DENIS GAGNON

MODÉLISATION ONDULATOIRE DE STRUCTURES OPTIQUES RÉSONANTES

Application aux microcavités diélectriques bidimensionnelles

Mémoire présenté
à la Faculté des études supérieures de l'Université Laval
dans le cadre du programme de maîtrise en physique
pour l'obtention du grade de Maître ès sciences (M.Sc.)

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE, DE GÉNIE PHYSIQUE ET D'OPTIQUE
FACULTÉ DES SCIENCES ET DE GÉNIE
UNIVERSITÉ LAVAL

2011

© Denis Gagnon, 2011

Résumé

L'utilité des microcavités diélectriques a été démontrée dans le cadre de plusieurs applications technologiques, de la biodétection à l'informatique quantique en passant par le développement de nouvelles sources laser. Les ingrédients nécessaires à ces multiples applications sont principalement une concentration énergétique élevée et un haut facteur de qualité (temps de confinement très long) menant à un recyclage photonique efficace. Les cavités en forme de microdisque (rayon de 10-100 µm) sont d'un intérêt particulier comme structure de base en raison de leur géométrie quasi-bidimensionnelle et de la facilité associée à leur fabrication et leur intégration.

Ce projet de maîtrise s'articule autour de deux types de méthodes numériques visant à modéliser des structures optiques bidimensionnelles, plus particulièrement des microcavités diélectriques. D'abord, un algorithme de modélisation par éléments de frontière est mis en œuvre afin de déterminer les modes résonants de cavités et le facteur de qualité associé. La méthode est généralisée à un nombre arbitraire de domaines diélectriques simplement ou multiplement connexes. Le cas important de la cavité annulaire, une cavité en microdisque dans laquelle un défaut circulaire est inscrit, est traité en détail. Cette géométrie particulière permet d'accéder à une plus grande richesse de profils d'émission tout en conservant le haut facteur de confinement propre aux cavités symétriques. Les résultats obtenus s'inscrivent spécifiquement dans le cadre du développement de nouveaux microlasers directionnels.

Deuxièmement, un modèle numérique par éléments finis est développé afin de rendre compte du couplage évanescent entre une microcavité et un guide d'ondes rectangulaire. Cette étude vise à optimiser les paramètres géométriques d'un dispositif d'optique intégrée pouvant être utilisé dans le cadre de la biodétection.

Abstract

Devices based on dielectric microcavities are used in a broad range of applications such as biosensing, quantum computing and novel laser sources. The most useful features for those applications are the high field intensity confined in a small modal volume and high quality factor (or high photon confinement time) associated with the microcavities, leading to efficient resonant recirculation. Two-dimensional microdisk cavities (10-100 µm radius) are of great interest owing to their straightforward fabrication and integration. Therefore, they are often used as building blocks for photonic devices.

The goal of this master thesis is the modeling of two-dimensional photonic structures, more precisely dielectric microcavities. For this purpose, two types of numerical methods are used. First, an algorithm based on a boundary integral formulation is used to compute the resonant modes and quality factor of cavities. The method is generalized to an arbitrary number of simply or multiply connected dielectric regions. We carry a detailed case study of the annular cavity, basically a microdisk with a circular defect in it. This geometry exhibits a greater scope of emission profiles while preserving the high quality factor of symmetric cavities. Our results are aimed at providing design rules for directional microlasers.

Second, a finite element model of the evanescent coupling between a rectangular dielectric waveguide and a microdisk is presented. The main goal of this model is to optimize the geometric parameters of an integrated optics device useful in the field of biosensing.

Avant-propos

Un certain nombre d'individus méritent des remerciements pour leur contribution à ce mémoire et à mon cheminement à l'Université Laval ces dernières années. Je tiens d'abord à souligner le soutien constant de mon directeur de recherche, le Prof. Louis J. Dubé et à saluer l'opportunité qui m'est donnée d'entreprendre des études de doctorat sous sa supervision.

La virtuelle totalité des recherches présentées dans ce mémoire ont été effectuées en collaboration avec M. Guillaume Painchaud-April, qui mérite une mention spéciale pour son mentorat dans les premiers pas de mes études graduées. J'aimerais aussi remercier, pour d'innombrables discussions à caractère scientifique ou non, tous les membres passés et présents du groupe de recherche dont je fais partie : Antoine Allard, Laurent Hébert-Dufresne, Vincent Marceau, Pierre-André Noël, Mikhail Panine, Julien Poirier et Jean-Gabriel Young.

Une partie des recherches présentées dans ce mémoire, en particulier le chapitre 4, est le fruit d'une collaboration inter-universitaire avec le *Laboratoire de microphotonique* de l'École Polytechnique de Montréal. J'aimerais remercier les membres de ce groupe pour des échanges scientifiques enrichissants, en particulier M. Francis Vanier.

J'aimerais également remercier certains professeurs de l'Université Laval de m'avoir permis d'acquérir de l'expérience comme auxiliaire d'enseignement rattaché à leurs cours : M. Gabriel Bédard (à qui je souhaite une heureuse retraite), Mme Nathalie McCarthy et M. Simon Rainville. Je suis également reconnaissant à M. Jocelyn Savard, enseignant au Cégep de Sainte-Foy, pour avoir été le premier à susciter en moi un réel intérêt pour la physique.

J'exprime ma gratitude à deux organismes subventionnaires pour leur soutien financier complet lors de ces deux ans d'études graduées : le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) et le Fonds de recherche du Québec – Nature et technologies (FQRNT). Je tiens également à souligner l'expérience acquise au baccalauréat dans le cadre du Programme de bourses de recherche de 1er cycle du

CRSNG, de même que les professeurs qui m'ont supervisé lors de ces stages de recherche estivaux.

Je tiens finalement à remercier mes parents pour leur encouragement et leur soutien inconditionnel, mon frère, et ma copine pour sa présence et sa compréhension, surtout en cette période de rédaction.

DENIS GAGNON, Août 2011

Table des matières

Résumé iii

Abstract v

Avant-propos vii

Table des matières ix

Liste des figures xiii

Liste des tableaux xv

Notation xvii

1 Introduction 1
- 1.1 Aperçu . . . 1
  - 1.1.1 Microcavités optiques : fabrication et applications . . . 2
  - 1.1.2 Autres structures optiques bidimensionnelles . . . 4
- 1.2 Profil d'émission et facteur de qualité . . . 6
- 1.3 Stratégies de modélisation ondulatoire . . . 9

2 Solutions de l'équation de Helmholtz dans les systèmes intégrables 11
- 2.1 Formulation générale . . . 12
  - 2.1.1 Des équations de Maxwell à l'équation de Helmholtz . . . 13
  - 2.1.2 Conditions aux limites . . . 15
- 2.2 Domaines circulaires . . . 17
  - 2.2.1 Diffusion d'ondes planes . . . 18
  - 2.2.2 Modes résonants . . . 21
  - 2.2.3 Domaines concentriques . . . 22
- 2.3 Comportement axial de la fonction d'onde . . . 24

3 Modélisation de structures bidimensionnelles asymétriques 27
- 3.1 Formulation intégrale . . . 28
  - 3.1.1 Singularités intégrables et équations intégrales . . . 30

3.1.2 Frontières et interfaces 30
3.2 Méthode des éléments de frontière 31
3.2.1 Étude de cas : domaine simplement connexe 33
3.2.2 Étude de la convergence : domaine circulaire 36
3.2.3 Étude de cas : domaine annulaire 39
3.3 Structures optiques asymétriques : résultats 39
3.3.1 Domaine annulaire asymétrique et limite de résolution 41
3.3.2 Domaine quadrupolaire et applications lasers/senseurs 43

4 Couplage entre un guide planaire et une cavité intégrée 47
4.1 Problème d'optimisation 48
4.1.1 Contraintes et ordres de grandeur 49
4.1.2 Modes du guide intégré 49
4.2 Méthode par éléments finis 51
4.2.1 Géométrie et conditions aux frontières 54
4.2.2 Maillage du domaine de calcul 56
4.2.3 Optimisation de la distance de couplage : résultats 57
4.2.4 Modification des paramètres du problème 60

5 Conclusion 65
5.1 Accomplissements et contributions 65
5.2 Perspectives 66
5.2.1 Optimisation de l'émission 67
5.2.2 Nouveaux matériaux 67

A Solutions générales de l'équation de Helmholtz 69
A.1 Coordonnées polaires 69
A.2 Fonctions de Bessel 71
A.2.1 Définition et fonction génératrice 71
A.2.2 Développements asymptotiques et fonctions de Hankel 72
A.2.3 Relations de récurrence 73
A.2.4 Comportement asymptotique des résonances 73
A.3 Domaines concentriques 74

B Fonction de Green et méthode des éléments de frontière 77
B.1 Formulation intégrale 77
B.1.1 Fonction de Green libre de l'équation de Helmholtz 77
B.1.2 Valeurs singulières de la fonction de Green 78
B.1.3 Contribution du contour à l'infini 80
B.2 Méthode des éléments de frontière 81
B.2.1 Évaluation du champ lointain 81

B.2.2 Éléments de matrice 83
B.2.3 Problème aux valeurs propres non-linéaire 84

C Guide d'onde à plaques parallèles et méthode de l'indice effectif 87
C.1 Équations d'onde 87
C.2 Relations de dispersion 89
C.2.1 Fréquence de coupure 90
C.3 Méthode de l'indice effectif 90

Bibliographie 93

Index 100

Liste des figures

1.1 Tour d'horizon de quelques structures optiques bidimensionnelles 3
1.2 Cavités réelles et application à la biodétection 5
1.3 Profil d'émission de deux résonances d'une cavité en stade 8

2.1 Forme du potentiel effectif du disque diélectrique 15
2.2 Diffusion d'une onde plane sur un cercle diélectrique 19
2.3 Résonances du cercle diélectrique 20
2.4 Coupe radiale de deux modes résonants du disque diélectrique 22
2.5 Interfaces diélectriques concentriques 23
2.6 Résonances complexe d'un anneau diélectrique 25

3.1 Géométrie typique de régions diélectriques bidimensionnelles et contours d'intégration associés 29
3.2 Géométrie de deux études de cas 34
3.3 Grandeur du déterminant de la matrice d'influence 35
3.4 Résonances du cercle diélectrique (m. éléments de frontière) 36
3.5 Étude de la convergence de l'algorithme BEM 38
3.6 Résonances de l'anneau diélectrique (m. éléments de frontière) 40
3.7 Résonances quasi-dégénérées d'une cavité annulaire asymétrique 42
3.8 Résonances de haut facteur-Q d'une cavité annulaire asymétrique . . . 43
3.9 Résonances typiques d'une cavité quadrupolaire 45
3.10 Mode résonant d'une cavité en spirale 46

4.1 Géométrie du problème de couplage 48
4.2 Guide d'onde diélectrique rectangulaire 50
4.3 Discrétisation en éléments finis de l'espace du problème 52
4.4 Géométrie du problème bidimensionnel à discrétiser en éléments finis . 54
4.5 Maillage du domaine de calcul 57
4.6 Profil du mode de galerie à deux lobes radiaux excité par le mode d'un guide planaire 59
4.7 Énergie emmagasinée dans un disque intégré en fonction de la longueur d'onde 59
4.8 Excitation d'un mode de galerie d'un micro-disque par couplage évanescent 62

B.1 Contour en demi-cercle permettant d'intégrer la singularité de la fonction de Green 79
B.2 Évaluation du champ lointain 81

C.1 Géométrie d'un guide d'onde à plaques parallèles 88
C.2 Valeurs de l'indice effectif en fonction de l'épaisseur du guide d'onde . . 92

Liste des tableaux

1.1 Microcavités et applications : quelques revues récentes 4

4.1 Paramètres géométriques du dispositif de couplage 48
4.2 Légende associée à la figure 4.4 55
4.3 Valeurs numériques des paramètres de simulation du dispositif de couplage 58
4.4 Caractéristiques des courbes Lorentziennes obtenues à partir des données de la figure 4.7. 60

Notation

Abréviations

Abréviation	Signification
BEM	*Boundary element method* (Méthode des éléments de frontière)
FEM	*Finite element method* (Méthode par éléments finis)
PML	*Perfectly matched layer* (Zone absorbante parfaitement adaptée)
TE	Polarisation transverse électrique
TM	Polarisation transverse magnétique

Systèmes de coordonnées

Symbole	Signification
x, y, z	Coordonnées cartésiennes
ρ, φ	Coordonnées polaires
t	Temps
ξ	Variable ou coordonnée libre

Matrices et vecteurs

Symbole	Signification
$\mathbf{V}$, $\boldsymbol{v}$	Vecteur (gras minuscule ou majuscule)
V_i	Composante du vecteur $\mathbf{V}$
$\boldsymbol{M}$	Matrice (gras italique majuscule)
M_{ij}	Élément de la matrice $\boldsymbol{M}$
$\boldsymbol{r}$	Vecteur position
$\hat{\mathbf{e}}_i$	Vecteur unitaire associé à la coordonnée ξ_i
σ_i	Valeur singulière d'une matrice

Fonctions

Symbole	Signification
$J_\nu(\xi)$	Fonction de Bessel de première espèce d'ordre ν
$Y_\nu(\xi)$	Fonction de Bessel de seconde espèce d'ordre ν
$H_\nu^{(+)}(\xi)$	Fonction de Hankel de première espèce d'ordre ν
$H_\nu^{(-)}(\xi)$	Fonction de Hankel de seconde espèce d'ordre ν
$\Gamma(\xi)$	Fonction gamma
$\delta(\xi)$	Fonction delta de Dirac

Ondes électromagnétiques

Symbole	Signification
λ	Longueur d'onde électromagnétique
$\Delta\lambda$	Largeur de résonance
ϵ	Permittivité relative
χ	Susceptibilité non-linéaire
ψ	Fonction d'onde (E_z ou H_z)
ω	Fréquence angulaire d'une onde électromagnétique
τ	Temps de vie d'une résonance
Ω_j	Milieu diélectrique d'indice de réfraction n_j
$\partial\Omega_j$	Frontière d'un milieu Ω_j d'indice de réfraction n_j
c	Vitesse de la lumière dans le vide
j	Nombre quantique radial
k	Nombre d'onde
m	Nombre quantique angulaire
$n(\boldsymbol{r})$	Distribution spatiale d'indice de réfraction
n_e	Indice de réfraction effectif
$\mathbf{E}$	Vecteur de champ électrique
$\mathbf{H}$	Vecteur de champ magnétique
Q	Facteur de qualité
$\boldsymbol{S}$	Matrice de diffusion
γ	Facteur lié aux conditions aux frontières, voir équation (2.1.20)
η	Facteur lié aux conditions aux frontières, voir équation (2.2.4)

Notation propre au chapitre 3

Symbole	Signification
ε	Paramètre de déformation
μ	Paramètre de résolution de la méthode des éléments de frontière
$\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r})$	Vecteur unitaire normal à un élément d'arc $ds(\boldsymbol{r})$
ϕ	Dérivée normale de la fonction d'onde ψ
ς	Constante d'Euler-Mascheroni (0.57722...)
Γ^{jm}	Interface diélectrique entre deux milieux $(\partial\Omega_j \cap \partial\Omega_m)$
Γ_l^{jm}	Élément discrétisé l $(l = 1, \dots\ N_{jm})$ de l'interface Γ^{jm}
N_{jm}	Nombre de points de discrétisation sur une interface diélectrique Γ^{jm}
G_j	Fonction de Green libre de l'équation de Helmholtz dans un milieu d'indice n_j

Notation propre au chapitre 4

Symbole	Signification
g	Distance de couplage entre un disque diélectrique et un guide d'onde
p	Paramètre des PMLs
q	Ordre des PMLs
L_e	Longueur d'évanescence caractéristique

Chapitre 1

Introduction

"It has been observed by others that transparent substances, as Glass, Water, Air, etc. when made very thin by being blown into Bubbles, or otherwise formed into Plates, do exhibit various Colours according to their various thinness, altho' at greater a greater thickness they appear very clear and colourless."

Isaac Newton
Opticks, 1704.

1.1 Aperçu

Le travail de recherche présenté dans ce mémoire vise à obtenir une meilleure compréhension des *structures optiques diélectriques*, ou plus précisément une meilleure compréhension de la propagation d'ondes électromagnétiques dans ces structures. Les règles de l'optique géométrique s'appliquent à des structures diélectriques dont les dimensions sont plusieurs ordres de grandeurs supérieurs à la *longueur d'onde* des ondes électromagnétiques s'y propageant ; il s'agit de la limite *semi-classique*. Dans le cas où les dimensions des structures sont comparables à la longueur d'onde, ces règles ne s'appliquent plus et une caractérisation de la dynamique ondulatoire, régie par les *équations de Maxwell*, devient nécessaire.

Nous étudions des structures dont les dimensions se situent entre le régime semi-classique et le régime ondulatoire. Comme plusieurs applications réelles impliquent une opération dans la fenêtre de longueur d'onde allant du proche infrarouge à l'ultraviolet

(de 400 à 1600 nm), les structures à l'étude sont typiquement des *micro-structures* optiques. Les recherches effectuées s'inscrivent ainsi dans le cadre de la *microphotonique*.

On supposera que les structures étudiées sont bidimensionnelles, ce qui revient à dire que la dynamique ondulatoire dans un certain plan peut être découplée de la dynamique axiale. Un tour d'horizon de ces structures est présenté à la figure 1.1.

1.1.1 Microcavités optiques : fabrication et applications

Les réalisations de micro-structures les plus étudiées sont probablement les *microcavités optiques*, ou *microrésonateurs* optiques [82]. Ces résonateurs consistent typiquement en un milieu optiquement dense dans lequel le rayonnement électromagnétique est confiné par réflexion totale interne et sont caractérisés par un spectre de *fréquences de résonance* ω et de *temps de vie* τ dépendant de la configuration (géométrie, permittivité diélectrique) du milieu constituant. Les résonances de cavité sont les signatures de *modes à pertes*, des états quasi-liés correspondant à une émission d'énergie vers le monde extérieur à la cavité. En ce sens, les microcavités diélectriques constituent des *systèmes ouverts*, par opposition aux cavités idéales qui constituent des *systèmes fermés* confinant l'énergie électromagnétique pendant un temps infini.

Divers types de microcavités sont utilisées dans un contexte expérimental, la grande majorité de celles-ci étant fabriquées en oxyde de silicium (symbole chimique SiO_2, indice de réfraction $n \simeq 1.5$) ou en matériel semiconducteur (indice de réfraction $n \simeq 3.2$). Bien que la plus simple forme de cavité soit la microsphère, nous nous intéressons plus particulièrement à des cavités optiquement minces pouvant être fabriquées sur un substrat approprié par photolithographie [40, 53]. Cette *intégration* de composantes photoniques permet une plus grande miniaturisation des dispositifs optiques.

Un type de cavité utilisé comme pierre angulaire de plusieurs dispositifs intégrés est le microdisque diélectrique, un cylindre diélectrique mince de rayon micrométrique. En plus de cette forme régulière, plusieurs types de *résonateurs asymétriques* ont été étudiés [63]. Une grande partie de nos recherches s'articule autour des *cavités annulaires*, définies comme un disque diélectrique dans lequel sont inscrites une ou plusieurs *inclusions* [6, 44].

Une application prometteuse des microcavités diélectriques est la détection de molécules biologiques. La plupart des techniques traditionnelles utilisées pour détecter des molécules de toute nature de façon optique sont basées sur l'interaction entre la lumière et des molécules immobilisées sur une surface à l'aide de *ligands* appropriés [84].

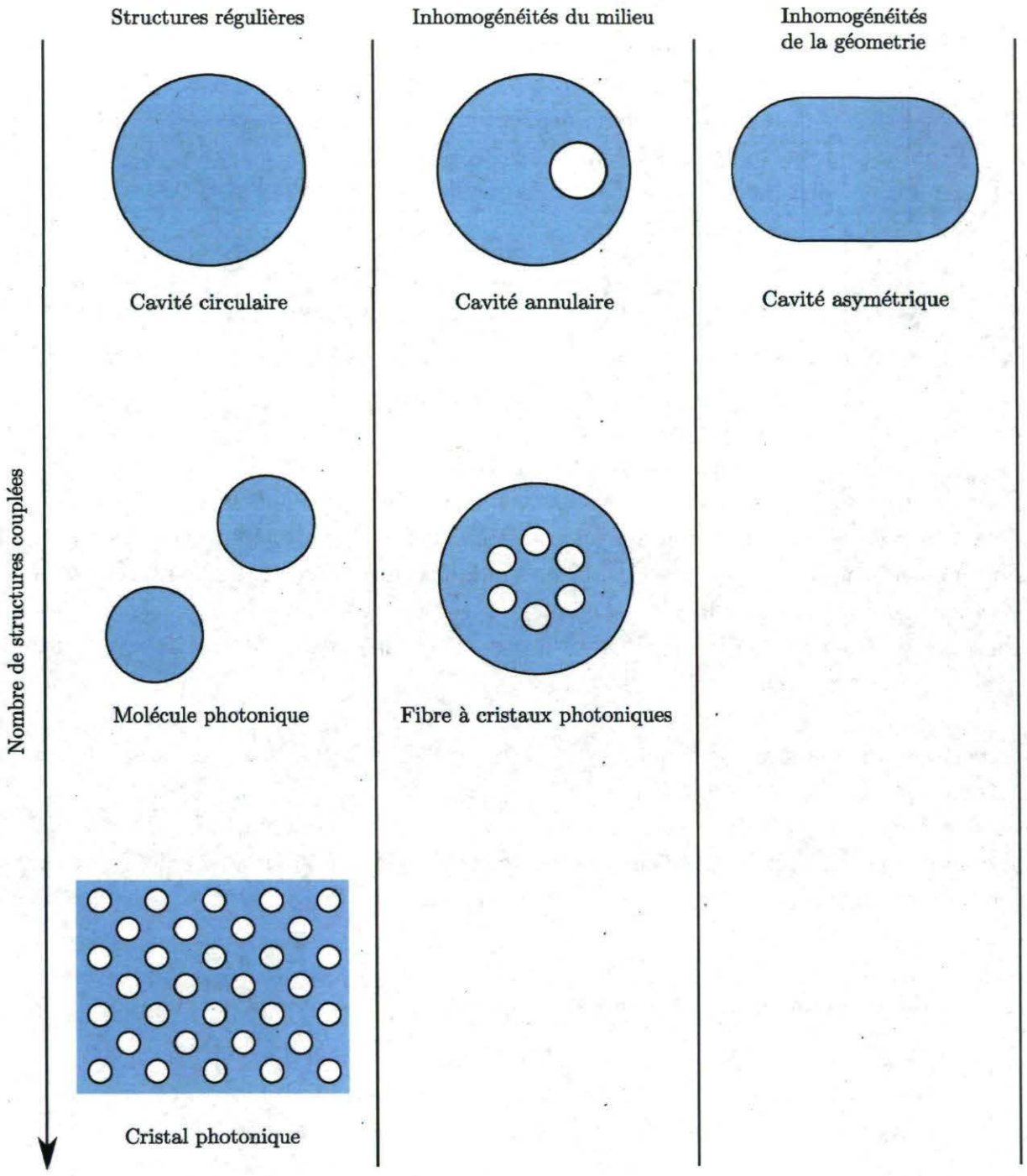


FIGURE 1.1 – Tour d'horizon de quelques structures optiques bidimensionnelles. Les milieux diélectriques optiquement denses correspondent aux régions colorées.

TABLEAU 1.1 – Microcavités et applications : quelques revues récentes

Principaux thèmes	Références
Biodétection	[49, 84, 86]
Fabrication, communications optiques et émission laser	[82]
Fabrication et applications de microcavités sphériques	[22]
Lasers bidimensionnels : dynamique classique et ondulatoire	[40]
Propriétés importantes des microlasers, *lab-on-chip*	[45, 61]
Senseurs, émission laser et optique fondamentale	[90]

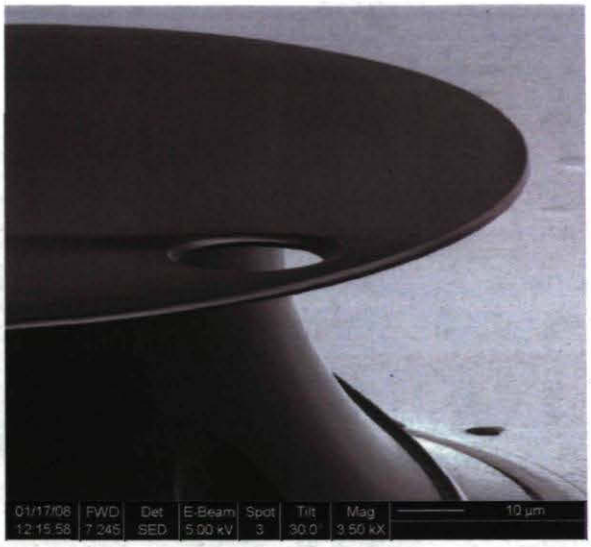
Des exemples courants de cette procédure sont les puces à ADN (*DNA microarrays*). Toutefois, ces dispositifs sont basés sur un traitement qui vise à marquer l'échantillon d'ADN à analyser. Ce processus, coûteux en temps et nécessitant un habile doigté, empêche la détection en temps réel des molécules. Les microcavités optiques, de leur côté, permettent une détection sans marqueur (*label-free detection*). L'idée de base consiste à *fonctionnaliser* des microcavités en oxyde de silicium. Ceci revient à dire qu'on fixe des récepteurs spécifiques à la molécule cible sur la surface de la cavité. La détection de la molécule cible peut ainsi être effectuée avec une grande sensibilité, allant même jusqu'à la détection de molécules uniques en temps réel [3]. La détection de ces événements d'attachement moléculaire est basée sur la mesure du déplacement des fréquences de résonances de cavité causé par un changement local de la polarisabilité du milieu diélectrique [4].

D'autres applications des microcavités sont également possibles, par exemple les communications optiques [36], l'informatique quantique [46] et la fabrication de microlasers directionnels [32]. Plusieurs revues récentes présentent de façon détaillée la théorie fondamentale et les applications des microcavités. Une liste non-exhaustive en est présentée au tableau 1.1.

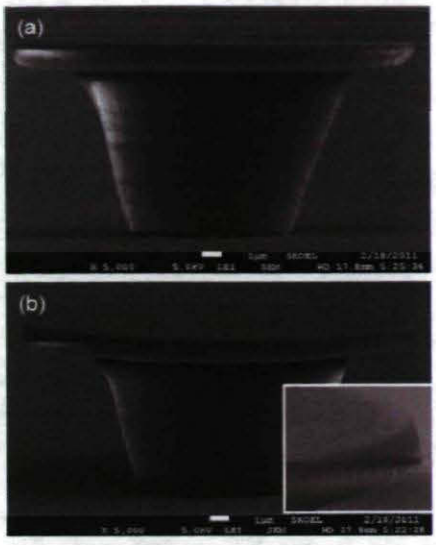
1.1.2 Autres structures optiques bidimensionnelles

Bien que ces travaux se concentrent sur la caractérisation ondulatoire de microcavités, nous présentons un aperçu de quelques autres structures diélectriques bidimensionnelles pouvant être modélisées dans le même esprit.

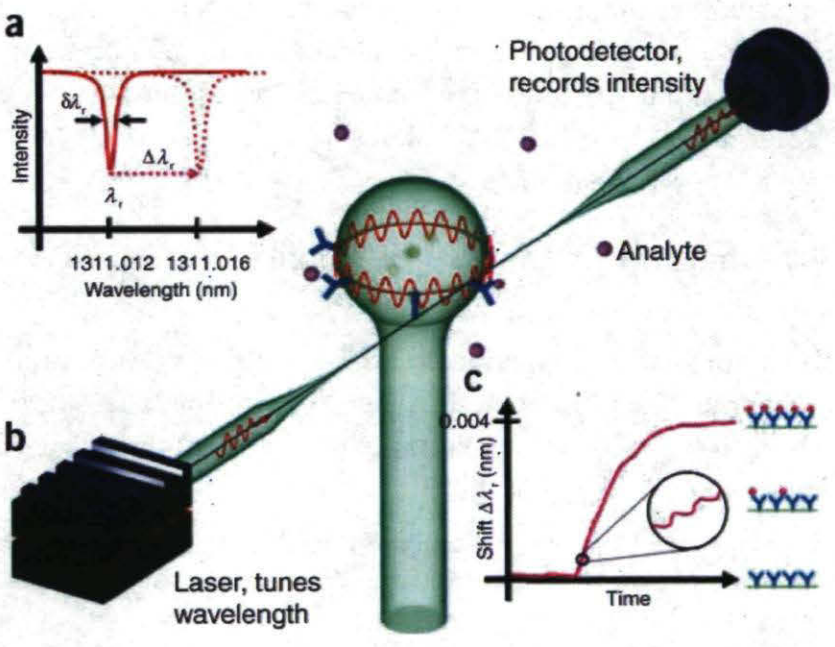
Il a récemment été proposé de coupler un certain nombre de ces structures afin de réaliser de nouveaux matériaux photoniques. Comme les microcavités se caractérisent par un spectre d'absorption analogue à un spectre moléculaire, il a été proposé de coupler plusieurs cavités pour réaliser une *molécule photonique* afin d'améliorer la sen-



(a) Courtoisie F. Vanier, École Polytechnique de Montréal



(b) Tiré de [53]



(c) Tiré de [86]

FIGURE 1.2 – Cavités réelles et application à la biodétection. **(a)** Microscopie électronique d'une cavité annulaire monolithique de SiO_2. La cavité est fabriquée par lithographie laser et possède un rayon de 50 µm. Une inclusion est inscrite dans le disque au moyen d'un faisceau d'ions. **(b)** Microdisque gravé par lithographie directe à l'aide d'un laser femtoseconde sur une résine dopée de colorant. Cette technique permet d'obtenir des rayons de l'ordre de 10 µm. **(c)** Schéma conceptuel de la biodétection à l'aide d'une microcavité sphérique. La signature de l'attachement d'analytes est le déplacement de la fréquence de résonance.

sibilité de dispositifs de détection [12, 72]. D'autres auteurs fabriquent des guides d'onde constitués d'une chaîne de cavités couplées. L'avantage principal de cette configuration est la possibilité de courber le guide d'onde sans altérer la transmission du rayonnement, un exploit difficile à réaliser au moyen de guides traditionnels [93].

Dans la même perspective de couplage de structures optiques, les *cristaux photoniques* ont fait l'objet de plusieurs études [47]. À l'instar des cristaux moléculaires, ces arrangements d'inclusions sur un réseau périodique permettent la conception de *structures de bandes photoniques*, interdisant la transmission de certaines longueurs d'onde. L'avantage indéniable de ces structures est la possibilité d'introduire des défauts dans la structure périodique, fournissant ainsi à l'expérimentateur un levier important sur les propriétés optiques des matériaux [67].

Finalement, la détermination de modes transverses de fibres optiques revient à la modélisation de structures optiques bidimensionnelles puisque la constante de propagation dans l'axe de la fibre peut souvent être complètement découplée de la dynamique dans la coupe de la fibre. Les *fibres à cristaux photoniques*, fibres dont le confinement dans le cœur est assuré par un arrangement périodique de trous d'air, sont d'un intérêt particulier. Caractérisées par un meilleur confinement que les fibres conventionnelles, les fibres à cristaux photoniques fournissent un cadre idéal pour l'étude de phénomènes optiques non-linéaires et la fabrication de pièges atomiques [75].

1.2 Profil d'émission et facteur de qualité

La plupart des applications expérimentales des microcavités optiques sont basées sur deux caractéristiques importantes des modes d'émission, soit le *profil d'émission* et le *facteur de qualité*. Un mode d'émission peut être complètement caractérisé par le comportement spatial et temporel du champ électrique à la fréquence de résonance complexe correspondante. Dans le cas d'un *mode harmonique*, le vecteur de champ électrique $\mathbf{E}$ s'exprime comme

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{r}, t) = \mathbf{E}(\boldsymbol{r}) e^{-i\omega t} \tag{1.2.1}$$

où $\omega \equiv \mathrm{Re}(\omega) + i\,\mathrm{Im}(\omega)$. La partie réelle de la fréquence de résonance est associée à la propagation alors que la partie imaginaire est associée aux pertes d'énergie vers l'extérieur de la cavité. D'un point de vue expérimental, seule l'intensité du rayonnement, proportionnelle à la norme au carré du champ électrique, est mesurable. On trouve que cette quantité varie exponentiellement dans le temps comme

$$|\mathbf{E}(\boldsymbol{r}, t)|^2 = |\mathbf{E}(\boldsymbol{r})|^2 e^{-t/\tau} \tag{1.2.2}$$

où $|\mathbf{E}(\boldsymbol{r})|^2$ est le profil d'émission et τ le temps caractéristique de décroissance exponentielle de l'intensité, donné par

$$\tau = -\frac{1}{2\,\mathrm{Im}(\omega)}. \tag{1.2.3}$$

Ce temps correspond au temps caractéristique de résidence d'un photon dans la cavité. Notons que les modes d'émission sont strictement associés aux valeurs négatives de $\mathrm{Im}(\omega)$, valeurs assurant un temps de *décroissance* exponentielle.

Afin d'obtenir une valeur quantitative du confinement électromagnétique dans les résonateurs diélectriques, on définit le *facteur de qualité* d'une résonance, à une constante près, comme le rapport entre le temps de résidence photonique τ et la période d'une oscillation lumineuse $T = 2\pi/\,\mathrm{Re}(\omega)$, soit

$$Q \equiv \mathrm{Re}(\omega)\tau = -\frac{\mathrm{Re}(\omega)}{2\,\mathrm{Im}(\omega)}. \tag{1.2.4}$$

Le facteur de qualité est également une quantification de la largeur des résonances de cavité, soit

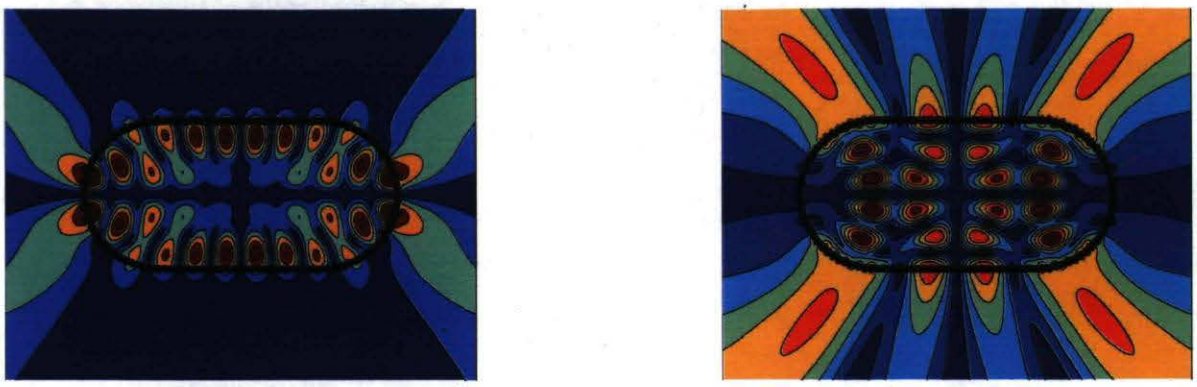
$$\Delta\lambda = \frac{\lambda}{Q} \tag{1.2.5}$$

où $\lambda = 2\pi c/\omega$ est la *longueur d'onde* et c la *vitesse de la lumière dans le vide*. Une grande valeur du facteur de qualité est ainsi synonyme d'une résonance fine. Une définition alternative, basée sur le rapport entre l'énergie stockée à la résonance et l'énergie dissipée par cycle optique, peut s'écrire

$$Q = 2\pi\,\frac{\text{Énergie emmagasinée dans la cavité résonante}}{\text{Énergie émise par cycle optique}}. \tag{1.2.6}$$

Une haute valeur du facteur de qualité correspond ainsi à un haut *confinement*, ou de faibles pertes d'énergie par cycle optique. La dernière définition a toutefois le désavantage de suggérer que la quantité Q est une fonction continue de la fréquence du rayonnement, alors qu'un facteur de qualité unique existe pour chaque résonance discrète [78].

Le profil d'émission de deux modes d'un résonateur diélectrique en forme de stade est présenté à titre d'exemple à la figure 1.3. En particulier, le mode de la figure 1.3(a) appartient à une classe de modes caractérisés par un haut facteur de qualité et une localisation en périphérie de la frontière diélectrique, les *modes de galerie*. Plus précisément, les modes de plus haut facteur de qualité existant pour une structure donnée à une valeur de $\mathrm{Re}(\omega)$ donnée sont dans la vaste majorité des cas des modes de galerie. Cette appellation vient de l'analogie avec un phénomène de localisation acoustique similaire découvert par Lord Rayleigh il y a un siècle [59, 81].



(a) $Q \simeq 50$ **(b)** $Q \simeq 7$

FIGURE 1.3 – Profil d'émission $|\mathbf{E}(\boldsymbol{r})|^2$ de deux résonances d'une cavité en stade. Tiré de [55].

Le facteur de qualité est une quantité centrale dans la plupart des applications des microcavités. Par exemple, la haute sensibilité des techniques de biodétection décrites à la section 1.1.1 découle directement du haut confinement des modes de cavité [49]. En effet, une haute valeur du facteur de qualité correspond à un long temps de résidence, autrement dit à un long parcours optique à l'intérieur du senseur résultant en un grand nombre d'interactions photoniques avec l'agent à détecter. De façon plus précise, la *limite de détection* d'un senseur est définie comme le plus petit déplacement spectral $\delta\lambda_{\text{min}}$ pouvant être résolu à l'aide de techniques expérimentales traditionnelles. Cette quantité est reliée au facteur de qualité par

$$\frac{\delta\lambda_{\text{min}}}{\lambda} \propto \frac{1}{Q^{\alpha}}. \tag{1.2.7}$$

La valeur de α dépend de la nature de l'interaction entre le champ évanescent du senseur et l'agent à détecter. Dans le cas d'une interaction réactive (linéaire), $\alpha = 1$ alors que dans le cas d'une interaction thermo-optique (non-linéaire), $\alpha = 2$ [3, 4]. La nature exacte de cette interaction est encore un sujet de débat actif [5].

Dans le cadre d'applications de biodétection, une caractérisation du profil d'émission au *champ proche* est nécessaire. Dans le cadre d'applications de type microlasers, le profil d'émission au *champ lointain* est également important [1]. Comme une *émission directionnelle* est souvent requise [32], il est nécessaire de développer des méthodes numériques permettant de déterminer les caractéristiques ondulatoires de cavités en fonction des caractéristiques physiques des milieux diélectriques constituants.

1. Le champ lointain est défini comme l'observation du profil d'émission à une distance $d \gg \lambda$ de la cavité.

1.3 Stratégies de modélisation ondulatoire

L'obtention de solutions analytiques de l'équation régissant la dynamique ondulatoire de structures optiques (équation de Helmholtz) est présentée au chapitre 2. Bien que ces solutions ne puissent être obtenues par séparation de variables que pour des systèmes symétriques, cette analyse permet de bien définir les équations de base et les conditions aux limites dans le cas général. Ces solutions permettent également de guider l'obtention de solutions numériques dans le cas de géométries asymétriques consistant en une déformation du cas symétrique.

Afin de déterminer les caractéristiques ondulatoires de structures optiques complètement arbitraires, il devient nécessaire de solutionner numériquement l'équation de Helmholtz. Dans cette perspective, le développement d'une méthode basée sur la fonction de Green de l'équation de Helmholtz est présenté au chapitre 3. La stratégie utilisée dans ce cas est une discrétisation des interfaces diélectriques du problème permettant de solutionner un système d'équations intégrales. Une attention particulière est portée au calcul du facteur de qualité et du profil d'émission des modes résonants, deux quantités dont l'utilité a été justifiée à la section 1.2.

L'algorithme développé au chapitre 3 permet de déterminer les modes d'émission de structures ouvertes, ou leur réponse à une *excitation libre*. Toutefois dans une vaste gamme de situations expérimentales, en particulier la biodétection [3, 16, 49, 86], le couplage entre une cavité et un guide d'onde est utilisé comme technique de mesure. Ainsi, un modèle par éléments finis permettant une caractérisation de ce couplage est présenté au chapitre 4. La stratégie de modélisation est dans ce cas la discrétisation de l'espace entier du problème, puisque la formulation par équations intégrales ne peut s'appliquer que difficilement à une *excitation guidée*. L'optimisation numérique d'un dispositif de couplage est également présentée dans ce chapitre.

Le développement de toutes les méthodes numériques a été effectué en gardant à l'esprit deux applications spécifiques des microcavités, soit la biodétection et la fabrication de microlasers directionnels.

Chapitre 2

Solutions de l'équation de Helmholtz dans les systèmes intégrables

> *"In a dielectric under the action of electromotive force, we may conceive that the electricity in each molecule is so displaced that one side is rendered positively and the other negatively electrical, but that the electricity remains entirely connected with the molecule and does not pass from one molecule to another."*
>
> James Clerk Maxwell
> *A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field*, 1864.

Ce chapitre est consacré à la solution de l'équation de Helmholtz dans les systèmes intégrables bidimensionnels. Après avoir déterminé l'équation différentielle partielle régissant la dynamique ondulatoire de ces systèmes, les conditions aux limites propres aux milieux ouverts sont obtenues. Les solutions analytiques dans quelques systèmes intégrables sont ensuite détaillées, de même que les prévisions physiques associées.

Les systèmes intégrables sont définis comme une enceinte bidimensionnelle dans laquelle la dynamique d'une particule classique est complètement régulière. Une particule libre dans un *billard circulaire* [1], par exemple, possède une dynamique complètement régulière (son énergie et son moment angulaire par rapport au centre de la « boîte » sont

1. Pour une introduction à la dynamique chaotique et régulière des *billards classiques*, voir [10, 73]. La correspondance classique-ondulatoire dans les billards est traitée dans une multitude d'articles. Le lecteur intéressé peut consulter [7, 25, 40, 42, 44, 88]. Cette correspondance ne sera pas abordée plus en détails dans le présent mémoire.

conservés). Ce cas important est traité à la section 2.2.

2.1 Formulation générale

Au centre de l'étude théorique de la propagation de la lumière dans les structures optiques bidimensionnelles se trouvent les équations de Maxwell. Dans la plupart des cas d'intérêt, des milieux diélectriques sont considérés, donc de conductivité nulle et sans sources. Ainsi, les paramètres d'intérêt pour l'étude des cavités diélectriques sont l'indice de réfraction $n(\boldsymbol{r})$ du milieu et la géométrie des frontières de ce milieu.

La méthode de travail consiste à chercher la solution des équations de Maxwell en imposant des conditions aux limites appropriées sur $\mathbf{E}$ et $\mathbf{H}$, les champs électriques et magnétiques. Dans un milieu non-magnétique (perméabilité magnétique unitaire) et sans pertes, ces équations s'écrivent [2]

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \tag{2.1.1a}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \tag{2.1.1b}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \tag{2.1.1c}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \tag{2.1.1d}$$

Les deux premières équations régissent la propagations des ondes. La forme particulière de (2.1.1c) vient de l'absence de charges dans les milieux diélectriques, alors que (2.1.1d) découle de l'inexistence de monopôles magnétiques.

En général, les composantes du vecteur déplacement $\mathbf{D}$ sont reliées aux composantes de $\mathbf{E}$ par une série de puissance, soit

$$D_i = \sum_j \epsilon_{ij} E_j + \sum_{jk} \chi_{ijk} E_j E_k + \mathcal{O}(E^3) \tag{2.1.2}$$

où ϵ_{ij} est le tenseur de permittivité relative et χ_{ijk} le tenseur de susceptibilité non-linéaire. L'essentiel de nos travaux s'intéresse au cas de faibles intensités lumineuses, ce qui se traduit par une susceptibilité non-linéaire nulle [3]. De plus, lorsque les milieux diélectriques sont isotropes et non-dispersifs, $\epsilon_{ij} = \delta_{ij} n^2(\boldsymbol{r})$. Les équations de Maxwell

2. Le système d'unités électromagnétiques de Heaviside-Lorentz est utilisé sans perte de généralité. Les détails de la conversion vers le système SI se trouvent dans [27].

3. Les deux effets non-linéaires dominants dans des microcavités en oxyde de silicium sont probablement l'absorption thermique et l'effet Kerr. Le lecteur intéressé peut consulter [31].

d'intérêt deviennent ainsi

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \tag{2.1.3a}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{n^2(\boldsymbol{r})}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \tag{2.1.3b}$$

2.1.1 Des équations de Maxwell à l'équation de Helmholtz

En général, une description des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{H}$ correspond à une fonction compliquée des coordonnées d'espace et de temps. La dépendance temporelle peut cependant être séparée de la dépendance spatiale en supposant l'existence de *modes harmoniques* du champ électromagnétique, soit $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t}$ et $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t}$. On obtient

$$\nabla \times \mathbf{E} = ik\mathbf{H} \tag{2.1.4a}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -in^2(\boldsymbol{r})k\mathbf{E} \tag{2.1.4b}$$

où $k = \omega/c$. Ces équations peuvent être découplées de façon à obtenir une équation d'onde pour le champ électrique et une pour le champ magnétique. L'expression du rotationnel de (2.1.4a) est

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = ik\nabla \times \mathbf{H} = n^2(\boldsymbol{r})k^2\mathbf{E}. \tag{2.1.5}$$

Il existe une identité vectorielle telle que

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2\mathbf{E}. \tag{2.1.6}$$

Une autre identité vectorielle permet de développer (2.1.1c). On obtient

$$\nabla \cdot [n^2(\boldsymbol{r})\mathbf{E}] = n^2(\boldsymbol{r})\nabla \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \nabla n^2(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{2.1.7}$$

Si la condition $\mathbf{E} \cdot \nabla n^2(\boldsymbol{r}) = 0$ est satisfaite, on obtient $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ et l'équation (2.1.6) devient l'équation de Helmholtz pour le champ électrique

$$[\nabla^2 + n^2(\boldsymbol{r})k^2]\mathbf{E} = 0. \tag{2.1.8}$$

Une équation semblable peut être obtenue pour le champ magnétique. En général, le gradient de la distribution d'indice de réfraction $n(\boldsymbol{r})$ ne s'annule pas et il n'est pas possible d'obtenir l'équation de Helmholtz. Toutefois il existe deux conditions importantes permettant d'éviter cette difficulté, soit

1. Il est possible de définir $n(\boldsymbol{r})$ par parties, de façon telle que l'indice de réfraction est constant de part et d'autre d'une *interface diélectrique*. Dans ce cas, il est possible de solutionner l'équation de Helmholtz dans chaque milieu et de connecter les solutions à l'interface au moyen de conditions aux limites appropriées.

2. Le champ électrique peut s'écrire comme $\mathbf{E}(\boldsymbol{r}) = E_z(x,y)\hat{\mathbf{e}}_z$ et la fonction d'indice de réfraction comme $n^2(\boldsymbol{r}) = n^2(x,y)$, ce qui revient à dire que la *polarisation* du champ électrique est perpendiculaire au gradient d'indice de réfraction. Cette condition ne permet pas d'obtenir l'équation pour $\mathbf{H}$.

Supposons une cavité bidimensionnelle située dans le plan xy. En général, un gradient d'indice de réfraction peut exister à l'intérieur de la cavité, ce qui entraîne une dépendance spatiale telle que $n^2(\boldsymbol{r}) = n^2(x,y)$. Il est possible de découpler les polarisations du champ électromagnétique en une composante perpendiculaire au plan de la cavité et une comprise dans ce plan. Dans le cas d'une polarisation dite TM, $\mathbf{E}(\boldsymbol{r}) = E_z(x,y)\hat{\mathbf{e}}_z$, ce qui satisfait d'emblée la condition 2. Dans le cas d'une polarisation TE, $\mathbf{H}(\boldsymbol{r}) = H_z(x,y)\hat{\mathbf{e}}_z$.

Nous traiterons essentiellement de cavités bidimensionnelles dans lesquelles la condition 1 est satisfaite, c'est-à-dire des cavités d'indice de réfraction homogène séparées du monde extérieur par des interfaces. Dans ce cas, l'équation de Helmholtz peut s'écrire sous forme scalaire comme

$$[\nabla^2 + n^2k^2]\psi = 0 \tag{2.1.9}$$

où la *fonction d'onde* ψ est la composante selon $\hat{\mathbf{e}}_z$ du champ électromagnétique (soit E_z ou H_z).

Potentiel effectif

Il existe une analogie entre l'équation de Helmholtz et l'équation de Schrödinger, et il est possible d'utiliser cette analogie afin d'effectuer des prédictions physiques sur la nature des solutions de l'équation de Helmholtz dans les milieux diélectriques. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit, en deux dimensions

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = \mathcal{E}\psi(\boldsymbol{r}). \tag{2.1.10}$$

L'équation (2.1.9) peut être réécrite

$$-\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + k^2\Big(1 - n^2\Big)\psi(\boldsymbol{r}) = k^2\psi(\boldsymbol{r}). \tag{2.1.11}$$

Cette analogie suggère que les régions d'indice de réfraction $n > 1$ correspondent à un potentiel attractif, à la différence (importante) que le potentiel lui-même est multiplié par la valeur propre k^2 [63]. Considérons maintenant le cas d'un cylindre diélectrique de rayon R et d'indice de réfraction n_1 placé dans un milieu d'indice n_2. Ceci se traduit par

$$n(\rho) = \begin{cases} n_1 & (0 < \rho < R) \\ n_2 & (\rho > R). \end{cases} \tag{2.1.12}$$

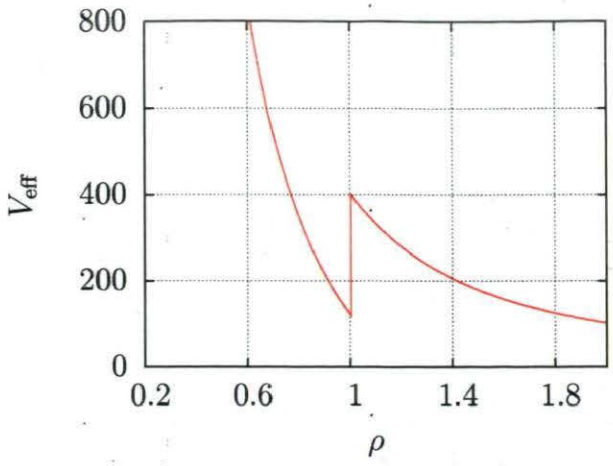


FIGURE 2.1 – Forme du potentiel effectif du disque diélectrique. Les états situés à l'intérieur du puits sont dits quasi-stationnaires. Les valeurs arbitraires utilisées pour tracer la figure sont $R = 1$, $k = 15$, $n_1 = 1.5$, $n_2 = 1$ et $m = 20$.

En écrivant l'opérateur laplacien en coordonnées polaires ($\boldsymbol{r} = \{\rho, \varphi\}$), on trouve que la partie radiale de (2.1.11) satisfait une équation de Bessel, soit

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \left(n^2 k^2 - \frac{m^2}{\rho^2}\right)\psi = 0. \tag{2.1.13}$$

On identifie le potentiel effectif dans le cas $\hbar^2/2M = 1$ comme

$$V_{\text{eff}} = k^2\left(1 - n^2\right) + \frac{m^2}{\rho^2}. \tag{2.1.14}$$

La forme de ce potentiel pour une distribution d'indice donnée par (2.1.12) est tracée à la figure 2.1. Les états situés à l'intérieur du puits de potentiel respectent la condition

$$\frac{m}{n} < \mathrm{Re}(kR) < m \tag{2.1.15}$$

et sont dits quasi-stationnaires, puisqu'un effet tunnel vers l'extérieur du puits est toujours possible. Ce phénomène est l'équivalent quantique de la condition de réflexion totale interne [44].

2.1.2 Conditions aux limites

Bien que la forme des modes TM et TE soit prescrite par la même équation, les conditions aux limites diffèrent dans chaque cas ce qui rend ces modes de profil et de fréquence de résonance en général tous différents. Il est possible d'obtenir les conditions aux limites de façon complètement générale pour chacune des polarisations dans le cas d'interfaces situées dans le plan xy.

Soit un système de coordonnées curvilinéaires cylindriques local tel qu'un vecteur $\mathbf{F}$ peut être décomposé en une composante normale à l'interface, $F_\perp$, une composante parallèle à l'axe z, F_z, et une troisième composante tangentielle, $F_\parallel$, perpendiculaire aux deux précédentes. Cette décomposition se traduit par

$$\mathbf{F} = F_\parallel \hat{\mathbf{e}}_\parallel + F_\perp \hat{\mathbf{e}}_\perp + F_z \hat{\mathbf{e}}_z. \tag{2.1.16}$$

Si on traite une polarisation pure, soit $\mathbf{F} = F_z \hat{\mathbf{e}}_z$, on obtient

$$\nabla \times \mathbf{F} = \frac{1}{h_\perp}\frac{\partial F_z}{\partial \xi_\perp}\hat{\mathbf{e}}_\parallel - \frac{1}{h_\parallel}\frac{\partial F_z}{\partial \xi_\parallel}\hat{\mathbf{e}}_\perp \tag{2.1.17}$$

où h_i est le coefficient de Lamé associée à la coordonnée locale ξ_i. Pour chaque polarisation, il importe d'imposer deux conditions de continuité, soit

1. La continuité de la composante du champ électromagnétique selon $\hat{\mathbf{e}}_z$
2. La continuité de la composante du champ électromagnétique selon $\hat{\mathbf{e}}_\parallel$.

Considérons une interface entre deux milieux Ω_1 et Ω_2. En polarisation TM, la première condition se traduit par la continuité de E_z en tout point de l'interface. La seconde condition exige la continuité de la composante du champ $\mathbf{H}$ parallèle à l'interface. On obtient de (2.1.4a) et (2.1.17)

$$H_\parallel = -\frac{i}{k}[\nabla \times \mathbf{E}]_\parallel = -\frac{i}{h_\perp k}\frac{\partial E_z}{\partial \xi_\perp}. \tag{2.1.18}$$

La seconde condition se traduit ainsi par la continuité de la dérivée directionnelle normale de E_z ou encore la continuité de $\frac{\partial E_z}{\partial \xi_\perp}$ en tout point de l'interface.

Un travail similaire peut être effectué en polarisation TE. La première condition se traduit par la continuité de H_z en tout point de l'interface. La seconde condition nécessite la continuité de la composante du champ $\mathbf{E}$ parallèle à l'interface. On obtient de (2.1.4b) et (2.1.17)

$$E_\parallel = \frac{i}{n^2 k}[\nabla \times \mathbf{H}]_\parallel = \frac{i}{h_\perp n^2 k}\frac{\partial H_z}{\partial \xi_\perp}. \tag{2.1.19}$$

La seconde condition se traduit ainsi par la continuité de $\frac{1}{n^2}\frac{\partial H_z}{\partial \xi_\perp}$ en tout point de l'interface. Les conditions aux limites à appliquer aux solutions de (2.1.9) peuvent être réécrites de façon compacte comme

$$\psi^{(1)} = \psi^{(2)} \tag{2.1.20a}$$

$$\gamma_1 \frac{\partial \psi^{(1)}}{\partial \xi_\perp} = \gamma_2 \frac{\partial \psi^{(2)}}{\partial \xi_\perp} \tag{2.1.20b}$$

où $\gamma_i = 1\ (1/n_i^2)$ en polarisation TM (TE) et $\psi^{(i)}$ dénote la fonction d'onde dans le milieu Ω_i d'indice de réfraction n_i.

Une autre condition doit être imposée sur le comportement du champ à l'infini. Une expérience de diffusion élastique d'ondes sur un objet diélectrique se traduit par une fonction d'onde composée d'une onde plane incidente de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ et d'une onde plane émergente à l'infini, soit

$$\lim_{\rho\to\infty} \psi \sim \psi_{\text{in}} + \psi_{\text{out}} = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) + g(\varphi)\frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{\rho}} \tag{2.1.21}$$

où $k = |\boldsymbol{k}|$ et $g(\varphi)$ est l'amplitude diffusée dépendant de la forme de l'onde incidente et de la géométrie de l'objet diffuseur. Cette condition est appelée *condition de diffusion*.

Certains formalismes utilisent une approche par émission plutôt que par diffusion. Une condition correspondant à une onde purement sortante à l'infini doit être imposée, la *condition d'émission de Sommerfeld*. Cette dernière se traduit par

$$\lim_{\rho\to\infty} \psi \sim \psi_{\text{out}} = \bar{g}(\varphi)\frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{\rho}} \tag{2.1.22}$$

où $\bar{g}(\varphi)$ ne dépend maintenant que de la géométrie de l'objet émetteur. En résumé, l'équation différentielle partielle (2.1.9), la géométrie des interfaces diélectriques, les deux conditions aux interfaces, de même que le choix de (2.1.21) ou (2.1.22) définissent complètement le problème à solutionner.

2.2 Domaines circulaires

Un domaine diélectrique circulaire est défini comme un domaine Ω_1 d'indice de réfraction n_1 borné par une frontière circulaire $\partial\Omega_1$ de rayon R centrée à l'origine du plan xy. Le domaine circulaire est ouvert sur un domaine semi-infini Ω_2 d'indice de réfraction $n_2 < n_1$. L'équation de Helmholtz peut être solutionnée par séparation de variables en coordonnées polaires ($\boldsymbol{r} = \{\rho, \varphi\}$). La solution générale est un produit de fonctions cylindriques radiales et de fonctions harmoniques angulaires (voir annexe A.1). La solution de l'équation de Helmholtz la plus générale dans le domaine Ω_1 est

$$\psi^{(1)}(\rho,\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m^{(1)} J_m(n_1 k\rho) e^{im\varphi} \tag{2.2.1}$$

où J_m est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre m et $\{a_m^{(1)}\}$ est un ensemble de coefficients complexes indéterminés. Cette fonction correspond à une superposition d'ondes stationnaires à l'intérieur du cercle diélectrique. La superposition d'une seconde solution linéairement indépendante Y_m (fonction de Bessel de seconde espèce) est proscrite puisque cette dernière diverge à l'origine pour $\rho \to 0$.

À l'extérieur du disque, la solution la plus générale satisfaisant la condition de diffusion (voir annexe A.2.2) peut s'écrire [4]

$$\psi^{(2)}(\rho,\varphi) = \underbrace{\sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m^{(2)} H_m^{(-)}(n_2 k\rho) e^{im\varphi}}_{\psi_{\text{in}}} + \underbrace{\sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m^{(2)} H_m^{(+)}(n_2 k\rho) e^{im\varphi}}_{\psi_{\text{out}}}. \tag{2.2.2}$$

Le choix de cette forme de solution est motivé par le comportement asymptotique des fonctions de Hankel $H^{(+)}$ et $H^{(-)}$ à l'infini, soit respectivement une onde plane sortante et une onde plane incidente (voir annexe A.2.2).

Les coefficients $\{b_m^{(2)}\}$ associés à l'onde cylindrique diffusée sont reliés aux coefficients $\{a_m^{(2)}\}$ par la *matrice de diffusion* $\boldsymbol{S}$ selon la relation

$$b_m^{(2)} = \sum_{q=-\infty}^{\infty} S_{mq} a_q^{(2)}. \tag{2.2.3}$$

Il est aisé de montrer qu'en l'absence du disque, la matrice de diffusion devient l'identité ($S_{mq} = \delta_{mq}$). L'application des conditions aux limites (2.1.20) sur la frontière $\partial\Omega_1$ fixe la valeur des éléments de matrice pour un cercle diélectrique, soit

$$S_{mq} = -\delta_{mq} \frac{\eta_{12} J_m'(u_1) H_m^{(-)}(u_2) - J_m(u_1) H_m^{(-)\prime}(u_2)}{\eta_{12} J_m'(u_1) H_m^{(+)}(u_2) - J_m(u_1) H_m^{(+)\prime}(u_2)}. \tag{2.2.4}$$

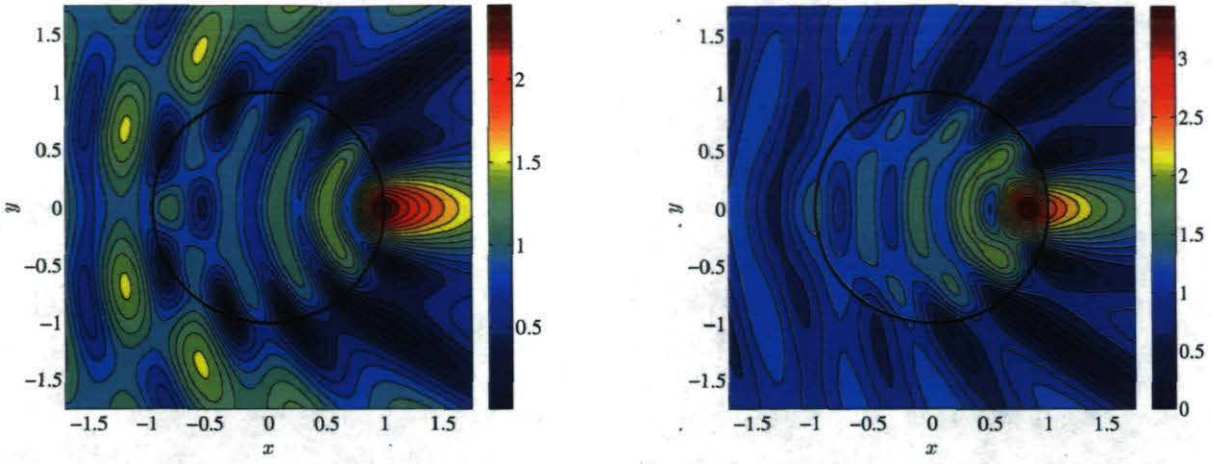
où $u_i = n_i kR$ et $\eta_{ij} = n_i/n_j$ (n_j/n_i) en polarisation TM (TE). Cette forme diagonale de la matrice de diffusion revient à une règle de conservation du *moment angulaire*. En effet, pour une excitation cylindrique de moment angulaire généralisé m, la réponse d'un cercle diélectrique est également une onde cylindrique de moment angulaire m.

2.2.1 Diffusion d'ondes planes

Les équations (2.2.1) et (2.2.2) de même que l'expression (2.2.4) permettent de déterminer la valeur du champ électromagnétique en tout point de l'espace en présence d'une excitation arbitraire. La procédure revient à décomposer l'onde incidente en série de Fourier-Bessel de façon à fixer les coefficients $\{a_m^{(2)}\}$ et par la suite obtenir la fonction d'onde à l'aide de la matrice de diffusion. Le coefficient $a_m^{(1)}$ est ensuite simplement calculé à partir de $a_m^{(2)}$ de la façon suivante

$$a_m^{(1)} = \frac{a_m^{(2)}}{J_m(u_1)} \left[H_m^{(-)}(u_2) + S_{mm} H_m^{(+)}(u_2) \right]. \tag{2.2.5}$$

4. $H_m^{(+)}(\xi) = J_m(\xi) + iY_m(\xi)$, $\quad H_m^{(-)}(\xi) = J_m(\xi) - iY_m(\xi)$



(a) Polarisation TM **(b)** Polarisation TE

FIGURE 2.2 – Diffusion d'une onde plane sur un cylindre diélectrique ($n_1 = 1.5, n_2 = 1, k = 5$). Les coefficients $m = [-25, 25]$ sont utilisés pour l'évaluation des sommes partielles. Carte de $|\psi|$, unités de couleur arbitraire. Le périmètre du cercle diélectrique est illustré en noir.

Considérons à titre d'exemple une excitation incidente de la forme d'une onde plane de nombre d'onde k, soit

$$\psi_{\text{inc}}(\rho, \varphi) = e^{in_2 kx} = e^{in_2 k\rho\cos\varphi}. \tag{2.2.6}$$

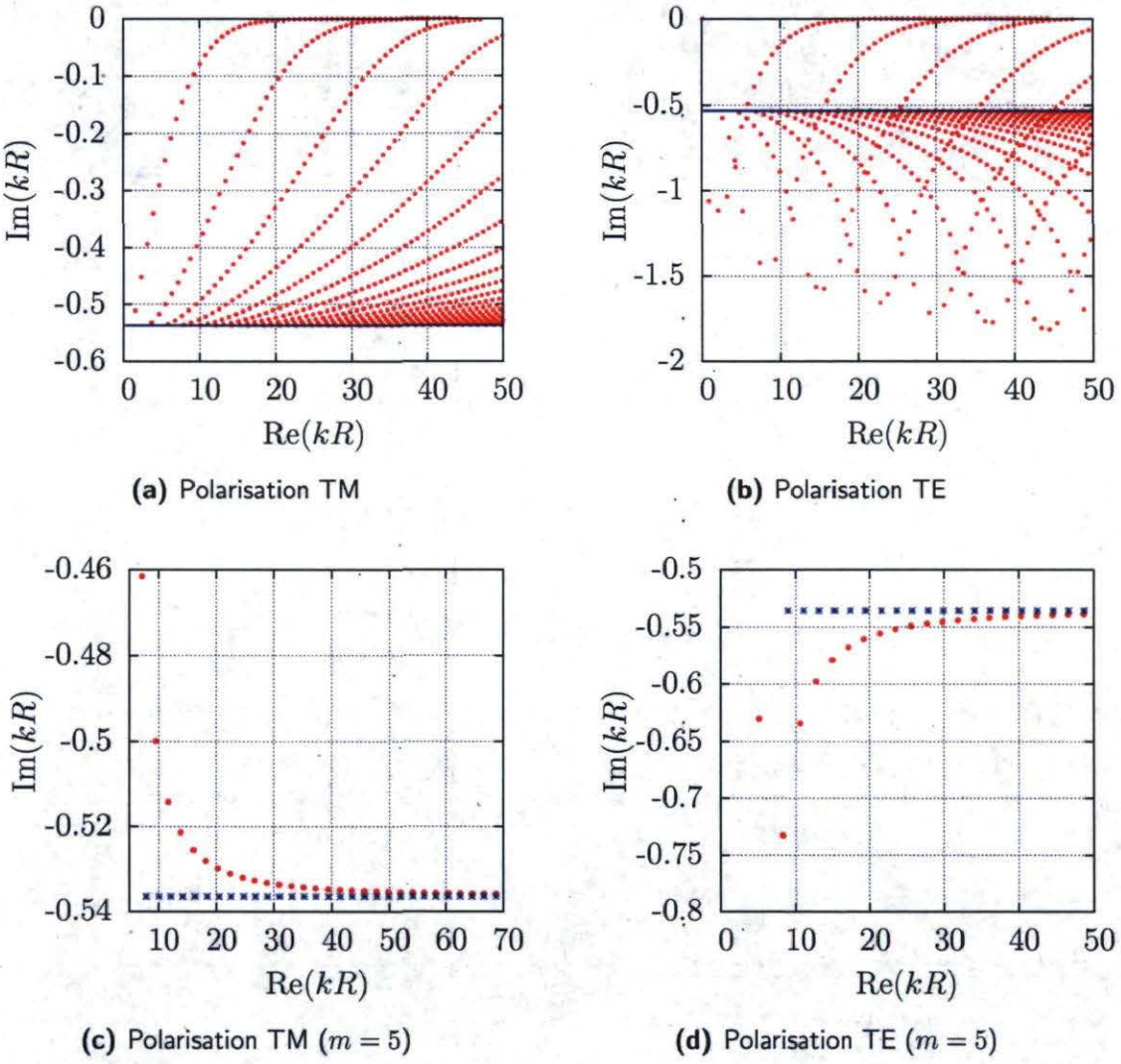
L'onde plane provient des x négatifs ($\varphi = \pi$), ce qui n'entraîne aucune perte de généralité en raison de la symétrie de rotation du problème (toutes les directions incidentes sont équivalentes). Cette onde incidente se décompose en série de Fourier-Bessel de la façon suivante [34]

$$\psi_{\text{inc}}(\rho, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(n_2 k\rho) e^{im\varphi}. \tag{2.2.7}$$

En l'absence d'objet diffuseur ($S_{mm} = \delta_{mm}$), cette excitation se propage librement et on trouve de (2.2.2)

$$\psi^{(2)}(\rho, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} 2a_m^{(2)} J_m(n_2 k\rho) e^{im\varphi}. \tag{2.2.8}$$

En comparant les deux dernières équations, on identifie aisément $a_m^{(2)} = i^m/2$. La fonction d'onde dans tout l'espace peut être reconstruite en utilisant les expressions (2.2.4) et (2.2.5) et en sommant les séries jusqu'à convergence (voir fig. 2.2). Cette démarche est générique puisque toute excitation peut être développée en série de Fourier-Bessel.



(a) Polarisation TM **(b)** Polarisation TE

(c) Polarisation TM ($m = 5$) **(d)** Polarisation TE ($m = 5$)

FIGURE 2.3 – Position dans le plan complexe de quelques résonances du cercle diélectrique ($n_1 = 1.5, n_2 = 1$) pour $1 \leq m \leq 54$. **(a-b)** Les racines de l'équation caractéristique (2.2.10) ont été déterminées à l'aide de la méthode de Newton-Raphson et sont indiquées en rouge. **(c-d)** Position des résonances pour $m = 5$ et vérification de la tendance asymptotique (bleu) présentée à l'annexe (A.2.4) pour $kR \gg m$.

2.2.2 Modes résonants

Les modes résonants constituent le squelette de la réponse d'un cercle diélectrique à une excitation quelconque. Ces modes correspondent à une réponse infinie du milieu diélectrique en présence d'une excitation infinitésimale (nulle). En appliquant la condition d'émission de Sommerfeld, on obtient de (2.2.1) et (2.2.2) l'expression des modes résonants

$$\psi_m^{(1)}(\rho,\varphi) = a_m J_m(n_1 k\rho) e^{im\varphi} \tag{2.2.9a}$$
$$\psi_m^{(2)}(\rho,\varphi) = b_m H_m^{(+)}(n_2 k\rho) e^{im\varphi}. \tag{2.2.9b}$$

Les modes résonants forment un ensemble discret de nombres d'onde k complexes (ou fréquences complexes $\omega = ck$) tels que les conditions aux limites électromagnétiques sont respectées. Cet ensemble correspond aux pôles simples de la matrice de diffusion $\boldsymbol{S}(k)$ et est composé des solutions de l'équation caractéristique suivante, obtenue en égalant le dénominateur de (2.2.4) à zéro [5]

$$\eta_{12}\frac{H_m^{(+)}(u_2)}{H_m^{(+)\prime}(u_2)} = \frac{J_m(u_1)}{J_m'(u_1)}. \tag{2.2.10}$$

Les pôles simples [6] de la matrice de diffusion dans le domaine fréquentiel correspondent à des raies lorentziennes, d'où le caractère « résonant » des modes de cavité. La détermination des pôles peut être effectuée en solutionnant (2.2.10) de façon numérique. Chaque solution est caractérisée par deux nombres quantiques (m, j) correspondant au nombre de lobes angulaires et radiaux, respectivement. Les modes d'un cercle diélectrique sont infiniment dégénérés en φ. Ceci est une conséquence de la symétrie de rotation du système ; il n'y a pas de lieu privilégié pour l'emplacement des lobes angulaires d'une solution quelconque.

Les singularités dans la partie inférieure du plan complexe ($k = k' - ik''$) sont d'un intérêt particulier. Considérons la forme asymptotique de la fonction d'onde sortante présentée à l'annexe (A.2.2), soit

$$\lim_{\rho\to\infty} H_m^{(+)}(n_2 k\rho) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi n_2 k\rho}} \exp\left[+i\left(n_2 k\rho - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right]. \tag{2.2.11}$$

5. Cette équation peut également être obtenue connectant les solutions (2.2.9a) et (2.2.9b) au moyen des conditions aux limites électromagnétiques et correspond aux zéros du déterminant de la matrice des coefficients du système d'équations linéaires homogènes pour a_m et b_m. En d'autres mots, ceci est analogue à un problème de Sturm-Liouville, soit déterminer les valeurs propres et les fonctions propres de l'équation de Helmholtz.

6. Les solutions de (2.2.10) sont en général complexes. En effet, dans le cas d'une valeur purement réelle de k, le côté gauche de l'équation est complexe alors que le côté droit est purement réel, ce qui proscrit en général les solutions réelles.

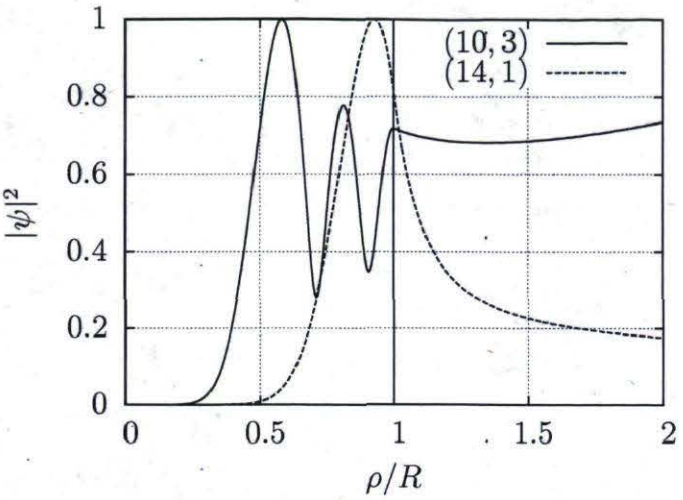


FIGURE 2.4 – Coupe de radiale deux modes résonants du disque diélectrique ($n_1 = 1.5, n_2 = 1$, normalisation arbitraire). La frontière diélectrique est indiquée par une droite verticale en $\rho = R$. Le mode $(14, 1)$ possède une fréquence de résonance $kR = 11.46 - 0.05i$ alors que le mode $(10, 3)$ se caractérise par une fréquence de résonance $kR = 13.52 - 0.44i$. La croissance exponentielle vers l'infini est bien visible dans le cas du mode $(10, 3)$.

La forme asymptotique de la fonction d'onde du système à la résonance est ainsi

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t} = A(\rho)e^{n_2 k'' \rho}e^{-cn_2 k'' t}e^{in_2 k'(\rho - ct)}e^{im\varphi} \tag{2.2.12}$$

où $A(\rho)$ est une amplitude complexe. La norme au carré de cette expression est proportionnelle à un produit d'exponentielles

$$|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 = |A(\rho)|^2 e^{2n_2 k'' \rho}e^{-2cn_2 k'' t} \equiv |A(\rho)|^2 e^{2_2 k'' \rho}e^{-t/\tau}. \tag{2.2.13}$$

Ce comportement exponentiel des fonctions d'ondes les rend non-normalisables, une caractéristique des modes à pertes [68]. Il peut sembler problématique que la fonction d'onde diverge de façon exponentielle pour $\rho \to \infty$ (voir par exemple fig. 2.4), mais ce comportement est une signature de la fuite d'énergie, et la partie imaginaire de k est l'analogue d'un gain dans le milieu. L'énergie contenue dans la cavité décroît de façon exponentielle avec le temps, ce qui correspond à un *mode d'émission* (autrement dit, l'énergie est entièrement évacuée du cercle diélectrique après un temps suffisamment long). Le temps caractéristique de cette décroissance exponentielle, ou encore le *délai* subi lors de l'interaction, est donné par $\tau = (2n_2 k'' c)^{-1}$.

2.2.3 Domaines concentriques

Les cavités diélectriques annulaires ont été l'objet de plusieurs études récentes [6, 44]. La solution de l'équation de Helmholtz dans cette géométrie peut être obtenue

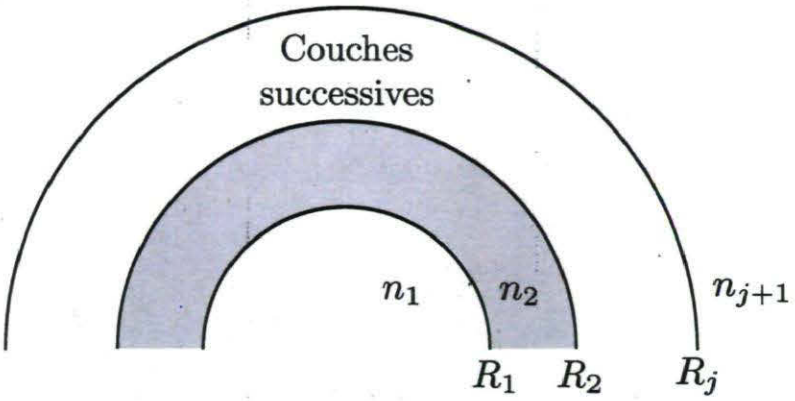


FIGURE 2.5 – Interfaces diélectriques concentriques. Chaque interface Γ_p est un cercle de rayon $R_p > R_{p-1}$ centré à l'origine et sépare deux milieux diélectriques d'indice n_p et n_{p+1}.

analytiquement tant que la symétrie de rotation est présente, c'est-à-dire dans le cas où la cavité est formée de deux cercles diélectriques concentriques. En fait, les modes d'un résonateur composé d'un nombre arbitraire de frontière diélectriques concentriques peuvent être obtenus (voir fig. 2.5).

La solution dans la région centrale et celle dans la région extérieure sont les mêmes que dans le cas de la cavité circulaire, puisqu'on impose la condition d'émission de Sommerfeld (2.1.22) à l'infini et une solution bornée à l'origine. Dans les couches intérieures, une superposition d'une onde sortante et d'une onde entrante est possible, ce qui permet d'écrire la fonction d'onde d'un système constitué de j interfaces et $j+1$ milieux diélectriques comme

$$\begin{aligned}
\psi_m^{(1)} e^{-im\varphi} &= a_m^{(1)} J_m(n_1 k\rho) \\
\psi_m^{(2)} e^{-im\varphi} &= b_m^{(2)} H_m^{(+)}(n_2 k\rho) + c_m^{(2)} H_m^{(-)}(n_2 k\rho) \\
&\vdots \\
\psi_m^{(j)} e^{-im\varphi} &= b_m^{(j)} H_m^{(+)}(n_j k\rho) + c_m^{(j)} H_m^{(-)}(n_j k\rho) \\
\psi_m^{(j+1)} e^{-im\varphi} &= d_m^{(j+1)} H_m^{(+)}(n_{j+1} k\rho).
\end{aligned} \tag{2.2.14}$$

L'application des conditions aux frontières (2.1.20a) et (2.1.20b) à chaque interface résulte en un système de $2j$ équations homogènes pour $2j$ inconnues, qui se traduit sous forme matricielle par

$$\boldsymbol{T} \begin{pmatrix} a_m^{(1)} \\ \vdots \\ d^{(j+1)} \end{pmatrix} = 0 \tag{2.2.15}$$

où $\boldsymbol{T}$ est une matrice $2j \times 2j$, tridiagonale pour $j = 2$ et pentadiagonale pour $j \geq 3$. Le détail des entrées de cette matrice est présenté à l'annexe (A.3). Ce système n'admet de solutions non-triviales que si le déterminant de la matrice de la matrice $\boldsymbol{T}$ est nulle.

L'équation caractéristique des résonances du système est ainsi simplement donnée par

$$\det\left[\boldsymbol{T}(k)\right] = 0. \tag{2.2.16}$$

Dans le cas de l'anneau diélectrique centré, composé de deux interfaces et trois milieux diélectriques, l'équation caractéristique est

$$\begin{vmatrix} J_m(u_{11}) & -H_m^{(+)}(u_{21}) & -H_m^{(-)}(u_{21}) & 0 \\ \gamma_1 J_m'(u_{11}) & -\gamma_2 H_m^{(+)\prime}(u_{21}) & -\gamma_2 H_m^{(-)\prime}(u_{21}) & 0 \\ 0 & -H_m^{(+)}(u_{22}) & -H_m^{(-)}(u_{22}) & H_m^{(+)}(u_{32}) \\ 0 & -\gamma_2 H_m^{(+)\prime}(u_{22}) & -\gamma_2 H_m^{(-)\prime}(u_{22}) & \gamma_3 H_m^{(+)\prime}(u_{32}) \end{vmatrix} = 0 \tag{2.2.17}$$

où $u_{pq} \equiv n_p k R_q$. L'évaluation explicite du déterminant redonne la forme mentionnée dans [44]. Les résonances comprises entre $0 \leq nkR \leq 50$ sont présentées à la figure (2.6).

La position des résonances est calculée de façon numérique en utilisant un algorithme de Newton-Raphson [70]. Une itération s'écrit

$$k_{n+1} = k_n - \frac{\det[\boldsymbol{T}(k_n)]'}{\det[\boldsymbol{T}(k_n)]} \tag{2.2.18}$$

où k_0 est une valeur initiale de partie imaginaire négative et le symbole prime dénote la dérivée par rapport à k. Cette dérivée peut être évaluée à l'aide de l'identité de Jacobi [60]

$$\frac{\partial \det(\boldsymbol{T})}{\partial k} = \det(\boldsymbol{T}) \mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{T}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial k}\right) \tag{2.2.19}$$

où $\frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial k}$ est la dérivée élément par élément de la matrice $\boldsymbol{T}$. Cette dérivée est aisément évaluée à l'aide des relations de récurrence caractéristiques des fonctions de Bessel (A.2.10), ce qui permet de réécrire une itération sous la forme simple

$$k_{n+1} = k_n - \frac{1}{\mathrm{Tr}[\boldsymbol{T}^{-1}(k_n)\boldsymbol{T}'(k_n)]}. \tag{2.2.20}$$

2.3 Comportement axial de la fonction d'onde

Jusqu'à ce point, seulement des systèmes bidimensionnels ont été considérés. En effet les fonctions d'onde dans les directions angulaires et radiales ont été obtenues,

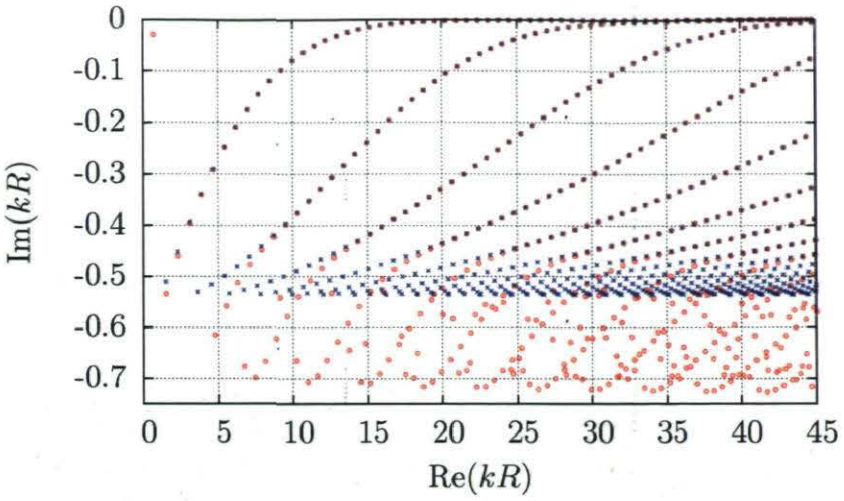


FIGURE 2.6 – Résonances complexes d'un anneau diélectrique (rouge). Une comparaison avec les résonances de la cavité circulaire (bleu) de même indice de réfraction est effectuée. L'anneau diélectrique est simplement une cavité circulaire à laquelle on ajoute un trou d'air. Le rayon intérieur de l'anneau est égal à $0,4R$ dans ce cas particulier ($n_1 = 1.5, n_2 = 1$, polarisation TM).

mais dans les systèmes réels, le comportement axial de la fonction d'onde ne peut pas nécessairement être négligé de la sorte. Les résultats obtenus s'appliquent de façon directe à des milieux semi-infinis dans la direction axiale. Ce pourrait être le cas d'un cylindre diélectrique infini, une fibre optique par exemple. Dans ce cas, le vecteur d'onde est simplement décomposé en une composante axiale et une composante transverse.

Un autre type de milieu d'intérêt est une cavité optiquement mince. Dans ce cas, la composante axiale du vecteur d'onde peut être déterminée de façon approximative à l'aide de la méthode de l'indice effectif. Cette méthode consiste à modéliser la dimension axiale de la cavité comme un guide d'onde à plaques parallèles. Les détails de cette approximation se trouvent à l'annexe C.3.

Il a été déterminé expérimentalement que la méthode de l'indice effectif entraîne une erreur notable sur la position des résonances [11]. Néanmoins, le caractère tridimensionnel des structures résonantes ne sera pas pris en compte dans le prochain chapitre. Nous supposons simplement que les dimensions des cavités sont telles que nous travaillons sous la fréquence de coupure du second mode axial (voir annexe C.3). Il est toutefois bon de garder à l'esprit que le comportement axial des solutions est généralement non-trivial.

Conclusion et perspectives

Les solutions analytiques de l'équation de Helmholtz bidimensionnelle ont été détaillées pour deux géométries intégrables, soit le cercle et l'anneau. Bien que les systèmes réels ne soient généralement pas de nature intégrable, les solutions analytiques permettent de guider l'obtention de solutions de façon numérique dans le cas non-intégrable.

Afin d'illustrer ce fait, considérons la cavité annulaire, en particulier les résultats présentés à la figure 2.6. Il est remarquable que la fréquence de résonance de certains modes de galerie (valeurs faiblement négatives de $\mathrm{Im}(kR)$) ne soit pas modifiée par la présence du trou d'air à l'intérieur du cercle, alors que les modes de faible qualité (valeurs fortement négatives de $\mathrm{Im}(kR)$) sont perturbés et voient leur facteur de qualité diminuer davantage. Ces résultats permettent d'obtenir des règles de design visant à contrôler l'émission multimode d'une cavité annulaire en modifiant la géométrie et/ou la position de l'inclusion. En effet, la présence de l'inclusion force les modes de faibles qualité – potentiellement indésirables – à être rapidement évacués, tout en préservant la haute qualité des modes utiles aux dispositifs de biodétection ou de télécommunications, par exemple. La symétrie du système intégrable condamne toutefois le profil d'émission associé à être symétrique de la même façon. Afin d'explorer une plus grande richesse de configurations expérimentales, il importe de se doter d'outils numériques permettant de solutionner (2.1.9) dans des systèmes non-intégrables. Dans cette perspective, deux types d'outils numériques sont présentés aux chapitres 3 et 4.

Chapitre 3

Modélisation ondulatoire de structures bidimensionnelles asymétriques

Les cavités asymétriques ont fait l'objet de multiples études depuis la réalisation que les effets de déformations non-perturbatives de cavités idéales peuvent en fait être utiles dans un contexte expérimental [63]. En particulier, la conception de microlasers caractérisés par une émission fortement directionnelle et une préservation du facteur de qualité est au centre de plusieurs travaux récents [43, 89].

En général, les systèmes dont les frontières sont des *déformations du cercle* sont non-intégrables, à l'exception notable de l'ellipse [88]. Ainsi, des méthodes numériques sont requises afin de déterminer les fréquences de résonance, le facteur de qualité et les fonctions d'ondes associés. Dans tous les cas, l'équation de Helmholtz (2.1.9) est réduite à une forme matricielle en discrétisant soit les frontières du problème [91] ou l'espace physique du problème [17, 71]. La première avenue se traduit souvent par la mise en œuvre de la *méthode des éléments de frontière (boundary element method)*, souvent appelée *algorithme BEM* dans la littérature. Il s'agit d'un algorithme polyvalent s'appliquant à une variété de domaines multiplement connexes (avec inclusions) ou de structures couplées.

Ce chapitre présente la théorie derrière la méthode des éléments de frontière dans le cadre de la détermination des modes résonants de structures optiques bidimensionnelles. Une généralisation aux domaines multiplement connexes est présentée, de même que plusieurs résultats numériques illustrant les avantages et limites de la méthode. L'accent est mis sur la détermination de modes de cavités diélectriques, mais il est possible d'utiliser la méthode BEM avec des modifications mineures dans le cadre d'autres applications. Ces situations incluent sans s'y restreindre la plasmonique [69], les semi-

conducteurs et puits quantiques [51, 52] et les fibres optiques creuses [37].

3.1 Formulation intégrale

L'algorithme BEM est basé sur la solution de systèmes *d'équations intégrales de frontière*. L'équation de Helmholtz dans un domaine diélectrique Ω_j d'indice n_j délimité par une frontière $\partial\Omega_j$ s'écrit

$$[\nabla^2 + n_j^2 k^2]\psi(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{3.1.1}$$

La solution de l'équation de Helmholtz inhomogène pour une excitation ponctuelle (fonction delta de Dirac) est connue. Il s'agit de la *fonction de Green* G_j, définie par l'équation

$$[\nabla^2 + n_j^2 k^2]G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}). \tag{3.1.2}$$

En multipliant (3.1.1) par $G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k)$ et en soustrayant (3.1.2) multipliée par ψ, on obtient

$$\psi(\boldsymbol{r})\nabla^2 G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k) - G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k)\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}). \tag{3.1.3}$$

On s'intéresse maintenant à l'intégrale sur l'entièreté de la surface du milieu diélectrique, soit

$$\int_{\Omega_j} dA[\psi(\boldsymbol{r})\nabla^2 G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k) - G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k)\nabla^2\psi(\boldsymbol{r})] = \psi(\boldsymbol{r'}) \tag{3.1.4}$$

où la propriété fondamentale de la fonction δ sous le signe intégral est utilisée. La seconde identité de Green permet de réécrire le côté gauche de l'équation précédente comme une intégrale de contour sur la frontière $\partial\Omega_j$

$$\psi(\boldsymbol{r'}) = \oint_{\partial\Omega_j} d\boldsymbol{s} \cdot [\psi(\boldsymbol{r})\nabla G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k) - G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k)\nabla\psi(\boldsymbol{r})]. \tag{3.1.5}$$

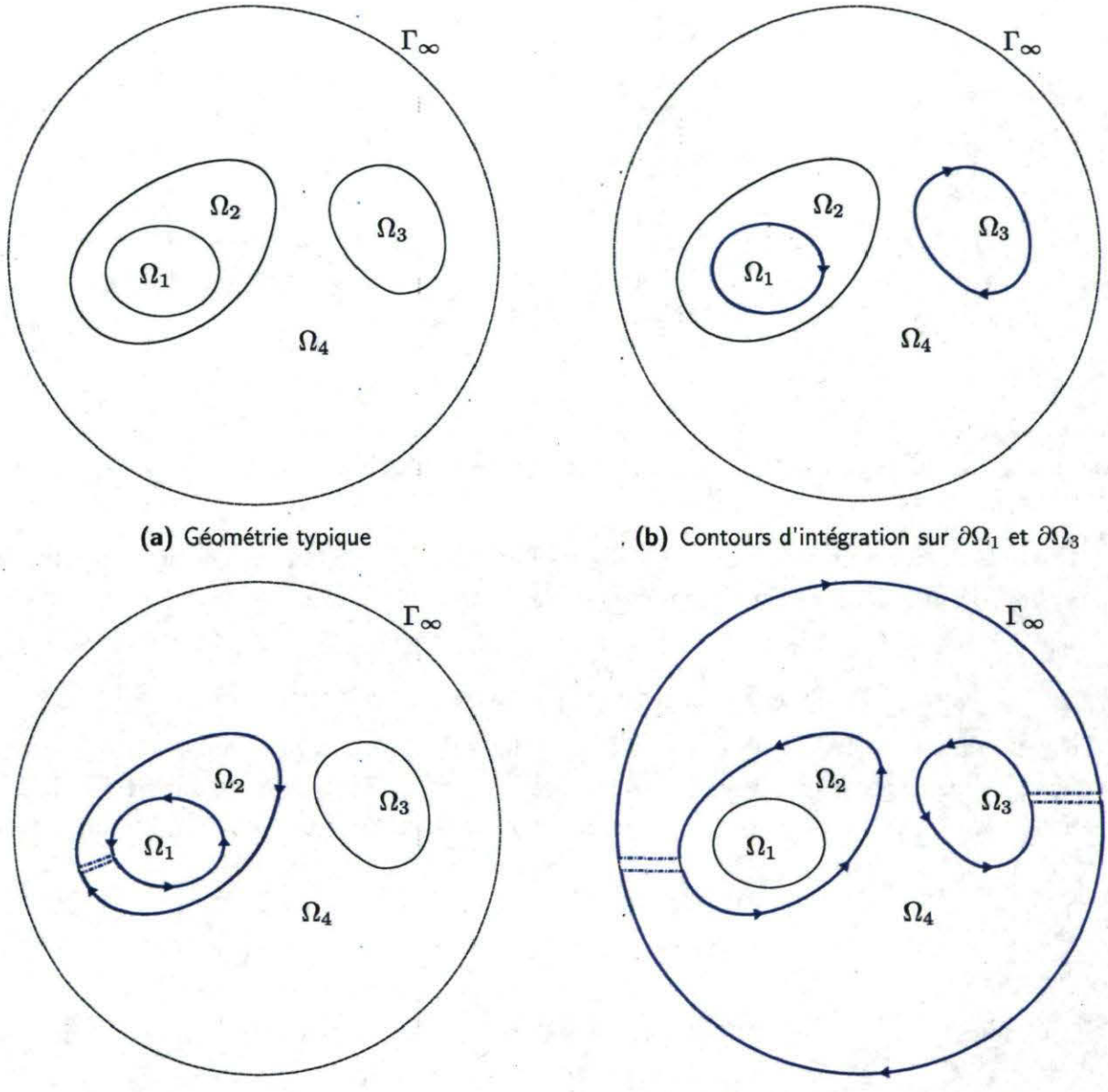
Le vecteur $d\boldsymbol{s}$ étant normal à l'élément de longueur d'arc ds, on peut réécrire cette intégrale comme [52]

$$\psi(\boldsymbol{r'}) = \oint_{\partial\Omega_j} ds\ [\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k) - G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})] \tag{3.1.6}$$

où la dérivée normale est définie comme

$$\partial_\perp \equiv \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}) \cdot \nabla_r \tag{3.1.7}$$

avec $\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r})$ le vecteur unitaire normal à l'élément d'arc $ds(\boldsymbol{r})$. L'équation intégrale (3.1.6) permet de déterminer la valeur de la fonction d'onde en tout point du milieu diélectrique Ω_j à partir de la connaissance de la valeur de la fonction d'onde sur la frontière $\partial\Omega_j$ du milieu et de la fonction de Green associée. Les contours d'intégration pour plusieurs frontières types sont illustrés à la figure 3.1.



(a) Géométrie typique

(b) Contours d'intégration sur $\partial\Omega_1$ et $\partial\Omega_3$

(c) Contour d'intégration sur $\partial\Omega_2$

(d) Contour d'intégration sur $\partial\Omega_4$

FIGURE 3.1 – Géométrie typique de régions diélectriques bidimensionnelles et contours d'intégration associés. La convention sur le sens d'intégration est en sens horaire. Les coupures sont indiquées en pointillés et ont une contribution nulle aux intégrales. Le contour Γ_∞ est défini comme un cercle de rayon $\rho \to \infty$.

Cette formulation revient à dire que la fonction de Green agit comme un *propagateur* des solutions de l'équation de Helmholtz. Par ailleurs, il est aisé de montrer (annexe B.1.1) que la fonction de Green de l'équation de Helmholtz bidimensionnelle est

$$G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) = -\frac{i}{4} H_0^{(+)}(n_j k|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}|). \tag{3.1.8}$$

La dérivée normale s'écrit ainsi [1]

$$\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) = \frac{i n_j k}{4} \cos\alpha H_1^{(+)}(n_j k|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}|) \tag{3.1.9}$$

où α est l'angle entre le vecteur normal au point $\boldsymbol{r}$ et le vecteur $\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}$, donné par

$$\cos\alpha = \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}) \cdot \frac{\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}|}. \tag{3.1.10}$$

3.1.1 Singularités intégrables et équations intégrales

Avant d'aller plus loin dans cette discussion des équations intégrales de frontière, il importe de mentionner deux propriétés des fonctions de Green, soit

1. La fonction de Green est symétrique, soit $G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) = G_j(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}; k)$.
2. La fonction de Green possède une singularité intégrable au point $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$.

La seconde propriété entraîne une difficulté dans l'évaluation de l'intégrale (3.1.6) en raison du passage au point singulier lorsque $\boldsymbol{r}' \in \partial\Omega_j$. Toutefois, la singularité de la fonction de Green et de sa dérivée première sont intégrables (annexe B.1.2). On trouve ainsi une reformulation de (3.1.6) en termes de sa valeur principale, soit

$$\frac{1}{2}\psi(\boldsymbol{r}') = \mathcal{P} \oint_{\partial\Omega_j} ds\, [\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) - G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k)\partial_\perp \psi(\boldsymbol{r})] \tag{3.1.11}$$

où $\boldsymbol{r}' \in \partial\Omega_j$. L'équation (3.1.11) est le point de départ de la méthode des éléments de frontière. Tel que noté par Wiersig [91], les milieux situés de part et d'autre de la frontière contribuent chacun de moitié à la valeur de la fonction d'onde sur la frontière.

3.1.2 Frontières et interfaces

La frontière $\partial\Omega_j$ d'un milieu diélectrique Ω_j est en général composée de l'union de plusieurs *interfaces diélectriques*. Nous définissons l'interface Γ^{jm} entre deux milieux

1. Notons que $\frac{\partial}{\partial\xi} H_0^{(+)}(\xi) = -H_1^{(+)}(\xi)$.

comme une courbe fermée composée de l'intersection entre les frontières de ces deux milieux, soit

$$\Gamma^{jm} \equiv \partial\Omega_j \cap \partial\Omega_m \qquad (m \neq j). \tag{3.1.12}$$

Une équation du type (3.1.11) existe pour chaque milieu diélectrique Ω_j ; il est possible de réécrire l'intégration sur une frontière $\partial\Omega_j$ comme une somme d'intégrales sur toutes les interfaces constituantes. En utilisant la définition (3.1.12), on peut écrire la forme compacte suivante

$$\sum_{m\neq j} \oint_{\Gamma^{jm}} ds\, [\mathcal{B}_j(s',s)\phi(s) + \mathcal{C}_j(s',s)\psi(s)] = 0 \tag{3.1.13}$$

où $\mathcal{B}_j(s',s) = -2G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)$, $\mathcal{C}_j(s',s) = 2\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) - \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ et $\phi(s) = \partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})$ [2]. La somme doit être effectuée sur toutes les interfaces partagées entre le milieu Ω_j et les milieux connexes Ω_m. Cette forme particulière en termes d'opérateurs intégraux permet de construire un système d'équations intégrales afin d'obtenir les modes résonants de structures optiques. En effet, un tel système nécessite la détermination du sous-espace nul d'une matrice caractéristique, à l'instar de la démarche exposée à la section (2.2.3).

Notons qu'il est nécessaire de montrer rigoureusement que l'intégrale sur le contour Γ_∞ – illustré à la figure 3.1 – ne contribue pas à la somme (3.1.13). Cette preuve, détaillée à la section B.1.3, découle du fait que la fonction G_j satisfait la condition d'émission de Sommerfeld.

3.2 Méthode des éléments de frontière

Les équations intégrales (3.1.13) ne peuvent être solutionnées de façon analytique dans le cas de frontières de forme quelconque. La façon usuelle de solutionner de telles équations est la méthode BEM, dont voici la formulation générale.

1. On remplace chaque interface Γ^{jm} par un polygone à N_{jm} côtés dont les sommets sont situés sur l'interface. Ceci se traduit par

$$\Gamma^{jm} = \bigcup_{l=1}^{N_{jm}} \Gamma_l^{jm}. \tag{3.2.1}$$

Chaque frontière $\partial\Omega_j$ est ainsi discrétisée en $N_j = \sum_m N_{jm}$ éléments de frontière.

2. Les résultats obtenus sont valides en polarisation TM seulement. Nous ne considérons que cette dernière polarisation dans le présent chapitre puisque les conclusions sont génériques pour les deux types de polarisation. La polarisation TE peut être prise en compte en utilisant plutôt $\phi(s) = n^{-2}\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})$ et $\mathcal{B}_j(s',s) = -2n^2 G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)$. Par ailleurs, les conditions aux frontières (2.1.20a) et (2.1.20b) sont d'emblée satisfaites par la formulation ici présentée.

L'idée de la méthode est d'approximer $\psi(\boldsymbol{r})$ et $\phi(\boldsymbol{r})$ comme des constantes sur chacun des N_{jm} segments de droite Γ_l^{jm} afin de pouvoir réduire les équations intégrales à un système linéaire. L'équation (3.1.13) devient ainsi

$$\sum_{m\neq j}\sum_{l=1}^{N_{jm}}\left[\phi_l\int_{\Gamma_l^{jm}} ds\ \mathcal{B}_j(s',s)+\psi_l\int_{\Gamma_l^{jm}} ds\ \mathcal{C}_j(s',s)\right]=0. \tag{3.2.2}$$

2. En effectuant le changement de variable $s=\xi\Delta s_l$ avec Δs_l la longueur du segment Γ_l^{jm}, on obtient un ensemble d'équations pour le milieu Ω_j

$$\begin{aligned}\sum_{m\neq j}\sum_{l=1}^{N_{jm}}\Bigg[&\phi_l\Delta s_l\int_{-1/2}^{1/2} d\xi\ \mathcal{B}_j(s_i,s_l+\xi\Delta s_l)\\ &+\psi_l\Delta s_l\int_{-1/2}^{1/2} d\xi\ \mathcal{C}_j(s_i,s_l+\xi\Delta s_l)\Bigg]=0,\quad \forall\ i=1,\dots N_j\end{aligned} \tag{3.2.3}$$

où s_i est le point médian du segment Γ_i^{jm}. L'équation précédente représente un système de N_j équations tenant compte de l'effet des *points source* s_i sur les *points cible* s_l. On peut écrire le système d'équations (3.2.3) sous forme matricielle comme

$$\sum_{m\neq j}\sum_{l=1}^{N_{jm}}\left(B_{il}^{jmp}\phi_l^{(jm)}+C_{il}^{jmp}\psi_l^{(jm)}\right)=0,\qquad \forall\ i=1,\dots N_{jp}. \tag{3.2.4}$$

et l'indice p peut prendre toutes les valeurs $m\neq j$. Afin de lire ce système plus facilement, les deux règles suivantes seront utiles :

- Une matrice du type $\boldsymbol{A}^{jmp}$ dénote le couplage électromagnétique entre $s_i\in\Gamma_i^{jp}$ et $s_l\in\Gamma_l^{jm}$ à l'intérieur du milieu Ω_j. La taille de cette matrice est $N_{jm}\times N_{jp}$.
- Une vecteur colonne du type $\boldsymbol{v}^{(jm)}$ dénote la fonction d'onde ou sa dérivée sur l'interface Γ^{jm}. La longueur de ce vecteur est N_{jm}.

3. On construit les éléments de matrice B_{il}^{jmp} et C_{il}^{jmp} à l'aide de la routine d'intégration désirée, par exemple la méthode du trapèze[3]. Les éléments de matrice sont dans ce cas donnés par (voir annexe B.2.2)

$$B_{il}^{jmp}=\begin{cases}\dfrac{i\Delta s_l}{2}H_0^{(+)}(n_jkr_{il})\\ \dfrac{\Delta s_l}{\pi}\left[1-\ln\left(\dfrac{n_jk\Delta s_l}{4}\right)+\dfrac{i\pi}{2}-\varsigma\right]\quad (i=l\ \&\ m=p)\end{cases} \tag{3.2.5a}$$

3. D'autres méthodes d'intégration plus précises peuvent être utilisées, par exemple la quadrature gaussienne [91]. Toutefois, augmenter le nombre d'éléments de frontière est essentiellement équivalent à utiliser un algorithme plus fin. Cette stratégie est utilisée par souci de simplicité numérique.

$$C_{il}^{jmp} = \begin{cases} \dfrac{in_j k \Delta s_l}{2} \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}_l) \cdot \dfrac{\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{r}_i}{r_{il}} H_1^{(+)}(n_j k r_{il}) \\ -1 \qquad\qquad (i = l \;\&\; m = p). \end{cases} \tag{3.2.5b}$$

où $r_{il} = |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_l|$ et ς est la constante d'Euler-Mascheroni. Par convention, les intégrales de contour sont toujours effectuées dans le sens horaire. Le signe de Δs_l doit ainsi être ajusté de façon appropriée dans le cas d'une intégrale sur une frontière extérieure.

4. L'objectif de l'algorithme est de retourner les valeurs de ψ et ϕ sur chacun des éléments de frontière. Dans le cas de la détermination de résonances, une décomposition en valeurs singulières est utilisée afin de déterminer le sous-espace nul d'une *matrice d'influence* $\boldsymbol{M}(k)$ composée de blocs formés par $\boldsymbol{B}^{jmp}$ et $\boldsymbol{C}^{jmp}$. La matrice d'influence est construite en assemblant le système (3.2.4) selon la règle de continuité $\boldsymbol{v}^{(jm)} = \boldsymbol{v}^{(mj)}$. Ceci revient à une connexion des solutions aux interfaces $\Gamma^{jm} = \Gamma^{mj}$. Deux études de cas (sections 3.2.1 et 3.2.3) explicitent la forme exacte de cette matrice.

   Dans le cas d'un problème de diffusion, une simple inversion de $\boldsymbol{M}(k)$ fixe les valeurs recherchées[4].

5. Si nécessaire, le champ à un point quelconque $\boldsymbol{r}'$ est évalué à partir de la connaissance de la fonction d'onde sur la frontière à l'aide d'une version discrétisée de (3.1.6).

3.2.1 Étude de cas : domaine simplement connexe

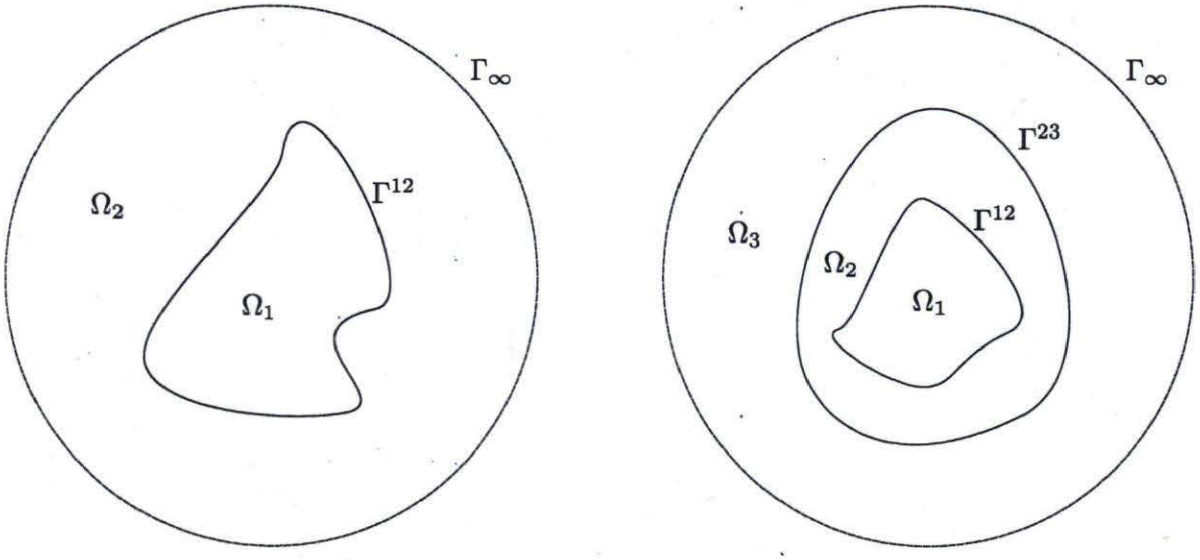
Afin d'expliciter les étapes de l'algorithme BEM, une mise en œuvre dans le cas d'un domaine simplement connexe est présentée. Considérons une région diélectrique Ω_1 d'indice n_1 située dans une région non-bornée Ω_2 d'indice n_2, tel que représentée à la figure 3.2(a). L'interface Γ^{12} entre les deux milieux est remplacée par une version discrétisée en N_{12} éléments de frontière. Par suite, l'équation matricielle (3.2.4) peut être réécrite

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{B}^{122} & \boldsymbol{C}^{122} \\ \boldsymbol{B}^{211} & \boldsymbol{C}^{211} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}^{(1)} \\ \boldsymbol{\psi}^{(1)} \end{pmatrix} = \boldsymbol{M}(k) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}^{(12)} \\ \boldsymbol{\psi}^{(12)} \end{pmatrix} = 0. \tag{3.2.6}$$

Ceci constitue une équation caractéristique des résonances de la cavité diélectrique à l'étude, puisqu'une solution non-triviale n'existe que pour $\det(\boldsymbol{M}) = 0$. Ainsi, la recherche des résonances du système est un problème aux valeurs propres non-linéaire ; l'ensemble discret de valeurs complexes k résultant en des valeurs singulières nulles

4. En effet, le problème de diffusion peut être traité à l'aide de l'algorithme BEM, mais ce sujet ne sera pas abordé. La procédure est plus simple que la recherche de résonances et est exposée dans [91]. En contrepartie, l'approche par diffusion est confinée aux valeurs réelles de k et ne permet pas de déterminer les résonances complexes.

de $\boldsymbol{M}(k)$ doivent être déterminées numériquement (voir annexe B.2.3). Ces valeurs complexes sont les nombres d'onde résonants du système, et les vecteurs singuliers associés aux valeurs singulières nulles correspondent aux valeurs de la fonction d'onde associée.



(a) Domaine simplement connexe **(b)** Domaine annulaire (multiplement connexe)

FIGURE 3.2 – Géométrie de deux études de cas

La distribution des valeurs de $\det(\boldsymbol{M})$ dans le plan complexe est tracée à la figure 3.3 pour une cavité circulaire. La signature des résonances correspond à des minima de la distribution. Toutefois, les « vallées » caractéristiques des résonances montrent une topologie assez compliquée et il peut être fastidieux de trouver un zéro du déterminant en quadrillant systématiquement le plan complexe. Nous proposons ainsi une méthode robuste basée sur une décomposition en valeurs singulières permettant de fournir des *prédicteurs* des positions de résonance. Ces prédicteurs sont ensuite raffinés au moyen d'un algorithme de Newton-Rapshon. Voici les grandes lignes de la méthode.

1. Une valeur négative de $\mathrm{Im}(k)$ est fixée arbitrairement. Un balayage des valeurs de $\mathrm{Re}(k)$ est ensuite effectué. La matrice $\boldsymbol{M}$ est évaluée en chaque point, de même que la plus petite valeur singulière de $\boldsymbol{M}$ en ce point, dénotée $\sigma_{\min}(k)$ [20]. Si l'échantillonnage en $\mathrm{Re}(k)$ est suffisamment fin, des pics signalant la présence de résonances apparaissent dans le spectre résultant.

   Ce choix de balayage est basé sur l'observation que les « vallées » apparaissant à la figure 3.3 sont essentiellement parallèles à l'axe imaginaire. Par ailleurs, les résonances du disque diélectrique obtenues à la section 2.2.2 permettent de guider le choix des valeurs de $\mathrm{Im}(k)$ en fonction de l'ordre de grandeur du facteur de

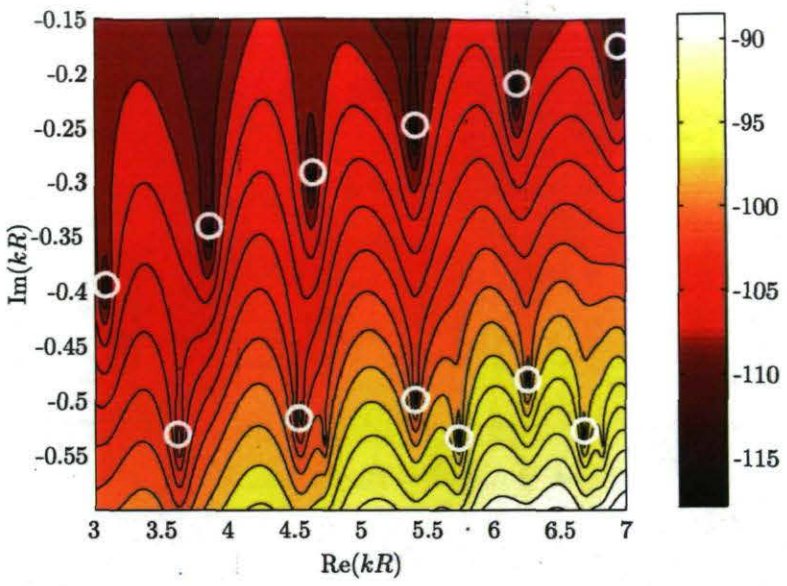


FIGURE 3.3 – Grandeur du déterminant de la matrice d'influence $\log|\det(\boldsymbol{M})|$ dans le plan complexe. La position exacte de quelques résonances (cercles blanc) est signalée par la présence de creux dans les équipotentielles ($n_1 = 1.5$, $n_2 = 1, N = 63$).

qualité Q désiré, à partir de la définition

$$\mathrm{Im}(k) = -\frac{\mathrm{Re}(k)}{2Q}. \tag{3.2.7}$$

2. La valeur approximative k_0 correspondant au pic (*prédicteur*) est ensuite corrigée à l'aide de la méthode de Newton-Raphson, ce qui permet de déterminer la position exacte de la résonance associée. À l'instar de la démarche exposée à la section 2.2.3, une itération s'écrit

$$k_{n+1} = k_n - \frac{1}{\mathrm{Tr}[\boldsymbol{M}^{-1}(k_n)\boldsymbol{M}'(k_n)]} \tag{3.2.8}$$

où Tr dénote la trace d'une matrice. La dérivée de $\boldsymbol{M}$ est approximée par [18, 91]

$$\frac{\partial \boldsymbol{M}}{\partial k} \equiv \boldsymbol{M}'(k) \simeq \frac{\boldsymbol{M}(k+dk) - \boldsymbol{M}(k)}{2dk} - i\frac{\boldsymbol{M}(k+idk) - \boldsymbol{M}(k)}{2dk}. \tag{3.2.9}$$

où dk est un petit nombre réel [5]. L'itération Newton-Raphson s'effectue jusqu'à ce que $\sigma_{\min}(k)$ atteigne un seuil prédéfini (ce critère assure que la matrice $\boldsymbol{M}$ demeure régulière) ou jusqu'à ce qu'un nombre maximal d'itérations soit atteint sans convergence.

3. Si l'algorithme converge, le vecteur solution de (3.2.6) est déterminé à une constante près par le vecteur singulier associé à $\sigma_{\min}(k)$.

5. Une valeur de $dk \propto \mathrm{Im}(k)$ est choisie de façon à résoudre les résonances minces.

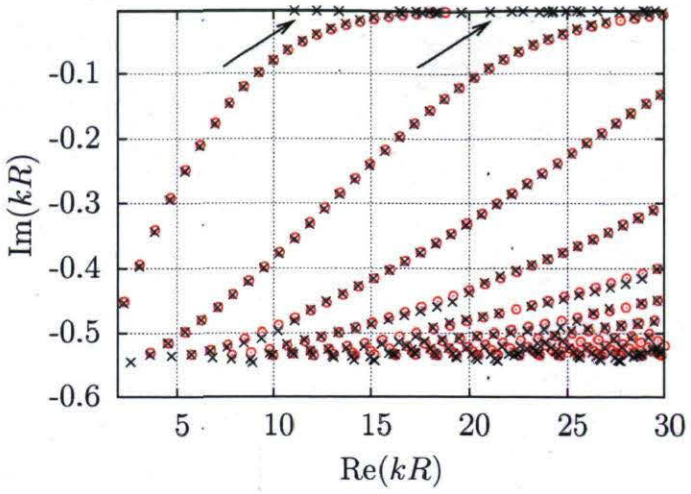


FIGURE 3.4 – Position dans le plan complexe de quelques résonances du cercle diélectrique. Les résonances trouvées à l'aide de la méthode BEM (croix) sont comparées aux résultats analytiques (cercles) pour une valeur du nombre quantique angulaire m comprise entre 1 et 54 (polarisation TM, $n_1 = 1.5$, et $n_2 = 1$). La position de solutions fictives est indiquée par deux flèches. Ces résultats représentent environ 4 heures de temps de calcul sur un ordinateur multiprocesseur.

Toutes les résonances présentées à la figure 3.3 sont aisément détectées à l'aide de l'algorithme décrit plus haut. La comparaison avec la position des résonances déterminées analytiquement est présentée à la figure 3.4. Seuls des écarts minimes subsistent entre les deux approches.

Notons que l'algorithme peut converger vers une certaine classe de solutions indésirables [20, 91]. Ces solutions possèdent une partie imaginaire positive très petite, et sont par conséquent faciles à discriminer des solutions physiques (voir fig. 3.4).

3.2.2 Étude de la convergence : domaine circulaire

Nous présentons une étude de la convergence de l'algorithme en fonction du nombre d'éléments de frontière (ou encore de la qualité de la discrétisation) fixé lors des simulations. À notre connaissance aucune règle d'or concernant le choix de ce nombre n'est disponible dans la littérature. Une étude sommaire de la convergence vers les valeurs propres du problème de Dirichlet dans un cercle fermé est présentée dans [52], alors qu'un critère arbitraire pour le problème ouvert est présenté dans [28].

Nous proposons de définir le nombre total d'éléments de frontière arbitrairement en fonction de la géométrie du milieu diélectrique comme

$$N_{\text{tot}} = \mu n_c k L \tag{3.2.10}$$

où n_c est choisi comme l'indice de réfraction du milieu le plus optiquement dense présent, μ est un *paramètre de résolution* et L est une longueur caractéristique du problème. Autrement dit, le nombre d'éléments de frontière est choisi comme un multiple d'une fréquence normalisée caractéristique de la géométrie, arrondie à l'entier supérieur. Dans le cas d'espèces de la cavité circulaire ($N_{12} = N_{\text{tot}}$), le choix naturel est de poser L égal au rayon de l'enceinte circulaire [6].

Position des prédicteurs

Plusieurs tests de convergence ont été effectués en fixant la partie imaginaire du nombre d'onde à $\text{Im}(kR) = -0.5$ et en balayant sur l'intervalle $5 \leq \text{Re}(kR) \leq 10$. Pour chaque simulation, le paramètre de résolution μ de l'équation (3.2.10) a été varié, tout en fixant $kL = \text{Re}(kR)_{\text{max}} = 10$. Les résultats de ces balayages sont consignés à la figure 3.5. Voici quelques constatations sommaires sur les résultats.

1. Les résultats sont en accord avec la littérature [52] pour $\mu \geq 2$, c'est à dire que seulement la profondeur des pics du « spectre » semble affectée par la résolution de l'algorithme, alors que leur position demeure sensiblement proche de celle des résonances.
2. En deçà de la limite $\mu \leq 2$, le balayage en valeurs singulières ne permet pas la détection adéquate de prédicteurs. Dans un régime intermédiaire, des pics sont détectés, mais leur nombre d'onde est légèrement inférieur à la position exacte de la résonance.
3. Le comportement de la valeur singulière minimale loin d'une résonance est également indicatif de la qualité de la résolution de l'algorithme. En effet, on constate que cette valeur « plafonne » entre les zones d'influence de chaque résonance, tel qu'observé à la figure 3.5(a) pour $\mu = 7$.

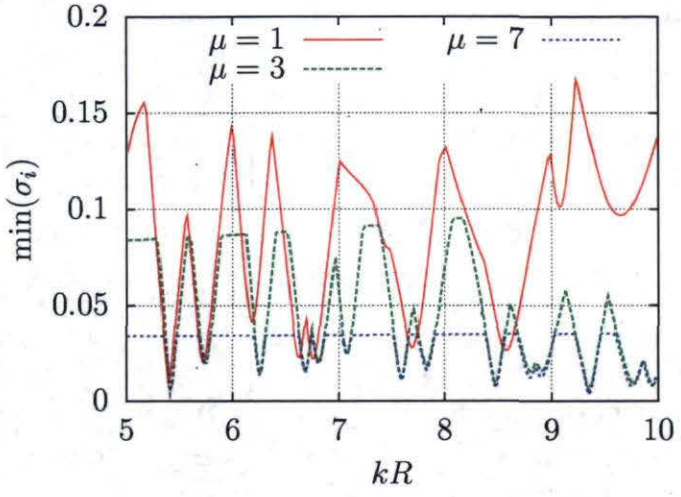
En résumé, le choix $\mu \geq 2$ permet de déterminer la position des prédicteurs de façon satisfaisante.

Algorithme de Newton-Raphson

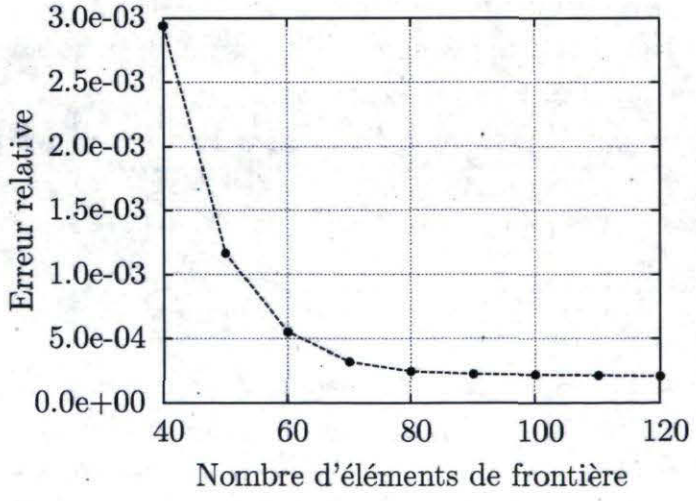
La convergence de l'algorithme de Newton est également étudiée. Considérons un mode de la cavité circulaire de fréquence de résonance $kR \simeq 9.216 - 0.0979i$, caractérisé par le couple de nombres quantiques (11,1). La convergence vers cette solution analytique en fonction du nombre d'éléments de frontière utilisés est présentée à la figure 3.5(b).

6. Les résultats obtenus seront supposés génériques pour une géométrie quelconque du milieu diélectrique, puisque l'algorithme BEM ne suppose *a priori* aucune intégrabilité ou symétrie du système.

On remarque la présence de deux régimes de convergence. Dans ce cas d'espèces, la convergence augmente rapidement lorsque le nombre d'éléments est inférieur à 70. Dans le cas d'un nombre d'éléments supérieur à 70, l'erreur relative est inférieure à un facteur 10^{-4} près même si N_{tot} est augmenté. Ainsi, il est important de déterminer un critère assurant un bon compromis entre la rapidité du calcul et la précision sur la position des résonances. Comme le temps de calcul augmente essentiellement comme N^2, une solution possible est de régler les paramètres de la simulation à la limite des deux régimes décrits plus haut. Le choix $\mu = 6$ assure une qualité acceptable de la convergence dans la plupart des cas.



(a) Position des prédicteurs



(b) Erreur relative sur la position de la résonance

FIGURE 3.5 – Étude de la convergence de l'algorithme BEM en fonction du nombre de points de discrétisation (cavité circulaire, $n_1 = 1.5$, $n_2 = 1$).

3.2.3 Étude de cas : domaine annulaire

Il est possible d'utiliser l'algorithme BEM afin de déterminer les résonances d'un ensemble de structures couplées, comme montré aux références [76, 91]. Toutefois, il s'agit du cas de milieux simplement connexes, c'est-à-dire que l'intersection de deux milieux quelconques $\Omega_i \cap \Omega_j$ est vide, excepté si l'un des deux milieux est celui s'étendant vers l'infini. Cette section vise à montrer comment la forme générale (3.2.4) permet également de déterminer les résonances complexes de domaines *multiplement connexes*.

Notre contribution est illustrée par la détermination de résonances d'une cavité annulaire composée de trois milieux diélectriques Ω_1 et Ω_2, Ω_3 (voir fig. 3.2(b)). En utilisant (3.2.4), il est possible d'écrire l'équation caractéristique des résonances de cette cavité comme

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{B}^{322} & \boldsymbol{C}^{322} & 0 & 0 \\ \boldsymbol{B}^{222} & \boldsymbol{C}^{222} & \boldsymbol{B}^{221} & \boldsymbol{C}^{221} \\ \boldsymbol{B}^{221} & \boldsymbol{C}^{221} & \boldsymbol{B}^{211} & \boldsymbol{C}^{211} \\ 0 & 0 & \boldsymbol{B}^{111} & \boldsymbol{C}^{111} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}^{(23)} \\ \boldsymbol{\psi}^{(23)} \\ \boldsymbol{\phi}^{(12)} \\ \boldsymbol{\psi}^{(12)} \end{pmatrix} = 0. \tag{3.2.11}$$

Par simplicité, le nombre d'éléments de frontière sur Γ^{12} et Γ^{23} est choisi comme étant le même ($N_{12} = N_{23} \equiv N$). De plus, ceci est physiquement justifié par la nécessité d'une plus grande résolution de l'algorithme sur la frontière intérieure. Notons que cette approche est aisément généralisable à un nombre arbitraire de sous-domaines multiplement connexes, par exemple plusieurs anneaux concentriques.

Afin de montrer l'exactitude de cette formulation, les résultats obtenus à l'aide de l'algorithme BEM utilisant comme équation caractéristique (3.2.11) sont comparés aux solutions analytiques obtenues à la section 2.2.3. La présence de solutions fictives est toujours une difficulté associée à la méthode, tel qu'illustré à la figure 3.6. Par ailleurs, la détermination des modes de faible facteur de qualité ($\mathrm{Im}(kR) \simeq 0.5$) pose problème en raison de l'entrelacement des bassins d'attraction des nombreuses résonances existant à ces valeurs de facteur de qualité. En dehors de ces difficultés, la méthode converge de façon admirable, surtout dans le cas de résonances de facteur de qualité intermédiaire. Le cas de l'anneau asymétrique (inclusion décentrée) est traité plus en détails à la section 3.3.1.

3.3 Structures optiques asymétriques : résultats

Cette section présente l'application de l'algorithme BEM à des structures optiques asymétriques. Cette asymétrie est définie par rapport au cercle diélectrique, qui se car-

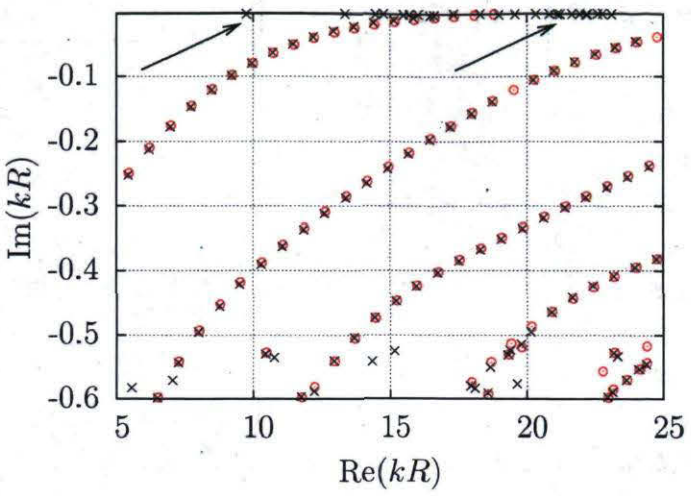


FIGURE 3.6 – Position dans le plan complexe de quelques résonances de l'anneau diélectrique. Les résonances trouvées à l'aide de la méthode BEM (croix) sont comparées aux résultats analytiques (polarisation TM, $R_1 = 0.5$, $n_1 = 1.5$, et $n_2 = 1$). La position de solutions fictives est indiquée par deux flèches. Ces résultats représentent environ 3 heures de temps de calcul sur un ordinateur multiprocesseur.

actérise par une symétrie de rotation. En raison de cette symétrie, les modes résonants du cercle diélectrique sont infiniment dégénérés, ce qui revient à dire que les lobes du profil modal peuvent exister à n'importe quelle position angulaire φ. La plupart des cas étudiés sont des *déformations du cercle* et possèdent au plus deux axes de symétrie, ce qui lève la dégénérescence des modes de la cavité circulaire. Si la cavité est symétrique par rapport à l'axe x, deux modes de fréquence de résonance différentes apparaissent, dénotés ψ_o et ψ_e. Ces modes se caractérisent par une symétrie impaire et paire, respectivement. La symétrie impaire est définie comme la présence d'un zéro du profil angulaire en $\varphi = 0$, alors que la symétrie paire correspond à la présence d'un maximum à cette position.

Dans plusieurs situations, le mode pair et le mode impair sont *quasi-dégénérés*, ce qui se traduit par la détection d'une seule résonance au lieu de deux de fréquences voisines. Ce comportement est causé par la résolution finie de l'algorithme BEM. Toutefois, il est possible d'obtenir le profil modal de chacune des symétries en considérant les deux vecteurs propres correspondant aux deux plus petites valeurs singulières de la matrice caractéristique $\boldsymbol{M}$. Dans le cas d'un mode quasi-dégénéré, ces deux valeurs seront toutes deux beaucoup plus petites que le reste des valeurs singulières, ce qui fournit un critère permettant de discriminer les modes non-dégénérés des modes quasi-dégénérés.

Des résultats sont présentés pour deux géométries, soit l'anneau asymétrique et le quadrupôle. Mentionnons toutefois qu'il existe des résultats détaillés dans la littérature

pour d'autres déformations du cercle, tels le stade [55], l'ellipse [88] et le limaçon [92].

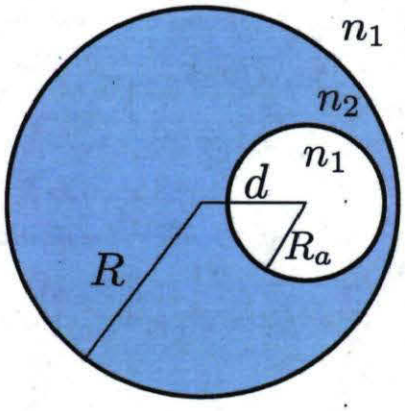
3.3.1 Domaine annulaire asymétrique et limite de résolution

La cavité annulaire a été proposée comme une géométrie permettant d'obtenir une émission laser hautement directionnelle tout en conservant un haut facteur de qualité intrinsèque [6, 43]. Cette proposition est justifiée par le fait que les modes de galerie sont localisés en périphérie de la cavité. Cette localisation laisse la liberté de placer une inclusion décentrée dans une cavité circulaire et de n'exercer qu'un effet perturbatif sur le facteur de qualité, tout en induisant un effet mesurable sur le champ lointain émis [66]. Dans cette perspective, la présente section contient une caractérisation numérique de l'émission de cavités annulaires asymétriques à l'aide de la méthode décrite à la section 3.2.3.

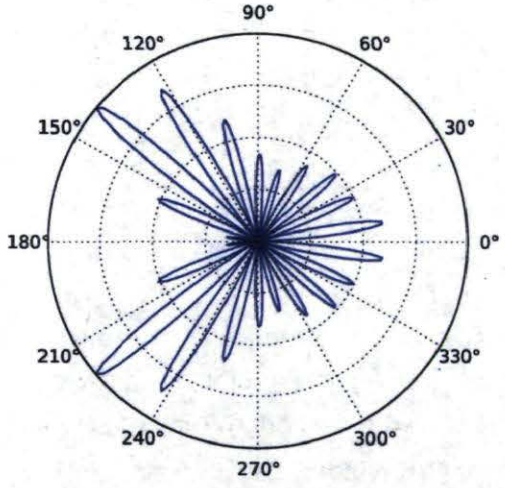
Le champ lointain de modes d'émission peut être aisément calculé à l'aide d'une version discrétisée de (3.1.6), en suivant la méthode décrite à l'annexe B.2.1. Le profil de champ de deux modes quasi-dégénérés de la cavité annulaire est présenté à la figure 3.7. L'algorithme BEM utilise dans ce cas la fréquence de résonance de la cavité annulaire symétrique correspondante ($d = 0, R_a = 0.3R$), soit $kR = 9.217 - 0.100i$ comme point de départ de la recherche de résonances. Cette stratégie permet d'augmenter la vitesse de la convergence. En plus d'illustrer la levée de dégénérescence des modes, ce résultat montre comment il est possible d'induire une modification mesurable du champ lointain d'une cavité annulaire sans diminution majeure du facteur de qualité. En effet, la résonance non-perturbée possède un facteur $Q_0 \simeq 46.09$, versus $Q \simeq 45.64$ pour la cavité décentrée, ce qui correspond à une diminution de seulement 1% induite par l'asymétrie. L'outil numérique développé ouvre ainsi la voie au contrôle des paramètres influençant l'émission de cavités annulaires à haut confinement.

Les fréquences de résonance ne peuvent toutefois être déterminées qu'avec une précision limitée. En effet, pour un mode de haut facteur de qualité d'une cavité circulaire, l'erreur commise par l'algorithme doit être inférieure à $\mathrm{Re}(kR)/Q$. Dans le cas d'un mode de facteur de qualité supérieur à 10^5, l'erreur doit être au moins inférieure à 10^{-4} afin de déterminer précisément la valeur de $\mathrm{Im}(kR)$. Par suite, le nombre d'éléments de frontière nécessaire à une bonne résolution devient rapidement prohibitif à la convergence de l'algorithme (voir fig. 3.5).

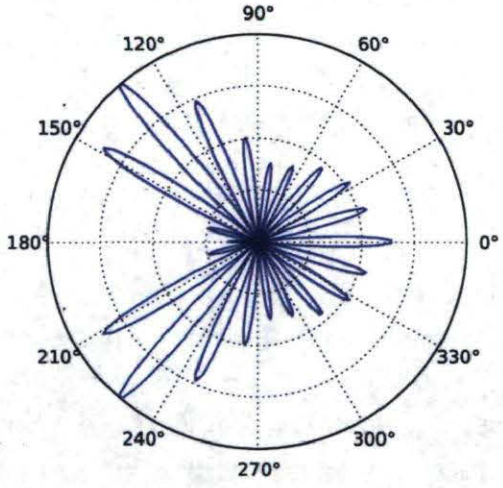
Afin d'illustrer cette limite, considérons les résultats numériques présentés à la figure 3.8. Les deux modes résonants détectés correspondent à des modes de facteur de qualité 10^4 et 10^5 dans le cas non-perturbé, respectivement. L'algorithme converge



(a) Cavité annulaire asymétrique

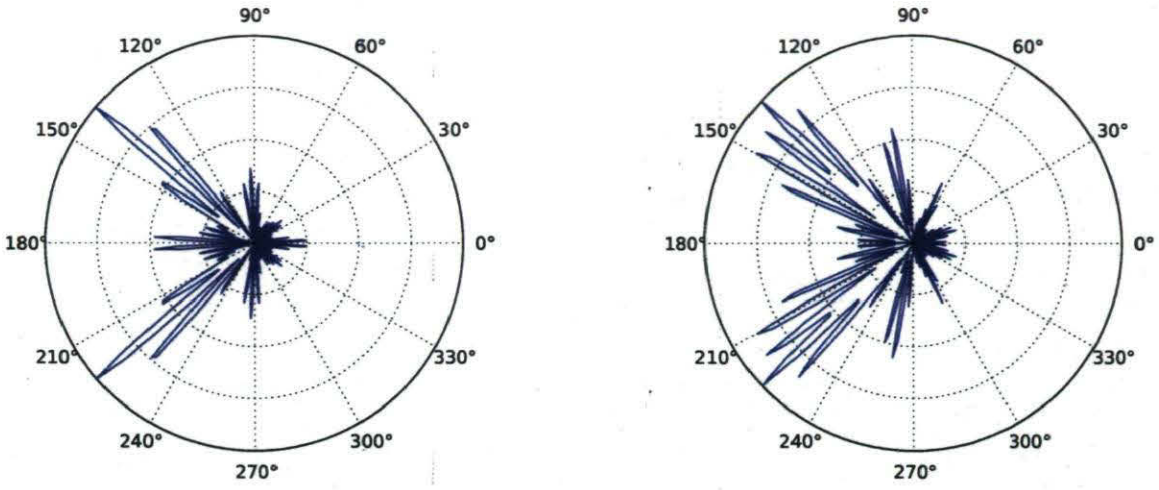


(b) Mode impair



(c) Mode pair

FIGURE 3.7 – Modes résonants quasi-dégénérés d'une cavité annulaire asymétrique. **(a)** Géométrie de la cavité annulaire. **(b-c)** Profil d'émission au champ lointain $|\psi|^2$ de deux modes quasi-dégénérés ($m = 11, j = 1$) de fréquence de résonance $kR \simeq 9.220 - 0.101i$ ($Q \simeq 45.64$, unités d'intensité arbitraires). Les paramètres de la cavité sont $d = 0.4R, R_a = 0.3R, n_1 = 1, n_2 = 1.5$.



(a) $m_0 = 28, Q_0 = 10^4$ **(b)** $m_0 = 35, Q_0 = 10^5$

FIGURE 3.8 – Profil d'émission $|\psi|^2$ au champ lointain de deux modes résonants de haut facteur Q d'une cavité annulaire asymétrique (symétrie impaire, unités d'intensité arbitraires). L'algorithme converge dans ce cas vers des fréquences de résonance de partie imaginaire *positive*, soit $kR = 21.632 + 0.00130i$ et $kR = 26.597 + 0.00237i$ respectivement. Les paramètres de la cavité sont $d = 0.5R, R_a = 0.2R, n_1 = 1, n_2 = 1.5$, et le paramètre de résolution est fixé à $\mu = 15$.

toutefois vers des fréquences de résonance de partie imaginaire positive, ce qui correspond à un *mode d'absorption*. Malgré cet apparent caractère non-physique, le profil d'émission des modes est prédit de façon très précise par l'algorithme en regard de la présence des deux symétries et de la valeur adéquate du nombre quantique angulaire. Ces observations ont mené au développement d'une méthode basée sur le vecteur de Poynting afin de déterminer le facteur Q plutôt que la définition en termes du rapport $Q = -\operatorname{Re}(k)/2\operatorname{Im}(k)$. Cette approche est détaillée dans [95].

3.3.2 Domaine quadrupolaire et applications lasers/senseurs

La frontière d'une cavité quadrupolaire est définie en coordonnées polaires comme

$$\rho(\varphi) = R\left(1 + \frac{\varepsilon}{5}\cos 2\varphi\right). \tag{3.3.1}$$

Il s'agit d'une frontière circulaire déformée ; le cas limite $\varepsilon = 0$ correspond à une frontière circulaire alors que $\varepsilon = 1$ correspond à la déformation maximale pour laquelle la frontière demeure convexe (ou plus précisément de nombre d'enroulement 1 par rapport à l'origine). Pour cette raison, ε est souvent appelé *paramètre de déformation*. L'objectif de cette section est de présenter les modes typiques d'une cavité quadrupolaire pouvant être utilisés dans le cadre de deux applications, soit les microlasers [32] et les mi-

crosenseurs [3, 86]. Quelques conclusions générales concernant les cavités asymétriques sont également dégagées.

Un mode résonant de type *bowtie* (nœud-papillon) est présenté à la figure 3.9(a). Ce type de mode est d'un intérêt particulier dans le cadre de la construction de microlasers en raison de la présence de quatre directions d'émission préférentielles évidentes à la figure 3.9(c). Par ailleurs, la localisation de l'intensité au centre géométrique permet de dégager une règle de conception utile ; le milieu actif peut être situé seulement près du centre de la cavité [32].

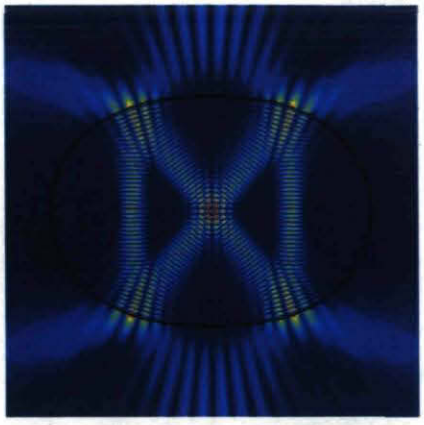
Un mode de galerie propice à la fabrication de dispositifs de détection est présenté à la figure 3.9(b). Les caractéristiques désirables dans le cadre de cette application sont le haut facteur de qualité du mode et sa localisation en périphérie de la cavité. Par ailleurs, le champ proche de cette cavité, illustré à la fig. 3.9(d) se caractérise par une plus grande homogénéité que son homologue laser, ce qui est en accord avec la plus grande valeur de Q calculée.

Notons que la recherche de résonances dans le cas de cavités hautement asymétriques telles que le quadrupôle nécessitent une moins grande résolution que dans le cas de frontières circulaires. En effet, la diminution du facteur de qualité associée à la déformation permet de déterminer la position des résonances avec une plus grande précision pour une même valeur de $\mathrm{Re}(kR)$ et du paramètre de résolution μ.

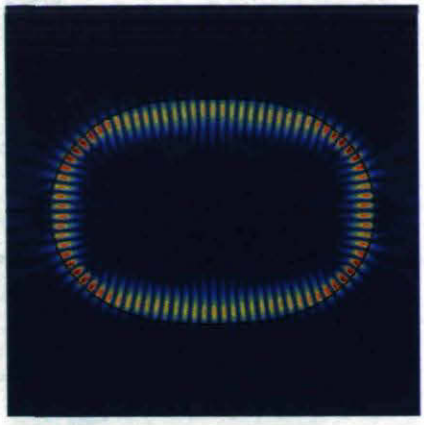
Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons traité de l'application de la méthode des éléments de frontière à la recherche de modes d'émission de cavités bidimensionnelles asymétriques. Le cadre théorique derrière l'algorithme et la stratégie numérique ont été présentés en détail, de même que la convergence de l'algorithme vers certaines solutions analytiques. Une extension aux domaines multiplement connexes a été proposée, généralisable à un nombre arbitraire d'inclusions. Des résultats types pour deux géométries de cavités ont été présentés, notamment afin d'illustrer deux applications possibles (lasers et senseurs) ainsi que la limite de résolution de l'algorithme. L'accent est mis sur la détermination du profil d'émission et du facteur de confinement. La grande polyvalence de l'algorithme BEM a été mise de l'avant par l'obtention des modes résonants pour une variété de géométries. Cette possibilité de traiter n'importe quel agencement bidimensionnel de frontières diélectriques est un des principaux avantages de la méthode.

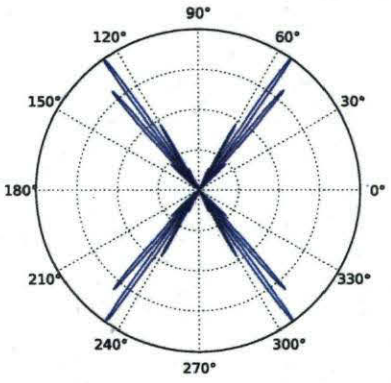
À titre d'exemple de la polyvalence de l'algorithme, la figure 3.10 présente un mode



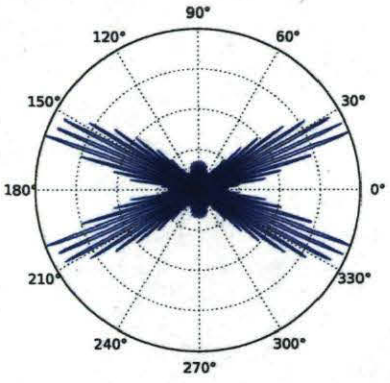
(a) $Q = 600$



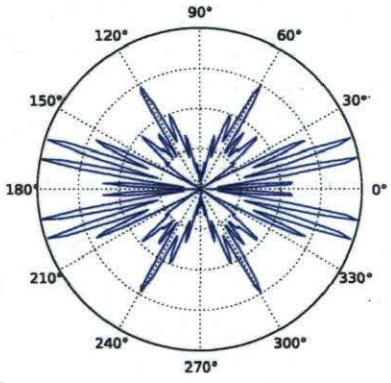
(b) $Q = 4000$



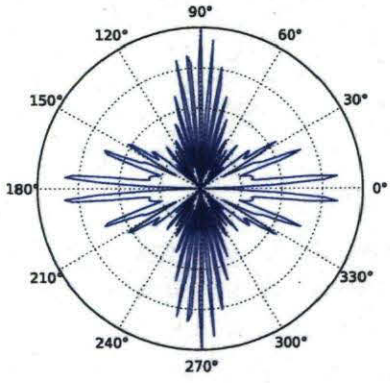
(c) Champ proche (*bowtie*)



(d) Champ proche (galerie)



(e) Champ lointain (*bowtie*)



(f) Champ lointain (galerie)

FIGURE 3.9 – Résonances typiques d'une cavité quadrupolaire. L'intensité du champ électrique est calculée à partir d'une version discrétisée de (3.1.6). **(a)** Mode de type *bowtie* caractérisé par une fréquence de résonance $kR \simeq 34.67 - 0.06i$ ($\varepsilon = 0.85, n_1 = 2.9, n_2 = 1$). Le même mode est retrouvé dans [41]. **(b)** Mode de galerie caractérisé par une fréquence de résonance $kR = 31.03 - 0.008i$ ($\varepsilon = 0.9, n_1 = 1.5, n_2 = 1$). **(c-d)** Profil de $|\psi|^2$ au champ proche pour chaque mode. **(e-f)** Profil au champ lointain. Toutes les unités d'intensité sont arbitraires.

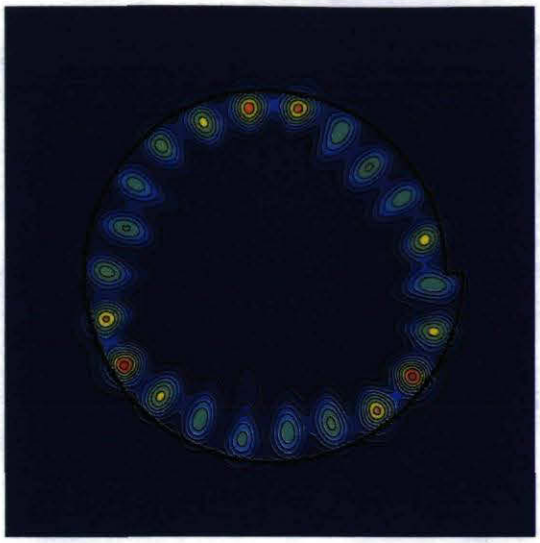


FIGURE 3.10 – Mode résonant d'une cavité en spirale ($\varepsilon = 0.1, n_1 = 3.2, n_2 = 1.0, kR = 4.279 - 0.045i$).

résonant d'une cavité en spirale. La frontière de cette cavité est définie en coordonnées polaires comme

$$\rho(\varphi) = R\left(1 + \frac{\varepsilon}{2\pi}\right). \tag{3.3.2}$$

De façon notable, cette frontière possède deux discontinuités et aucun axe de symétrie.

En contrepartie, la formulation intégrale présentée échoue lorsque la fonction de Green n'est pas connue ou difficile à calculer, par exemple dans le cas de milieux de permittivité diélectrique inhomogène ou non-linéaire. En plus de ce problème conceptuel, le calcul numérique précis du facteur de qualité – ou plus spécifiquement de la valeur de $\mathrm{Im}(k)$ – présente une grande difficulté à haute fréquence.

Plusieurs améliorations du volet numérique de la méthode des éléments de frontière ont été proposées, par exemple une détermination du facteur de qualité basée sur le vecteur de Poynting [95] permettant de contourner la difficulté mentionnée plus haut, ainsi que l'obtention de prédicteurs permettant d'améliorer la vitesse de l'algorithme [41, 94]. D'autres auteurs proposent l'élimination des solutions fictives de façon systématique en utilisant une formulation intégrale duale [15, 19, 21]. Des formulations alternatives du noyau d'intégration ont également été publiées [13, 14].

Chapitre 4

Couplage entre un guide planaire et une cavité intégrée

Les solutions analytiques exposées à la section 2 et la méthode numérique présentée au chapitre 3 permettent de déterminer les modes d'émission de structures diélectriques ouvertes, ou leur réponse à une *excitation libre*. Toutefois, ces formulations ne permettent pas de rendre compte de la réponse de cavités à une *excitation guidée*. En effet, certaines applications expérimentales telles la construction de filtres optiques [57] et la biodétection [86] utilisent un guide d'onde diélectrique pour acheminer et extraire l'énergie lumineuse d'une cavité de taille microscopique par *couplage évanescent*. Bien que le *couplage au contact* soit satisfaisant dans plusieurs situations [85], de récents progrès en nano-fabrication rendent possible la réalisation de dispositifs intégrés constitués d'une cavité monolithique séparée d'un guide planaire par aussi peu que 100–200 nm [39]. La qualité du transfert d'énergie entre le guide d'onde et la cavité étant fortement dépendante de cette *distance de couplage*, le présent chapitre présente la mise en œuvre d'un algorithme par *éléments finis* [38] permettant de procéder à l'optimisation du couplage entre structures intégrées. Des calculs d'ordre de grandeur basés sur certaines contraintes expérimentales [1] sont d'abord présentés, suivis de la présentation du modèle par éléments finis et de résultats numériques.

Notons que certains auteurs ont développé des méthodes perturbatives d'étude du couplage cavité-guide basées sur la *théorie des modes couplés* [58, 62, 65]. Ces méthodes ne s'appliquent toutefois pas au régime non-perturbatif que nous considérons. De façon plus précise, elles ne présentent pas la dépendance attendue sur la distance de couplage dans le cas d'une interaction forte entre les modes respectifs du guide et de la cavité.

1. Cette étude a été réalisée dans le cadre d'une collaboration avec des étudiants et chercheurs du *Laboratoire de microphotonique* de l'École Polytechnique de Montréal.

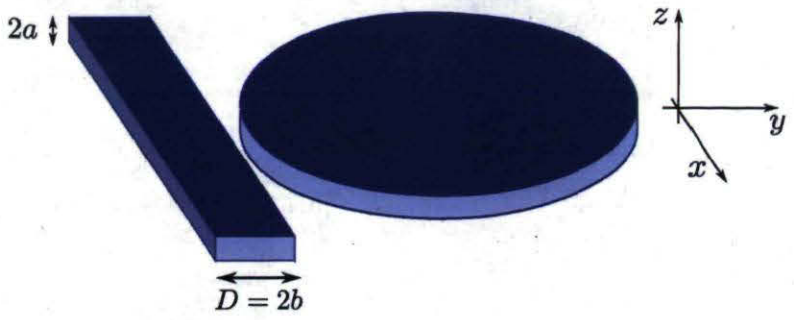


FIGURE 4.1 – Géométrie du problème de couplage entre un disque diélectrique et un guide diélectrique rectangulaire (les dimensions ne sont pas à l'échelle).

TABLEAU 4.1 – Paramètres géométriques du dispositif de couplage

Quantité	Expression	Dimension
Épaisseur des structures optiques	$2a$	Longueur
Largeur du guide d'onde	$2b$	Longueur
Distance de couplage	g	Longueur
Indices de réfraction des structures, du mileu extérieur	n_1, n_0	Adimensionnel
Rayon du disque	R	Longueur
Longueur d'onde d'opération	λ	Longueur

4.1 Problème d'optimisation

Le problème d'optimisation est représenté de façon schématique à la figure 4.1. La géométrie est tridimensionnelle ; un guide rectangulaire de largeur $2b$ et d'épaisseur $2a$, semi-infini dans la direction x, est séparé par une distance minimale g d'un disque diélectrique de même épaisseur et de rayon R. Les structures diélectriques sont supposées de même indice de réfraction n_1 et placées dans un milieu environnant d'indice n_0.

La quantité à maximiser en fonction du paramètre g est le transfert d'énergie par couplage évanescent entre la cavité et le guide. Nous définissons l'énergie normalisée emmagasinée par l'intégrale

$$\mathcal{E}_c \equiv \int_V |\mathbf{E}|^2 dV \tag{4.1.1}$$

où V est le volume de la cavité diélectrique. La valeur de g maximisant cette quantité pour une valeur donnée des autres paramètres énoncés au tableau 4.1 est dénotée g^*. Cette configuration optimale est parfois appelée *couplage critique* et est observée de façon expérimentale comme un minimum du signal à la sortie du guide d'onde [16].

4.1.1 Contraintes et ordres de grandeur

Certaines contraintes inhérentes au processus de fabrication de cavités intégrées sont prises en compte dans les simulations. Comme les structures sont souvent fabriquées en oxyde de silicium (SiO_2), l'indice de réfraction des structures optiques est fixé à $n_1 = 1.45$. La valeur $2a = 850$ nm est également fixée (épaisseur typique des gaufres de SiO_2). Deux configurations sont à l'étude, correspondant à deux combinaisons de (n_0, λ), soit

1. CONFIGURATION À L'AIR LIBRE : La longueur d'onde d'opération est dans l'infrarouge ($\lambda \sim 1.5$ µm) et l'indice de réfraction du milieu extérieur est fixé à $n_0 = 1$.
2. CONFIGURATION MICROFLUIDIQUE : La longueur d'onde d'opération est dans le visible ($\lambda \sim 750$ nm) et l'indice de réfraction de l'environnement aqueux est fixé à $n_0 = 1.33$. L'étude de cette configuration est utile à la réalisation de dispositifs de détection biologique [86]. Le choix de la longueur d'onde visible en microfluidique vise à éviter le problème d'absorption des longueurs infrarouges par l'eau [26].

Il est possible d'utiliser les contraintes ici décrites afin d'obtenir certains ordres de grandeur utiles concernant les conditions d'opération du guide intégré. Par ailleurs, comme toutes les structures ont la même épaisseur, la méthode de l'indice effectif est utilisée afin de réduire le problème à deux dimensions spatiales (voir section C.3).

4.1.2 Modes du guide intégré

Il n'existe pas de solution analytique pour les modes d'un guide de section rectangulaire, mais une solution approximative dans les régions d'intérêt peut être obtenue à l'aide de la *méthode de Marcatili* [65]. Cette approche consiste à analyser les modes hybrides d'un guide rectangulaire en considérant une superposition perpendiculaire de deux guides planaires indépendants (voir annexe C). En contrepartie, les expressions obtenues ne sont valides que dans un domaine limité, illustré à la figure 4.2. Cette approximation est toutefois satisfaisante dans le cas étudié puisque les structures ne sont pas couplées dans les régions où l'approximation n'est plus valide.

Supposons que l'axe x coïncide avec l'axe du guide. En accord avec la figure 4.1, l'onde guidée est de la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}(y,z)e^{i(\beta x - \omega t)} \\ \mathbf{H} &= \mathbf{H}(y,z)e^{i(\beta x - \omega t)}. \end{aligned} \tag{4.1.2}$$

Les modes transverses et leurs constantes de propagation respectives u_y et u_z sont

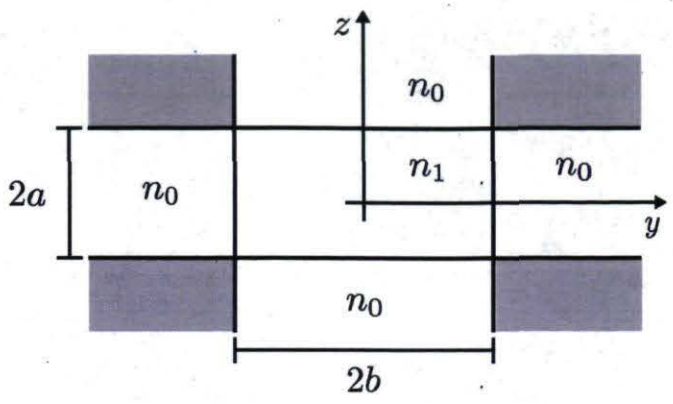


FIGURE 4.2 – Guide d'onde diélectrique rectangulaire. La méthode de Marcatili permet d'obtenir les modes de cette géométrie non-intégrable de façon analytique. En contrepartie, les expressions obtenues ne sont pas valides dans les régions grises.

déterminés en solutionnant la relation de dispersion (C.2.10), et la constante de propagation axiale est simplement donnée par

$$\beta^2 = k^2 n_1^2 - \left(\frac{u_z^2}{a^2} + \frac{u_y^2}{b^2}\right) \tag{4.1.3}$$

où $k = 2\pi/\lambda$. La dépendance du profil du mode guidé fondamental (TM_0) sur la coordonnée z est donnée par l'expression de la composante E_y (proportionnelle à H_z). On trouve de l'équation (C.2.1)

$$E_y(z) = \begin{cases} A_z \cos u_z \exp\left[-w_z\left(\frac{z}{a} - 1\right)\right] & (z > a) \\ A_z \cos\left(\frac{u_z z}{a}\right) & (-a \leqslant z \leqslant a) \\ A_z \cos u_z \exp\left[w_z\left(\frac{z}{a} + 1\right)\right] & (z < -a) \end{cases} \tag{4.1.4}$$

où A_z est une amplitude arbitraire et $w_z^2 = v_z^2 - u_z^2$, avec

$$v_z^2 = k^2 a^2 (n_1^2 - n_0^2). \tag{4.1.5}$$

L'idée de la méthode de Marcatili est de supposer que la dépendance du profil modal sur la coordonnée y est semblable à la dépendance en z à une rotation du système de coordonnées près. Ceci revient à dire que les deux polarisations ne sont pas couplées au sein du guide. On obtient ainsi

$$E_z(y) = \begin{cases} A_y \cos u_y \exp\left[-w_y\left(\frac{y}{b} - 1\right)\right] & (y > b) \\ A_y \cos\left(\frac{u_y y}{b}\right) & (-b \leqslant y \leqslant b) \\ A_y \cos u_y \exp\left[w_y\left(\frac{y}{b} + 1\right)\right] & (y < -b) \end{cases} \tag{4.1.6}$$

où A_y est une amplitude arbitraire et $w_y^2 = v_y^2 - u_y^2$, avec

$$v_y^2 = k^2 b^2 (n_1^2 - n_0^2). \tag{4.1.7}$$

Nous supposons que le mode guidé se couplant le plus fortement aux modes de cavité est le mode TM_0 dans la direction y puisqu'il s'agit du mode le moins confiné du guide d'onde. D'autres modes peuvent exister, mais leur confinement est plus élevé (plus faible longueur d'évanescence caractéristique). Ceci revient à dire que pour une distance g donnée, les modes de la cavité seront plus fortement interpellés par le mode guidé fondamental polarisé selon E_z.

Afin d'obtenir une valeur quantitative du confinement dans un guide d'onde microfabriqué, supposons un guide de largeur $D = 1000$ nm. Les longueurs d'évanescence caractéristiques dans la direction y (direction de couplage) obtenues de l'équation (C.3.4) sont

$$\begin{aligned} L_e &\sim 260 \text{ nm} \quad \text{(CONFIGURATION À L'AIR LIBRE)} \\ L_e &\sim 232 \text{ nm} \quad \text{(CONFIGURATION MICROFLUIDIQUE).} \end{aligned} \tag{4.1.8}$$

Il est raisonnable de considérer que la distance de couplage optimale g^* est de l'ordre de grandeur de ces longueurs. Ceci permet d'estimer les valeurs de g à échantillonner numériquement afin de déterminer g^*.

Finalement, comme la méthode de simulation est bidimensionnelle, il convient d'attribuer un indice effectif de réfraction n_e à la cavité. À partir de la méthode décrite à l'annexe C.3, on trouve les valeurs suivantes pour l'indice effectif d'une cavité intégrée d'épaisseur 850 nm

$$\begin{aligned} n_e &\sim 1.337 \quad \text{(CONFIGURATION À L'AIR LIBRE)} \\ n_e &\sim 1.420 \quad \text{(CONFIGURATION MICROFLUIDIQUE).} \end{aligned} \tag{4.1.9}$$

4.2 Méthode par éléments finis

La *méthode par éléments finis* (FEM) tire son origine de l'analyse structurelle, mais peut également s'appliquer à des problèmes électromagnétiques. Bien que la méthode BEM présentée au chapitre 3 ou la méthode des différences finies [77, 80] soient conceptuellement et algorithmiquement plus simples à mettre en place, la méthode des éléments finis possède une plus grande polyvalence en raison de son caractère systématique. En contrepartie, le traitement des conditions aux frontières à l'infini est moins aisé. Une description détaillée de cette méthode n'étant pas l'objet de la présente étude, un simple aperçu conceptuel est présenté.

Considérons à titre d'exemple le problème bidimensionnel aux conditions limites suivant

$$\mathcal{L}[f(x,y)] = 0 \tag{4.2.1}$$

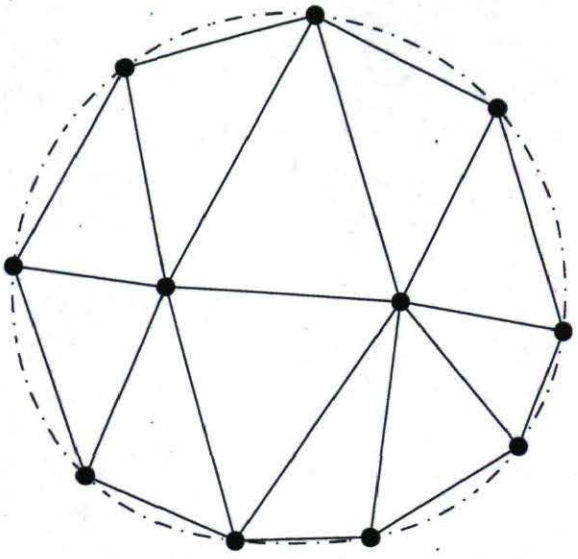


FIGURE 4.3 – Discrétisation en éléments finis de l'espace du problème $\mathcal{L}[f(x,y)] = 0$. La frontière réelle de l'espace est indiquée en pointillés. Les éléments finis sont dans ce cas l'ensemble des triangles dont les arêtes sont indiquées par des ligne pleines et les sommets par des disques noirs.

tel que $\mathcal{L}$ est un opérateur différentiel linéaire et $f(x,y)$ la solution du problème. La résolution de ce problème par la méthode des éléments finis comporte quatre étapes principales [77].

1. *L'espace du problème est discrétisé en un nombre fini de sous-régions, ou éléments.* En d'autres mots, un *maillage* du domaine de calcul est effectué. Les éléments utilisés dans le cadre de cette étude sont des triangles à trois sommets (nœuds), tels que schématisés à la figure 4.3. Chaque élément est défini par les coordonnées de ses trois sommets $\{x_i, y_i\}$.
2. *Les équations régissant la dynamique de chaque élément sont déterminées à l'aide des équations différentielles originales et des conditions aux limites.* Une forme approximative de la solution sur un élément e, soit $f_e(x,y)$ est recherchée. Dans le cas d'un élément triangulaire, la valeur de $f_e(x,y)$ peut être approximée par interpolation linéaire des valeurs aux trois sommets f_{e1}, f_{e2} et f_{e3} comme

$$f_e(x,y) = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i(x,y) f_{ei} \tag{4.2.2}$$

où

$$\alpha_i(x,y) = \frac{1}{2\mathcal{A}}[(x_j y_k - x_k y_j) + (y_j - y_k)x + (x_k - x_j)y] \tag{4.2.3}$$

avec $\mathcal{A}$ l'aire de l'élément triangulaire, soit

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2}[x_i(y_j - y_k) + x_j(y_k - y_i) + x_k(y_i - y_j)]. \tag{4.2.4}$$

La valeur de $\mathcal{A}$ est positive si les sommets sont étiquetés en ordre anti-horaire. Les valeurs f_{ei} sont les inconnues du problème sauf dans le cas où elles sont imposées par les conditions aux frontières.

Si $f_e(x,y)$ est une solution du problème (4.2.1), la fonctionnelle suivante doit être stationnaire par rapport à $f_e(x,y)$

$$W_e = \frac{1}{2}\langle \mathcal{L}[f_e(x,y)] | f_e(x,y) \rangle. \tag{4.2.5}$$

En substituant (4.2.2) dans l'expression du produit scalaire, on trouve

$$W_e = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} f_{ei}\left[\int \mathcal{L}[\alpha_i(x,y)]\alpha_j(x,y)\, dA\right] f_{ej} \tag{4.2.6}$$

où l'intégration s'effectue sur la surface de l'élément e. Cette fonctionnelle peut être réécrite sous forme matricielle comme

$$\boldsymbol{W}^{(e)} = \boldsymbol{f}_e^T \boldsymbol{V}^{(e)} \boldsymbol{f}_e \tag{4.2.7}$$

où

$$V_{ij}^{(e)} = \frac{1}{2}\int \mathcal{L}[\alpha_i(x,y)]\alpha_j(x,y)\, dA \tag{4.2.8}$$

et

$$\boldsymbol{f}_e = \begin{bmatrix} f_{e1} \\ f_{e2} \\ f_{e3} \end{bmatrix}. \tag{4.2.9}$$

La forme exacte de $\boldsymbol{V}^{(e)}$ dépend de la forme de l'opérateur linéaire $\mathcal{L}[f_e(x,y)]$ et des conditions aux frontières du problème. Cette matrice peut être interprétée comme un opérateur de couplage entre les nœuds de l'élément fini.

3. *Les éléments de l'espace du problème sont assemblés.* Ceci revient à écrire la fonctionnelle globale du système $\boldsymbol{W}$ sous forme matricielle en joignant les nœuds communs à plusieurs triangles.
4. *Le système d'équations linéaires résultant est solutionné.* Ceci détermine les valeurs de $f(x,y)$ sur tous les nœuds du maillage en imposant $\delta \boldsymbol{W} = 0$.

À défaut de programmer manuellement l'ensemble de ces tâches, le logiciel COMSOL MULTIPHYSICS est utilisé dans le cadre de cette étude [24]. Il s'agit d'une implémentation commerciale de la méthode par éléments finis. Les étapes d'assemblage et de solution du système linéaire (étapes 3 et 4) sont effectuées de façon interne par le logiciel ; l'utilisateur spécifie seulement la géométrie et les conditions aux frontières dans un certain nombre de sous-domaines, certaines règles concernant la génération du maillage (étape 1) et les équations différentielles (étape 2). Ces spécifications sont détaillées dans les prochaines sections.

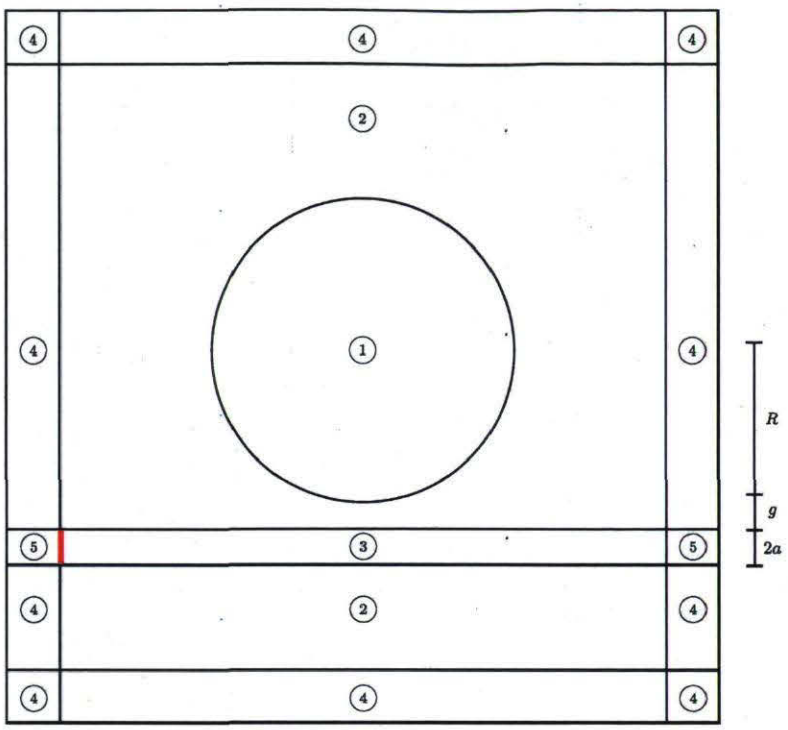


FIGURE 4.4 – Géométrie du problème bidimensionnel à discrétiser en éléments finis. Le disque diélectrique est centré à l'origine du plan xy. Le champ incident à l'entrée du guide (rouge) est imposé de la forme (4.1.6).

4.2.1 Géométrie et conditions aux frontières

Les milieux considérés dans le cadre de cette étude sont de nature diélectrique, à savoir de conductivité nulle, et sans sources (voir section 2.1). Le champ électrique doit satisfaire l'équation de Helmholtz (2.1.9) dans tout le domaine de calcul bidimensionnel (seule la polarisation TM est traitée sans perte de généralité). Ainsi, la définition de la permittivité diélectrique est nécessaire dans chacun des milieux présents, soient la cavité, le guide d'onde et le milieu environnant. La géométrie du domaine de calcul et les indices de réfraction sont définis à la figure 4.4.

Le profil du mode TM fondamental (4.1.6) est imposé à l'entrée du guide d'onde [38] ; le champ électromagnétique en tout autre point du domaine de calcul est une inconnue du problème. Les conditions de continuité (2.1.20a) et (2.1.20b) sont imposées d'emblée sur toutes les interfaces entre deux milieux diélectriques, sauf aux extrémités du domaine de calcul où un mur métallique est imposé. Ceci revient à la condition

$$\boldsymbol{\nu} \times \mathbf{E} = 0 \tag{4.2.10}$$

où $\boldsymbol{\nu}$ est le vecteur normal au mur.

TABLEAU 4.2 – Légende associée à la figure 4.4

Milieu	Indice de réfraction	PML
1 (cavité)	n_e (ind. effectif)	Non
2 (vide)	n_0	Non
3 (guide)	n_1	Non
4 (vide)	$n_0 - in_l(x,y)$	Oui
5 (guide)	$n_1 - in_l(x,y)$	Oui

Zones absorbantes parfaitement adaptées

La condition (4.2.10) n'est pas en accord avec les conditions d'émission ou de diffusion obtenues à la section 2.1.2. En effet, la formulation par éléments finis nécessite une troncation du domaine de calcul ce qui rend nécessaire l'utilisation de *zones absorbantes parfaitement adaptées*, ou PMLs (de l'anglais *perfectly matched layers*). Essentiellement, ces couches sont placées entre un « infini » déterminé arbitrairement et l'extrémité du domaine de calcul et visent à émuler la condition (2.1.21) en introduisant artificiellement des pertes d'énergie [2].

Cet objectif est atteint en prolongeant les coordonnées spatiales dans le plan complexe au sein des PMLs. L'indice de réfraction est redéfini comme [9, 17]

$$\widetilde{n}(x,y) = n(x,y) - in_l(x,y) \tag{4.2.11}$$

où $n_l(x,y) = n_{lx}(x) + n_{ly}(y)$, avec

$$n_{lx}(x) = \begin{cases} p\left(\dfrac{x^-_{pml} - x}{w^-_{xpml}}\right)^q & (x^-_{pml} - w^-_{xpml}) \le x \le x^-_{pml} \\ 0 & x^-_{pml} \le x \le x^+_{pml} \\ p\left(\dfrac{x - x^+_{pml}}{w^+_{xpml}}\right)^q & x^+_{pml} \le x \le (x^+_{pml} + w^+_{xpml}) \end{cases} \tag{4.2.12a}$$

$$n_{ly}(y) = \begin{cases} p\left(\dfrac{y^-_{pml} - y}{w^-_{ypml}}\right)^q & (y^-_{pml} - w^-_{ypml}) \le y \le y^-_{pml} \\ 0 & y^-_{pml} \le y \le y^+_{pml} \\ p\left(\dfrac{y - y^+_{pml}}{w^+_{ypml}}\right)^q & y^+_{pml} \le y \le (y^+_{pml} + w^+_{ypml}). \end{cases} \tag{4.2.12b}$$

2. L'utilisation de PMLs rend ainsi les conditions aux frontières satisfaites de façon *inexacte* peu importe la qualité de la discrétisation de l'espace, alors que la formulation intégrale présentée à la section 3.1 permet de satisfaire la condition d'émission de Sommerfeld ou la condition de diffusion de façon *exacte* pour une qualité de discrétisation tendant vers l'infini.

Les PMLs sont de largeur $w_{pml}^{\pm}$ et délimités par $x_{pml}^{\pm}$ et $y_{pml}^{\pm}$, respectivement, où le surindice $(+,-)$ signifie couche de (droite, gauche) ou (bas, haut). L'entier q est l'ordre des PMLs et p un entier positif. L'effet de cette substitution est de prolonger les coordonnées x et y de la façon suivante

$$\tilde{x} = \int_0^x \widetilde{n}(x', y)dx' \,. \tag{4.2.13a}$$

$$\tilde{y} = \int_0^y \widetilde{n}(x, y')dy' \tag{4.2.13b}$$

où les coordonnées « propres » du problème $\tilde{x}$ et $\tilde{y}$ sont essentiellement une continuation analytique des coordonnées réelles x et y. Ce prolongement assure que toutes les ondes harmoniques se propageant à incidence normale à l'interface d'une couche PML sont entièrement atténuées une fois la zone absorbante traversée. En contrepartie, trois principales difficultés sont associées à l'utilisation des PMLs [48].

1. L'élimination de réflexions n'est parfaite que dans le cas où l'équation de Helmholtz (2.1.9) est satisfaite de façon exacte. Dans le cas d'un espace discrétisé, la continuation analytique ne permet pas d'éliminer complètement la composante réfléchie de l'onde. Les PMLs peuvent toutefois être suffisamment absorbantes pour constituer une bonne approximation de l'infini dans le cas où le maillage est suffisamment fin.
2. En théorie, seules les excitations dont le vecteur d'onde est orienté purement dans une des deux directions x ou y sont complètement absorbées par une couche PML d'indice complexe donné par (4.2.11–4.2.12). De multiples « allers-retours » pourront être parcourus avant absorption dans le cas où le vecteur d'onde d'une excitation est orienté dans une direction quelconque. Placer les PMLs suffisamment loin de l'objet d'intérêt permet de minimiser cette difficulté. Il est plausible de supposer que l'onde guidée ne possède qu'une composante en x, ce qui justifie le fait d'étendre le guide jusqu'aux PMLs. Par contre, le cas d'un guide d'onde à incidence non-normale vers le milieu extérieur serait problématique.
3. Dans le cas où le milieu s'étendant vers l'infini est anisotrope ou quasi-périodique, par exemple le cas de cristaux photoniques, la formulation échoue, puisque la continuation analytique à partir une interface à coordonnée x ou y n'est plus valide. Cette difficulté n'est pas capitale dans le cadre de la présente étude.

4.2.2 Maillage du domaine de calcul

Le maillage triangulaire du domaine de calcul est effectué à l'interne par COMSOL MULTIPHYSICS. Nous spécifions seulement la taille maximale des arêtes dans certaines régions, en exigeant une plus petite taille maximale dans le guide d'onde et dans la

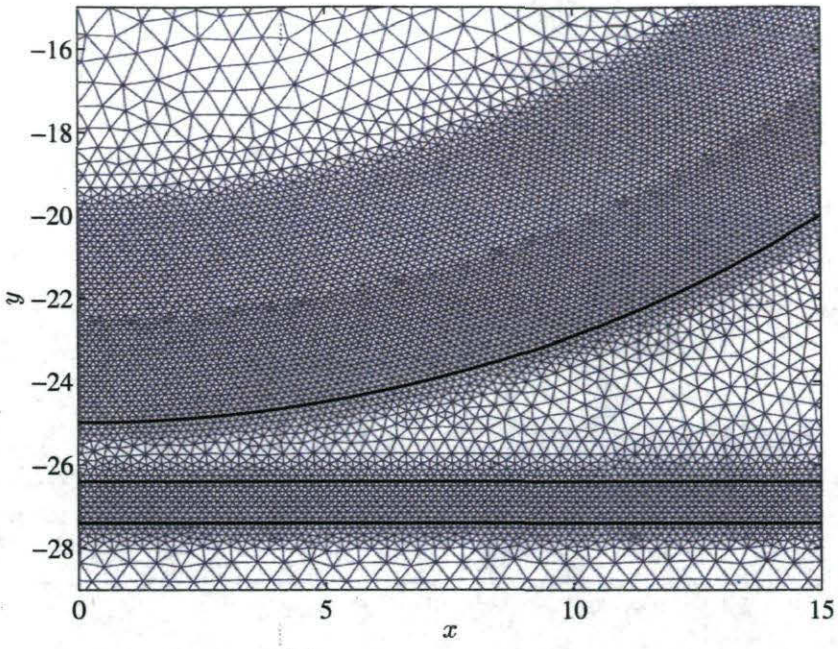


FIGURE 4.5 – Maillage du domaine de calcul pour un guide de largeur 1 µm, une distance cavité-guide de 1400 nm et un rayon du disque intégré de 25 µm. Une plus fine résolution (au moins $\lambda/10$) est imposée dans un anneau de rayon intérieur de 20 µm, dans le guide et dans la région d'interaction cavité-guide. Dans les autres régions, une résolution de $\lambda/2$ est acceptable et permet de diminuer le temps de calcul.

cavité. En effet, la longueur d'évanescence caractéristique du guide d'onde est typiquement une fraction de la longueur d'onde d'opération (voir section 4.1.1). Ceci justifie la résolution plus fine requise dans la zone d'interaction forte entre la cavité et le guide, qui est située près du point de séparation minimale entre les structures. Un maillage illustrant l'application de ces règles empiriques est présenté à la figure 4.5.

Notons qu'afin d'optimiser le transfert d'énergie par couplage, il est nécessaire de procéder à un balayage des valeurs de g, ce qui nécessite la génération d'un nouveau maillage pour chacune des valeurs.

4.2.3 Optimisation de la distance de couplage : résultats

L'optimisation de la distance de couplage g nécessite d'abord la recherche d'une résonance du système cavité-guide. Afin d'y parvenir, une valeur de g de l'ordre de grandeur de L_e est fixée et l'énergie emmagasinée $\mathcal{E}_c$ (4.1.1) est évaluée numériquement versus la longueur d'onde λ sur une fenêtre donnée. Le maillage n'a pas à être regénéré à chaque pas en longueur d'onde si la résonance est suffisamment fine. Une fois la résonance trouvée, le balayage en longueur d'onde est repris pour différentes valeurs de g jusqu'à l'atteinte de la valeur optimale g^* à une précision donnée. La quantité

TABLEAU 4.3 – Valeurs numériques des paramètres de simulation du dispositif de couplage (configuration à l'air libre)

Quantité	Expression	Valeur
Épaisseur des structures optiques	$2a$	850 nm
Largeur du guide d'onde	$2b$	1000 nm
Indice de réfraction des structures	n_1	1.5
Indice de réfraction du milieu environnant	n_0	1.0
Rayon du disque	R	25 µm
Longueur d'onde d'opération	λ	~ 1.5 µm
Largeur des PMLs (direction x)	$w^{\pm}_{xpml}$	1 µm
Largeur des PMLs (direction y)	$w^{\pm}_{ypml}$	1 µm
Position des PMLs (direction x)	$x^{\pm}_{pml}$	29 µm
Position des PMLs (direction y)	$y^{\pm}_{pml}$	29 µm

$\mathcal{E}_c$ est ainsi optimisée par rapport au couple de valeurs (g, λ) au moyen d'un balayage paramétrique.

Nous avons choisi de simuler le couplage entre un mode guidé et un mode de galerie à deux lobes radiaux (voir figure 4.6). Bien que les modes à un lobe radial ($j = 1$) soient de plus haut facteur de qualité, ils se couplent moins facilement au guide et nécessitent un balayage plus fin en longueur d'onde. L'étude d'un mode moins confiné simplifie ainsi le calcul et les conclusions tirées peuvent être étendues aux modes plus fortement confinés en utilisant des arguments quantitatifs simples.

Les résultats sont présentés à la figure 4.7 et au tableau 4.4. On note que la valeur maximale de $\mathcal{E}_c$ est atteinte pour $g \simeq 1100$ nm. Une précision de 100 nm sur la valeur de g^* est satisfaisante dans le cadre de cette étude en raison de la limite de résolution associée à la fabrication de cavités intégrées. Les paramètres des PMLs ont été fixés à $p = 1$ et $q = 1$. La valeur des autres paramètres est présentée au tableau 4.3.

En plus de fournir de l'information sur la distance optimale de couplage, les résultats obtenus permettent de rendre compte de deux régimes de couplage, soit le sous-couplage ($g > g^*$) et le sur-couplage ($g < g^*$). Dans le premier cas, le recouvrement des modes de la cavité et du guide est perturbatif [58]. Lorsque la séparation est grande, la fréquence de résonance du mode de cavité est pratiquement inchangée par la présence du guide et approcher le guide de la cavité augmente le transfert d'énergie. Ce régime perturbatif est évident dans le cas des courbes $g = 1400$ nm et $g = 1300$ nm (voir fig. 4.7). Le régime de sur-couplage est atteint lorsque l'effet du guide sur le mode de cavité n'est plus perturbatif et entraîne d'importantes pertes.

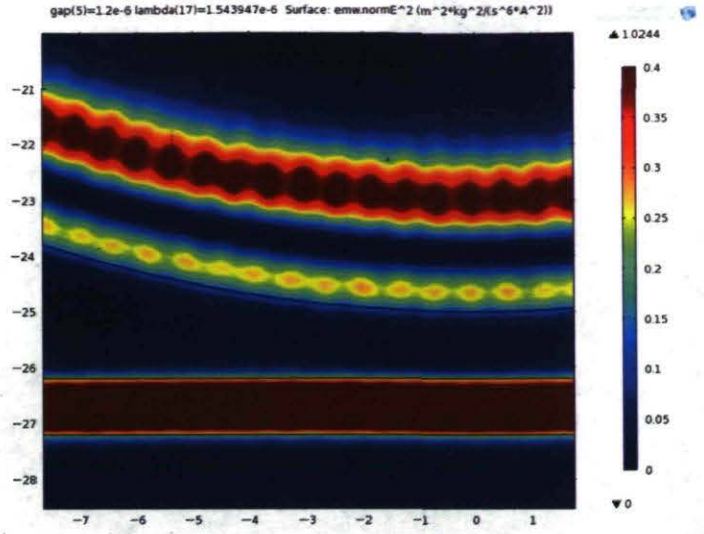


FIGURE 4.6 – Profil du mode de galerie à deux lobes radiaux excité par le mode d'un guide planaire. L'échelle de couleur est tronquée et ne reflète pas l'intensité relative des modes, mais sert seulement à illustrer le champ dans chaque structure (cas hors résonance, unités d'intensité arbitraires).

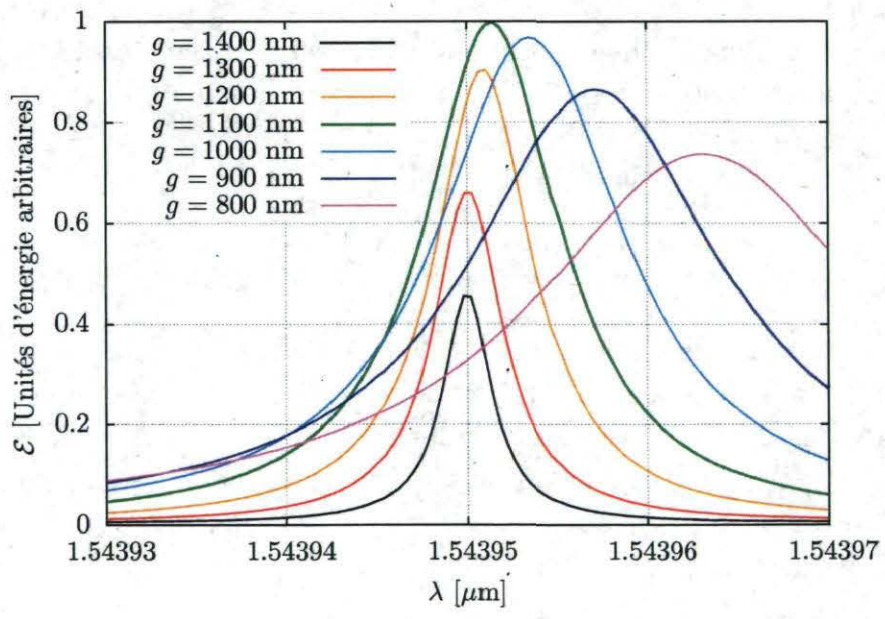


FIGURE 4.7 – Énergie emmagasinée dans un disque intégré en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de la séparation cavité-guide g. Les courbes sont obtenues à l'aide de l'ajustement d'une fonction Lorentzienne sur les données produites par COMSOL MULTIPHYSICS. Les paramètres empiriques ainsi obtenus sont consignés au tableau 4.4. Ces résultats représentent environ 30 minutes de calcul sur un ordinateur personnel pour chaque valeur de g.

TABLEAU 4.4 – Caractéristiques des courbes Lorentziennes obtenues à partir des données de la figure 4.7.

g (nm)	λ_{max} (µm)	$\Delta\lambda$ ($\cdot 10^{-6}$ µm)	Q ($\cdot 10^5$)	max($\mathcal{E}_c$)
800	1.5439631	11.6	1.3	0.726
900	1.5439571	8.6	1.8	0.858
1000	1.5439535	6.3	2.4	0.964
1100	1.5439513	4.6	3.4	0.995
1200	1.5439509	3.3	4.7	0.901
1300	1.5439500	2.3	6.6	0.659
1400	1.5439500	1.6	9.5	0.457

Notons également que l'augmentation monotone du facteur de qualité Q avec la distance de couplage g est en accord avec la règle d'addition [49]

$$\frac{1}{Q} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{Q_c} + \frac{1}{Q_0} \tag{4.2.14}$$

où Q_c est proportionnel au temps caractéristique d'échappement de l'énergie dans le guide d'onde et Q_0 est le facteur de qualité intrinsèque du mode de galerie, associé aux pertes radiatives. Cette règle revient à dire que le facteur de qualité total est dominé par le facteur de qualité ayant la plus petite valeur. De façon évidente, Q_c doit diminuer avec la diminution de g puisque la voie d'échappement vers le guide d'onde est proportionnellement plus importante. Ceci confère un réalisme physique aux résultats de la figure 4.7.

4.2.4 Modification des paramètres du problème

Les simulations COMSOL MULTIPHYSICS ont été effectuées en ne balayant que deux paramètres, soient la longueur d'onde λ et la séparation g. Afin de tirer des conclusions plus générales et guider d'éventuelles études, nous passons en revue les principaux paramètres qui pourraient être modifiés et l'effet escompté de ces modifications sur les conditions de couplage optimales. Nous abordons également les effets du passage à la configuration microfluidique.

1. **Taille de la cavité.** L'augmentation du rayon du disque aura comme effet *d'augmenter* le confinement du mode de galerie donc de *diminuer* la distance critique de couplage.
2. **Nature du mode de galerie.** Il serait possible de refaire ces simulations en excitant plutôt un mode de galerie possédant un seul lobe radial ($j = 1$). Toutefois,

ce mode serait *plus confiné*, ce qui aurait comme effet de *diminuer* la distance critique de couplage.

3. **Augmentation de l'indice effectif du disque**. Encore une fois, augmenter l'indice effectif de la cavité aura comme effet *d'augmenter* le confinement du mode de galerie donc de *diminuer* la distance critique de couplage. Une diminution de la longueur d'onde d'opération λ ou une augmentation de l'épaisseur $2a$ de la cavité (en maintenant tous les autres paramètres constants) a le même effet, tel que montré à la figure C.2.
4. **Augmentation de la largeur du guide**. Ne tenant pas compte de la nature multimodale d'un guide large, l'augmentation de la largeur du guide aura comme effet de diminuer son indice effectif transverse. En accord avec l'équation (C.3.4), ceci aura comme effet *d'augmenter* le confinement du mode guidé donc de *diminuer* la distance critique de couplage.
5. **Passage à la configuration microfluidique**. Comme nous avons calculé plus haut, les longueurs d'évanescence caractéristiques sont environ les mêmes dans les deux configurations, ce qui revient à dire que les résultats obtenus à l'aide de COMSOL MULTIPHYSICS seront comparables dans les deux situations pour un mode de galerie de confinement comparable.

Conclusion et perspectives

Un modèle bidimensionnel par éléments finis a été développé et permet de rendre compte du transfert d'énergie entre un guide d'onde rectangulaire et une cavité intégrée. La méthode de l'indice effectif permet de réduire la dimensionnalité du problème puisque nous considérons un arrangement de structures optiques d'épaisseur uniforme. Le maillage du domaine de calcul est effectué en tenant compte de la résolution nécessaire à une longueur d'onde donnée.

Ce modèle a permis d'optimiser le transfert d'énergie en fonction de la séparation cavité-guide en tenant compte de certaines contraintes expérimentales. Par ailleurs, des calculs d'ordre de grandeur s'appuyant sur la théorie des guides d'onde [65] permettent d'étendre les conclusions dégagées de façon qualitative à d'autres configurations expérimentales.

Parmi les avantages du modèle, mentionnons la capacité de modéliser de hautes fréquences d'excitation ($nkR \simeq 500$). Par ailleurs, le modèle développé peut être adapté à de multiples géométries et à une variété d'excitations guidées. Le réalisme du modèle est confirmé par le comportement à la résonance des simulations (voir fig. 4.8), la dépendance du facteur de qualité total sur la distance de couplage, et la présence at-

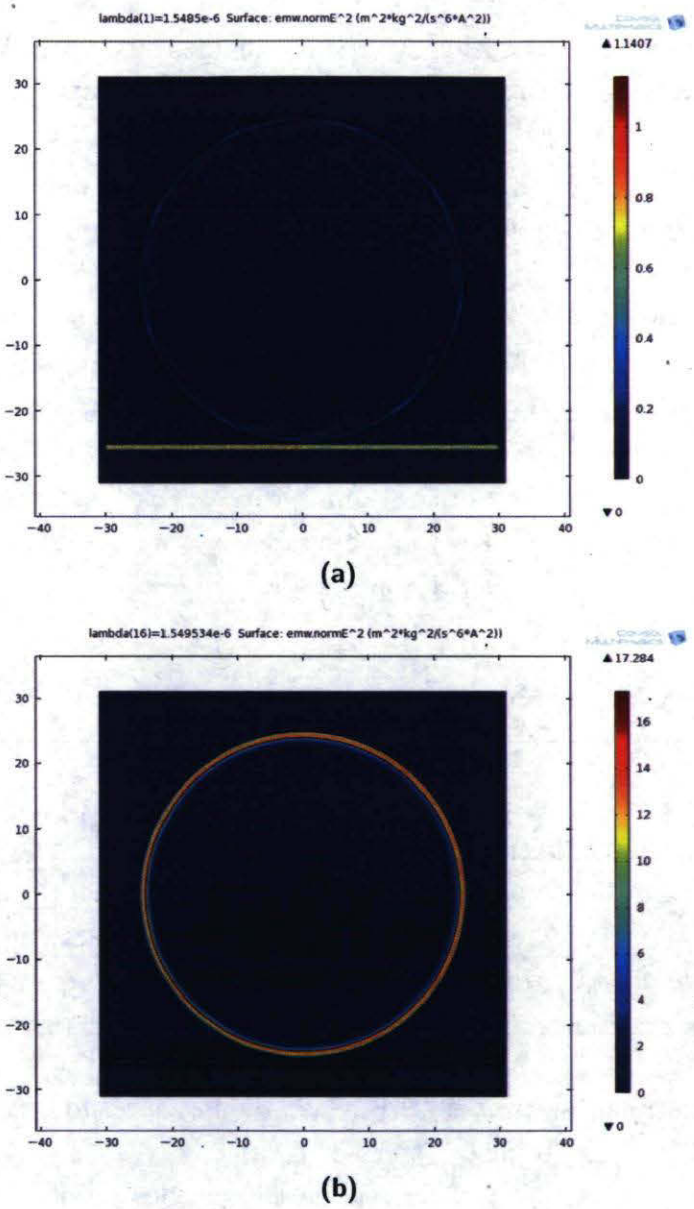


FIGURE 4.8 – Excitation d'un mode de galerie d'un micro-disque par couplage évanescent. **(a)** Couplage hors-résonance : la majeure partie de l'énergie demeure confinée dans le guide. **(b)** Couplage à la résonance : la majeure partie de l'énergie est transférée au disque (unités d'intensité arbitraires).

tendue d'un régime de sous-couplage et d'un régime de sur-couplage [16]. Toutefois, en raison des réflexions sur les extrémités du domaine de calcul, ce modèle ne permet pas dans son état actuel de rendre compte *parfaitement* de la transmission dans le guide d'onde. Ces réflexions sont dues au caractère artificiel des zones absorbantes parfaitement adaptées. L'effet détaillé de ces réflexions et une façon de les minimiser ont fait l'objet d'une publication récente [54].

Une extension de ce modèle pourrait permettre de déterminer les modes résonants de cavités bidimensionnelles à l'aide des zones absorbantes parfaitement adaptées [17]. Cette extension implique possiblement la mise en place d'une couche PML cylindrique [83]. Par ailleurs, comme la formulation par éléments finis fournit un cadre de travail idéal pour l'étude d'équations différentielles couplées, ce type d'algorithme pourrait être appliqué à l'étude d'effets non-linéaires dans les microcavités, par exemple l'absorption thermique du matériel constituant.

Chapitre 5

Conclusion

"The applications of analysis to the physical Sciences, have the double advantage of manifesting the extraordinary powers of this wonderful instrument of thought, and at the same time of serving to increase them ; numberless are the instances of the truth of this assertion."

George Green
An Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theories of Electricity and Magnetism, 1850.

5.1 Accomplissements et contributions

Nous avons présenté une caractérisation ondulatoire à deux volets des résonateurs optiques bidimensionnels. Après avoir déterminé analytiquement et numériquement les modes d'émission de cavités *isolées*, nous avons mis en œuvre une méthode permettant de caractériser le *couplage évanescent* de cavités à des structures externes. Ceci est analogue à une démarche expérimentale ; des cavités diélectriques possédant leurs caractéristiques optiques propres sont fabriquées et ensuite couplées à des instruments de mesure.

Nos contributions principales consistent en des améliorations de la *méthode des éléments de frontière* utilisée dans le cadre de la détermination des résonances de cavités. Une généralisation du formalisme à un nombre arbitraire de domaines simplement ou multiplement connexes a été effectuée. Une comparaison avec des résultats analytiques pour une cavité annulaire simple a permis de confirmer la précision numérique

de ce nouveau traitement. Nous avons également présenté une méthode de recherche de prédicteurs et une étude de la convergence jusqu'à maintenant introuvable dans la littérature.

Une technique de modélisation du couplage entre une cavité et un guide intégré, d'abord présentée dans [38], a été modifiée par l'ajout de zones absorbantes parfaitement adaptées. Une série de simulations numériques et de calculs d'ordre de grandeur ont permis de déterminer les conditions de couplage critique d'un dispositif intégré en oxyde de silicium.

Un lecteur averti aura remarqué que, bien que les paramètres utilisés dans la modélisation numérique soient réalistes, cet ouvrage ne contient aucune comparaison avec des résultats expérimentaux. En effet, cette comparaison représente un défi technique de taille. Comme les microcavités optiques sont des résonateurs extrêmement sensibles aux perturbations extérieures, leur caractérisation optique doit être effectuée avec une grande finesse afin de fournir des résultats fiables. Les imperfections de surface et la poussière ambiante ne sont que deux exemples de sources d'erreur expérimentale qui peuvent affecter la qualité des données réelles.

Des difficultés conceptuelles compliquent également cette comparaison. La plus notable de ces difficultés vient de l'utilisation d'algorithmes ondulatoires. Bien que ces algorithmes soient encore valides pour $nkR \gg 1$, ils deviennent numériquement instables dans ce régime et donc pratiquement inapplicables. Par exemple, les résultats de la section 4.2.3 correspondent à une valeur de $nkR \simeq 150$. En réalité, des valeurs de $nkR \geq 500$ sont souvent prescrites par des limites instrumentales, valeurs rendant l'utilisation de méthodes ondulatoires prohibitive. De plus, l'approximation de l'indice effectif permettant de rendre compte du caractère tridimensionnel des cavités entraîne une erreur importante sur la position des résonances. L'ensemble de ces difficultés empêchent la reproduction numérique exacte du spectre de cavités réelles. Toutefois, les règles de design obtenues et l'ordre de grandeur des facteurs de qualité prédits sont tout à fait valides.

5.2 Perspectives

Les outils développés dans le présent mémoire, particulièrement la méthode des éléments de frontière, peuvent être appliqués à une grande variété de problèmes. Nous présentons deux perspectives s'inscrivant dans la réalisation de lasers directionnels. La première est une perspective de nature conceptuelle concernant la suite des travaux présentés, alors que la seconde concerne la nature des milieux optiques à l'étude.

5.2.1 Optimisation de l'émission

Les recherches présentées permettent de déterminer le profil d'émission étant donnée une configuration de milieux diélectriques, par exemple une cavité annulaire décentrée. Toutefois, afin d'atteindre la meilleure directionnalité possible, il serait utile d'être en mesure de cheminer en sens inverse, soit trouver la configuration à utiliser *étant donné* un profil d'émission. Ainsi, le prochain niveau de sophistication de nos travaux pourrait passer par la mise en œuvre d'algorithmes d'optimisation. La procédure consiste à définir un nombre de configurations potentielles associés à certains paramètres géométriques. Par exemple la position et la taille d'une certaine quantité de défauts circulaires dans un milieu diélectrique pourraient paramétriser les configurations possibles. L'émission au champ lointain d'un mode particulier de la cavité, calculée à l'aide des méthodes numériques présentées dans cet ouvrage, serait ensuite optimisée par rapport à ces paramètres géométriques.

Vu le grand nombre de configurations possibles dans les structures photoniques, des méthodes heuristiques robustes doivent être choisies. À cet effet, les algorithmes génétiques semblent constituer une avenue prometteuse vu leur capacité à déterminer l'optimum global d'un problème. L'utilité de ces algorithmes a été démontrée dans le cadre de la conception de plusieurs types de structures photoniques, par exemple les fibres à cristaux photoniques [50], les polarimètres de Stokes [56] et les guides d'ondes courbés [87].

5.2.2 Nouveaux matériaux

Plusieurs applications récentes de dispositifs photoniques reposent sur les *plasmons de surface*. Ces plasmons sont essentiellement des ondes confinées à l'interface entre un diélectrique et un milieu conducteur ou semi-conducteur, résultat de l'oscillation résonante d'électrons libres. L'avantage principal de l'utilisation de ces *matériaux plasmoniques* est la possibilité de concentrer localement une grande quantité d'énergie électromagnétique [8]. Ceci confère une grande utilité aux plasmons dans le cadre de la biodétection [23, 79]. Nous proposons d'utiliser des matériaux plasmoniques dans un autre objectif : la réalisation de microlasers directionnels.

Il a été montré à la section 3.3.1 comment la présence d'une inclusion diélectrique permet d'induire une émission directionnelle à partir d'une cavité initialement homogène. Une récente publication offre une interprétation géométrique de ce résultat : le défaut inscrit dans la cavité agit en fait comme une source ponctuelle, et la cavité « focalise » ce rayonnement vers l'infini [89]. Afin d'améliorer la qualité de cette émission,

un défaut métallique ou plasmonique pourrait être utilisé au lieu d'une inclusion, permettant ainsi de bénéficier de la haute concentration localisée du champ décrite plus haut. En particulier, l'utilisation d'oxydes transparentes conductrices au lieu de métaux traditionnels tels l'or et l'argent pourrait permettre d'atteindre cet objectif tout en réduisant les pertes associées [64].

Les plasmons de surface peuvent se propager lorsque le contraste de permittivité relative de part et d'autre d'une interface satisfait certaines conditions. En effet, les milieux diélectriques se caractérisent par une permittivité relative réelle et positive, alors que les matériaux plasmoniques possèdent une permittivité de partie imaginaire non-nulle et de partie réelle négative. La caractérisation ondulatoire de ces *cavités plasmoniques* pourrait ainsi être effectuée à l'aide de la méthode des éléments de frontière au moyen d'une modification de la fonction de Green, fonction dont l'argument dépend de la permittivité relative des milieux [69].

Cette étude s'inscrit dans le cadre de recherche plus large des *métamatériaux*, des composés artificiels pouvant posséder une permittivité et une perméabilité relative de valeur arbitraire. La modélisation de ces composés nécessite souvent de tenir compte de la dispersion des milieux, à savoir une permittivité relative dépendant de la fréquence du rayonnement [92].

Annexe A

Solutions générales de l'équation de Helmholtz par séparation de variables

L'équation de Helmholtz scalaire bidimensionnelle

$$[\nabla^2 + k^2(\boldsymbol{r})]\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{A.0.1}$$

est séparable dans 11 systèmes de coordonnées lorsque $k^2(\boldsymbol{r}) = n^2k^2$, une constante [30]. Nous allons montrer dans cette annexe que l'équation de Helmholtz demeure séparable en coordonnées polaires si $k^2(\boldsymbol{r})$ dépend des coordonnées spatiales et satisfait certaines conditions particulières [2]. Nous allons aussi obtenir des solutions générales de cette équation dans ce système de coordonnées [1].

A.1 Coordonnées polaires

L'équation (A.0.1) demeure séparable en coordonnées polaires $\boldsymbol{r} = \{\rho, \varphi\}$ si $k^2(\boldsymbol{r})$ s'exprime de la façon suivante

$$k^2(\boldsymbol{r}) = n^2k^2 + f(\rho) + \frac{1}{\rho^2}g(\varphi). \tag{A.1.1}$$

L'opérateur laplacien en coordonnées polaires s'écrit

$$\nabla^2\psi(\rho, \varphi) = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}. \tag{A.1.2}$$

1. La solution en coordonnées elliptiques (2D) et sphériques (3D) est également possible mais n'est pas détaillée ici.

Posons comme hypothèse $\psi(\rho,\varphi) = \mathcal{R}(\rho)\Phi(\varphi)$. L'équation (A.0.1) devient

$$\frac{\Phi}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\rho}\right) + \frac{\mathcal{R}}{\rho^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + \left[n^2k^2 + f(\rho) + \frac{1}{\rho^2}g(\varphi)\right]\mathcal{R}\Phi = 0. \tag{A.1.3}$$

En divisant par $\mathcal{R}\Phi$ et en multipliant par ρ^2. On obtient

$$\frac{\rho}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\rho}\right) + (nk\rho)^2 + \rho^2 f(\rho) = -\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} - g(\varphi). \tag{A.1.4}$$

Afin de séparer les variables, posons chaque côté de l'équation précédente égal à une constante de séparation m^2. On obtient ainsi une équation différentielle ordinaire linéaire pour chaque coordonnée, soit

$$\rho^2\mathcal{R}'' + \rho\mathcal{R}' + [(nk\rho)^2 + \rho^2 f(\rho) - m^2]\mathcal{R} = 0 \tag{A.1.5a}$$

$$\Phi'' + [g(\varphi) + m^2]\Phi = 0. \tag{A.1.5b}$$

Dans un milieu bidimensionnel symétrique, $f(\rho) = 0$ et $g(\varphi) = 0$, ce qui mène à la forme suivante

$$\rho^2\mathcal{R}'' + \rho\mathcal{R}' + [(nk\rho)^2 - m^2]\mathcal{R} = 0 \tag{A.1.6a}$$

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0. \tag{A.1.6b}$$

L'équation (A.1.6a) peut être réduite à une équation de Bessel. Effectuons le changement d'échelle $\xi = nk\rho$. On obtient ainsi l'équation de Bessel

$$\xi^2\frac{\partial^2\mathcal{R}}{\partial\xi^2} + \xi\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\xi} + (\xi^2 - m^2)\mathcal{R} = 0 \tag{A.1.7}$$

dont la solution générale est donnée par une combinaison linéaire de solutions linéairement indépendantes

$$\mathcal{R}(\rho) = AJ_m(\xi) + BY_m(\xi) = AJ_m(nk\rho) + BY_m(nk\rho) \tag{A.1.8}$$

où A et B sont des constantes, $J_m(\xi)$ est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre m et $Y_m(\xi)$ est la fonction de Bessel de seconde espèce d'ordre m [2]. Il apparaît que (A.1.6b) admet des solutions de nature harmonique, soit

$$\Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi} + De^{-im\varphi} \tag{A.1.9}$$

où C et D sont des constantes. Comme la constante de séparation m^2 demeure arbitraire mais $\Phi(\varphi)$ doit être de période 2π, m peut prendre toute valeur entière positive

2. La résolution de l'équation de Bessel passe par une solution en séries de puissance à l'aide de la méthode de Fröbenius. La démarche est exposée dans tout bon manuel de physique mathématique. Un survol des propriétés de ces fonctions est présenté à l'annexe (A.2).

ou négative. Ainsi, en coordonnées polaires, la solution la plus générale possible de l'équation de Helmholtz, pour $k(\boldsymbol{r}) = nk$, s'écrit en combinant (A.1.8) et (A.1.9)

$$\boxed{\psi(\rho,\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Big(a_m J_m(nk\rho) + b_m Y_m(nk\rho) \Big) e^{im\varphi}} \tag{A.1.10}$$

où les coefficients $\{a_m\}$ et $\{b_m\}$ sont à déterminer à l'aide des conditions aux limites. Il est à noter que les fonctions de Bessel de première espèce $J_m(\xi)$ sont bornées pour toutes les valeurs de ξ. Une autre solution générale de forme utile est énoncée à la section (A.2.2).

A.2 Fonctions de Bessel

Cette annexe vise à exposer quelques définitions et développements utiles concernant les fonctions de Bessel [3]. Ces fonctions sont d'un grand intérêt dans le cadre de l'analyse des cavités optiques bidimensionnelles. Comme elles apparaîssent naturellement comme solutions des équations de Laplace et de Helmholtz en coordonnées cylindriques, les fonctions de Bessel sont aussi appelées *fonctions cylindriques*.

A.2.1 Définition et fonction génératrice

Les fonctions de Bessel d'ordre entier sont définies à partir de la fonction génératrice $g(\xi,t) = e^{(\xi/2)(t-1/t)}$. Le développement de cette fonction en série de Laurent autour de $t = 0$ mène à

$$e^{(\xi/2)(t-1/t)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(\xi) t^m. \tag{A.2.1}$$

Il suffit de développer $e^{(\xi t/2)}$ et $e^{(\xi/2t)}$ en séries de Maclaurin et de multiplier les séries pour obtenir l'expression des fonctions de Bessel d'ordre m entier, soit

$$J_m(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+m)!} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2n+m}. \tag{A.2.2}$$

Cette expression tient aussi pour les valeurs de m négatives. Dans ce cas, on trouve

$$J_{-m}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m}}{n!(n+m)!} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2n+m} \tag{A.2.3}$$

3. Les développements mathématiques de cette section sont tirés du livre de Arfken [2] et de celui de Greenberg [35]

d'où la relation $J_{-m}(\xi) = (-1)^m J_m(\xi)$. Pour un ordre quelconque, on peut généraliser les factorielles et écrire

$$J_\nu(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\Gamma(n+\nu+1)} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2n+\nu} \tag{A.2.4a}$$

$$J_{-\nu}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\Gamma(n-\nu+1)} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2n-\nu}. \tag{A.2.4b}$$

Les fonctions $J_\nu(\xi)$ et $J_{-\nu}(\xi)$ sont deux solutions linéairement indépendantes de l'équation de Bessel, sauf dans le cas $\nu = m$, un entier. Toutefois, afin d'écrire la solution la plus générale possible, on cherche une combinaison de deux fonctions linéairement indépendantes pour tout ν. En appliquant la méthode de Fröbenius, on trouve comme fonction linéairement indépendante la fonction de Bessel de seconde espèce (parfois appelée fonction de Weber ou fonction de Neumann), définie comme

$$Y_\nu(\xi) \equiv \frac{(\cos\nu\pi)J_\nu(\xi) - J_{-\nu}(\xi)}{\sin\nu\pi}. \tag{A.2.5}$$

Dans le cas $\nu = m$, cette équation est une forme indéterminée, mais en évaluant la limite de façon appropriée, on trouve une expression pour les fonctions $Y_m(\xi)$. La solution la plus générale de l'équation de Bessel (A.1.7), pour tout ν, est donc bien donnée par (A.1.8).

A.2.2 Développements asymptotiques et fonctions de Hankel

Deux développements asymptotiques des fonctions de Bessel sont particulièrement utiles. Pour $\xi \gg |m^2 - 1/4|$, on trouve [1]

$$J_m(\xi) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \cos\left(\xi - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{A.2.6a}$$

$$Y_m(\xi) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \sin\left(\xi - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{A.2.6b}$$

Dans le cadre de l'étude de la propagation d'ondes dans des milieux diélectriques, il est utile de disposer de solutions de l'équation de Bessel qui modélisent des ondes planes. D'après (A.2.6), les fonctions $J_m(\xi)$ et $Y_m(\xi)$ correspondent à des ondes stationnaires. Notons toutefois que la formule d'Euler ($e^{i\xi} = \cos\xi + i\sin\xi$) suggère la définition naturelle d'une nouvelle base complexe comme solution de l'équation Bessel. On définit les fonctions de Hankel de première et de seconde espèce, respectivement, de la façon suivante

$$H_\nu^{(+)}(\xi) \equiv J_\nu(\xi) + iY_\nu(\xi) \tag{A.2.7a}$$

$$H_\nu^{(-)}(\xi) \equiv J_\nu(\xi) - iY_\nu(\xi). \tag{A.2.7b}$$

Une solution générale de l'équation de Bessel peut ainsi s'écrire

$$\mathcal{R}(\xi) = AH_\nu^{(+)}(\xi) + BH_\nu^{(-)}(\xi) \tag{A.2.8}$$

et les développements asymptotiques suivants sont obtenus de (A.2.6)

$$H_m^{(+)}(\xi) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \exp\left[+i\left(\xi - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right] \tag{A.2.9a}$$

$$H_m^{(-)}(\xi) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \exp\left[-i\left(\xi - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right] \tag{A.2.9b}$$

développements correspondant bien à des ondes planes. Cette solution peut être utilisée au lieu de (A.1.10) lorsque la situation physique le requiert.

A.2.3 Relations de récurrence

Les fonctions de Bessel satisfont les relations de récurrence suivantes [1]

$$\mathcal{F}_{\nu-1}(\xi) + \mathcal{F}_{\nu+1}(\xi) = \frac{2\nu}{\xi}\mathcal{F}_\nu(\xi) \tag{A.2.10a}$$

$$\mathcal{F}_{\nu-1}(\xi) - \mathcal{F}_{\nu+1}(\xi) = 2\mathcal{F}'_\nu(\xi) \tag{A.2.10b}$$

$$\mathcal{F}'_\nu(\xi) = \mathcal{F}_{\nu-1}(\xi) - \frac{\nu}{\xi}\mathcal{F}_\nu(\xi) \tag{A.2.10c}$$

$$\mathcal{F}'_\nu(\xi) = -\mathcal{F}_{\nu+1}(\xi) + \frac{\nu}{\xi}\mathcal{F}_\nu(\xi) \tag{A.2.10d}$$

où $\mathcal{F}$ dénote $J, Y, H^{(+)}, H^{(-)}$ ou une combinaison linéaire de ces fonctions. Les coefficients de ladite combinaison linéaire doivent être indépendants de l'argument ξ et de l'ordre ν.

A.2.4 Comportement asymptotique des résonances

Il est également possible d'obtenir une expression asymptotique de la position des résonances d'un cercle diélectrique dans le cas $kR \gg m$, ce qui se traduit par des résonances larges, situées à l'extérieur du puits de potentiel. L'équation caractéristique des résonances (2.2.10) peut être réécrite à l'aide de la relation (A.2.10d) comme

$$\eta_{12} J_{m+1}(u_1) H_m^{(+)}(u_2) = J_m(u_1) H_{m+1}^{(+)}(u_2). \tag{A.2.11}$$

La substitution des relations asymptotiques et (A.2.6a) et (A.2.9a) permet de réécrire

$$\eta_{12} \tan\left(u_1 - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = -i \tag{A.2.12}$$

ou encore

$$u_1 - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4} = \tan^{-1}\left(\frac{-i}{\eta_{12}}\right). \tag{A.2.13}$$

D'après la relation **(4.4.39)** de la référence [1], on trouve

$$u_1 - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4} = j\pi + \frac{i}{2}\ln\left[\frac{|\eta_{12}-1|}{\eta_{12}+1}\right]. \tag{A.2.14}$$

En utilisant la définition $\eta_{12} = n_1/n_2$ (n_2/n_1) en polarisation TM (TE), on trouve finalement

$$\mathrm{Re}(kR) \sim \frac{\pi}{n_1}\left(\frac{m}{2} + j + \frac{1}{4}\right) \tag{A.2.15a}$$

$$\mathrm{Im}(kR) \sim \frac{1}{2n_1}\ln\left(\frac{|n_1-n_2|}{n_1+n_2}\right). \tag{A.2.15b}$$

Ainsi, dans ce régime particulier, la partie imaginaire du nombre d'onde est toujours négative et indépendante des nombres quantiques m et j. Il est surtout remarquable que la position des résonances soit indépendante de la polarisation (η_{12} n'apparaît pas dans les expressions finales). Une explication physique de cette indépendance est le fait que l'interface de la cavité paraît plane aux yeux de l'onde électromagnétique dans le régime $kR \gg m$, ce qui n'entraîne aucune différence entre une onde incidente polarisée TM ou une onde incidente polarisée TE.

A.3 Domaines concentriques

L'équation caractéristique des résonances d'un système constitué de j interfaces diélectriques circulaires concentriques s'écrit

$$\det\left[\boldsymbol{T}(k)\right] = 0 \tag{A.3.1}$$

où $\boldsymbol{T}$ est une matrice de dimension $2j \times 2j$ dont les éléments sont donnés en connectant les solutions (2.2.14) au moyen des conditions (2.1.20a) et (2.1.20b). Au plus quatre éléments par ligne peuvent être non-nuls. Les éléments de matrice non-nuls sont définis comme suit

Lignes 1 et 2 (interface Γ_1)

$$\begin{aligned}
T_{11} &= J_m(u_{11}) \\
T_{12} &= -H_m^{(+)}(u_{21}) \\
T_{13} &= -H_m^{(-)}(u_{21}) \\
T_{21} &= \gamma_1 J_m'(u_{11}) \\
T_{22} &= -\gamma_2 H_m^{(+)\prime}(u_{21}) \\
T_{23} &= -\gamma_2 H_m^{(-)\prime}(u_{21})
\end{aligned} \tag{A.3.2}$$

Lignes $2p-1$ et $2p$ (interface Γ_p, $1 < p < j$)

$$\begin{aligned}
T_{(2p-1)(2p-2)} &= (-1)^{(p-1)} H_m^{(+)}(u_{pp}) \\
T_{(2p-1)(2p-1)} &= (-1)^{(p-1)} H_m^{(-)}(u_{pp}) \\
T_{(2p-1)(2p)} &= (-1)^{p} H_m^{(+)}(u_{(p+1)p}) \\
T_{(2p-1)(2p+1)} &= (-1)^{p} H_m^{(-)}(u_{(p+1)p}) \\
T_{(2p)(2p-2)} &= (-1)^{(p-1)} \gamma_p H_m^{(+)\prime}(u_{pp}) \\
T_{(2p)(2p-1)} &= (-1)^{(p-1)} \gamma_p H_m^{(-)\prime}(u_{pp}) \\
T_{(2p)(2p)} &= (-1)^{p} \gamma_{p+1} H_m^{(+)\prime}(u_{(p+1)p}) \\
T_{(2p)(2p+1)} &= (-1)^{p} \gamma_{p+1} H_m^{(-)\prime}(u_{(p+1)p})
\end{aligned} \tag{A.3.3}$$

Lignes $2j-1$ et $2j$ (interface Γ_j)

$$\begin{aligned}
T_{(2j-1)(2j-2)} &= (-1)^{(j-1)} H_m^{(+)}(u_{jj}) \\
T_{(2j-1)(2j-1)} &= (-1)^{(j-1)} H_m^{(-)}(u_{jj}) \\
T_{(2j-1)(2j)} &= (-1)^{j} H_m^{(+)}(u_{(j+1)j}) \\
T_{(2j)(2j-2)} &= (-1)^{(j-1)} \gamma_j H_m^{(+)\prime}(u_{jj}) \\
T_{(2j)(2j-1)} &= (-1)^{(j-1)} \gamma_j H_m^{(-)\prime}(u_{jj}) \\
T_{(2j)(2j)} &= (-1)^{j} \gamma_{j+1} H_m^{(+)\prime}(u_{(j+1)j})
\end{aligned} \tag{A.3.4}$$

La matrice caractéristique pour p interfaces est toujours une partition composée des $2p$ première lignes et $2p$ premières colonnes d'une matrice caractéristique pour un plus grand nombre d'interfaces. Par exemple, la matrice caractéristique pour une cavité circulaire simple (une seule interface) est une partition 2×2 de la matrice caractéristique 4×4 d'une cavité annulaire.

Annexe B

Fonction de Green et méthode des éléments de frontière

B.1 Formulation intégrale

B.1.1 Fonction de Green libre de l'équation de Helmholtz bidimensionnelle

Cette annexe présente une façon d'obtenir la fonction de Green libre de l'équation de Helmholtz bidimensionnelle [1]. Dans le cas d'une source ponctuelle située à l'origine du plan xy, on cherche la solution de l'équation inhomogène

$$[\nabla^2 + n_j^2 k^2] G_j(x, y; k) = \delta(x)\delta(y). \tag{B.1.1}$$

Les fonctions δ et la fonction de Green peuvent s'écrire sous forme de transformées de Fourier, soit

$$\delta(x)\delta(y) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int\int dp_x \; dp_y e^{ip_x x} e^{ip_y y} \tag{B.1.2a}$$

$$G_j(x, y; k) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int\int dp_x \; dp_y e^{ip_x x} e^{ip_y y} \widetilde{G}_j(p_x, p_y; k). \tag{B.1.2b}$$

La substitution de ces transformées dans (B.1.1) et la comparaison des coefficients de Fourier permettent d'identifier

$$\widetilde{G}_j(p_x, p_y; k) = \frac{1}{n_j^2 k^2 - (p_x^2 + p_y^2)} \tag{B.1.3}$$

1. Pour une introduction aux fonctions de Green, le lecteur intéressé peut consulter [29].

d'où

$$G_j(x,y;k) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\int \frac{dp_x\, dp_y e^{ip_x x} e^{ip_y y}}{n_j^2 k^2 - (p_x^2 + p_y^2)}. \tag{B.1.4}$$

Cette équation peut être réécrite en coordonnées polaires comme

$$G_j(\rho;k) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{pdp}{n_j^2 k^2 - p^2}\int_0^{2\pi} d\theta e^{ip\rho\cos(\theta-\varphi)} \tag{B.1.5}$$

où nous avons substitué $(x,y) \to (\rho,\varphi)$ et $(p_x,p_y) \to (p,\theta)$. Comme la fonction de Green doit être symétrique sous rotation, c'est-à-dire être indépendante de φ, il convient de poser $\varphi = 0$ dans l'expression (B.1.5). La valeur de l'intégrale est en fait la même pour toute valeur de φ. L'identité suivante

$$\int_0^{2\pi} e^{iz\cos\theta} d\theta = 2\pi J_0(z) \tag{B.1.6}$$

permet ensuite d'évaluer l'intégrale angulaire de (B.1.5). On obtient

$$G_j(\rho;k) = -\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \frac{pJ_0(p\rho)dp}{p^2 - n_j^2 k^2}. \tag{B.1.7}$$

Substituons ensuite $\kappa = -in_j k$, de façon telle que $\kappa^2 = -n_j^2 k^2$. L'intégrale à évaluer est ainsi [2]

$$G_j(\rho;k) = -\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \frac{pJ_0(p\rho)dp}{p^2 + \kappa^2} = -\frac{1}{2\pi}K_0(\kappa\rho) \tag{B.1.8}$$

où K_0 est une fonction de Bessel modifiée [34]. La substitution de $K_0(z) = (i\pi/2)H_0^{(+)}(iz)$ dans cette équation permet finalement d'écrire la fonction de Green sous la forme

$$G_j(\rho;k) = -\frac{i}{4}H_0^{(+)}(n_j k\rho) \tag{B.1.9}$$

et la redéfinition de $\rho = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$ mène à la forme (3.1.8).

B.1.2 Valeurs singulières de la fonction de Green

L'objectif de la méthode des éléments de frontière est d'utiliser l'équation (3.1.6) pour déterminer la fonction d'onde aux interfaces diélectriques, une quantité *a priori* inconnue. Il est ainsi nécessaire de prendre la limite $\boldsymbol{r}' \in \partial\Omega_j$ des équations intégrales. Dans ce cas, la fonction de Green et sa dérivée normale possèdent une singularité à $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$. Il est toutefois possible de montrer que ce sont des *singularités intégrables.*

2. Voir [34], équation **6.532(4)**, de même que la méthode de régularisation présentée dans [52].

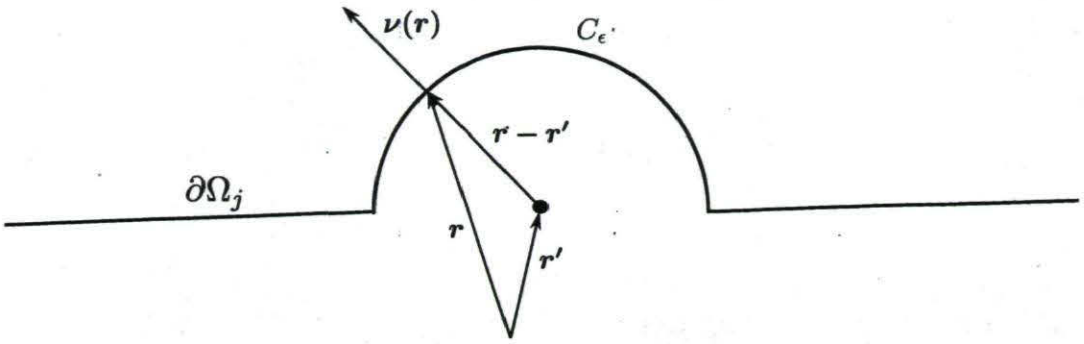


FIGURE B.1 – Contour en demi-cercle permettant d'intégrer la singularité en $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$ de la fonction de Green et de sa dérivée.

Considérons le petit contour C_ϵ en demi-cercle illustré à la figure B.1. En utilisant le développement de la fonction de Hankel pour les petits arguments [3], on trouve de (3.1.8) la forme limite de la fonction de Green

$$\lim_{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to 0} G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) = \frac{1}{2\pi}\ln(n_j k\epsilon) \tag{B.1.10}$$

où nous avons redéfini $\epsilon \equiv |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$, soit le rayon du contour C_ϵ. Dans le cas où la frontière est lisse, c'est-à-dire dans le cas d'une tangente à la courbe uniquement définie, l'intégrale sur le contour C_ϵ s'effectue de $\varphi = 0$ à $\varphi = \pi$. On trouve ainsi

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{C_\epsilon} ds\; G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r}') = \lim_{\epsilon\to 0}\int_0^\pi d\varphi\frac{\epsilon}{2\pi}\ln(n_j k\epsilon)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r}') = 0. \tag{B.1.11}$$

Dans le cas de la dérivée normale de la fonction de Green, on trouve de (3.1.9) la forme limite

$$\lim_{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to 0}\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) = \frac{1}{2\pi\epsilon}. \tag{B.1.12}$$

Notons que $\cos\alpha = 1$ sur l'arc de cercle illustré à la figure B.1. L'intégrale sur le contour C_ϵ est donc

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{C_\epsilon} ds\;\psi(\boldsymbol{r}')\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) = \lim_{\epsilon\to 0}\int_0^\pi d\varphi\;\frac{\psi(\boldsymbol{r}')}{2\pi} = \frac{1}{2}\psi(\boldsymbol{r}'). \tag{B.1.13}$$

La limite $\boldsymbol{r}' \in \Gamma_j$ de (3.1.6) peut ainsi s'exprimer en termes de la valeur principale de Cauchy de l'intégrale. On trouve

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}') = \mathcal{P}\oint_{\partial\Omega_j} ds\;[\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) - G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})]\\ + \lim_{\epsilon\to 0}\int_{C_\epsilon} ds\;[\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) - G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})].\end{aligned} \tag{B.1.14}$$

3. Voir [1], équation **9.1.8**.

En remplaçant l'intégrale sur le contour C_ϵ par sa valeur donnée par (B.1.11) et (B.1.13), on trouve l'équation fondamentale de la méthode BEM, à savoir (3.1.11)

$$\frac{1}{2}\psi(\boldsymbol{r}') = \mathcal{P}\oint_{\partial\Omega_j} ds\ [\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) - G_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})]. \tag{B.1.15}$$

B.1.3 Contribution du contour Γ_∞

On vise à montrer que le contour Γ_∞ (voir fig. 3.1) possède une contribution nulle à un système d'équations intégrales de la forme (3.2.6). Plus précisément, il s'agit de montrer que l'équation suivante est satisfaite

$$I_\infty = \oint_{\Gamma_\infty} ds\ [\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_\infty(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) - G_\infty(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\partial_\perp\psi(\boldsymbol{r})] = 0 \tag{B.1.16}$$

où Γ_∞ est un cercle de rayon $\rho \to \infty$, et $n_\infty = 1$, par simplicité (on suppose que le milieu Ω_J, qui englobe tous les autres milieux et est ouvert vers l'infini, est d'indice $n_J = n_\infty$). La preuve passe par le développement asymptotique de la fonction de Green (3.1.8), qui peut être obtenu de (A.2.9a), soit

$$\lim_{\xi\to\infty} G_\infty(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \sim -\frac{1+i}{4\sqrt{\pi\xi}}e^{i\xi} \tag{B.1.17}$$

où $\xi \equiv k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = k\sqrt{\rho^2+\rho'^2-2\rho\rho'\cos(\varphi-\varphi')}$. En utilisant l'approximation binomiale, on peut réécrire

$$\lim_{\rho\to\infty} \xi \sim k[\rho - \rho'\cos(\varphi-\varphi')]. \tag{B.1.18}$$

On substitue cette valeur de ξ dans l'argument de l'exponentielle de (B.1.17), alors qu'au dénominateur il est possible de négliger le terme en ρ', ce qui mène à

$$\lim_{\rho\to\infty} G_\infty(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \sim g(\varphi,\varphi')\frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{\rho}} \tag{B.1.19}$$

où

$$g(\varphi,\varphi') = \frac{1+i}{4\sqrt{\pi k}}e^{-ik\rho'\cos(\varphi-\varphi')}. \tag{B.1.20}$$

On constate que (B.1.19) satisfait la condition d'émission de Sommerfeld (2.1.22) de la même façon que ψ. Ce comportement asymptotique de ψ est hérité directement de la fonction de Green. Comme $\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ et $G_\infty(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)$ apparaissent de façon antisymétrique dans (B.1.16), il en découle que $I_\infty = 0$.

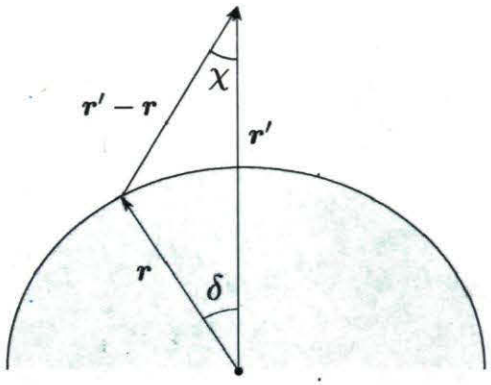


FIGURE B.2 – Application de l'identité de Graf à l'évaluation du champ lointain

B.2 Méthode des éléments de frontière

B.2.1 Évaluation du champ lointain

Nous visons maintenant l'obtention d'une méthode de calcul du profil d'émission au champ lointain. Dénotons le milieu s'étendant vers l'infini comme Ω_J, avec un indice de réfraction homogène $n_J = 1$. L'évaluation du champ lointain de modes résonants ($r' \to \infty$, $\tan\chi = 0$) peut être effectuée à l'aide de la seconde identité de Green.

$$\psi(\boldsymbol{r'}) = \oint_{\partial\Omega_J} ds\, [\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_J(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'};k) - G_J(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'};k)\phi(\boldsymbol{r})]. \tag{B.2.1}$$

Tel que démontré à la section (B.1.3), le contour Γ_∞ ne contribue pas à l'intégrale (B.2.1) puisque la fonction de Green satisfait la condition d'émission de Sommerfeld (2.1.22). Il est ainsi possible de remplacer l'intégrale sur $\partial\Omega_J$ par une somme de contributions sur le nombre d'interfaces entre Ω_J et l'ensemble des autres milieux Ω_m, soit

$$\psi(\boldsymbol{r'}) = \sum_{m\neq J} \oint_{\Gamma^{Jm}} ds\, [\psi(\boldsymbol{r})\partial_\perp G_J(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'};k) - G_J(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'};k)\phi(\boldsymbol{r})]. \tag{B.2.2}$$

D'après la condition d'émission de Sommerfeld (2.1.22), la forme du champ dans le cas $r' \to \infty$ est

$$\psi(r',\varphi') = g(\varphi')\frac{e^{ikr'}}{\sqrt{kr'}}. \tag{B.2.3}$$

Afin de pouvoir s'affranchir du comportement exponentiel, nous utilisons l'identité de Graf[4] afin de réécrire (voir fig. B.2)

$$H_\nu^{(+)}(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|)e^{i\nu\chi} = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} H_{\nu+\mu}^{(+)}(kr')J_\mu(k\boldsymbol{r})e^{i\mu\delta} \tag{B.2.4}$$

4. Voir [1], équation **(9.1.79)**

où $\delta = \angle(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ et

$$\tan\chi = \frac{r\sin\delta}{r' - r\cos\delta}. \tag{B.2.5}$$

Dans le cas $r' \to \infty$, $\tan\chi = 0$, et l'utilisation des développements asymptotiques (A.2.9a) mène à

$$\lim_{|\boldsymbol{r}'|\to\infty} H_0^{(+)}(n_j k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi k r'}} e^{i(kr' - \frac{\pi}{4})} f(r,\delta) \tag{B.2.6}$$

$$\lim_{|\boldsymbol{r}'|\to\infty} H_1^{(+)}(n_j k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi k r'}} e^{i(kr' - \frac{3\pi}{4})} f(r,\delta) \tag{B.2.7}$$

$$\tag{B.2.8}$$

où

$$f(r,\delta) = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} J_\mu(kr) e^{i\mu(\delta - \frac{\pi}{2})}. \tag{B.2.9}$$

Nous utilisons ensuite les définitions usuelles

$$G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) = -\frac{i}{4} H_0^{(+)}(n_j k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \tag{B.2.10}$$

$$\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) = \cos\alpha \frac{i n_j k}{4} H_1^{(+)}(n_j k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \tag{B.2.11}$$

et nous discrétisons les interfaces

$$\oint_{\Gamma^{Jm}} \to -\sum_l \Delta s_l^{Jm}. \tag{B.2.12}$$

ce qui permet de réécrire (B.2.2) sous la forme

$$\lim_{|\boldsymbol{r}'|\to\infty} \psi(\boldsymbol{r}') = -\sum_{m\neq J} \frac{1}{4}\sqrt{\frac{2}{\pi k r'}} e^{ikr'} \sum_l \left(\phi_l e^{\frac{i\pi}{4}} + k\cos\alpha_l \psi_l e^{-\frac{i\pi}{4}}\right) \Delta s_l^{Jm} f(r_l, \delta_l). \tag{B.2.13}$$

On obtient aisément

$$g(\varphi') = -\sum_{m\neq J} \frac{1}{4}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_l \left(\phi_l e^{\frac{i\pi}{4}} + k\cos\alpha_l \psi_l e^{-\frac{i\pi}{4}}\right) \Delta s_l f(r, \delta_l) \tag{B.2.14}$$

où

$$\delta_l = \arctan\left(\frac{y_l}{x_l}\right) - \varphi' \tag{B.2.15}$$

et

$$\cos\alpha_l = \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}_l) \cdot \frac{\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_l}{|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_l|} \simeq \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}_l) \cdot \frac{\boldsymbol{r}'}{r'} = \nu_x(\boldsymbol{r}_l)\cos\varphi + \nu_y(\boldsymbol{r}_l)\sin\varphi. \tag{B.2.16}$$

La dernière égalité utilise le fait que dans la limite $|\boldsymbol{r}'| \to \infty$, les segments $\boldsymbol{r}'$ et $\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_l$ sont à toutes fins pratiques parallèles.

B.2.2 Éléments de matrice

Nous obtenons dans cette section les équations (3.2.5). Les matrices $\boldsymbol{B}^{jmp}$ et $\boldsymbol{C}^{jmp}$ sont des matrices $N_{jm} \times N_{jp}$, avec N_{jm} le nombre de points de discrétisation sur la frontière Γ^{jm}. Nous présentons ici le calcul détaillé des éléments de matrice B_{il}^{jmp} et C_{il}^{jmp}.

Matrice $\boldsymbol{B}^{jmp}$. Dans le cas de la matrice $\boldsymbol{B}^{jmp}$, on trouve par définition

$$B_{il}^{jmp} = \Delta s_l \int_{-1/2}^{1/2} d\xi \; \mathcal{B}_j(s_i, s_l + \xi \Delta s_l) \tag{B.2.17}$$

où $\mathcal{B}_j(s', s) = -2G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}; k)$, $s_i \in \Gamma_i^{jp}$ et $s_l \in \Gamma_l^{jm}$. Dans le cas où la frontière est suffisamment discrétisée, il est possible d'approximer l'intégrale sur un élément de frontière à l'aide de la valeur de la fonction de Green au point médian de l'intervalle d'intégration de longueur Δs_l [28]. On trouve ainsi

$$B_{il}^{jmp} = \frac{i\Delta s_l}{2} H_0^{(+)}(n_j k r_{il}) \tag{B.2.18}$$

où $r_{il} = |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_l|$, soit la distance entre les points médians des éléments de frontière Γ_i^{jp} et Γ_l^{jm}. L'élément de matrice diagonal de B^{jmm} requiert une attention spéciale en raison de la singularité en $\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_l$. On cherche à évaluer la valeur principale de Cauchy de l'intégrale, soit

$$\begin{aligned} B_{ll}^{jmm} &= \mathcal{P} \int_{-1/2}^{1/2} d\xi \; \mathcal{B}_j(s_l, s_l + \xi \Delta s_l) \\ &= \Delta s_l \int_{-1/2}^{0} d\xi \; \mathcal{B}_j(s_l, s_l + \xi \Delta s_l) + \Delta s_l \int_{0}^{1/2} d\xi \; \mathcal{B}_j(s_l, s_l + \xi \Delta s_l). \end{aligned} \tag{B.2.19}$$

Le développement de la fonction de Green pour les petits arguments peut s'écrire [5]

$$H_0^{(+)}(n_j k|r|) = \left[\frac{2i}{\pi} \ln\left(\frac{n_j k|r|}{2}\right) + 1 + \frac{2i\varsigma}{\pi}\right] \tag{B.2.20}$$

où ς est la constante d'Euler-Mascheroni (0.57721...). En utilisant ce développement de même que le changement de variable $\tau = 2\xi$, on peut réécrire l'élément diagonal comme

$$\begin{aligned} B_{ll}^{jmm} &= \frac{\Delta s_l}{\pi} \int_0^1 d\tau \left[- \ln \tau - \ln\left(\frac{n_j k \Delta s_l}{4}\right) + \frac{i\pi}{2} - \varsigma \right] \\ &= \frac{\Delta s_l}{\pi} \left[1 - \ln\left(\frac{n_j k \Delta s_l}{4}\right) + \frac{i\pi}{2} - \varsigma \right]. \end{aligned} \tag{B.2.21}$$

5. Voir [1], équations **9.1.13** et **9.1.14**.

Ce résultat est identique à celui utilisé par Wiersig [91]. Une forme plus précise est présentée par Chen [18], mais la forme obtenue offre une précision numérique adéquate pour une discrétisation suffisamment fine des interfaces. En résumé, les éléments de $\boldsymbol{B}^{jmp}$ sont définis comme

$$\boxed{B_{il}^{jmp} = \begin{cases} \dfrac{i\Delta s_l}{2} H_0^{(+)}(n_j k r_{il}) \\ \dfrac{\Delta s_l}{\pi}\left[1 - \ln\left(\dfrac{n_j k \Delta s_l}{4}\right) + \dfrac{i\pi}{2} - \varsigma\right] \quad (i = l \;\&\; m = p). \end{cases}} \tag{B.2.22}$$

Matrice $\boldsymbol{C}^{jmp}$. Les éléments de la matrice $\boldsymbol{C}^{jmp}$ s'évaluent de façon similaire. On trouve

$$C_{il}^{jmp} = \Delta s_l \int_{-1/2}^{1/2} d\xi \; \mathcal{C}_j(s_i, s_l + \xi \Delta s_l) \tag{B.2.23}$$

où $\mathcal{C}_j(s', s) = 2\partial_\perp G_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) - \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. On trouve également

$$C_{il}^{jmp} = \frac{i n_j k \Delta s_l}{2} \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}_l) \cdot \frac{\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{r}_i}{r_{il}} H_1^{(+)}(n_j k r_{il}). \tag{B.2.24}$$

Dans le cas de l'élément diagonal C_{ll}^{jmm}, on trouve que le produit scalaire entre le vecteur normal et le vecteur $\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{r}_i$ tend linéairement vers zéro lorsque $\boldsymbol{r}_l \to \boldsymbol{r}_i$. Seule la fonction delta de Dirac en $\boldsymbol{r}_l = \boldsymbol{r}_i$ contribue. Les éléments de matrice de $\boldsymbol{C}^{jmp}$ sont donc

$$\boxed{C_{il}^{jmp} = \begin{cases} \dfrac{i n_j k \Delta s_l}{2} \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{r}_l) \cdot \dfrac{\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{r}_i}{r_{il}} H_1^{(+)}(n_j k r_{il}) \\ -1 \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (i = l \;\&\; m = p). \end{cases}} \tag{B.2.25}$$

B.2.3 Problème aux valeurs propres non-linéaire

La recherche des modes résonants de structures optiques peut se traduire par la solution d'un *problème aux valeurs propres non-linéaire*. Ce problème est défini comme suit [6].

Définition B.2.1 (Problème aux valeurs propres non-linéaire). *Soit une matrice $\boldsymbol{M}(k)$ de dimension $m \times n$ dont les éléments sont des fonctions analytiques du nombre complexe*

6. Une revue des algorithmes permettant de solutionner le problème aux valeurs propres non-linéaire peut être trouvée dans [74].

k. La solution du problème aux valeurs propres non-linéaire est l'ensemble des valeurs de k et des vecteurs $\boldsymbol{x}$ et $\boldsymbol{y}$ tels que

$$\boldsymbol{y}^{\dagger}\boldsymbol{M}(k) = \boldsymbol{M}(k)\boldsymbol{x} = 0. \tag{B.2.26}$$

où $\dagger$ dénote le conjugué hermitique. La solution de ce problème est le ***sous-espace nul*** *de $\boldsymbol{M}(k)$.*

Afin de déterminer le sous-espace nul de $\boldsymbol{M}(k)$, qui peut être en général non-carrée, il sera utile de faire appel à la décomposition en valeurs singulières.

Définition B.2.2 (Décomposition en valeurs singulières). *Toute matrice $\boldsymbol{M}$ complexe de dimension $m \times n$ peut être factorisée comme*

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{T} \tag{B.2.27}$$

où

- *$\boldsymbol{U}$ est une matrice unitaire de dimension $m \times m$ dont les colonnes sont les vecteurs propres de $\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{\dagger}$,*
- *$\boldsymbol{V}$ est une matrice unitaire de dimension $n \times n$ dont les colonnes sont les vecteurs propres de $\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M}$,*
- *$\boldsymbol{D}$ est une matrice $m \times n$ dont les éléments non-nuls sont diagonaux et égaux à la valeur absolue des valeurs propres complexes de $\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M}$.*

L'utilité de la décomposition en valeurs singulières est manifeste dans le cas de la détermination du sous-espace nul de $\boldsymbol{M}(k)$ puisque, pour chaque valeur de k définissant le sous-espace nul de $\boldsymbol{M}(k)$, il existe au moins une valeur singulière σ_i telle que

$$\boldsymbol{M}(k)\boldsymbol{x} = \sigma_i \boldsymbol{x} = 0. \tag{B.2.28}$$

Ainsi, une stratégie permettant de déterminer le sous espace-nul de $\boldsymbol{M}(k)$ est de suivre l'évolution de ses valeurs singulières dans le plan complexe. Le vecteur propre $\boldsymbol{x}$ associé est simplement la (les) colonne(s) de $\boldsymbol{V}$ correspondant à $\sigma_i = 0$. Par ailleurs, les valeurs singulières étant toujours des nombres réels positifs, il suffit essentiellement de suivre l'évolution de la valeur singulière *minimale* de $\boldsymbol{M}(k)$.

La décomposition en valeurs singulières est généralement calculée de façon numérique à l'aide d'une variation de la décomposition QR utilisée pour déterminer les valeurs propres d'une matrice [33].

Annexe C

Guide d'onde à plaques parallèles et méthode de l'indice effectif

Dans la présente annexe sont obtenues les équations régissant la propagation d'ondes électromagnétiques dans un guide d'onde à plaques parallèles, de même que les relations de dispersion associées [1]. Nous considérons un guide tel que l'indice du cœur est donné par n_1 et l'indice du substrat (milieu extérieur) par n_0, avec $2a$ l'épaisseur du cœur.

C.1 Équations d'onde

Les équations de Maxwell d'intérêt pour la propagation dans les guides d'onde s'écrivent [2]

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{n^2}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \end{aligned} \tag{C.1.1}$$

Un guide à plaques parallèles se caractérise par l'absence de dépendance des champs électrique et magnétique sur la variable y (voir figure C.1). L'axe y est perpendiculaire à l'axe de propagation (l'axe x) et à la droite reliant les plaques (l'axe z). Dans ce cas, il est possible d'écrire deux équations d'onde correspondant à deux polarisations indépendantes, TE et TM. Substituons la solution suivante dans les équations (C.1.1)

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}(z)e^{i(\beta x - \omega t)} \\ \mathbf{H} &= \mathbf{H}(z)e^{i(\beta x - \omega t)}. \end{aligned} \tag{C.1.2}$$

1. L'analyse ici présentée est tirée du livre de K. Okamoto [65]
2. Le système d'unités électromagnétiques de Heaviside-Lorentz est utilisé [27]

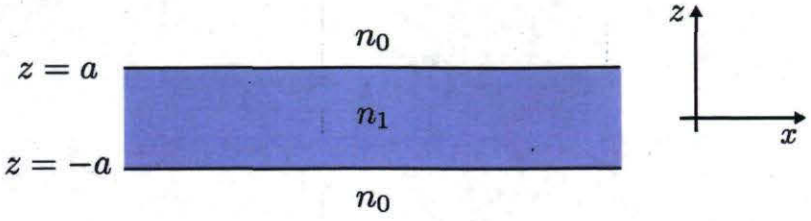


FIGURE C.1 – Géométrie d'un guide d'onde à plaques parallèles

En écrivant les rotationnels de façon explicite et en utilisant $\omega = kc$, on trouve les six équations suivantes

$$ikH_x = -\frac{dE_y}{dz} \tag{C.1.3a}$$

$$ikH_y = \frac{dE_x}{dz} - i\beta E_z \tag{C.1.3b}$$

$$ikH_z = i\beta E_y \tag{C.1.3c}$$

$$-ikn^2 E_x = -\frac{dH_y}{dz} \tag{C.1.3d}$$

$$-ikn^2 E_y = \frac{dH_x}{dz} - \beta H_z \tag{C.1.3e}$$

$$-ikn^2 E_z = i\beta H_y. \tag{C.1.3f}$$

L'équation des modes TM peut être trouvée en dérivant d'abord (C.1.3a) par rapport à z pour obtenir

$$\frac{d^2 E_y}{dz^2} = -ik\frac{dH_x}{dz}. \tag{C.1.4}$$

Substituons la dérivée de H_x par sa valeur donnée par (C.1.3e). On obtient

$$\frac{d^2 E_y}{dz^2} = k\beta H_z - k^2 n^2 E_y. \tag{C.1.5}$$

Remplaçons finalement H_z par sa valeur donnée par (C.1.3c). On obtient ainsi l'équation d'onde régissant les modes TM (puisque $E_y \propto H_z$)

$$\frac{d^2 E_y}{dz^2} + (k^2 n^2 - \beta^2) E_y = 0. \tag{C.1.6}$$

Un travail similaire avec les 3 équations restantes donne l'équation d'onde pour les modes TE (puisque $H_y \propto E_z$)

$$\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{n^2}\frac{dH_y}{dz}\right) + \left(k^2 - \frac{\beta^2}{n^2}\right) H_y = 0. \tag{C.1.7}$$

Puisque l'indice de réfraction du guide est supposé uniforme, l'équation des modes TE prend la même forme que l'équation des modes TM, soit

$$\frac{d^2 H_y}{dz^2} + (k^2 n^2 - \beta^2) H_y = 0. \tag{C.1.8}$$

C.2 Relations de dispersion

Cherchons maintenant une solution pour les modes TE (équation C.1.6). Comme les modes guidés sont confinés dans le cœur et décroissent exponentiellement dans le substrat, on trouve la solution suivante pour E_y (ϖ est une phase à déterminer)

$$E_y = \begin{cases} A\cos(u-\varpi)\exp\left[-w\left(\frac{z}{a}-1\right)\right] & (z>a) \\ A\cos\left(\frac{uz}{a}-\varpi\right) & (-a\leqslant z\leqslant a) \\ A\cos(u+\varpi)\exp\left[w\left(\frac{z}{a}+1\right)\right] & (z<-a) \end{cases} \tag{C.2.1}$$

avec u et w des constantes sans dimension correspondant respectivement à la propagation et à l'atténuation dans la direction z, et définies comme

$$\begin{aligned} u &= a\sqrt{k^2n_1^2-\beta^2} \\ w &= a\sqrt{\beta^2-k^2n_0^2}. \end{aligned} \tag{C.2.2}$$

On constate que cette solution est continue aux interfaces du guide. Les constantes u et w ne sont pas indépendantes et sont simplement reliées à la fréquence normalisée v de la façon suivante

$$u^2+w^2 = k^2a^2(n_1^2-n_0^2) \equiv v^2. \tag{C.2.3}$$

Écrivons maintenant la dérivée du champ électrique par rapport à z.

$$\frac{dE_y}{dz} = \begin{cases} -\frac{Aw}{a}\cos(u-\varpi)e^{-w(z/a-1)} & (z>a) \\ -\frac{Au}{a}\sin(uz/a-\varpi) & (-a\leqslant z\leqslant a) \\ \frac{Aw}{a}\cos(u+\varpi)e^{w(z/a+1)} & (z<-a). \end{cases} \tag{C.2.4}$$

Afin de fixer les valeurs des paramètres inconnus u et ϖ, il suffit d'imposer une condition de continuité de H_x, en $z=\pm a$. Ceci revient simplement à poser la continuité de la dérivée normale $\frac{dE_y}{dz}$ de part et d'autre des interfaces diélectriques, et mène aux équations

$$\begin{aligned} u\sin(u+\varpi) &= w\cos(u+\varpi) \\ u\sin(u-\varpi) &= w\cos(u-\varpi). \end{aligned} \tag{C.2.5}$$

On peut écrire ce résultat comme

$$\tan(u+\varpi) = \tan(u-\varpi) = w/u \tag{C.2.6}$$

ce qui fixe la phase $\varpi = m\pi/2$ avec m nul ou entier positif, de même que les relations de dispersion pour les modes TE_m

$$w = u\tan\left(u-\frac{m\pi}{2}\right). \tag{C.2.7}$$

Un travail similaire peut être effectué pour la polarisation TM. La procédure consiste à écrire une solution pour H_y de la forme (C.2.1). La continuité de E_x en $z = \pm a$ (ou encore de $\frac{1}{n^2}\frac{dH_y}{dz}$) est ensuite imposée, et on obtient de façon similaire

$$\begin{aligned} n_0^2 u \sin(u + \varpi) &= n_1^2 w \cos(u + \varpi) \\ n_0^2 u \sin(u - \varpi) &= n_1^2 w \cos(u - \varpi) \end{aligned} \tag{C.2.8}$$

$$\left(\frac{n_1}{n_0}\right)^2 w = u \tan\left(u - \frac{m\pi}{2}\right). \tag{C.2.9}$$

La relation de dispersion de la constante de propagation u pour le mode d'indice m d'un guide d'onde à plaques parallèles peut ainsi être écrite de façon compacte comme

$$\boxed{\eta_g \sqrt{v^2 - u^2} = u \tan\left(u - \frac{m\pi}{2}\right) \qquad m = 0, 1, 2...} \tag{C.2.10}$$

où $\eta_g = 1$ (n_1^2/n_0^2) en polarisation TE (TM).

C.2.1 Fréquence de coupure

La condition de coupure du mode m est donnée par $w = 0$ et $u = v$. La relation (C.2.10) donne dans ce cas la condition de coupure (valide pour les deux polarisations)

$$v_m = \frac{m\pi}{2}. \tag{C.2.11}$$

La condition pour une opération monomode est ainsi simplement une borne supérieure de la fréquence normalisée du guide d'onde, à savoir

$$v \leq \frac{\pi}{2} \tag{C.2.12}$$

ou encore

$$ka \leq \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sqrt{n_1^2 - n_0^2}}. \tag{C.2.13}$$

C.3 Méthode de l'indice effectif

La méthode de l'indice effectif est une approximation bidimensionnelle permettant de tenir compte de l'épaisseur finie D d'une structure optique mince, par exemple une cavité intégrée. Il s'agit simplement d'approximer la structure optique comme un guide d'onde diélectrique à plaques parallèles dans la direction z. Cette approximation est d'autant plus valide que l'étendue du milieu est grande par rapport à sa hauteur

$D = 2a$. Une fois la constante de propagation transverse β déterminée à l'aide de l'équation (C.2.2), l'indice effectif est simplement

$$n_e = \frac{\beta}{k} = \sqrt{n_1^2 - \left(\frac{u}{ka}\right)^2}. \tag{C.3.1}$$

L'utilisation de la relation de dispersion (C.2.10) mène à une équation implicite pour l'indice effectif, identique à celle retrouvée dans [11]

$$ka = \frac{1}{\sqrt{n_1^2 - n_e^2}} \left[\arctan\left(\eta_g \sqrt{\frac{n_e^2 - n_0^2}{n_1^2 - n_e^2}} \right) + \frac{m\pi}{2} \right]. \tag{C.3.2}$$

L'indice effectif en fonction de la valeur de ka est tracé à la figure C.2, ce qui permet d'illustrer le régime de validité de l'approximation de l'indice effectif. Pour une valeur très grande de ka (milieu semi-infini), l'émission devient multimode mais l'indice effectif de chaque branche tend vers l'indice réel de la cavité, ce qui correspond par exemple à une fibre optique. Dans le cas d'une structure très mince, $n_e \sim n_0$ et aucun confinement n'est possible. La meilleure validité de l'approximation est obtenue légèrement en deçà de la fréquence de coupure du premier mode excité, soit

$$ka \lesssim \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sqrt{n_1^2 - n_0^2}}. \tag{C.3.3}$$

Il est utile de quantifier l'extension de l'onde évanescente du mode guidé à partir de la valeur de l'indice effectif. À partir de l'équation (C.2.1), nous définissons la *longueur d'évanescence caractéristique* L_e d'un guide d'onde à plaques parallèles comme

$$L_e \equiv \frac{a}{w} = \frac{1}{\sqrt{\beta^2 - k^2 n_0^2}} = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{n_e^2 - n_0^2}}. \tag{C.3.4}$$

Cette longueur est une mesure de la profondeur de pénétration de l'onde évanescente dans le milieu environnant et dépend de l'indice effectif n_e, donc est différente pour chaque mode guidé. Comme n_e augmente avec l'ordre m du mode guidé, le mode fondamental est celui caractérisé par la plus grande longueur d'évanescence caractéristique. Il s'agit du mode le moins confiné, donc le plus susceptible de se coupler fortement aux modes de structures extérieures.

À titre d'exemple, pour un guide dont les paramètres sont ($n_1 = 1.5, n_0 = 1, D = 800$ nm), la longueur d'évanescence caractéristique du mode fondamental pour trois longueurs d'onde typiques est

$$\begin{aligned} L_e(\lambda = 1550 \text{ nm}) &\simeq 253 \text{ nm} \\ L_e(\lambda = 1064 \text{ nm}) &\simeq 168 \text{ nm} \\ L_e(\lambda = 632 \text{ nm}) &\simeq 94 \text{ nm}. \end{aligned} \tag{C.3.5}$$

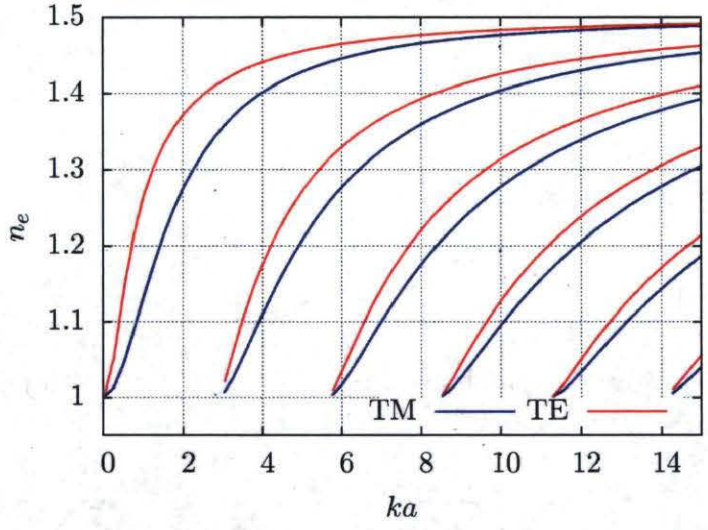


FIGURE C.2 – Valeurs de l'indice effectif en fonction de l'épaisseur du guide d'onde pour $0 \leq m \leq 5$ ($n_1 = 1.5, n_0 = 1$). Les branches sont en ordre croissant de m de gauche à droite.

Bibliographie

[1] M. Abramowitz et I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions : with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables (1st Edition)*, Dover Publications, juin 1970.

[2] G. Arfken et H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists (5th edition)*, Academic Press, 2001.

[3] A. M. Armani, R. P. Kulkarni, S. E. Fraser, R. C. Flagan et K. J. Vahala, *Label-free, single-molecule detection with optical microcavities*, Science, 317 (2007), p. 783–787.

[4] S. Arnold, M. Khoshsima, I. Teraoka, S. Holler et F. Vollmer, *Shift of whispering-gallery modes in microspheres by protein adsorption*, Opt. Lett., 28 (2003), p. 272–274.

[5] S. Arnold, S. I. Shopova et S. Holler, *Whispering gallery mode bio-sensor for label-free detection of single molecules : thermo-optic vs. reactive mechanism*, Opt. Express, 18 (2010), p. 281–287.

[6] A. Bäcker, R. Ketzmerick, S. Löck, J. Wiersig et M. Hentschel, *Quality factors and dynamical tunneling in annular microcavities*, Phys. Rev. A, 79 (2009), p 063804.

[7] A. Bäcker, F. Steiner et P. Stifter, *Spectral statistics in the quantized cardioid billiard*, Phys. Rev. E, 52 (1995), p. 2463–2472.

[8] W. L. Barnes, A. Dereux et T. W. Ebbesen, *Surface plasmon subwavelength optics*, Nature, 424 (2003), p. 824–830.

[9] J. P. Berenger, *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, J. Comput. Phys., 114 (1994), p. 185–200.

[10] M. V. Berry, *Regularity and chaos in classical mechanics, illustrated by three deformations of a circular billiard*, Eur. J. Phys., 2 (1981), p. 91–102.

[11] S. Bittner, B. Dietz, M. M. Oglu, P. O. Iriarte, A. Richter et F. Schäfer, *Experimental test of a two-dimensional approximation for dielectric microcavities*, Phys. Rev. A, 80 (2009), p. 023825+.

[12] S. V. Boriskina, *Spectrally engineered photonic molecules as optical sensors with enhanced sensitivity : a proposal and numerical analysis*, J. Opt. Soc. Am. B, 23 (2006), p. 1565–1573.

[13] S. V. Boriskina, T. M. Benson, P. Sewell et A. I. Nosich, *Highly efficient design of spectrally engineered whispering-gallery-mode microlaser resonators*, Opt. Quantum Electron., 35 (2003), p. 545–559.

[14] S. V. Boriskina, P. Sewell, T. M. Benson et A. I. Nosich, *Accurate simulation of two-dimensional optical microcavities with uniquely solvable boundary integral equations and trigonometric Galerkin discretization*, J. Opt. Soc. Am. A, 21 (2004), p. 393–402.

[15] A. J. Burton et G. F. Miller, *The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems*, Proc. R. Soc. London, Ser. A, 323 (1971), p. 201–210.

[16] M. Cai, O. Painter et K. J. Vahala, *Observation of critical coupling in a fiber taper to a silica-microsphere whispering-gallery mode system*, Phys. Rev. Lett., 85 (2000), p. 74–77.

[17] M. I. Cheema et A. G. Kirk, *Accurate determination of the quality factor of axisymmetric resonators by use of a perfectly matched layer.* arXiv :1101.1984v2 [physics.optics], jan. 2011.

[18] G. Chen et J. Zhou, *Boundary Element Methods*, Academic Press, 1992.

[19] J. T. Chen, *Dual integral formulation for determining the acoustic modes of a two-dimensional cavity with a degenerate boundary*, Eng. Anal. Boundary Elem., 21 (1998), p. 105–116.

[20] J. T. Chen, J. H. Lin, S. R. Kuo et S. W. Chyuan, *Boundary element analysis for the Helmholtz eigenvalue problems with a multiply connected domain*, Proc. R. Soc. London, Ser. A, 457 (2001), p. 2521–2546.

[21] J. T. Chen, L. W. Liu et H. K. Hong, *Spurious and true eigensolutions of Helmholtz BIEs and BEMs for a multiply connected problem*, Proc. R. Soc. London, Ser. A, 459 (2003), p. 1891–1924.

[22] A. Chiasera, Y. Dumeige, P. Féron, M. Ferrari, Y. Jestin, G. Nunzi Conti, S. Pelli, S. Soria et G. C. Righini, *Spherical whispering-gallery-mode microresonators*, Laser & Photon. Rev., 4 (2010), p. 457–482.

[23] T. M. Chinowsky, S. D. Soelberg, P. Baker, N. R. Swanson, P. Kauffman, A. Mactutis, M. S. Grow, R. Atmar, S. S. Yee et C. E. Furlong, *Portable 24-analyte surface plasmon resonance instruments for rapid, versatile biodetection*, Biosens. Bioelectron., 22 (2007), p. 2268–2275.

[24] COMSOL, Inc., *COMSOL Multiphysics RF Module User's Guide, version 4.2*, 2011.

[25] B. Crespi, G. Perez et S. J. Chang, *Quantum Poincaré sections for two-dimensional billiards*, Phys. Rev. E, 47 (1993), p. 986–991.

[26] J. A. Curcio et C. C. Petty, *The near infrared absorption spectrum of liquid water*, J. Opt. Soc. Am., 41 (1951), p. 302–302.

[27] E. A. Desloge, *Relation between equations in the international, electrostatic, electromagnetic, Gaussian, and Heaviside-Lorentz systems*, Am. J. Phys., 62 (1994), p. 601–609.

[28] R. Dubertrand, *Deux applications du chaos quantique : étude des fonctions d'ondes aléatoires via SLE et description de cavités diélectriques*, Thèse doctorat, Université Paris Sud - Paris XI, 2008.

[29] D. G. Duffy, *Green's Functions with Applications (1st Edition)*, Chapman & Hall, mai 2001.

[30] L. P. Eisenhart, *Separable systems in euclidean 3-space*, Phys. Rev., 45 (1934), p. 427–428.

[31] A. E. Fomin, M. L. Gorodetsky, I. S. Grudinin et V. S. Ilchenko, *Nonstationary nonlinear effects in optical microspheres*, J. Opt. Soc. Am. B, 22 (2005), p. 459–465.

[32] C. Gmachl, F. Capasso, E. E. Narimanov, J. U. Nöckel, A. D. Stone, J. Faist, D. L. Sivco et A. Y. Cho, *High-power directional emission from microlasers with chaotic resonators*, Science, 280 (1998), p. 1556–1564.

[33] G. Golub et W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, SIAM J. Numer. Anal., 2 (1965), p. 205+.

[34] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products (5th Edition)*, Academic Press, jan. 1994.

[35] M. D. Greenberg, *Advanced Engineering Mathematics (2nd Edition)*, Prentice Hall, jan. 1998.

[36] G. Griffel et S. Arnold, *Synthesis of variable optical filters using meso-optical ring resonator arrays, in* LEOS Conf. Proc., 1997, p. 165+.

[37] N. Guan, S. Habu, K. Takenaga, K. Himeno et A. Wada, *Boundary element method for analysis of holey optical fibers*, J. Lightwave Technol., 21 (2003), p. 1787+.

[38] Z. Guo et H. Quan, *Energy transfer to optical microcavities with waveguides*, J. Heat Transfer, 129 (2007), p. 44–52.

[39] Z. Guo, H. Quan et S. Pau, *Numerical characterization of whispering-gallery mode optical microcavities*, Appl. Opt., 45 (2006), p. 611–618.

[40] T. Harayama et S. Shinohara, *Two-dimensional microcavity lasers*, Laser & Photon. Rev., 5 (2011), p. 247–271.

[41] P. HEIDER, *Computation of scattering resonances for dielectric resonators*, Comput. Math. Appl., 60 (2010), p. 1620–1632.

[42] E. J. HELLER, *Bound-State eigenfunctions of classically chaotic hamiltonian systems : Scars of periodic orbits*, Phys. Rev. Lett., 53 (1984), p. 1515–1518.

[43] M. HENTSCHEL, *Optical microcavities as Quantum-Chaotic model systems : Openness makes the difference !, in* Advances in Solid State Physics, Springer, 2009, p. 293–304.

[44] M. HENTSCHEL ET K. RICHTER, *Quantum chaos in optical systems : The annular billiard*, Phys. Rev. E, 66 (2002), p. 056207+.

[45] V. S. ILCHENKO ET A. B. MATSKO, *Optical resonators with whispering-gallery modes-part II : Applications*, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron., 12 (2006), p. 15–32.

[46] A. IMAMOGLU, *Quantum Computation Using Quantum Dot Spins and Microcavities*, Wiley, 2005, chap. 14, p. 217–227.

[47] J. D. JOANNOPOULOS, R. D. MEADE ET J. N. WINN, *Photonic Crystals : Molding the Flow of Light*, Princeton University Press, juil. 1995.

[48] S. G. JOHNSON, *Notes on perfectly matched layers.* MIT Lecture Notes, oct 2007.

[49] N. JOKERST, M. ROYAL, S. PALIT, L. LUAN, S. DHAR ET T. TYLER, *Chip scale integrated microresonator sensing systems*, J. Biophoton., 2 (2009), p. 212–226.

[50] E. KERRINCKX, L. BIGOT, M. DOUAY ET Y. QUIQUEMPOIS, *Photonic crystal fiber design by means of a genetic algorithm*, Opt. Express, 12 (2004), p. 1990+.

[51] P. A. KNIPP ET T. L. REINECKE, *Boundary-element method for the calculation of electronic states in semiconductor nanostructures*, Phys. Rev. B, 54 (1996), p. 1880–1891.

[52] I. KOSZTIN ET K. SCHULTEN, *Boundary integral method for stationary states of two-dimensional quantum systems*, Int. J. Mod. Phys. C, 8 (1997), p. 293+.

[53] J.-F. KU, Q.-D. CHEN, R. ZHANG ET H.-B. SUN, *Whispering-gallery-mode microdisk lasers produced by femtosecond laser direct writing*, Opt. Lett., 36 (2011), p. 2871–2873.

[54] C.-H. LAI ET H.-C. CHANG, *Effect of perfectly matched layer reflection coefficient on modal analysis of leaky waveguide modes*, Opt. Express, 19 (2011), p. 562–569.

[55] S. Y. LEE, M. S. KURDOGLYAN, S. RIM ET C. M. KIM, *Resonance patterns in a stadium-shaped microcavity*, Phys. Rev. A, 70 (2004), p. 023809+.

[56] P. A. LETNES, I. S. NERBØ, L. M. AAS, P. G. ELLINGSEN ET M. KILDEMO, *Fast and optimal broad-band Stokes/Mueller polarimeter design by the use of a genetic algorithm*, Opt. Express, 18 (2010), p. 23095–23103.

[57] B. E. Little et S. T. Chu, *Toward very large-scale integrated photonics*, Opt. Photon. News, 11 (2000), p. 24+.

[58] Y. Liu, T. Chang et A. E. Craig, *Coupled mode theory for modeling microring resonators*, Opt. Eng., 44 (2005), p. 084601+.

[59] Lord Rayleigh, *The Problem of The Whispering Gallery*, Cambridge University Press, Royaume-Uni, 1912.

[60] J. Magnus et H. Neudecker, *Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics*, Wiley, 1999.

[61] A. B. Matsko et V. S. Ilchenko, *Optical resonators with whispering-gallery modes-part I : Basics*, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron., 12 (2006), p. 3–14.

[62] A. Morand, K. Phan-Huy, Y. Desieres et P. Benech, *Analytical study of the microdisk's resonant modes coupling with a waveguide based on the perturbation theory*, J. Lightwave Technol., 22 (2004), p. 827–832.

[63] J. U. Nöckel, *Resonances in Nonintegrable Open Systems*, Thèse doctorat, Yale University, 1997.

[64] M. A. Noginov, L. Gu, J. Livenere, G. Zhu, A. K. Pradhan, R. Mundle, M. Bahoura, Yu et V. A. Podolskiy, *Transparent conductive oxides : Plasmonic materials for telecom wavelengths*, Appl. Phys. Lett., 99 (2011), p. 021101+.

[65] K. Okamoto, *Fundamentals of Optical Waveguides (2nd edition)*, Academic Press, 2006.

[66] G. Painchaud-April, J. Poirier, D. Gagnon et L. J. Dubé, *Phase space engineering in optical microcavities I : Preserving near-field uniformity while inducing far-field directionality*, *in* ICTON Conf. Proc, IEEE, juin 2010.

[67] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus et I. Kim, *Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser*, Science, 284 (1999), p. 1819–1821.

[68] K. Phan-Huy, *Étude de micro-structures utilisant le guidage réfractif à fort confinement de la lumière*, Thèse doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2005.

[69] E. Pone, A. Hassani, S. Lacroix, A. Kabashin et M. Skorobogatiy, *Boundary integral method for the challenging problems in bandgap guiding, plasmonics and sensing*, Opt. Express, 15 (2007), p. 10231–10246.

[70] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing (3rd Edition)*, Cambridge University Press, oct. 2007.

[71] A. I. Rahachou et I. V. Zozoulenko, *Scattering matrix approach to the resonant states and Q values of microdisk lasing cavities*, Appl. Opt., 43 (2004), p. 1761+.

[72] Y. P. RAKOVICH ET J. F. DONEGAN, *Photonic atoms and molecules*, Laser & Photon. Rev., 4 (2010), p. 179–191.

[73] M. ROBNIK, *Classical dynamics of a family of billiards with analytic boundaries*, J. Phys. A : Math. Gen., 16 (1983), p. 3971–3986.

[74] A. RUHE, *Algorithms for the nonlinear eigenvalue problem*, SIAM J. Numer. Anal., 10 (1973), p. 674–689.

[75] P. RUSSELL, *Photonic crystal fibers*, Science, 299 (2003), p. 358–362.

[76] J.-W. RYU ET M. HENTSCHEL, *Designing coupled microcavity lasers for high-Q modes with unidirectional light emission*, Opt. Lett., 36 (2011), p. 1116–1118.

[77] M. N. O. SADIKU, *Numerical Techniques in Electromagnetics (2nd Edition)*, CRC Press, juil. 2000.

[78] E. I. SMOTROVA, V. O. BYELOBROV, T. M. BENSON, J. CTYROKY, R. SAULEAU ET A. I. NOSICH, *Optical theorem helps understand thresholds of lasing in microcavities with active regions*, IEEE J. Quantum Electron., 47 (2011), p. 20–30.

[79] J. D. SWAIM, J. KNITTEL ET W. P. BOWEN, *Detection limits in plasmonic whispering gallery mode biosensors.* arXiv :1106.4089v1 [physics.optics], juin 2011.

[80] J. W. THOMAS, *Numerical Partial Differential Equations : Finite Difference Methods (Texts in Applied Mathematics)*, Springer, sept. 1995.

[81] H. E. TÜRECI, *Wave chaos in dielectric resonators : asymptotic and numerical approaches*, Thèse doctorat, Yale University, 2003.

[82] K. J. VAHALA, *Optical microcavities*, Nature, 424 (2003), p. 839–846.

[83] P. VIALE, S. FÉVRIER, F. GÉRÔME ET H. VILARD, *Confinement loss computations in photonic crystal fibres using a novel perfectly matched layer design*, Proceedings of the COMSOL Multiphysics User's Conference, (2005). http ://www.comsol.com/papers/1083/.

[84] F. VOLLMER, *Taking detection to the limit*, B.I.F. Futura, 20 (2005), p. 239–244.

[85] F. VOLLMER, *Communication privée.* 2011.

[86] F. VOLLMER ET S. ARNOLD, *Whispering-gallery-mode biosensing : Label-free detection down to single molecules*, Nat. Methods, 5 (2008), p. 591–596.

[87] A. VUKOVIC, P. SEWELL ET T. M. BENSON, *Strategies for global optimization in photonics design*, J. Opt. Soc. Am. A, 27 (2010), p. 2156–2168.

[88] H. WAALKENS, J. WIERSIG ET H. R. DULLIN, *Elliptic quantum billiard*, Ann. Phys., 260 (1997), p. 50–90.

[89] Q. J. WANG, C. YAN, N. YU, J. UNTERHINNINGHOFEN, J. WIERSIG, C. PFLÜGL, L. DIEHL, T. EDAMURA, M. YAMANISHI, H. KAN ET F. CAPASSO, *Whispering-gallery mode resonators for highly unidirectional laser action*, PNAS, 107 (2010), p. 22407–22412.

[90] J. WARD ET O. BENSON, *WGM microresonators : sensing, lasing and fundamental optics with microspheres*, Laser & Photon. Rev., 5 (2011), p. 553–570.

[91] J. WIERSIG, *Boundary element method for resonances in dielectric microcavities*, J. Opt. A : Pure Appl. Opt., 5 (2003), p. 53–60.

[92] J. WIERSIG, J. UNTERHINNINGHOFEN, H. SCHOMERUS, U. PESCHEL ET M. HENTSCHEL, *Electromagnetic modes in cavities made of negative-index metamaterials*, Phys. Rev. A, 81 (2010), p. 023809+.

[93] A. YARIV, Y. XU, R. K. LEE ET A. SCHERER, *Coupled-resonator optical waveguide : a proposal and analysis*, Opt. Lett., 24 (1999), p. 711–713.

[94] C.-L. ZOU, H. G. L. SCHWEFEL, F.-W. SUN, Z.-F. HAN ET G.-C. GUO, *Quick root searching method for resonances of dielectric optical microcavities with the boundary element method*, Opt. Express, 19 (2011), p. 15669–15678.

[95] C.-L. ZOU, Y. YANG, Y.-F. XIAO, C.-H. DONG, Z.-F. HAN ET G.-C. GUO, *Accurately calculating high quality factor of whispering-gallery modes with boundary element method*, J. Opt. Soc. Am. B, 26 (2009), p. 2050–2053.

Index

Émission directionnelle, 8

Algorithme
  d'optimisation, 67
  de Newton-Raphson, 24, 34
  génétique, 67

Billard, 12
Biodétection, 2, 8, 26

Cavité
  annulaire, 2, 22, 39
  asymétrique, 2, 27
  bidimensionnelle, 2, 14
  en spirale, 46
  microdisque, 2
  microsphère, 2
  quadrupolaire, 43
Champ électromagnétique, 12
Condition
  d'émission de Sommerfeld, 17, 31
  de continuité, 16
  de diffusion, 17
Confinement, 7
Couplage, 9
  évanescent, 47
  au contact, 47
  critique, 48

Décomposition
  en valeurs singulières, 33
Déformations, 27
Délai, 22
Diélectrique
  cercle, 17
  domaine, 17, 28
  frontière, 17, 28
  interface, 13, 30
  permittivité, 2
  structure optique, 1

Électromagnétique
  onde, 1
  rayonnement, 2
Équation
  de Bessel, 15, 70
  de Helmholtz, 11, 27, 69
  de Schrödinger, 14
  intégrale de frontière, 28
Équations de Maxwell, 1, 12
Excitation, 9

Facteur de qualité, 7, 26, 27
Fibre optique, 6, 28
Fonction
  cylindrique, 71
  d'onde, 14
  de Bessel, 17, 70
  de Green, 28
  delta de Dirac, 28
Fonctionnalisation, 4
Fréquence de résonance, 2, 15, 27

Guide d'onde, 9, 47, 87

Indice
  de réfraction, 2, 12
  effectif, 25
Intégrale de contour, 28
Intégration, 2

Ligands, 2
Limite de détection, 8
Longueur d'onde, 1

Métamatériaux, 68
Méthode
    des éléments de frontière, 27
    par éléments finis, 9, 47
    perturbative, 47
Matrice
    d'influence, 33
    de diffusion, 18
Microphotonique, 2
Mode
    à pertes, 2
    d'émission, 22
    d'absorption, 43
    de galerie, 7
    guidé, 50
    harmonique, 6, 13
    pair, impair, 40
    quasi-dégénéré, 40
    résonant, 21
    TM, TE, 15
Moment angulaire, 18

Nombre
    d'onde, 19
    quantique, 21
Non-linéaire
    susceptibilité, 12

Ondulatoire
    dynamique, 1, 11
    régime, 1
Oxyde
    de silicium, 2
    transparente conductrice, 68

Photonique
    cristal, 6
    molécule, 6
Plasmon de surface, 68
Polarisation, 14
Prédicteur, 34
Profil d'émission, 7, 27
Propagateur, 30

Réflexion totale interne, 2, 15
Résonateur, voir cavité

Semi-classique, 1
Semiconducteur, 2, 28
Singularité intégrable, 30
Solution
    analytique, 11, 37
    indésirable, 36
Structure de bandes, 6

Temps de vie, 2

Valeur singulière, voir Décomposition