MODÉLISATION DE NANOSTRUCTURES

Sommaire

I.1	Quelques rappels sur les cristaux photoniques	13
I.2	Rappels sur la modélisation des CP	19
I.3	Couplage entre deux guides d'onde par une structure périodique	36
I.4	Étude théorique de nanostructures	44
I.5	Conclusion	50

Nous voulons étudier des structures particulières, comportant d'une part des guides optiques traditionnels (guides d'ondes ruban sur une structure multicouche de $SiO_2/SiON/SiO_2$ sur substrat de Si), de tailles micrométriques et d'autre part des structures photoniques, qui ne sont autres que des trous percés à la surface des échantillons, d'échelle nanométrique. L'interaction entre ces deux éléments d'échelles différentes est une chose encore mal connue et peu étudiée. Nous ferons tout d'abord une étude des guides d'onde qui seront utilisés lors de cette étude. Puis nous nous attarderons sur les structures photoniques en soi et sur l'interaction que nous attendons avec les guides d'ondes.

I.1 QUELQUES RAPPELS SUR LES CRISTAUX PHOTONIQUES

Nous verrons dans cette partie l'importance prise par les structures périodiques de plots et de trous dans les recherches récentes, surtout dans le cadre de l'effet de bandes photoniques interdites.

1.1 Les cristaux photoniques

Les structures photoniques périodiques de taille sub-longueur d'onde ont fait l'objet depuis une dizaine d'années de recherches continues sur le plan de la théorie, de la fabrication et des applica-

tions¹. Les cristaux photoniques (souvent appelés aussi matériaux à bandes photoniques interdites (BIP)²) peuvent être de différentes dimensions (cf. fig. I.1):

- 1D, plus connus sous le terme de miroirs de Bragg;
- 2D actuellement les plus faciles à modéliser avec les moyens de calcul courants. Ils présentent une analogie avec les structures planaires réalisées par lithographie électronique (e-beam) associé à une gravure RIE (Reactive Ion Etching);
- 3D, dont les effets sont les plus intéressants puisqu'ils permettent un contrôle significatif de la propagation dans les trois dimensions spatiales, par contre leur fabrication reste encore un défi technologique malgré les réussites de démonstrations expérimentales [5–9].



(a) Cristal 1D, réseaux de Bragg





(b) Cristal 2D, structure périodique de trous ou de plots

(c) Cristal 3D

FIG. I.1 – Les différentes dimensions des cristaux photoniques

1.1.1 Structures de bandes photoniques

Un cristal est un arrangement périodique d'atomes ou de molécules. Par conséquent, un cristal permet une propagation d'électrons, et en particulier, sa structure périodique peut introduire des valences dans la structure de bande d'énergie du cristal, de telle sorte que les électrons ne peuvent se propager qu'avec certaines énergies. L'analogue optique d'un tel cristal (que nous verrons un peu plus en détail dans la partie suivante) est un cristal photonique, dans lequel la périodicité est du à un

^{1.} Pour en savoir plus sur l'état de l'art de ce type de structures, le lecteur pourra consulter le livre « fondateur »de J. D. Joannopoulos et al. [1] ou celui plus récent J.-M. Lourtioz et al. [2]. Voir aussi les premiers articles de Yablonovitch [3], [4].

^{2.} Le terme «bande interdite photonique »vient de l'analogie qui a été faite au début de l'exploitation de ces structures avec la physique du solide. En effet, de la même manière que la périodicité d'un cristal solide impose des bandes de conduction et de valence pour les électrons, la structuration périodique des matériaux optiques est le moyen de contrôler les énergies et les flux de photons à l'intérieur de ces derniers.

arrangement périodique de matériaux diélectriques ou métalliques. En effet, un matériau dont l'indice de réfraction varie périodiquement suivant les différentes directions de l'espace pourra présenter des bandes d'énergie interdite pour les photons. Ainsi, dans certaines gammes de longueurs d'onde de l'ordre de la période de la structure, la lumière ne pourra se propager dans le matériau et sera réfléchie quelle que soit son incidence. Cette gamme de longueurs d'onde est appelée bande interdite photonique (BIP ou Photonic Band Gap (PBG)) et est à la base du concept de cristaux photoniques.

Quand les ondes électromagnétiques se propagent dans un cristal photonique, il existe une relation entre les vecteurs d'onde et les fréquences ou relation de dispersion. Cette relation permet de remonter à la *structure de bande* du cristal. Un cristal photonique à deux dimensions (2D) est périodique selon un plan (par exemple le plan xz) et invariant selon la troisième direction (par exemple la direction y). Ainsi, les modes propagatifs doivent osciller dans la direction y, avec un vecteur d'onde k_y . Si $k_y = 0$, une onde électromagnétique peut être décomposée en deux polarisations. La polarisation TE correspond au cas où le champ électrique \vec{E} est parallèle à l'axe des barreaux ou des trous de la structure. La polarisation TM correspond, quant à elle, au cas où le champ magnétique \vec{H} est parallèle à l'axe des cylindres. Si, pour certaines gammes de fréquences, les ondes électromagnétiques ne peuvent se propager dans le cristal photonique pour aucune de ces polarisations, on dit que le cristal possède une *bande interdite photonique* (BIP) 2D complète.

L'effet de BIP peut être appliqué à un certain nombre d'applications dont je citerai ici quelques exemples pour illustration.

1.1.2 Cavités dans les cristaux photoniques

Si un défaut unique est introduit dans une structure périodique à l'origine supposée parfaite, un mode (ou un groupe de modes) peut être obtenu à une certaine fréquence (ou à plusieurs fréquences spécifiques) dans la BIP. Le défaut se comporte comme une cavité entourée de miroirs, puisque les ondes à cette fréquence ne peuvent pas se propager dans le cristal photonique parfait. Les cavités dans les cristaux photoniques, qui ont habituellement de très hauts facteurs de qualité, ont l'avantage d'être très compactes et ne peuvent supporter que peu de modes (voir Fig I.2(a)).

Cet effet trouve de nombreuses applications comme des systèmes laser [10], des résonateurs [11], antennes [12] ou encore pour les composants des circuits intégrés tout-optiques ou les système de communication optique [13]. On peut imaginer des coupleurs sélectifs en longueurs d'onde (*channel*

drop filters), qui permettraient d'accéder à un canal d'un signal de multiplexage en longueur d'onde (WDM (*wavelength division multipliexed*), tout en laissant les autres canaux intacts.



(a) Cavité résonante dans un cristal photonique 2D. Un mode de résonance est créé par l'introduction d'un défaut dans la structure (en augmentant le diamètre d'un des tiges de 50%.



(b) Cartographie du champ électrique lorsque une onde électromagnétique se propage dans un guide d'onde faisant un virage à 90° dans un cristal photonique.

FIG. I.2 – Deux effets intéressants provoqués par des défauts introduits dans une structure photonique (matrice carrée de plots diélectriques (R = 0,18a, $\varepsilon = 11,4$) dans l'air). Calculs FDTD. Sources : http://ab-initio.mit.edu/photons/index.html, site de The Joannopoulos Research Group at MIT.

1.1.3 Guides d'onde dans les cristaux photoniques

Deux types de guides d'onde ont été principalement développés pour guider des ondes électromagnétiques le long d'une ligne, soit en formant des guides d'onde par des tubes métalliques, soit des guides d'onde diélectriques pour les domaines de l'infrarouge ou du visible. Les guides d'onde métalliques permettent des transmissions sans perte uniquement pour le domaine des microondes, alors que les guides d'onde diélectriques ont pour leur part le défaut de provoquer de grandes pertes dans le cas de virage de fortes courbures.

Par contre, si une ligne de défauts est introduite dans un cristal photonique parfait possédant une bande interdite photonique, la lumière y sera guidée, dans les gammes de fréquence comprises dans la BIP, d'un bout à l'autre de cette ligne de défaut, la lumière n'ayant pas la possibilité de se propager dans le cristal photonique. Les études théoriques et expérimentales de ce type de composants ont montré de faibles pertes en transmission, même dans le cas extrême de virage à 90°. Par exemple, le cas proposé Fig. I.2(b) montre une transmission de 100% [14]. Cette propriété semble très promet-teuse en application dans les systèmes de communication optique et pourra permettre à terme à une

forte miniaturation des composants optiques intégrés si les structures peuvent être fabriquées avec la précision nécessaire.

À partir de ces propriétés, on peut envisager de nombreuses fonctions : filtrage en longueur d'onde, couplage sélectif, multiplexage, interféromètres Mach-Zehnder... le tout intégré dans des systèmes optiques de très petites tailles. De tels composés ont été proposés par de nombreuses équipes [15–21]. Des efforts théoriques et expérimentaux ont été notamment remarqués pour la réalisation de guides d'onde monomodes pour les applications télécoms [14, 15, 22–24]. À cause de sa faible taille, les guides d'onde sur cristaux photoniques monomodes ont malheureusement une faible efficacité en couplage avec les fibres optiques ou les guides d'onde optiques conventionnels utilisés. Des études ont permis d'améliorer le couplage dans de telles structures [25–28]. Pour cette même raison, les guides d'ondes sur CP de tailles plus importantes font encore l'objet de recherches [28–30].

Ces études et réalisations sont toutes dans le cadre de CP bidimensionnels, dont la fabrication est plus aisée, mais qui ne garantit pas un confinement de la lumière dans la direction transversale. Des études ont donc été faites dans le but de diminuer les pertes en propagation [19, 31–34]. D'autres configurations ont été tentées, notamment des guides d'ondes sur des CP formés par des tiges [35] ou encore mieux, des guides d'onde dans des CP tridimensionnels [36].

1.1.4 Fibres à cristal photonique

Bien entendu, ce sujet prometteur a donné naissance à un grand nombre d'applications mais qui s'éloignent du sujet de ce travail. Je ne citerai que le cas des *fibres photoniques* qui a été la première application des cristaux photoniques à être commercialisée.

Dans une fibre optique classique, la lumière est guidée par le phénomène de réflexion totale interne. Ce guidage s'effectue dans le cœur de silice dont l'indice est plus élevé que celui de la gaine, également en silice, la différence d'indice étant obtenue par un dopage différent de la gaine et du cœur.

Les fibres à cristal photonique [37], quant à elles, contiennent des trous d'air répartis sur un réseau périodique (voir Fig. I.3). On peut comparer la structure de la fibre à un cristal photonique 2D de hauteur infini avec un défaut ponctuel en son centre. À la différence des structures présentées plus haut, la propagation lumineuse ne se fait pas dans le plan du cristal, mais parallèlement à l'axe des structures. La lumière est confinée au cœur de la fibre par l'action d'une structure périodique (hexagonal ou en



FIG. I.3 – Exemple de fibre à cristal photonique.

nids d'abeille) entourant un défaut. Le principe de fonctionnement de ces fibres peuvent être séparés en deux types :

- la lumière est guidée par réfraction interne, de la même manière que les fibres optiques traditionnelles [38]. Le cœur de la fibre est constitué d'un matériau de haut indice, entouré d'un matériau effectif d'indice plus faible, qui est un matériau troué périodiquement par des cylindres d'air. Une propriété intéressante de ce type de fibre est la possibilité d'obtenir un guidage monomode sur un vaste domaine de longueur d'onde.
- la lumière est guidée dans les fibres à cristal photoniques grâce à l'existence d'une BIP et la création d'un mode de défaut au sein de cette bande [39]. La structure périodique de trous percée autour du cœur permet d'agir à la manière d'un miroir de Bragg et d'y renvoyer la lumière. L'avantage de ce type de fibre est de pouvoir guider la lumière dans un cœur de bas indice, tel que l'air ou le vide. Par contre, cette fibre, utilisant l'effet de BIP ne permet qu'une bande spectrale limitée.

Contrairement aux fibres conventionnelles qui pour être monomodes nécessitent d'un faible taille de cœur, les fibres à cristal photonique monomodes permettent permet des tailles de cœur beaucoup plus importantes (jusqu'à cinquante fois plus grandes [40]). L'intérêt de ces fibres est donc la possibilité de transmission de fortes puissances optiques. Inversement, des fibres avec des tailles de modes guidés très faibles peuvent être fabriquées (réseau de trou large et cœur très petit). Dans de telles fibres, où le mode est ultra-confinée, des non-linéarités optiques peuvent être obtenues et permet la génération de supercontinua en y injectant un laser nano- ou femtoseconde [41].

On voit la grande liberté d'utilisation que permet ces différents types de fibres à cristal photonique et des recherches sont actuellement en cours, notamment dans le domaine des télécommunications optiques à haut débit et longue portée.

1.1.5 En conclusion

Avec la découverte de l'effet de bande interdite photonique, de nombreux champs d'investigation se sont ouverts aux chercheurs. Cependant, le défi technologique que représente la fabrication des cristaux photoniques nécessite des études théoriques préalables, ce qui explique en partie la grande quantité de travaux centrés sur la modélisation.

I.2 QUELQUES RAPPELS SUR LA MODÉLISATION DES CRISTAUX PHOTONIQUES ET MÉTHODES CHOISIES

2.1 Présentation générale

2.1.1 Analogie photon-électron

Le concept de cristal photonique est né de l'analogie entre les matériaux à bandes interdites photoniques et des matériaux à bandes interdites électroniques : de la même manière que la périodicité du cristal solide impose les bandes d'énergie et les propriétés de conduction de ses électrons, une structuration périodique des matériaux optiques à l'échelle de la longueur d'onde permet de contrôler les énergies et les flux de photons en leur sein. Cette analogie électron photon peut être explicitée simplement par le lien de parenté existant entre les équations de Maxwell utilisées pour décrire les ondes électromagnétiques et l'équation de Schrödinger utilisée pour traiter les fonctions d'onde électronique. Ainsi, par exemple en omettant la fonction de spin, on observe de grandes similitudes entre l'équation d'une onde électromagnétique harmonique dans un milieu diélectrique sans perte (voir Eq. I.1a) et l'équation de la fonction d'onde d'un électron de masse m dans le potentiel V (voir Eq. I.1b) [2]:

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_r(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r})$$
(I.1a)

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r})$$
(I.1b)

La différence entre les photons et les électrons tient :

- à la nature vectorielle ou scalaire respectivement de l'équation d'onde;
- à une statistique différente de l'occupation des états d'énergie.

Une comparaison rapide entre les deux équations montre que la permitivité diélectrique relative $\varepsilon_r(\mathbf{r})$ (qui n'est autre que le carré de l'indice réfraction *n* pour u n milieu non-absorbant) joue dans l'équation I.1a un rôle analogue au potentiel *V* dans l'équation I.1b, autrement dit, une variation périodique de $\varepsilon_r(\mathbf{r})$ pourra donc conduire à l'apparition de bandes photoniques interdites pour les photons dans des domaines de fréquences ω (ou à des longueurs d'onde λ) pour lesquels la lumière ne pourra pas se propager dans la structure. N'étant pas non plus absorbée, cette lumière sera réfléchie.

L'analogie électron-photon peut aussi être envisagée au delà de la notion de bande interdite. En effet, par exemple, si l'on considère un guide d'onde planaire consistant en une couche de permittivité ε_1 , placée entre deux couches de confinement semi-infinies de permittivité $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$. Ce système peut être comparé par analogie à un puits de potentiel V_1 placé entre deux barrières de potentiels $V_1 < V_2$. Ainsi, pour une constante de propagation donnée de la lumière, supérieure à $\varepsilon_2 \omega/c$, dans un plan du guide, il peut exister des modes de propagation guidées à des fréquences discrètes, comme il existe des niveaux électroniques à des énergies discrètes dans les puits de potentiels.

Bien entendu, cette analogie, bien qu'ayant permis de prévoir de nombreux effets de matériaux à bande photonique interdite, ne peut servir de modélisation, puisqu'elle ne prend pas en compte la nature vectorielle de l'onde électromagnétique. Pour aller plus loin dans l'exploitation de tels matériaux, il a donc fallu développer des outils numériques permettant de prévoir avec précision les propriétés des cristaux photoniques, qui doivent prendre en compte les lois fondamentales de l'électromagnétisme.

2.1.2 Quelques outils de modélisation de cristaux photoniques

De nombreux outils de modélisation des phénomènes de propagation et de diffraction des ondes électromagnétiques ont été développés depuis la fin des années 60 grâce aux performances croissantes des moyens de calcul.

Pour limiter la complexité de la modélisation numérique de cristaux photoniques, la *méthode des ondes planes* [1], d'abord utilisée, a permis et permet encore, sans grande puissance de calcul, de calculer les bandes interdites photoniques. Cependant, elle suppose des hypothèses fortes, notamment sur le fait que les cristaux photoniques ainsi modélisés sont illimités dans toutes les dimensions de l'espace, ce qui n'est bien entendu pas le cas des cristaux photoniques réels qui sont limités en taille. La méthode Ho (ou plane wave extension method, que nous appellerons par la suite méthode PWE) dérivée de cette dernière, plus légère, est couramment utilisée pour déterminer les BIP [42].

Un autre méthode fréquemment utilisée dans le cas de cristaux infinis est la méthode dite KKR (Korringa-Kohn-Rostocker) [43]. Cette méthode permet d'éviter certaines instabilités numériques auxquels conduisent la méthode des ondes planes, principalement dues au fait que la permittivité du cristal ainsi que certaines composantes des champs électromagnétiques sont discontinues à la frontière entre deux matériaux. Cette méthode (dérivée des articles [44] et [45]) est basée sur l'utilisation de la matrice de diffraction de la maille élémentaire. Un des gros avantages de la méthode KKR est qu'elle donne directement la fonction de Green, qui permet de déduire la densité d'états (Density of States, DOS) et la densité locale d'états, quantités importantes dans l'étude des phénomènes physiques liés aux cristaux photoniques³.

Les méthodes numériques qui prennent en compte la taille finie du cristal sont nécessaires notamment pour la conception de systèmes (cavités résonantes, guides photoniques) utilisant l'effet de BIP. Cependant, celles-ci, plus complexes, demandent des ressources informatiques (mémoire vive, disque dur) ainsi qu'un temps de calcul plus important, qui limite pour l'instant le champ d'investigation. Ces méthodes sont par contre nécessaires pour modéliser des cristaux photoniques avec défauts, comme par exemple les cristaux photoniques possédant des lacunes dans leur périodicité.

Nous pouvons différencier principalement deux grands axes de modélisation de tels cristaux finis :

Le premier comprend les modèles permettant de calculer les propriétés de réflexion et de trans-

^{3.} Par définition, la densité d'états est le nombre de modes électromagnétiques permis par unité de fréquence.

mission du réseau de diffraction formé par une couche de cristal. On utilise dans ce cas des matrices de transfert, de réflexion et de transmission, certaines méthodes utilisent des codes à éléments finis. Cette méthode s'utilise principalement quand la dimension verticale du cristal est finie, ses dimensions horizontales restant infinies, en tirant partie de la pseudo-périodicité du champ dans les directions horizontales. Les temps de calcul pour cette méthode reste raison-nable mais dans le cas de cristaux photoniques possédant un défaut, on est obligé de recourir à la méthode de la supercellule pour traiter ces problèmes. On peut citer dans cette catégorie la méthode de Pendry [46], dont le principal intérêt est d'être exclusivement numérique et donc d'utiliser les équations de Maxwell d'une manière directe, sans l'usage d'intermédiaire mathématique important.

– Le second ne prend pas en compte en compte la périodicité du cristal et revient à traiter le problème comme un problème de diffraction classique. Cette seconde catégorie propose bien entendu des méthodes beaucoup plus gourmande en ressource informatique et plus complexe en programmation, mais permet de répondre à quasimment tous les problèmes que l'on peut se poser. Dans cette catégorie, la méthode des différences finies temporelles (en anglais Finite Difference Time Domain, FDTD [47]) est la méthode ayant le plus de succès actuellement de par sa flexibilité. Son principe est de faire une première résolution des équations de Maxwell dans le domaine temporel et non dans le domaine des fréquences. Nous verrons par la suite plus en détail cette méthode.

2.1.3 Conclusions et méthodes utilisées

Nous avons vu dans cette rapide présentation qu'il existe actuellement un certain nombre d'outils permettant de modéliser des problèmes de cristaux photoniques et de structures périodiques. Il faut remarquer que certaines méthodes peuvent être tout à fait complémentaires. Par exemple, pour prédire la propagation des champs dans des structures guidantes (obtenues par une(des) ligne(s) de lacune dans la périodicité du cristal photonique), il est utile d'étudier les bandes interdites photoniques dans un cristal équivalent sans défauts par une méthode de la première catégorie avant de réaliser des propagations avec une des méthodes issues de la deuxième catégorie (beaucoup plus gourmande en ressources informatiques).

Nous avons choisi de travailler avec un logiciel commercial (RSoft⁴) rassemblant deux méthodes :

- FullWave (logiciel de FDTD)
- BandSolve (logiciel de calcul de bandes photoniques utilisant la méthode PWE (Plane Wave Expansion).

2.2 Quelques notions sur la théorie des structures à bandes photoniques

Calculer un diagramme de bandes consiste à trouver les modes optiques d'une structure photonique décrite par une variation périodique des constantes diélectriques. La figure I.1 présente schématiquement la distribution des constantes diélectriques $\varepsilon(\mathbf{r})$ en 1, 2 ou 3 dimensions.

Un propriété des systèmes périodiques nous permet d'exprimer une fonction périodique $f(\vec{r})$ en terme de maillage. Un maillage est défini par un ensemble de points discrets dans l'espace qui se répètent périodiquement. Par définition, il existe des vecteurs \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 tel que pour tout vecteur de la maille \vec{r} du maillage :

$$\vec{r} = l\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + n\vec{a}_3$$

avec l, m et n étant des entiers.

 \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 sont des vecteurs de base du réseau en 1 ou 2 dimensions, 1 ou 2 vecteurs suffisent à décrire la maille.

On associe à ce maillage un maillage réciproque. Les vecteurs de ce réseau réciproque sont définis par les équations I.2.

$$\vec{r_{1}} = 2\pi \frac{\vec{a_{2}} \times \vec{a_{3}}}{\vec{a_{1}} \cdot \vec{a_{2}} \times \vec{a_{3}}}$$

$$\vec{r_{2}} = 2\pi \frac{\vec{a_{3}} \times \vec{a_{1}}}{\vec{a_{1}} \cdot \vec{a_{2}} \times \vec{a_{3}}}$$

$$\vec{r_{3}} = 2\pi \frac{\vec{a_{1}} \times \vec{a_{2}}}{\vec{a_{1}} \cdot \vec{a_{2}} \times \vec{a_{3}}}$$

(I.2)

Le réseau direct et le réseau réciproque sont reliés par l'équation I.3

^{4.} Le lecteur pourra trouver des informations sur le site www.rsoftdesign.com .

$$\vec{a_i} \cdot \vec{r_j} = 2\pi \delta_{ij} \text{ avec } \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j; \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{cases}$$
(I.3)

Par définition, les vecteurs définissant le réseau direct et réciproque sont inverses l'un de l'autre. Ainsi, puisque les vecteurs du réseau direct ont la dimensions d'une longueur, ceux du réseau réciproque ont la dimension de l'inverse d'une longueur. Dans notre cas, les vecteurs du réseau réciproque fournissent donc une base naturelle pour les vecteurs d'onde optique qui joueront un rôle prépondérant dans la théorie des bandes interdites photoniques.

2.2.1 Relation de dispersion

Quand nous étudions les modes optiques d'une structure photonique conventionnelle (fibres optiques et autres guides d'ondes), il est nécessaire de déterminer la relation de dispersion $\vec{k} = \vec{k}(\omega)$, reliant le vecteur d'onde \vec{k} ou constante de propagation k d'un mode donné à la fréquence ω . Le vecteur d'onde permet de déterminer la vitesse de phase du mode conformément à l'équation I.4, où nous avons choisi un mode se propageant selon l'axe z et la vitesse de phase étant $v_p = \omega/k$.

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}(x,y) \exp[i\omega(t-z/v_p)]$$
(I.4)

En inversant la relation de dispersion pour obtenir la relation $\omega = \omega(\vec{k})$, nous trouvons une solution différente pour chaque valeur de \vec{k} . Pour des valeurs suffisamment grandes de k, le système supportera plusieurs modes et nous trouverons plusieurs solutions ω_i pour chaque valeur de \vec{k} .

Dans des systèmes périodiques comme les cristaux photoniques, les courbes de dispersion sont sensiblement différentes. Nous recherchons toujours les fréquences $\omega_i(\vec{k})$ de tous les modes pour un vecteur d'onde \vec{k} , mais cette fois, il n'existe pas de solutions distinctes pour chaque valeur de \vec{k} .

La figure I.4 présente une portion d'une courbe de dispersion calculée dans le cas de modes TM pour une structure rectangulaire périodique dans une dimension (réseau de Bragg) de période a. Nous remarquons que lorsque le vecteur d'onde \vec{k} varie, les fréquences de mode varient périodiquement. En fait et nous le verrons plus en détail par la suite, pour toute structure périodique, deux vecteurs d'onde qui différent d'un vecteur du réseau réciproque sont équivalent. Plus précisément, pour tout vecteur d'onde \vec{k} et pour tout vecteur du réseau réciproque \vec{G} , il est possible de trouver un mode j



FIG. I.4 – Courbes de dispersion pour un réseau 1D dans le cas d'une polarisation TM. D'autres bandes apparaissent pour des fréquences supérieures sans limite.

pour chaque mode *i* tel que $\omega_i(\vec{k}) = \omega_j(\vec{k} + \vec{G}).$

Ce résultat a pour conséquence que pour trouver tous les modes du cristal, il est seulement nécessaire de résoudre le problème dans une zone limitée autour de l'origine de l'espace réciproque (l'espace des vecteurs d'onde). Cette zone sera précisément définie comme étant la première zone de Brillouin (1BZ).

2.2.2 La première zone de Brillouin (1BZ)

La première zone de Brillouin est la cellule élémentaire de l'espace réciproque où les points sont les plus proches de l'origine que tous les autres points du réseau périodique. La figure I.5 présente plusieurs exemples de cristaux photoniques et les zones de Brillouin correspondantes, pour des cas 1D (réseau) et 2D (cristal planaire à maille carré ou triangulaire)⁵.

Comme on peut le remarquer sur ces figures, dans les cas 1D et 2D, la première zone de Brillouin s'obtient en traçant les médiatrices⁶ des segments joignant l'origine des nœuds les plus proches du réseau réciproque. À partir de ce domaine ainsi délimité, il est possible de couvrir tout l'espace en faisant des translations d'un vecteur \vec{G} . Il suffit donc de faire évoluer \vec{k} dans ce domaine pour représenter

^{5.} Il existe bien entendu des mailles 3D, où il est possible de définir des zones de Brillouin correspondantes. Ce cas n'étant pas étudié dans ce travail, il ne sera pas détaillé ici.

^{6.} Dans le cas 3D, ce sera les plans médiateurs.



FIG. I.5 – Cristaux photoniques 1D et 2D (à gauche) et les zones de Brillouin correspondantes (au centre (grisé) et à droite).

l'ensemble des courbes de dispersion du cristal. Ce domaine peut encore être réduit en considérant les symétries du cristal. Prenons l'exemple du cas 1D (Fig. I.5, première ligne). Dans ce cas, la première zone de Brillouin est l'intervalle $[-\pi/a, + \pi/a]$. Mais on peut remarquer que si une onde de vecteur \vec{k} et de fréquence ω est solution du problème, la symétrie du système nous dit que l'onde se propageant en sens opposé, de vecteur $-\vec{k}$, l'est aussi. On peut donc restreindre l'étude à un intervalle $[0, + \pi/a]$, que l'on nomme zone de Brillouin irréductible.

Cette simplification du domaine d'étude pour les structures périodiques allège l'appel aux ressources mémoire et le temps de calcul.

2.2.3 Théorème de Bloch

Par la suite, le problème sera exprimé en fonction du champ magnétique $\vec{H}(\vec{r},t) = \vec{H}(\vec{r}) \exp(i\omega t)$.

Les modes d'un cristal photonique doivent être, bien entendu, solutions des équations de Maxwell. De plus, la forme possible des solutions tient compte des considérations de symétrie du système. Puisque la distribution des indices optiques est identique dans chaque cellule unitaire définie, le mode doit rester inchangé dans le cas d'un translation dans l'espace d'un vecteur de réseau \vec{R} . Tout au plus, la solution peut varier d'un facteur de phase constant.

Exprimons la translation grâce à un opérateur $\hat{T}_{\vec{R}} = \exp(i\vec{R}\cdot\nabla)$ et cherchons des solutions valeurs propres de $\hat{T}_{\vec{R}}$, c'est-à-dire ne variant seulement que d'un terme de phase par opération de $\hat{T}_{\vec{R}}$.

Exprimons le champ magnétique sous la forme d'une onde plane arbitraire multipliée par une série de Fourier dans l'espace réciproque [1]:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) \sum_{j} c_{j}\hat{\varepsilon}_{j} \exp(i\vec{G}\vec{r})$$
(I.5)

 c_j sont des coefficients de dilatation, $\hat{\varepsilon}_j$ sont des vecteurs de polarisation choisis pour garantir que le champ est transverse. En appliquant l'opérateur de translation à $\vec{H}(\vec{r})$, nous obtenons les résultats I.6 :

$$\hat{T}_{\vec{R}}\vec{H}(\vec{r}) = \sum_{j} c_{j}\hat{\varepsilon}_{j} \exp\left[i\left(\vec{k}+\vec{G}_{j}\right)\cdot\vec{R}\right] \exp\left[i\left(\vec{k}+\vec{G}_{j}\right)\cdot\vec{r}\right]$$

$$= \sum_{j} c_{j}\hat{\varepsilon}_{j} \exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{R}\right] \exp\left[i\left(\vec{k}+\vec{G}_{j}\right)\cdot\vec{r}\right]$$

$$= \exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{R}\right] \exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{r}\right] \sum_{j} c_{j}\hat{\varepsilon}_{j} \exp\left[i\vec{G}_{j}\cdot\vec{r}\right]$$

$$= \exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{R}\right]\vec{H}(\vec{r})$$
(I.6)

Ainsi, le champ magnétique ne change bien que d'un facteur de phase par translation d'un vecteur du réseau, et satisfait bien la symétrie. En fait, il est possible de montrer que cette expression est la forme la plus générale, un résultat connu sous le nom de *théorème de Bloch*. Le champ magnétique doit prendre la forme d'une onde plane multipliée par une fonction de la périodicité du réseau :

$$\vec{H}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$$
(I.7)

où $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})=\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R})$ pour tout vecteur du réseau $\vec{R}.$

2.2.4 Formulation des valeurs propres des équations de Maxwell

En considérant que tous les matériaux sont linéaires, sans perte et isotropes, les équations de Maxwell, en unités SI, se présentent ainsi :

$$\nabla \cdot \vec{H}(\vec{r},t) = 0 \tag{I.8a}$$

$$\nabla \cdot \varepsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r},t) = 0 \tag{I.8b}$$

$$abla imes \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t},$$
(I.8c)

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r},t) = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$
(I.8d)

avec :

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{r}) \vec{E} \tag{I.9a}$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \tag{I.9b}$$

où $\varepsilon(\vec{r})$ est la permittivité diélectrique. En séparant les variables de temps et d'espace dans les expressions de \vec{H} et de \vec{E} :

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}(\vec{r}) \exp(i\omega t)$$

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \vec{H}(\vec{r}) \exp(i\omega t)$$
(I.10)

nous combinons les équations de Maxwell pour obtenir l'équation d'Helmholtz :

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times\right) \vec{H}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r})$$
(I.11)

Cette équation est souvent nommée dans la littérature des cristaux photoniques équation-maîtresse (master equation). Le théorème de Bloch nous permet d'écrire $\vec{H}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$, où $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$ est

fonction de la périodicité du réseau. En l'insérant dans l'équation I.11, nous obtenons :

$$\hat{L}\vec{u}_{\vec{k}} = (\mathbf{i}\vec{k} + \nabla) \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}(\mathbf{i}\vec{k} + \nabla)\right] \times \vec{u}_{\vec{k}} = \bar{\omega}^2 \vec{u}_{\vec{k}}$$
(I.12)

où $\bar{\omega} = \omega/c$ est la fréquence normalisée. Cette équation est l'équation fondamentale résolue par la plupart des logiciels servant à calculer les structures de bandes (dont RSoft *BandSolve* que nous avons utilisé). L'équation I.12 peut être vue comme une équation aux valeurs propres avec $\bar{\omega}$ comme valeur propre inconnue et $\vec{u}_{\vec{k}}$ comme vecteur propre, et avec le vecteur d'onde \vec{k} comme paramètre libre.

2.2.5 Les structures de bandes et les bandes interdites photoniques

Pour chaque valeur de \vec{k} , l'équation I.12 a un nombre infini de solutions $\bar{\omega}_{\vec{k},n}$ désignées par le numéro de bande n dans l'ordre des fréquences croissantes. La bande n = 0 est souvent par convention la bande la plus basse.

Quand \vec{k} varie, l'ensemble des solutions $\bar{\omega}_{\vec{k},m}$ pour un entier fixé *m* constitue une *bande*. La *structure de bande* du cristal est constituée de l'ensemble de ces bandes. Nous avons vu plus haut que le problème pouvait être réduit à l'étude des valeurs de \vec{k} comprises dans la première zone de Brillouin de l'espace réciproque.

En conclusion, une description complète de la structure de bande consiste à trouver toutes les solutions $\bar{\omega}_{\vec{k},n}$ pour toutes les valeurs de \vec{k} dans la 1BZ.

Les fréquences dans une bande particulière $\bar{\omega}_{\vec{k},m}$ varient continuement quand le vecteur d'onde \vec{k} varie et décrit une courbe dans l'espace des vecteurs d'onde pour des problèmes 1D, une surface pour les problèmes 2D (voir Fig I.6) et une *hypersurface* dans le cas 3D.

La lecture de ces graphiques n'est pas aisée. On peut observer si deux bandes adjacentes ne se touchent en aucun points. C'est par exemple le cas du graphe représentant la polarisation TE à droite de la Fig. I.6 où il existe une large bande interdite entre la première et la deuxième bande. Cependant, l'obtention de tels graphes nécessite pour certains cas (structure 2D compliquée ou quasimment toutes les structures 3D) de lourdes ressources de calcul.

Pour la plupart des applications les plus courantes qui consistent à localiser ou à optimiser les BIP, il est possible de réduire le domaine d'étude en examinant uniquement certains points de la 1BZ.



FIG. I.6 – Surface de fréquences calculée par BandSolve dans la 1BZ pour un réseau 2D carré de plots cylindrique dans l'air. À gauche : polarisation TM, à droite : polarisation TE.

La théorie des groupes permet cette simplification grâce aux simplifications dues aux symétries du réseau. En effet, si un espace de propagation interdite est obtenue au points de symétrie du réseau, nous pouvons être sûr que cette zone s'étendra à tous les points de la 1BZ. Pour construire les diagrammes de bandes, il convient donc de repérer les points de symétries de la structure(désignés par un certain nombre de lettres, Γ , M, K, X...) et de les relier par une ligne droite, comme il est montré dans les exemples de la troisième colonne de la Fig.I.5. Cette zone est appelée dans la littérature *zone de Brillouin irréductible*.

Les structures de bandes calculées en suivant les contours de la zone de Brillouin irréductible sont représentés sur un graphe simplifié. Voir par exemple les graphes I.7 où sont représentés les diagrammes de bandes correspondant aux surfaces de fréquence de la figure I.6. On n'observe toujours pas de BIP pour la polarisation TM (Fig. I.7(a)). Par contre la large bande interdite précédemment observée pour la polarisation TE apparaît bien (Fig. I.7(b)).

2.2.6 Remarques concernant les notations de polarisation

Jusqu'à présent, il n'a pas été discuté du caractère vectoriel du champ magnétique.

Considérons le repère cartésien (0xyz). Dans la suite, la direction 0z sera considéré être la direction de propagation de l'onde incidente et Oy la direction des axes des trous ou plots. En général, les



FIG. I.7 – Diagrammes de bande une structures à maille carrée de plots cylindriques dans l'air.

modes des cristaux photoniques 3D sont hybrides et décrits par les composantes (Hx, Hy, Hz, Ex, Ey, Ez). Pour les problèmes à une ou deux dimensions, l'équation vectorielle peut être séparée en plusieurs équations selon les modes de polarisation TE ou TM. Selon la littérature, les conventions peuvent être différentes. Pour des raisons de simplification, nous avons préféré suivre les conventions utilisées par le logiciel de calcul de bande que nous avons utilisé, RSoft *BandSolve*. Ainsi, les modes TE sont décrits par le système de composantes non nulles (Hx, Hz, Ey) et les modes TM par le système (Hy, Ex, Ez).

2.3 La méthode PWE

Le logiciel RSoft *BandSolve* que nous avons utilisé, permettant la détermination des structures de bande, utilise la méthode PWE (Plane Wave Expansion). Cette méthode permet de résoudre les équations de Maxwell dans le domaine des fréquences grâce à l'équation I.12. Il existe un certain nombre de versions de cette méthode [42, 48–53]. Je présenterai ici rapidement la méthode utilisée par Ho, Chan et Soukoulis [42].

En sachant que $\varepsilon_r(\vec{r})$ est périodique, le théorème de Bloch permet de décomposer le champ \vec{H} en ondes planes (voir Eq. I.13). De même, elle permet de décomposer la constante diélectrique $\varepsilon_r(\vec{r})$ (voir Eq. I.14).

$$H(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \sum_{\lambda=1,2} h_{\vec{G}\lambda} \hat{e}_{\lambda} \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r})$$
(I.13)

$$\frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} \varepsilon_r^{-1}(\vec{G}) \exp(\mathrm{i}\vec{G}\cdot\vec{r})$$
(I.14)

Dans ces équations, \vec{k} est le vecteur d'onde dans la zone de Brillouin du réseau, \vec{G} est un vecteur du réseau réciproque, et \hat{e}_1, \hat{e}_2 sont les vecteurs unités perpendiculaires à $\vec{k} + \vec{G}$, conformément à la nature transverse du champ \vec{H} ($\nabla \cdot \vec{H} = 0$). En reprenant l'équation maîtresse I.11 et en y substituant les résultats ainsi obtenus, nous obtenons les équations matricielles suivantes (Eq. I.15):

$$\sum_{\vec{G}'} |\vec{k} + \vec{G}| |\vec{k} + \vec{G}'| \varepsilon_r^{-1} (\vec{G} - \vec{G}') \begin{pmatrix} \hat{e}_2 \cdot \hat{e}'_2 & -\hat{e}_2 \cdot \hat{e}'_1 \\ -\hat{e}_1 \cdot \hat{e}'_2 & \hat{e}_1 \cdot \hat{e}'_1 \end{pmatrix} h_{\vec{G}'\lambda'} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_{\vec{G}\lambda}$$
(I.15)

L'équation I.15 peut être résolue en utilisant des méthodes de diagonalisation de matrices standards. Pour différents \vec{k} , il est possible d'obtenir une série de fréquences propres ω qui compose la structure de bandes du cristal photonique étudié.

2.4 Présentation de la méthode FDTD (Finite-Difference Time-Domain)

Il a été montré dans la partie précédente que la méthode PWE permettait une étude des cristaux photoniques parfaits et infinis. Cependant, pour le sujet qui nous intéresse, les structures étudiés sont finies, voire avec défauts, et couplées à des guides d'onde optique traditionnels. La PWE ne permet pas dans des conditions de calcul standards de faire l'étude de tels composants. La méthode FDTD, qui permet une résolution directe des équations de Maxwell⁷, paraît être un outil beaucoup plus adapté, prenant en compte la taille finie de structure photonique. Cette méthode, très souple, permet une modélisation du champ électromagnétique à l'intérieur de la structure décrite en fonction du temps. Elle permet aussi, en plaçant des capteurs, permettant l'intégration de l'intensité des champs sur un segment choisi, (*time monitors* dans *FullWave*) en entrée et en sortie de la structure, de calculer des spectres de transmissions pour un mode d'injection donné. Il sera fait ici un bref rappel des principes de cette méthode.

^{7.} Pour de plus amples détails, le lecteur peut se référer au livre [54].

2.4.1 Principe de la FDTD

Pour un matériau linéaire et isotrope dans une région de l'espace libre de courant et de charge isolée, les équations de maxwell peuvent s'écrire de la manière suivante (Eq. I.16):

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu(\vec{r})} \nabla \times \vec{E}$$
(I.16a)

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H} - \frac{\sigma(\vec{r})}{\varepsilon(\vec{r})} \vec{E}$$
(I.16b)

où $\varepsilon(\vec{r})$, $\mu(\vec{r})$ et $\sigma(\vec{r})$ sont respectivement la permittivité, la perméabilité et la conductivité du matériau, tous dépendants de la position. Les équations de Maxwell peuvent être discrètisées dans l'espace et le temps par la méthode des cellules de Yee [47], dont une cellule unitaire est montrée Fig. I.8.



FIG. I.8 – Cellule unitaire de Yee pour un maillage en trois dimension. On peut remarquer que les composantes du champ \vec{H} sont calculées pour des points décalés d'une demi-maille par rapport au maillage en fonction des composantes du champ \vec{E} .

De plus le temps est lui-même discrètisé par pas de Δt . Les composantes du champ \vec{E} sont alors déterminées à des temps $t = n\Delta t$ et les composantes de \vec{H} à des temps $t = (n + 1/2)\Delta t$, où n est un entier représentant le pas de calcul. Par exemple, les champs \vec{E} à un temps $t = n\Delta t$ est égal aux champs \vec{E} à un temps $t = (n - 1)\Delta t$ plus un terme supplémentaire calculé en fonction de la variation spatiale du champ \vec{H} au temps t.

Cette méthode permet d'écrire six équations relatives aux composantes dans le système de coordonnées cartésiennes xyz des champs \vec{E} et \vec{H} , qui seront utilisées pour calculer les champs en des points de la maille donnée, désignés par i, j et k. L'équation I.17 montrent deux de ces six composantes les champs H_x et E_x . Les quatre autres équations s'écrivent de la même manière [55].

$$H_x \Big|_{i,j,k}^{n+1/2} = H_x \Big|_{i,j,k}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{E_z \Big|_{i,j+1,k}^n - E_z \Big|_{i,j,k}^n}{\Delta y} - \frac{E_y \Big|_{i,j,k+1}^n - E_y \Big|_{i,j,k}^n}{\Delta z} \right)$$
(I.17a)

$$E_{x} \Big|_{i,j,k}^{n+1} = \frac{\varepsilon_{i,j,k} - \mu_{i,j,k} \Delta t/2}{\varepsilon_{i,j,k} + \mu_{i,j,k} \Delta t/2} E_{y} \Big|_{i,j,k}^{n} + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j,k} + \mu_{i,j,k} \Delta t/2} \left(\frac{H_{x} \Big|_{i,j,k}^{n+1/2} - H_{x} \Big|_{i,j,k-1}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{H_{z} \Big|_{i,j,k}^{n+1/2} - H_{z} \Big|_{i-1,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} \right)$$
(I.17b)

avec *n* représentant le pas de discrètisation temporelle; *i*, *j* et *k* indiquant les positions des nœuds de la maille respectivement dans les direction *x*, *y* et *z*; Δt est l'incrément de temps et Δx , Δy et Δz sont les incrémentations spatiales entre deux points voisins de la grille suivant respectivement les directions *x*, *y* et *z*.

On peut voir que pour un nombre fixé de pas temporels, le temps de calcul sera proportionnel au nombre de points de discrètisation sur le domaine de calcul.

2.4.2 Stabilité numérique

Le choix du pas temporel Δt n'est pas arbitraire. En effet, les équations temporelles de la FDTD imposent à Δt une certaine limite dépendant de Δx , Δy et Δz . Cette limite est nécessaire pour éviter une instabilité numérique. Ainsi, les calculs FDTD en trois dimensions sont stables si la condition ci-dessous (Eq. I.18) est satisfaite [54] :

$$\Delta t \le 1/c\sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2} + \Delta z^{-2}} \tag{I.18}$$

où c est la célérité de la lumière dans le vide.

2.4.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites aux bords de la fenêtre de calcul doivent être considérées avec attention. En effet, le champ électromagnétique à cet endroit doit être calculé d'une manière particulière, vu que les informations à l'extérieur de la fenêtre de calcul ne sont pas explicitement connues.

Beaucoup d'outils de simulation utilisent des conditions absorbantes sur les frontières du domaine qui éliminent toute propagation d'énergie dirigée vers l'extérieur de la fenêtre de calcul et empiétant sur ces bords. Une de ces méthodes les plus efficaces est la méthode dite *perfectly matched layer* (PML) [56], dans laquelle à la fois les conductivités électriques et magnétiques sont introduites de telle manière que l'énergie est absorbée sans induire de réflexion.

2.4.4 Paramètres importants de la FDTD

Le programme utilisé, bien que fermé car commercial, nous permet grâce à différents menus de choisir et modifier de nombreux paramètres. Ils se répartissent en deux catégories :

- Les paramètres physiques. Ils permettent de définir avec précision le système étudié avant le début du calcul, notamment la distribution d'indice de réfraction $n(\vec{r})$ et les différentes autres propriétés, telle que la dispersion dans le matériau. On peut citer aussi la définition de l'excitation du champ électromagnétique, c'est-à-dire l'état du champ électromagnétique au début du calcul (à t = 0).
- Les paramètres numériques. Ces paramètres sont liés directement à l'algorithme de calcul FDTD. Ainsi, il est nécessaire de définir la taille de la fenêtre de calcul, les conditions aux frontières de cette fenêtre (trouver de bons réglages pour la PML), la taille du maillage spatial $(\Delta x, \Delta y \text{ et } \Delta z)$ ainsi que celle du maillage temporel (plus souvent appeler pas temporel, Δt) en respectant bien sûr l'Eq. I.18.

I.3 COUPLAGE ENTRE DEUX GUIDES D'ONDE PAR UNE STRUC-TURE PÉRIODIQUE.

3.1 Description du système

Au début de notre travail, il était prévu de fabriquer sur les structures multicouches $(SiO_2/SiON/SiO_2)$ le type de structure utilisée dans la thèse présentée à Besançon par D. Mulin [57]. La configuration qui avait été retenue consistait à intégrer sur un même composant des guides d'onde parallèles et des nanostructures périodiques disposées perpendiculairement assurant la jonction. Le champ évanescent sur les parois latérales du guides permettent d'éclairer les structures (voir Fig. I.9). Dans ce travail, l'échantillon avait été fabriqué par le Laboratoire de Photonique et de Nanostructures (CNRS/LPN) par lithographie sur une structure multicouche SiO_2/Si_3N_4 sur substrat de Si. La technique de fabrication retenue avait pour conséquence que les plots et les guides, réalisés en même temps, avait la même hauteur. Les désavantages de cette méthode était l'obtention de guides d'onde très multi-modes et des échantillons de taille relativement petite ($5 \times 5mm^2$). Cependant des résultats prometteurs lors de la caractérisation avaient été obtenus [58,59].



FIG. I.9 – Configuration pour le couplage entre deux guides d'onde optique par l'intermédiaire d'une structure périodique.

Dans la configuration de la Fig. I.9, les structures périodiques sont excitées uniquement par le champ évanescent issu du guide d'onde servant à l'injection. À première vue, le phénomène résultant de cette méthode originale d'injection dans la structure périodique pourrait se rapprocher de l'effet observé dans les cristaux photoniques lorsque la lumière est guidée par une ligne de défauts. Il existe néanmoins une différence fondamentale entre ces deux phénomènes issus pour l'un d'une injection par onde évanescente (phénomène parfois appelé Evanescent Addressing Mode, EAM ou effet tunnel résonant [59, 60]) et l'autre par une onde propagative. Dans le cas de *l'adressage par onde évanescente*, le couplage optique entre deux régions est plus localisé et la présence de structures périodiques peut provoquer une délocalisation de la lumière pour certaines bandes de longueur d'onde. Une conséquence directe de cet effet est de pouvoir guider de la lumière sur une seule ligne de structures périodiques [60].

3.2 Étude théorique d'une structure simple

3.2.1 Résultats de la méthode développée par Girard et al.

Les simulations théoriques, réalisées en collaboration avec C. Girard, du CEMES de Toulouse, avait permis de modéliser la configuration expérimentale de la Fig.I.9 en utilisant le formalisme de Green (voir Fig.I.10).

La configuration géométrique qui avait été utilisée lors de ce calcul [59] est la suivante (voir Fig. I.11):

- Les plots sont carrés (300nm d'arête) et hauts de 180nm; il sont répartis en réseau carré, distants de 300nm;
- La matrice est composée de 6 lignes de onze plots chacune; ces structures sont d'indice $n_{structures} = 2,1$ et baignent dans l'air ($n_{air} = 1$);
- L'éclairage de la matrice est modélisé par une onde plane se propageant dans un milieu semiinfini d'indice $n_{guide} = 1,5$, et en réflexion totale sur le dioptre séparant ce milieu de celui contenant la matrice (angle d'incidence par rapport à la normale $\theta_i = 43^o$).
- La première rangée de plots est accolée au dioptre d'entrée; à l'extrémité de la matrice, un second dioptre introduisant un milieu d'indice 1,5 qui est également accolé à la dernière rangée de plots (simulation du guide passif).

On observe des variations de transmission par la matrice de plots selon la longueur d'onde. La figure I.10 présente une cartographie des intensités du champ électrique ($|E|^2$) et du champ magnétique ($|H|^2$) pour deux longueurs d'onde ($\lambda_1 = 760nm$ et $\lambda_2 = 810nm$) dans le plan médian. Le



FIG. I.10 – Distribution du champ électrique et magnétique, dans le plan médian des nanostructures de 300nm pour deux longueurs d'ondes (échelle d'intensité logarithmique). Calcul réalisé par C. Girard [59]



FIG. I.11 – Configuration géométrique de la simulation.

faisceau d'excitation est incident dans la partie supérieure gauche des images : il interfère avec l'onde plane réfléchie pour donner un système de franges. Nous observons un comportement complètement différent. Alors qu'à la longueur d'onde λ_1 , l'ensemble de la matrice est éclairée et l'on peut même remarquer une onde transmise à l'autre dioptre, on peut observer que pour la longueur d'onde λ_2 , la pénétration du champ dans la matrice est beaucoup plus faible et la propagation de l'onde dans les nanostructures est fortement atténuée. Ces résultats sont conformes à la théorie et rendent compte de la sensibilité du champ électromagnétique à la longueur d'onde dans ce type de structures.

3.2.2 Comparaison entre deux méthodes de simulation

Nous avons reproduit cette simulation en utilisant la méthode FDTD, qui, elle-aussi, a fait ces preuves pour la caractérisation de la propagation d'onde dans des structures sub-longueur d'onde. Nous nous sommes placés dans le cas à deux dimensions, la hauteur des plots étant infinie, et dans une polarisation TE. Pour le reste (indices de réfraction, taille des plots, injection...), les mêmes paramètres que précédemment ont été employés. La figure I.12 représente la distribution des champs électrique et magnétique pour les deux longueurs d'onde $\lambda = 760nm$ et $\lambda = 810nm$. FullWave ne permettant pas l'utilisation direct d'ondes planes, l'excitation est effectuée par une onde de forme gaussienne large (la largeur à mi-hauteur est prise cent fois plus grande que la fenêtre) venant du bas de la fenêtre de calcul et se dirigeant verticalement (la première version de Fullwave utilisée pour ce calcul ne proposait qu'une direction d'injection). Le dioptre et la nanostructure sont donc inclinés de manière à permettre une incidence par rapport à la normale au dioptre de 43 nécessaire pour permettre une réflexion totale. La fenêtre de calcul (d'une taille de $8 \times 8\mu m^2$) est entourée d'une PML. Les images sont présentées avec une échelle d'intensité linéaire. Nous trouvons des résultats équivalents à ceux obtenus par Mulin

et al. [59]. En effet, les deux longueurs d'onde choisies montrent deux comportement assez différents, notamment du point de vue de la pénétration des ondes électromagnétiques selon la longueur d'onde.

On remarque que, par les deux méthodes, on observe une localisation différentes des champs dans la structure. En effet, dans les figures I.10(a) et I.10(c), les maxima de $|E|^2$ sont situés sur le pourtour de chaque structure alors que dans les figures I.10(b) et I.10(d), les maxima de $|H|^2$ sont localisés au centre des plots. De même, les figures I.12(a) et I.12(c) montrent des maxima de $|E|^2$ entre les plots alors que dans les figures I.12(d), les maxima sont localisés à l'intérieur des plots.



(a) Module carré du champ électrique $|E|^2$. Longueur d'onde $\lambda = 760 nm$.



(c) Module carré du champ électrique $|E|^2$. Longueur d'onde $\lambda = 810nm$.



(b) Module carré du champ magnétique $|H|^2$. Longueur d'onde $\lambda = 760 nm$.



(d) Module carré du champ magnétique $|H|^2$. Longueur d'onde $\lambda = 810 nm$.



Un capteur permettant de déterminer l'intensité du champ incident et un deuxième capteur mesurant le champ transmis dans le dioptre en sortie de matrice, centré sur celle-ci, nous ont permis de calculer le coefficient de transmission normalisé par rapport au champ incident. Là où Mulin et al. [59] trouvaient quasimment 30% de transmission pour le champ \vec{E} à $\lambda = 760nm$, la simulation 2D-FDTD nous donne un peu moins de 20% (cf. Fig.I.12(a)).

En conclusion, il est intéressant de remarquer que les deux simulations montrent des résultats équivalents malgré les différences inhérentes aux spécificités de chaque méthode.

3.3 Analyse du coupleur à cristal photonique par la méthode FDTD

Dans cette partie, nous allons étudier le modèle utilisé dans la partie précédente, en affinant notre analyse notamment du point de vue de l'injection. En effet, l'injection a été effectuée par réflexion totale d'une onde plane sur un dioptre plan, permettant la création de l'onde évanescente qui va ensuite exciter le champ dans les nanostructures.

Toujours en nous limitant à deux dimensions, nous avons simulé deux guides d'onde plans, dont la traîne évanescente des modes guidés pourrait *arroser* les structures périodiques, se rapprochant plus de la réalité expérimentale.

Le matériau choisi pour la fabrication est une structure multicouche $SiO_2/SiON/SiO_2$ sur substrat de Si dont le comportement semble bien convenir à la fois à l'expérience (monomode sur la gamme de longueur d'onde d'étude, forme du mode guidé assez large permettant un traîne assez importante sur les bords) et la fabrication bien maîtrisée au laboratoire. Nous avons aussi choisi de fabriquer une matrice de trous convenant plus aux guides d'ondes, puisqu'ils sont semi-enterrés.

Nous avons cherché à faire une analogie 2D de ce problème 3D. Nous avons choisi un matériau dont l'indice correspond à l'indice de la couche guidante de SiON ($n_1 = 1,53$). Nous avons ensuite fabriqué deux guides plan dont l'indice optique permet un guidage monomode (mode calculé par BPM puis réinjecté dans le calcul FDTD). Nous pouvons voir une illustration de cette configuration Fig. I.13(a).

En envoyant une impulsion et en plaçant des capteurs (*time monitor* dans le logiciel Rsoft) recevant l'intensité du champs \vec{E} , nous avons pu faire une étude spectrale de ce système. De nombreuses configurations ont été étudiés : nous avons fait varier la période a, la taille des trous par rapport à la période (c'est-à-dire le facteur de remplissage f), la forme des trous, l'écartement entre les guides d, le type de maille de la matrice (carrée, hexagonale...). Nous pouvons voir Fig. I.13(b) un spectre de transmission calculé dans le cas de deux guides parallèles reliés par 40 trous (période a = 700nm, taille des trous c = a/2 = 350nm, facteur de remplissage f = 25%). La capteur est placé sur le guide récepteur au milieu du bord de la matrice. Malgré les fortes variations de l'intensité transmise, nous obtenons un pic de transmission assez fin pour une longueur d'onde $\lambda = 782,7nm$, effet qui peut être utile lors d'un couplage guide à guide avec filtrage en fréquence.



(a) Schéma d'une des configurations adoptées pour la simulation. Nous apercevons deux guides parallèles séparés de $28\mu m$ reliés par une matrice de trous de maille carrée (période de 700nm, trous carrés de 350nm de côté).



(b) Spectre de transmission calculé pour cette configuration et pour le *time monitor* indiqué. Polarisation TE.

FIG. I.13 – Schéma et spectre de transmission pour une des configurations étudiées.

Il est possible par la suite de calculer des cartographies des champs pour quelques longueurs d'onde intéressantes (cf. Fig.I.14). On voit par exemple que l'onde pénètre beaucoup mieux dans la nanostructure à la longueur d'onde correspondant au pic trouvé dans le spectre I.13(b)) ($\lambda = 782,7nm$) que pour $\lambda = 758nm$, située à gauche du pic, pour laquelle l'intensité décroît assez vite. La figure I.14(b) montre aussi qu'une partie de l'onde est transmise dans le deuxième guide.

3.4 Conclusion

Nous avons lors de ces essais chercher à trouver la meilleure configuration possible pour réaliser un coupleur à cristal photonique entre deux guides parallèles. Nous avons fait varier les différents paramètres : période, taille des trous, type de maille (triangulaire et carrée), écart entre les guides. Comme nous pouvons le voir sur les figures I.13 et I.14, la transmission de la lumière d'un guide à l'autre reste très faible (entre 0,5 et 2% dans les cas étudiés) et ne semble pas permettre le guidage efficace de l'onde transmise dans le deuxième guide d'onde. Nous n'avons pas réussi à trouver une



(a) Cartographie de l'intensité du champ électrique pour $\lambda=758,0nm.$

(b) Cartographie de l'intensité du champ électrique pour $\lambda = 782,7nm$ (sur le pic de la Fig.I.13(b)).

FIG. I.14 – Deux cartographies du champ électrique à deux longueurs d'onde. L'écart entre les guides de 28µm. L'intensité a été saturée dans les guides d'injection (à droite) pour donner plus de contraste dans l'intérieur de la matrice.

géométrie pour la nanostructure permettant un meilleur couplage. De plus, les calculs ont été effectués par 2D-FDTD, une technique qui ne tient pas compte de probables fuites hors du plan. Ce type de structure demanderait un travail plus en profondeur notamment en partageant le travail de simulation en plusieurs étapes :

- optimisation du couplage guide-structure. La méthode d'injection dans la structure par onde évanescente est beaucoup moins répandue que celle par onde propagative et nécessite une recherche plus approfondie. Le travail réalisé par Mulin et al. [57] a mis en avant l'importance de la première ligne de trous accolée au guide d'onde qui permet de frustrer la traîne évanescente de l'onde guidée.
- l'onde ainsi couplée dans la structure est ensuite propagée dans la structure jusqu'au second guide. Cette étude va à contre-pied des études habituelles des cristaux photoniques qui sont plutôt axées sur la détermination des bandes interdites photoniques.
- enfin, le couplage structure-guide en sortie nécessite lui aussi une étude approfondie.

La fabrication des échantillons par FIB restant encore à valider et constituant l'enjeu majeur de cette thèse, nous avons décidé d'étudier l'interaction entre guide d'onde traditionnel et des structures photoniques sub-longueur d'onde, mais dans une configuration plus simple déjà étudiée et validée dans de nombreuses publications. Nous avons donc cherché à étudier le comportement de structures directement percées sur le guide d'onde, possédant ou non des défauts.

I.4 ÉTUDE THÉORIQUE DE NANOSTRUCTURES ASSOCIÉES À DES GUIDES D'ONDE

Dans cette partie, nous utiliserons les méthodes de simulations présentées dans la partie I.2 pour étudier les structures mésoscopiques que nous fabriquerons.

4.1 Calcul des structures de bande

Comme nous l'avons vu auparavant, de nombreux paramètres entrent en jeu lors de la création de structures photoniques, comme la période de la structure, la forme des trous ou des plots, ainsi que leur taille ou plus précisément ce que l'on appelle le facteur de remplissage, la régularité et la profondeur des trous, la différence d'indice optique etc. Pour prendre en compte l'ensemble de ces paramètres, nous avons donc procédé par étapes successives. La détermination des structures de bandes par méthode PWE nous permet de trouver les paramètres de la nanostructure (taille des trous, périodes) pour le matériau choisi (structure multicouche $SiO_2/SiON/SiO_2$). Les calculs seront faits en deux dimensions. L'indice effectif de cette structure, déterminé par un calcul BPM (RSoft *BeamProp*), vaut $n_{eff} = 1,489$ pour une longueur d'onde $\lambda = 900nm$, longueur d'onde choisie pour correspondre au centre de la gamme du Laser accordable utilisée par la suite.

Le calcul nous donne une bande interdite complète dans le cas d'une structure à maille triangulaire pour une seule polarisation (TM), pour un diamètre de trou d compris entre 0,65a à 0,82a (a étant la période de la matrice). La figure I.15 représente le diagramme de bande pour un diamètre d = 0,7a. La BIP dans la polarisation TM peut être obtenue pour des fréquences relatives $0,473 < \left(\frac{\omega \cdot a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda}\right) <$ 0,496. Le fait que la BIP en TM soit très fine et qu'il n'existe pas de BIP complète pour l'autre polarisation (voir Fig.I.15) peut être expliqué par la faible différence d'indice entre le matériau et les trous ($\Delta n = n_{eff} - n_{air} = 0,489$).

Par la suite, nous avons choisi de travailler avec des matrices dont la période a = 360nm et des trous de diamètre d = 200nm. Ces paramètres ont été choisis pour être compatibles à la fois avec les contraintes technologiques et expérimentales. En effet, la période est choisie pour obtenir une BIP dans la gamme de longueur d'onde permise par le Laser utilisé dans la partie expérimentale (au alentour de 800 - 900nm). De même, le rapport d/a peut difficilement excéder 0,7 à cause des limitations dues aux méthodes de fabrication choisies.



FIG. I.15 – Diagrammes de bande pour une matrice de trous à maille triangulaire (n = 1,489).

4.2 Simulations FDTD

Les paramètres de la matrice (période a, diamètres des trous d, rapport d/a) ont été déterminés pour trouver une BIP dans la gamme de longueurs d'onde nous intéressant. La prochaine étape est de caractériser les nanostructures associées aux guides d'onde traditionnels par simulation FDTD. Bien que le calcul 3D soit inclus dans les possibilité du programmes *FullWave* et pourrait nous donner une somme d'informations complémentaires (profondeur des trous, effet de surface etc...), cela demanderait malheureusement trop de ressources informatiques sachant la taille de l'ensemble de la structure. Nous nous sommes donc limité au calcul 2D, qui nous donnera une bonne approximation.

Nous nous sommes principalement intéressés à deux types de nanostructures sur guide d'onde. La première est une matrice à maille triangulaire de trous centrée sur le guide (voir Fig. I.16(a)), la seconde reprend les mêmes paramètres, mais en omettant une ligne de trous au centre du guide (voir Fig. I.16(b)).

Nous nous attendons à ce que la première matrice de trous se comporte comme un miroir pour les longueurs d'onde incluses dans la bande interdite photonique. Le comportement de la deuxième structure est plus compliqué, mais la ligne de trous pourra sans doute agir comme un guide d'onde à



(a) Schéma de la configuration sans défauts.

(b) Schéma de la configuration avec une ligne de trous manquants centrée par rapport au guide.

FIG. I.16 – Deux nanostructures étudiées par FDTD.

certaines longueurs d'onde.

4.2.1 Guides avec une structures triangulaire de trous

Nous nous plaçons dans le premier cas *sans défauts* (Fig. I.16(a)). La lumière est injectée dans un guide d'onde planaire qui a été percé d'une matrice de trous utilisant les paramètres déterminés précédemment.

Dans un premier temps, les spectres de transmission ont été calculés en injectant une impulsion dans la direction ΓM . Deux de ces spectres sont présentés sur la figure I.17. Nous remarquons que, bien que ces structures n'avaient pas montré de BIP complète pour la polarisation TE et une bande très fine dans le cas de la polarisation TM, ces spectres indiquent tout deux des BIP.

Pour la polarisation TE, une forte chute du rendement de transmission peut être remarquée pour une gamme de longueur d'onde entre 850nm et 900nm. Pour la polarisation TM, cette chute de transmission existe cette fois entre 800nm et 925nm. Cette chute de transmission augmente avec le nombre de périodes dans la direction de propagation. Nous avons trouvé qu'un minimum de vingt périodes est nécessaire pour assurer moins de 0,1% de transmission dans la gamme de longueur d'onde de la BIP. Pour cet exemple, nous avons utilisé 40 périodes.



FIG. I.17 – Spectres de transmission de matrices de 40×40 trous.

Nous avons comme précédemment, pour certaines longueurs d'onde intéressantes, calculé la cartographie de chaque champ (E_y , H_y et H_z pour une polarisation TE, E_x , E_z et H_y pour une polarisation TM) simplement en injectant dans le guide une excitation continue et en faisant tourner le calcul assez longtemps pour que les champs soient stabilisés dans la structure.

La figure I.18 représente les cartographies des champs électrique et magnétique calculés dans le cas d'une polarisation TE à deux longueurs d'onde différentes. Pour $\lambda = 800nm$ (voir Fig. I.18(a) et I.18(b)), nous sommes dans une longueur d'onde en dehors de la BIP, la lumière passe donc à travers la structure de trous. Nous observons dans le guide d'entrée (en bas de la structure sur la figure) des franges d'interférences qui sont dues à la réflexion d'une partie de l'onde par la nanostructure. La période de ces franges correspond à l'écart entre deux lignes de trous. À l'intérieur de la matrice, on observe une modulation du champ due aux trous. On peut remarquer que cette modulation sera différente pour le champ électrique et magnétique. On observe en effet des maxima de $|E|^2$ dans les trous alors que les maxima de $|H|^2$ sont localisés entre les lignes de trous. Nous remarquons aussi à l'intérieur de la structure l'apparition de trois battements. Ces battements sont sans doute créés par les multiples réflexions dans la structure et à chaque interface guide-structure.

Pour $\lambda = 900nm$ (voir les Fig. I.18(c)et I.18(d)) qui se trouve quant à elle dans la gamme de longueur d'onde de la BIP, la lumière semble être totalement réflèchie. Nous observons une meilleure visibilité des franges d'interférences dans le guide d'entrée. Par contre, l'onde pénètre plus dans la structure qu'il n'était attendu. En effet, il faut attendre 20 périodes de trous pour qu'il ne reste moins de 1% de l'intensité $|E|^2$. Au bout de 10 périodes, 30% en intensité de $|E|^2$ est transmis.



FIG. I.18 – Distribution des champs électrique et magnétique (polarisation TE). Matrice triangulaire de 40×40 trous sur un guide d'onde (a = 360nm, d = 200nm).

Ces figures illustrent bien la différence de comportement entre deux longueurs d'onde prise dans et en dehors de la BIP. Pour une longueur d'onde judicieusement choisie, la nanostructure se comporte comme un miroir.

4.2.2 Guides percés d'une matrice triangulaire de trous avec une ligne manquante

Cette deuxième structure (voir la Fig. I.16(b)) a été étudiée de la même manière que la matrice sans défauts. Comme nous l'avons vu dans la partie présentant les cristaux photoniques, les structures périodiques lacunaires peuvent donner lieu à des guides d'onde dans une ligne de trous manquants.

La lumière est toujours injectée dans la direction ΓM . Les spectres de transmission (Fig. I.19) montrent que les bandes interdites ont été perturbées par la ligne de trous manquants et on voit apparaître quelques pics sur le bord de la BIP, mais aucune dans la gamme des BIP, qui aurait prouvé qu'un mode guidé pouvait s'y installer.



FIG. I.19 – Spectres de transmission pour une structure de trous sur guide avec une ligne de défauts.

La cartographie des champs dans les deux polarisations indiquent des comportements intéressants du point de vue de la structuration du champ à l'intérieur de la ligne de lacune. c'est ce que montrent les deux exemples Fig. I.20. Les deux images, effectuées en polarisation TM, indiquent deux comportements bien différents. En effet, dans la Fig. I.20(a), la lumière pénètre assez profondément à l'intérieur de la structure, et est surtout confinée dans la ligne de trous manquantes, ce qui montre un comportement assez proche d'un guide sur cristal photonique. La distribution du champ dans cette ligne de lacune apparaît très structurée et périodique. On observe un *chapelet* de plusieurs maxima. À

l'entrée du guide photonique, deux lobes apparaissent suivis d'un lobe en étoile, suivi à nouveau de quatre lobes similaires aux deux premiers puis à nouveau la forme étoilée et ainsi de suite jusqu'à la sortie de la matrice. Ces lobes peuvent trouver une explication dans la forme particulière que prend la lacune de trou dans la direction ΓM , comme on peut le voir sur la figure I.16(b) : dans cette direction, on voit apparaître une suite de cavités, qui peuvent tous jouer le rôle de cavité résonante, et le guidage est effectué par couplage d'une cavité à une autre.

Par contre, la Fig. I.20(b), effectuée à $\lambda = 850nm$, une longueur d'onde qui se trouvait dans la gamme de la bande interdite, montre que la lumière semble, malgré les défauts, réfléchie par la structure et n'y pénètre que très peu. On observe malgré tout une pénétration plus importante à l'endroit de la lacune.

I.5 CONCLUSION

Les études effectuées ci-dessus ont été effectués par un logiciel de 2D-FDTD et donnent des informations sur le comportement des structures photoniques.

Nous avons, dans un premier temps, étudié un coupleur à cristal photonique entre deux guides parallèles. Nous n'avons malheureusement pas pu déterminer les paramètres de la nanostructure permettant d'obtenir un taux de couplage satisfaisant.

La validation de la fabrication de cristaux photoniques par FIB restant l'enjeu majeur de cette thèse, nous avons donc décidé de choisir des structures plus simples. Ainsi, nous avons choisi de travailler sur des nanostructures périodiques gravées sur les guides d'onde, l'une sans défaut, qui peut jouer le rôle d'un miroir dans la gamme de longueur d'onde de la BIP, la seconde, possédant une ligne de défauts en son centre, qui provoque une structuration intéressante du champ en fonction de la longueur d'onde. Ces structures, réalisées sur un matériau de bas indice (*SiON*) présentent une fine BIP en polarisation TM et aucune en polarisation TE. Cependant, les simulations FDTD nous ont permis de montrer des effets intéressants dans les deux polarisations avec les deux types de structure.

Les simulations nous ont aussi permis de trouver les paramètres (taille des trous, période de la maille etc...) qui permettent des bandes interdites partielles (selon la direction ΓM dans la gamme de longueur d'onde du laser accordable qui sera utilisé lors de la caractérisation. Ces paramètres serviront de base à la fabrication décrite dans le chapitre suivant.



(a) $\lambda = 752nm$, sur un pic de transmission.

(b) $\lambda = 850 nm$, dans un creux de transmission.

FIG. I.20 – Cartographie du champ $|H_y|^2$, polarisation TM. Matrice triangulaire de 40×40 trous avec une ligne manquante en son centre.