître, C. Dupuis, L. Manin and J.-L. Pelouard, *High-Q wet-etched GaAs microdisks containing InAs quantum boxes*, Appl. Phys. Lett. **75**(13), 1908–1910 (1999).

[Ger04] D. Gerace and L. C. Andreani, *Disorder-induced losses in photonic crystal waveguides with line defects*, Opt. Lett. **29**(16), 1897–1899 (2004).

[Goo96] J. W. Goodman, *Introduction to Fourier optics*, 2nd ed. (Mc Graw Hill, New York, 1996).

[Gér99] J.-M. Gérard, and B. Gayral, *Strong Purcell Effect for InAs quantum boxes in three-dimensional solid-state microcavities*, J. Lightwave Technol. **17**(11), 2089–2095 (1999).

[Gra96] G. Granet and B. Guizal, *Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization*, J. Opt. Soc. Am. A **13**(5), 1019–1023 (1996).

[Had02] G. R. Hadley, *Out-of-plane losses of line-defect photonic crystal waveguides*, IEEE Photon. Technol. Lett. **14**(5), 642–644 (2002).

[Hai93a] H. Haidner, P. Kipfer, J. T. Sheridan, J. Schwinder, N. Streibl, M. Collischon, J. Hutfless and M. März, *Diffraction grating with rectangular grooves exceeding 80% diffraction efficiency*, Infrared Phys. **34**(5), 467–475 (1993).

[Hai93b] H. Haidner, J. T. Sheridan and N. Streibl, *Dielectric binary blazed gratings*, Appl. Opt. **32**(22), 4276–4278 (1993).

[Har89] S. Haroche and D. Keppner, *Cavity quantum electrodynamics*, Physics Today **42**(1), 24–30 (1989).

[Hel96] S. F. Helfert and R. Pregla, *Finite difference expressions for arbitrary positioned dielectrics steps in waveguide structures*, J. Lightwave Technol. **14**(10), 2414–2421 (1996).

[Her97] H. P. Herzig, *Micro-optics : elements, systems and applications*, ed. H. P. Herzig, Chapitre 1 (Taylor & Francis, London, 1997).

[Ho90] K. M. Ho, C. T. Chan and C. M. Soukoulis, *Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures*, Phys. Rev. Lett. **65**(25), 3152–3155 (1990).

[Hoe92] H. J. W. M. Hoekstra, G. J. M. Krijnen and P. V. Lambeck, *Efficient interface conditions for the finite difference beam propagation method*, J. Lightwave Technol. **10**(10), 1352–1355 (1992).

[Hon00] M. Honkanen, V. Kettunen, J. Tervo and J. Turunen, *Fourier arry illuminators with 100% efficiency : analytical jones-matrix construction*, J. Mod. Opt. **47**(13), 2351–2359 (2000).

[Hua93] S. Huard, *Polarisation de la lumière* (Masson, Paris, 1993).

[Hug05a] S. Hughes, L. Ramunno, J. F. Young and J. E. Sipe, *Extrinsic optical scattering loss in photonic crystal waveguides : role of fabrication disorder and photon group velocity*, Phys. Rev. Lett. **94**(3), 033903 (2005).

[Hug05b] J.-P. Hugonin and P. Lalanne, *Perfectly-matched-layers as nonlinear coordinate transforms : a generalized formalization*, J. Opt. Soc. Am. A **22**(9), 1844–1849 (2005).

[Jac74] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Chapitres 6 et 8, 2nd ed. (John Wiley, New York, 1974).

[Joa95] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn, *Photonic crystals* (Princeton University Press, New Jersey, 1995).

[Joh87] S. John, *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*, Phys. Rev. Lett. **58**(23), 2486–2489 (1987).

[Joh01] S. G. Johnson, S. Fan, A. Mekis and J. D. Joannopoulos, *Multipole-cancellation mechanism for high-Q cavities in the absence of a complete photonic band gap*, Appl. Phys. Lett. **78**(22), 3388–3300 (2001).

[Kar04] A. Karalis, S. G. Johnson and J. D. Joannopoulos, *Discrete-mode cancellation mechanism for high-Q integrated optical cavities with small modal volume*, Opt. Lett. **29**(19), 2309–2311 (2004).

[Kip04] T. J. Kippenberg, S. M. Spillane and K. J. Vahala, *Demonstration of ultra-high-Q small mode volume toroid microcavities on a chip*, Appl. Phys. Lett. **85**(25), 6113–6115 (2004).

[Kno78] K. Knop, *Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves*, J. Opt. Soc. Am. **68**, 1206–1210 (1978).

[Kos98] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato and S. Kawakami, *Superprism phenomena in photonic crystals*, Phys. Rev. B **58**(16), 10096 (1998).

[Kos99] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato and S. Kawakami, *Self-collimating phenomena in photonic crystals*, Appl. Phys. Lett. **74**(9), 1212–1214 (1999).

[Kra98] T. F. Krauss, O. Painter, A. Scherer, J. S. Roberts and R. M. De La Rue, *Photonic microstructures as laser mirrors*, Opt. Eng. **37**, 1143–1148 (1998).

[Lal96a] P. Lalanne, *Effective medium theory applied to photonic crystals composed of cubic or square cylinders*, Appl. Opt. **35**(27), 5369–5380 (1996).

[Lal96b] P. Lalanne and D. Lemercier-Lalanne, *On the effective medium theory of subwavelength periodic structures*, J. Mod. Opt. **43**(10), 2063–2085 (1996).

[Lal96c] P. Lalanne and G. M. Morris, *Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization*, J. Opt. Soc. Am. A **13**(4), 779–784 (1996).

[Lal98a] P. Lalanne, *Effective properties and band structure of lamellar subwavelength crystals : plane-wave method revisited*, Phys. Rev. B **58**(15), 9801–9807 (1998).

[Lal98b] P. Lalanne, S. Astilean, P. Chavel, E. Cambril and H. Launois, *Blazed-binary subwavelength gratings with efficiencies larger than those of conventional échelette gratings*, Opt. Lett. **23**(14), 1081–1083 (1998).

[Lal99a] P. Lalanne, *Waveguiding in blazed-binary diffractive elements*, J. Opt. Soc. Am. A **16**(10), 2517–2520 (1999).

[Lal99b] P. Lalanne, S. Astilean, P. Chavel, E. Cambril and H. Launois, *Design and fabrication of blazed-binary diffractive elements with sampling periods smaller than the structural cutoff*, J. Opt. Soc. Am. A **16**(5), 1143–1156 (1999).

[Lal00a] P. Lalanne and J.-P. Hugonin, *Numerical performance of finite-difference modal methods for the electromagnetic analysis of one-dimensional lamellar gratings*, J. Opt. Soc. Am. A **17**(6), 1033–1042 (2000).

[Lal00b] P. Lalanne and E. Silberstein, *Fourier-modal methods applied to waveguide computational problems*, Opt. Lett. **25**(15), 1092–1094 (2000).

[Lal01] P. Lalanne and H. Benisty, *Out-of-plane losses of two-dimensionnal photonic crystal waveguides : electromagnetic analysis*, J. Appl. Phys. **89**(2), 1512–1514 (2001).

[Lal02] P. Lalanne, *Electromagnetic analysis of photonic crystal waveguides operating above the light cone*, IEEE J. Quantum Electron. **38**(7), 800–804 (2002).

[Lal03] P. Lalanne and J.-P. Hugonin, *Bloch-wave engineering for high Q's, small V's microcavities*, IEEE J. Quantum Electron. **39**(11), 1430–1438 (2003).

[Lal04a] P. Lalanne, J.-P. Hugonin and J.-M. Gérard, *Electromagnetic study of the Q of pillar microcavities in the small diameter limit*, Appl. Phys. Lett. **84**(23), 4726–4728 (2004).

[Lal04b] P. Lalanne, S. Mias and J.-P. Hugonin, *Two physical mechanisms for boosting the quality factor to cavity volume ratio of photonic crystal microcavities*, Opt. Express **12**(3), 458–467 (2004).

[Lal05] P. Lalanne, J.-P. Hugonin and P. Chavel, *Coupled Bloch modes and the optical properties of strongly-corrugated lamellar gratings*, soumis à J. Opt. Soc. Am. A (2005).

[Lec05] G. Lecamp, J.-P. Hugonin and P. Lalanne, *Implementation of dipole source in 3D Fourier modal method*, 13th International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling (Grenoble, 8-9 April 2005).

[Lee00a] M.-S. L. Lee, P. Lalanne and P. Chavel, *Blazed-binary diffractive elements with periods much larger than the wavelength*, J. Opt. Soc. Am. A **17**(7), 1250–1255 (2000).

[Lee00b] M.-S. L. Lee, P. Lalanne, J.-C. Rodier and E. Cambril, *Wide-field-angle behavior of blazed-binary gratings in the resonance domain*, Opt. Lett. **25**(23), 1690–1692 (2000).

[Lee01] M.-S. L. Lee, *Matériaux artificiels pour l'optique diffractive*, Thèse de doctorat, Université Paris XI, Orsay (2001).

[Lee02] M.-S. L. Lee, P. Lalanne, J.-C. Rodier, P. Chavel, E. Cambril and Y. Chen, *Imaging with blazed-binary diffractive elements*, J. Opt. A : Pure Appl. Opt. **4**, S119–S124 (2002).

[Lee04] M.-S. L. Lee, P. Legagneux, P. Lalanne, J.-C. Rodier, P. Gallais, C. Germain and J. Rollin, *Blazed-binary diffractive gratings with antireflection coating for improved operation at* $10.6\mu m$, Opt. Eng. **43**(11), 2583–2588 (2004).

[Lee05] M.-S. L. Lee, P. Lalanne, C. Sauvan and A. P. Wood, *Eléments d'optique diffractive de type binaire pour une utilisation sur une large bande spectrale*, Brevet publié sous le numéro FR2861183 (2005).

[Li93] L. Li and C. W. Haggans, *Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings*, J. Opt. Soc. Am. A **10**(6), 1184–1189 (1993).

[Li96a] L. Li, *Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings*, J. Opt. Soc. Am. A **13**(5), 1024–1035 (1996).

[Li96b] L. Li, *Use or Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures*, J. Opt. Soc. Am. A **13**(9), 1870–1876 (1996).

[Li96c] L. Li and J. Chandezon, *Improvement of the coordinate transformation method for surface-relief gratings with sharp edges*, J. Opt. Soc. Am. A **13**(11), 2247–2255 (1996).

[Li97] L. Li, *New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings*, J. Opt. Soc. Am. A **14**(10), 2758–2767 (1997).

[Li01] L. Li, *Mathematical modeling in optical science, frontiers in applied mathematics*, eds. G. Bao, L. Cowsar and W. Masters, Chapitre 4 (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2001).

[Li04] Z.-Y. Li and K.-M. Ho, *Anomalous propagation loss in photonic crystal waveguides*, Phys. Rev. Lett. **92**(6), 063904 (2004).

[Lin96] S. Y. Lin, V. M. Hietala, L. Wang and E. D. Jones, *Highly dispersive photonic band-gap prism*, Opt. Lett. **21**(21), 1771–1773 (1996).

[Lit98] B. E. Little, H. A. Haus, J. S. Foresi, L. C. Kimerling, E. P. Ippen and D. J. Ripin, *Wavelength switching and routing using absorption and resonance*, IEEE Photon. Technol. Lett. **10**, 816–818 (1998).

[Lon02] M. Loncar, T. Yoshie, A. Scherer, P. Gogna and Y. Qiu, *Low-threshold photonic crystal laser*, Appl. Phys. Lett. **81**(15), 2680–2682 (2002).

[Mar92] D. Marcuse, *Solution of the vector wave equation for general dielectric waveguides by the Galerkin method*, IEEE J. Quantum Electron. **28**(2), 459–465 (1992).

[Mar94] A. A. Maradudin and A. R. McGurn, *Out of plane propagation of electromagnetic waves in a two-dimensional periodic dielectric medium*, J. Mod. Opt. **41**(2), 275–284 (1994).

[Mog98] D. Mogilevtsev, T. A. Birks and P. S. Russell, *Group-velocity dispersion in photonic crystal fibers*, Opt. Lett. **23**(21), 1662–1664 (1998).

[Moh03] M. G. Moharam, E. G. Johnson, L. Vaissie and A. Greenwell, *Analysis of grating coupled surface-emitting guided-wave devices*, Diffractive Optics 2003, 14–15 (Oxford, 17-20 September 2003).

[Mon99] T. M. Monro, D. J. Richardson, N. G. R. Broderick and P. J. Bennett, *Holey optical fibers : an efficient modal model*, J. Lightwave Technol. **17**(6), 1093–1102 (1999).

[Nak02] T. Nakai and H. Ogawa, *Research on mulyi-layer diffractive optical elements and their application to camera lenses*, OSA Topical Meeting on Diffractive Optics and Micro-Optics, 5–7 (2002).

[Nev73] M. Nevière, P. Vincent, R. Petit and M. Cadilhac, *Systematic study of resonances of holographic thin film couplers*, Opt. Commun. **9**, 48–53 (1973).

[Nev95] M. Nevière, E. Popov and R. Reinisch, *Electromagnetic resonances in linear and nonlinear optics : phenomenological study of grating behavior through the poles and zeros of the scattering operator*, J. Opt. Soc. Am. A **12**(3), 513–523 (1995).

[Not00] M. Notomi, *Theory of light propagation in stronly modulated photonic crystals : Refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap*, Phys. Rev. B **62**(16), 10696 (2000).

[Not01] M. Notomi, K. Yamada, A. Shinya, J. Takahashi, C. Takahashi and I. Yokohama, *Extremly large group-velocity dispersion of line-defect waveguides in photonic crystal slabs*, Phys. Rev. Lett. **87**(25), 253902 (2001).

[Not04] M. Notomi, A. Shinya, S. Mitsugi, E. Kuramochi and H.-Y. Ryu, *Waveguides, resonators and their coupled elements in photonic crystal slabs*, Opt. Express **12**(8), 1551–1561 (2004).

[Ort03] A. Ortega, J. G. Wanguemert-Perez and I. Molina-Fernandez, *Adaptative Hermite-Gauss decomposition method to analyze optical dielectric waveguides*, J. Opt. Soc. Am. A **20**(3), 557–568 (2003).

[Pai99] O. Painter, J. Vuckovic and A. Scherer, *Defect modes of a two-dimensional photonic crystal in an optically thin dielectric slab*, J. Opt. Soc. Am. B **16**(2), 275–285 (1999).

[Pal01] M. Palamaru and P. Lalanne, *Photonic crystal waveguides : out-of-plane losses and adiabatic modal conversion*, Appl. Phys. Lett. **78**(11), 1466–1468 (2001).

[Par01] H. G. Park, J. K. Hwang, J. Huh, H. Y. Ryu, Y. H. Lee and J. S. Kim, *Nondegenerate monopole-mode two-dimensional photonic band gap laser*, Appl. Phys. Lett. **79**(19), 3032–3034 (2001).

[Pen75] S. T. Peng, T. Tamir and H. L. Bertoni, *Theory of periodic waveguides*, IEEE Trans. Microwave Theory and Tech. **MTT-23**, 123–133 (1975).

[Pet80] R. Petit, *Electromagnetic theory of gratings* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).

[Pop93] E. Popov, *Light diffraction by relief gratings : a macroscopic and microscopic view*, Prog. Optics **31**, 139–187 (1993).

[Pop00] E. Popov and M. Nevière, *Grating theory : new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization*, J. Opt. Soc. Am. A **17**(10), 1773–1784 (2000).

[Pop04] E. Popov, M. Nevière and N. Bonod, *Factorization of products of discontinuous functions applied to Fourier-Bessel basis*, J. Opt. Soc. Am. A **21**(1), 46–52 (2004).

[Pur46] E. M. Purcell, *Spontaneous emission probabilities at radiofrequencies*, Phys. Rev. **69**(11-12), 681 (1946).

[Ras93] T. Rasmussen, J. H. Povslen, A. Bjarklev, O. Lumholt, B. Pedersen and K. Rottwitt, *Detailed comparison of two approximate methods for the solution of the scalar wave equation for a rectangle optical waveguide*, J. Lightwave Technol. **11**(3), 429–433 (1993).

[Riv99] T. Rivera, J.-P. Debray, J.-M. Gérard, B. Legrand, L. Manin-Ferlazzo and J.-L. Oudar, *Optical losses in plasma-etched AlGaAs microresonators using reflection spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **74**(7), 911–913 (1999).

[Rob96] P. J. Roberts, T. A. Birks, P. S. J. Russell, T. J. Shepherd and D. M. Atkin, *Two-dimensional photonic band-gap structures as quasi-metals*, Opt. Lett. **21**(9), 507–509 (1996).

[Ryu03] H.-Y. Ryu and M. Notomi, *High-quality-factor and small-mode-volume hexapole modes in photonic-crystal-slab nanocavities*, Appl. Phys. Lett. **83**(21), 4294–4296 (2003).

[Ryu04] H. Y. Ryu, M. Notomi, E. Kuramoti and T. Segawa, *Large spontaneous emission factor* (> 0.1) *in the photonic crystal monopole-mode laser*, Appl. Phys. Lett. **84**(7), 1067–1069 (2004).

[Sac95] Z. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee and J. F. Lee, *A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition*, IEEE Trans. Antennas Propag. **43**(12), 1460–1463 (1995).

[Sau99] H. Sauer, P. Chavel and G. Erdei, *Diffractive optical elements in hybrid lenses : modeling and design by zone decomposition*, Appl. Opt. **38**(31), 6482–6486 (1999).

[Sau03] C. Sauvan, P. Lalanne, J.-C. Rodier, J.-P. Hugonin and A. Talneau, *Accurate modeling of line-defect photonic crystal waveguides*, IEEE Photon. Technol. Lett. **15**(9), 1243–1245 (2003).

[Sau04a] C. Sauvan, P. Lalanne and J.-P. Hugonin, *Truncation rules for modeling discontinuities with Galerkin method in electromagnetic theory*, Opt. Quantum Electron. **36**(1-3), 271–284 (2004).

[Sau04b] C. Sauvan, P. Lalanne and J.-P. Hugonin, *Tuning holes in photonic crystal nanocavities*, Nature **429**, doi : 10.1038/nature02602 (2004).

[Sau04c] C. Sauvan, P. Lalanne and M.-S. L. Lee, *Broadband blazing with artificial dielectrics*, Opt. Lett. **29**(14), 1593–1595 (2004).

[Sau05a] C. Sauvan and P. Lalanne, *Comment on "Anomalous propagation loss in photonic crystal waveguides"*, Phys. Rev. Lett. **95**(22), 229401 (2005).

[Sau05b] C. Sauvan, P. Lalanne and J.-P. Hugonin, *Slow-wave effect and mode-profile matching in photonic crystal microcavities*, Phys. Rev. B **71**(16), 165118 (2005).

[Sau05c] C. Sauvan, G. Lecamp, P. Lalanne and J.-P. Hugonin, *Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in photonic crystal microcavities*, Opt. Express **13**(1), 245–255 (2005).

[Sch99] A. Schilling, K. J. Weible and H. P. Herzig, *Diffractive structures with high, wavelength independent efficiency*, Diffractive Optics'99, 16–17 (Jena, 1999).

[Sil01] E. Silberstein, P. Lalanne, J.-P. Hugonin and Q. Cao, *On the use of grating theory in integrated optics*, J. Opt. Soc. Am. A **18**(11), 2865–2875 (2001).

[Sny83] A. W. Snyder and J. D. Love, *Optical Waveguide Theory* (Chapman & Hall, London, 1983).

[Sol01] G. S. Solomon, M. Pelton and Y. Yamamoto, *Single-mode spontaneous emission from a single quantum dot in a three-dimensional microcavity*, Phys. Rev. Lett. **86**, 3903–3906 (2001).

[Son05] B.-S. Song, S. Noda, T. Asano and Y. Akahane, *Ultra-high-Q photonic double-heterostructure nanocavity*, Nature Materials **4**, 207–210 (2005).

[Sri02] K. Srinivasan and O. Painter, *Momentum space design of high-Q photonic crystal optical cavities*, Opt. Express **10**(15), 670–684 (2002).

[Sri03] K. Srinivasan, P. E. Barclay, O. Painter, J. Chen, A. Y. Cho and C. Gmachl, *Experimental demonstration of a high quality factor photonic crystal*, Appl. Phys. Lett. **83**(10), 1915–1917 (2003).

[Sri04] K. Srinivasan, P. E. Barclay, M. Borselli and O. Painter, *Optical-fiber-based measurement of an ultrasmall volume high-Q photonic crystal microcavity*, Phys. Rev. B **70**(8), 081306 (2004).

[Sto91] W. Stork, N. Streibl, H. Haidner and P. Kipfer, *Artificial distributed-index media fabricated by zero-order gratings*, Opt. Lett. **16**(24), 1921–1923 (1991).

[Swa89] G. J. Swanson, *Binary optics technology : the theory and design of multi-level diffractive optical elements*, Technical Report 854, MIT (1989).

[Swa91] G. J. Swanson, *Binary optics technology : theoretical limits on the diffraction efficiency of multilevel diffractive optical elements*, Technical Report 914, MIT (1991).

[Tal03] A. Talneau, M. Mulot, S. Anand and P. Lalanne, *Compound cavity measurement of transmission and reflection of a tapered single-line photonic crystal waveguide*, Appl. Phys. Lett. **82**(16), 2577–2579 (2003).

[Teo05] S. H. G. Teo, J. Singh, M. B. Yu and A. Q. Liu, 1.55μm *pure photonic crystal waveguiding in two dimensions*, PECS VI : International Symposium on Photonic and Electromagnetic Crystal Structures (Aghia Pelagia, Crete, 2005).

[Ter00] J. Tervo and J. Turunen, *Paraxial-domain diffractive elements with 100% efficiency based on polarization gratings*, Opt. Lett. **25**(11), 785–786 (2000).

[Ter01] J. Tervo, M. Kuittinen, P. Vahimaa, J. Turunen, T. Aalto, P. Heimala and M. Leppihalme, *Efficient Bragg waveguide-grating analysis by quasi-rigorous approach based on Redheffer's star product*, Opt. Commun. **198**(4-6), 265–272 (2001).

[Ter03] J. Tervo, V. Kettunen, M. Honkanen and J. Turunen, *Design of space-variant diffractive polarization elements*, J. Opt. Soc. Am. A **20**(2), 282–289 (2003).

[Urs98] B. d'Urso, O. Painter, J. O'Brien, T. Tombrello, A. Yariv and A. Scherer, *Modal reflectivity in finite-depth two-dimensional photonic crystal microcavities*, J. Opt. Soc. Am. B **15**(3), 1155–1159 (1998).

[Vah03] K. J. Vahala, *Optical microcavities*, Nature **424**, 839–846 (2003).

[Vas97] C. Vasallo, *1993-1995 : Optical mode solvers*, Opt. Quantum Electron. **29**, 95–114 (1997).

[Vas02] M. Le Vassor d'Yerville, *Modélisation de cristaux photoniques bidimensionnels de hauteur finie*, Thèse de doctorat, Université de Montpellier II (2002).

[Vil94] P. R. Villeneuve and M. Piché, *Photonic bandgaps : what is the best numerical representation of periodic structures*, J. Mod. Opt. **41**(2), 241–256 (1994).

[Vla04] Y. A. Vlasov and S. J. McNab, *Losses in single-mode silicon-on-insulator strip waveguides and bends*, Opt. Express **12**(8), 1622–1631 (2004).

[Vuc02a] J. Vuckovic, M. Loncar, H. Mabuchi and A. Scherer, *Optimization of the Q factor in Photonic Crystal microcavities*, IEEE J. Quantum Electron. **38**(7), 850–856 (2002).

[Vuc02b] J. Vuckovic, M. Pelton, A. Scherer and Y. Yamamoto, *Optimization of three-dimensional micropost microcavities for cavity quantum electrodynamics*, Phys. Rev. A **66**, 023808 (2002).

[Wel95] A. Welsshar, J. Li, R. L. Gallawa, I. C. Goyal, Y. Tu and K. Ghatak, *Vector and quasi-vector solutions for optical waveguide modes using efficient Galerkin method with Hermite-Gauss basis functions*, J. Lightwave Technol. **13**(8), 1795–1800 (1995).

[Wu02] L. Wu, M. Mazilu, T. Karle and T. F. Krauss, *Superprism phenomena in planar photonic crystals*, IEEE J. Quantum Electron. **38**(7), 915–918 (2002).

[Wu03] L. Wu, M. Mazilu and T. F. Krauss, *Beam steering in planr-photonic crystals : from superprism to supercollimator*, J. Lightwave Technol. **21**(2), 561–565 (2003).

[Yab87] E. Yablonovitch, *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*, Phys. Rev. Lett. **58**(20), 2059–2062 (1987).

[Yab91] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer and J. D. Joannopoulos, *Donor and acceptor modes in photonic band structures*, Phys. Rev. Lett. **67**(24), 3380–3383 (1991).

[Yam93] Y. Yamamoto and R. E. Slusher, *Optical processes in microcavities*, Physics Today **46**(6), 66–73 (1993).

[Yeh98] P. Yeh, *Optical waves in layered media*, Chapitres 6 et 11 (John Wiley, New York, 1998).

[Yok92] H. Yokoyama, *Physics and device applications of optical microcavities*, Science **256**, 66–70 (1992).

[Yu03] X. Yu and S. Fan, *Bends and splitters for self-collimated beams in photonic crystals*, Appl. Phys. Lett. **83**(16), 3251–3253 (2003).

[Zha90] Z. Zhang and S. Satpathy, *Electromagnetic wave propagation in periodic structures : Bloch wave solution of Maxwell's equations*, Phys. Rev. Lett. **65**(21), 2650–2653 (1990).

[Zha96] J. P. Zhang, D. Y. Chu, S. L. Wu, W. G. Bi, R. C. Tiberio, R. M. Joseph, A. Taflove, C. W. Tu and S. T. Ho, *Nanofabrication of 1D photonic bandgap structures along a photonic wire*, IEEE Photon. Technol. Lett. **8**, 491–493 (1996).

[Zha04] Z. Zhang and M. Qiu, *Small-volume waveguide-section high Q microcavities in 2D photonic crystal slabs*, Opt. Express **12**(17), 3988–3995 (2004).

Résumé

Une compréhension fine des interactions de la lumière avec des matériaux structurés à l'échelle de la longueur d'onde est nécessaire pour parvenir à contrôler les photons (émission, propagation et détection) dans de petits volumes de l'ordre de quelques λ^3. Les applications de ce contrôle couvrent des domaines très variés, allant des interconnexions optiques à la réalisation d'expériences d'électrodynamique quantique à l'état solide. Au cours de cette thèse, nous avons étudié les interactions de la lumière avec des structures à base de cristaux photoniques bidimensionnels gravés dans un empilement de couches minces, structures qui peuvent être utilisées aussi bien en optique guidée qu'en optique en espace libre. Pour cela, des outils de simulation numérique tridimensionnelle performants ont été développés.

Tout d'abord, nous avons réalisé une étude théorique et numérique de la propagation de la lumière dans des guides à cristaux photoniques. Nous nous sommes intéressés à un système modèle, le guide à une rangée manquante, ainsi qu'à trois quantités physiques essentielles, l'atténuation, la durée de vie et le coefficient de réflexion du mode fondamental.

Nous avons également étudié le confinement de la lumière dans des microcavités à cristaux photoniques. Nous avons en particulier montré que, même à l'échelle de la longueur d'onde, la physique du confinement est essentiellement gouvernée par des quantités classiques : les pertes radiatives à l'interface des miroirs et la vitesse de groupe du mode de Bloch guidé à l'intérieur de la cavité.

Finalement, nous avons étudié une application des cristaux photoniques à l'optique diffractive en espace libre. Leurs propriétés de dispersion structurale originales nous ont permis de concevoir des optiques diffractives qui restent efficaces sur une large bande spectrale.

Mots-clés : Guides d'onde à cristaux photoniques, microcavités à cristaux photoniques, optique diffractive, méthodes numériques pour l'électromagnétisme, nanophotonique, structures sub-longueur d'onde, composants pour l'optique intégrée.