

Calculs de structures de bandes

Méthode des ondes planes

Equation aux valeurs propres sur u_k :

$$\hat{\Theta} \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}) \quad \hat{\Theta} = \nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \right]$$

avec : $H_k(r) = u_k(r) e^{ikr}$

devient : $\Theta_k u_k(r) = \left(\frac{\omega(k)}{c}\right)^2 u_k(r)$

avec le nouvel opérateur : $\Theta_k = (ik + \nabla) \wedge \left(\frac{1}{\varepsilon(r)} (ik + \nabla) \wedge \right)$

Méthode des ondes planes

La méthode consiste à utiliser la périodicité des champs et de la carte diélectrique et à effectuer une décomposition de Fourier de $E(r)$, $H(r)$, $\epsilon(r)$ ou $1/\epsilon(r)$

$E(r) = \sum_{G \in \text{réseau réciproque}} E_G e^{i(k+G)r}$	$H(r) = \sum_{G \in \text{réseau réciproque}} H_G e^{i(k+G)r}$
$\epsilon(r) = \sum_{G \in \text{réseau réciproque}} \epsilon_G e^{iGr}$	$\epsilon(r)^{-1} = \sum_{G \in \text{réseau réciproque}} \epsilon_G^{-1} e^{iGr}$

Rq: les variables ω et k sont omis pour ne pas alourdir les notations dans $E_\omega(r)$ et E^k_G

pour réécrire
$$\hat{\Theta} \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r})$$

sous une forme d'équation aux valeurs propres:

après troncation à un nombre fini N d'ondes planes, $m=1 \dots N$

$$\left[M_{G_n, G_m}^k \right] \left[H_m^k \right] = \left(\frac{\omega_k}{c} \right)^2 \left[H_m^k \right]$$

Méthode des ondes planes

Plus techniquement : $\nabla H = 0$ impose la transversalité de H

H(r) se réécrit :
$$H(r) = \sum_{G' \in \text{réseau réciproque}} (h_{1,G'} \vec{u}_{1,G'} + h_{2,G'} \vec{u}_{2,G'}) e^{i(k+G')r}$$

avec : $\{u_{1,G}, u_{2,G}, k+G\}$ trièdre direct. Rq: $k+G = |k+G| \cdot u_{1,G} \wedge u_{2,G}$

$$\nabla \wedge H = \sum_{G' \in R.R.} i|k+G'| (h_{1,G'} \vec{u}_{2,G'} - h_{2,G'} \vec{u}_{1,G'}) e^{i(k+G')r}$$

$$\varepsilon(r)^{-1} = \sum_{G'' \in R.R.} \varepsilon_{G''}^{-1} e^{iG''r}$$

$$\varepsilon(r)^{-1} \nabla \wedge H = i \sum_{G', G'' \in R.R.} \varepsilon_{G''}^{-1} |k+G'| (h_{1,G'} \vec{u}_{2,G'} - h_{2,G'} \vec{u}_{1,G'}) e^{i(k+G'+G'')r}$$

qu'il est plus commode de réécrire avec $G=G'+G''$

$$\varepsilon(r)^{-1} \nabla \wedge H = i \sum_{G, G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} |k+G'| (h_{1,G'} \vec{u}_{2,G'} - h_{2,G'} \vec{u}_{1,G'}) e^{i(k+G)r}$$

Méthode des ondes planes

après le deuxième rotationnel :

$$\nabla \wedge \varepsilon(r)^{-1} \nabla \wedge H = \sum_{G, G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} |k + G'| |k + G| \begin{bmatrix} \vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & -\vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \\ -\vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & \vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{1,G'} \\ h_{2,G'} \end{bmatrix} e^{i(k+G)r}$$

$$\nabla \wedge \varepsilon(r)^{-1} \nabla \wedge H = \left(\frac{\omega_k}{c} \right)^2 H = \left(\frac{\omega_k}{c} \right)^2 \sum_{G \in R.R.} H_G e^{i(k+G)r}$$

puis en projetant sur $e^{i(k+G)r}$ on aboutit à un ensemble d'équations sur G :

$$\left\{ \sum_{G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} |k + G'| |k + G| \begin{bmatrix} \vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & -\vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \\ -\vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & \vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{1,G'} \\ h_{2,G'} \end{bmatrix} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \begin{bmatrix} h_{1,G} \\ h_{2,G} \end{bmatrix} \right\}_{\forall G \in R.R.}$$

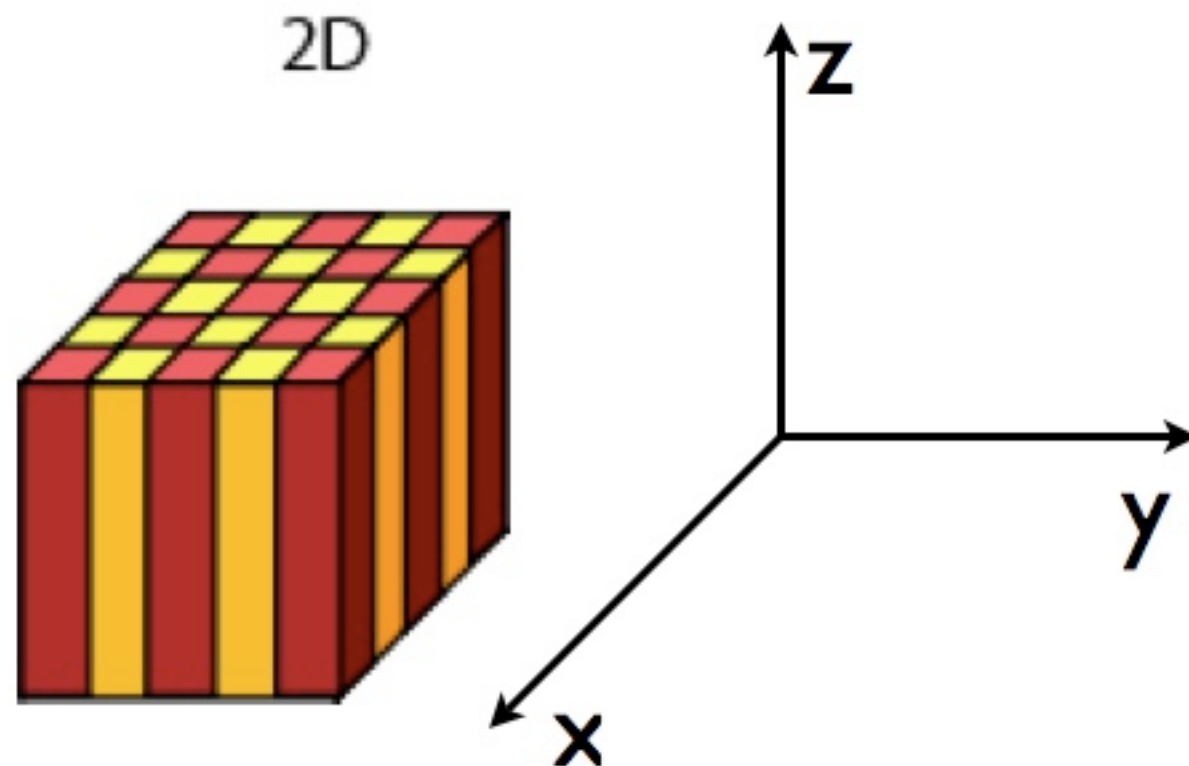
on se limite à m vecteurs du réseau réciproque et l'équation se réduit à la diagonalisation d'une matrice hermitienne $2m \times 2m$ dont les vecteurs propres sont $(\omega/c)^2$ et les vecteurs propres $\{H_G\}$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

La méthode est vite gourmande en temps de calcul, il faut plusieurs milliers d'ondes planes pour le calcul de la structure de bandes d'un empilement de sphères sur un réseau diamant.

Elle est surtout utilisée dans les cas bidimensionnels



On se limite à la propagation dans le plan x,y
les dérivées par rapport à z sont nulles

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

Polarisations TE et TM

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) - j\omega\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) + j\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}) &= 0\end{aligned}$$

permet de relier H_z à E_x, E_y et E_z à H_x, H_y

Les équations du champ H_z et E_z sont découplées :

$$\frac{1}{\epsilon(x,y)} \nabla^2 E_z = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E_z \quad \nabla \left(\frac{1}{\epsilon(x,y)} \nabla H_z \right) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H_z$$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

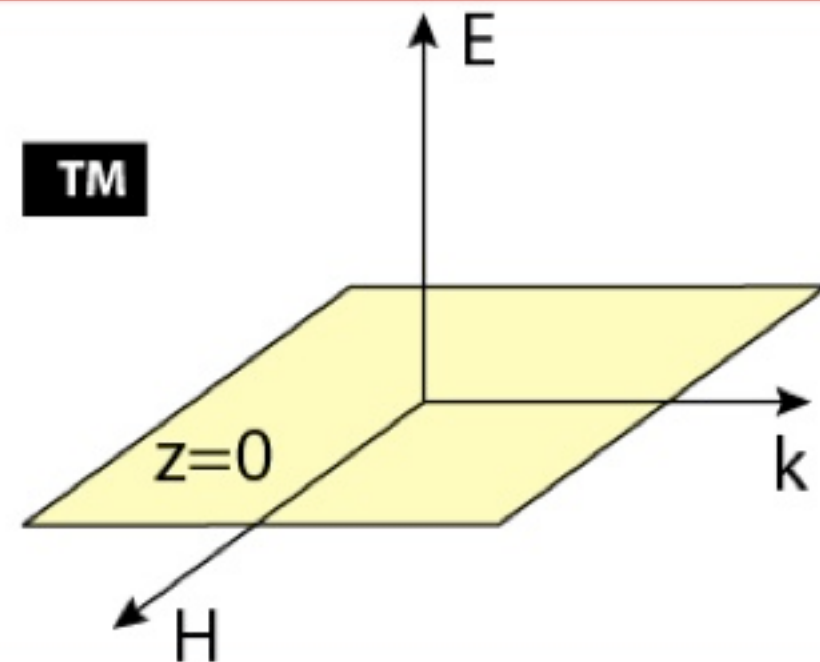
Polarisations TE et TM

Deux polarisations indépendantes :

$$H_z=0, E_z \neq 0$$

TM ou s

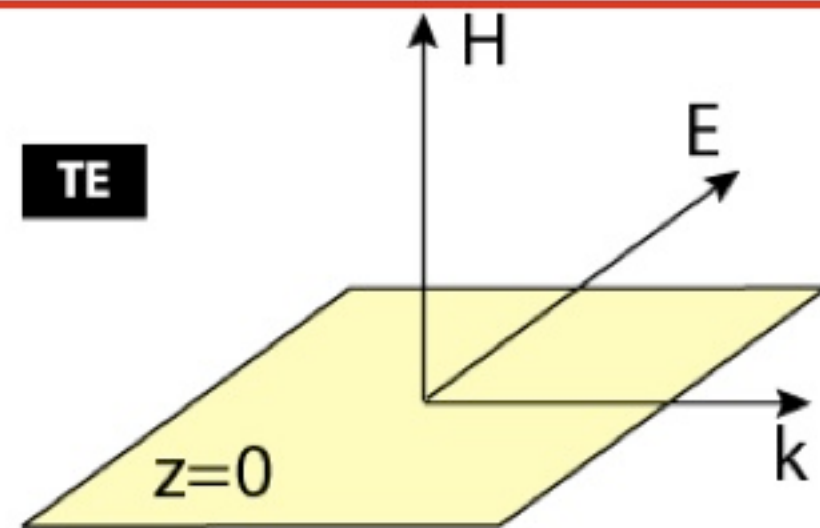
Mode transverse pour E
H dans le plan perpendiculaire



$$H_z \neq 0, E_z = 0$$

TE ou p

Mode transverse pour H
E dans le plan perpendiculaire

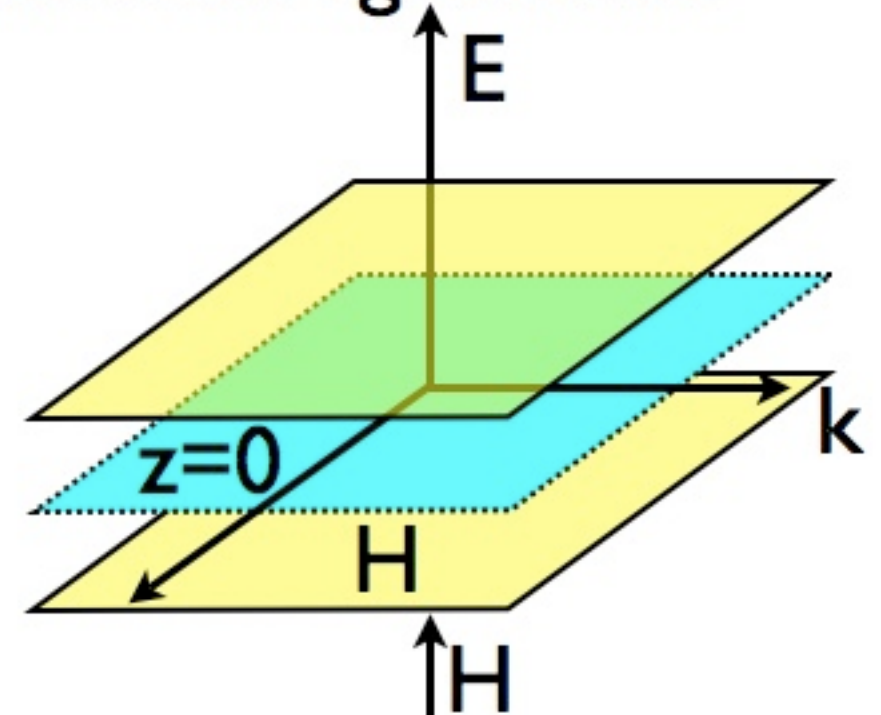


Remarque: Polarisation TE et TM

Dans le cas d'un guide d'onde présentant un plan de symétrie, on peut encore définir des modes pairs et impairs et la structure du champ *dans le plan miroir uniquement* est comparable aux polarisations TE et TM. Par abus de langage elle sont également appelées TE et TM

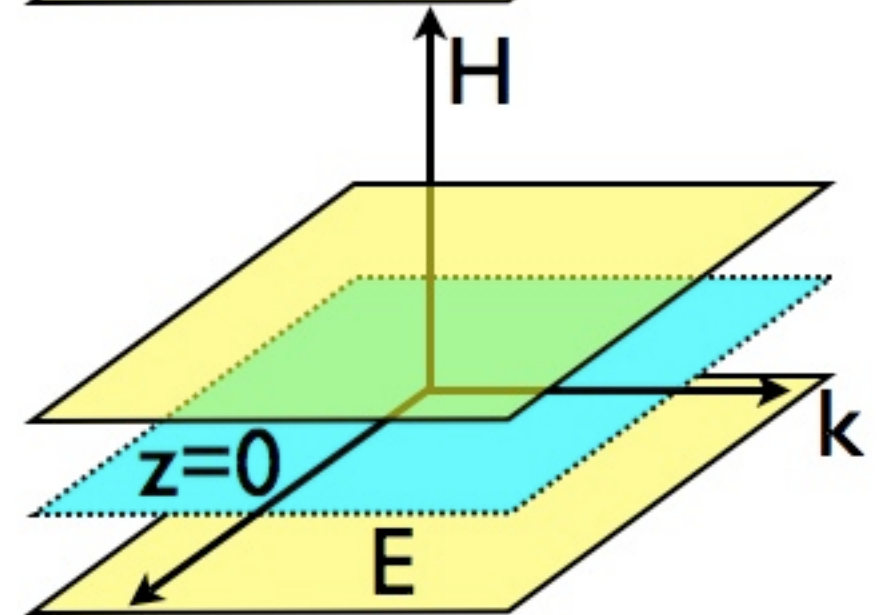
$$H_z(z=0)=0, E_z(z=0) \neq 0 \quad \text{"TM" ou s}$$

Mode transverse pour E
H dans le plan perpendiculaire



$$H_z(z=0) \neq 0, E_z(z=0)=0 \quad \text{"TE" ou p}$$

Mode transverse pour H
E dans le plan perpendiculaire



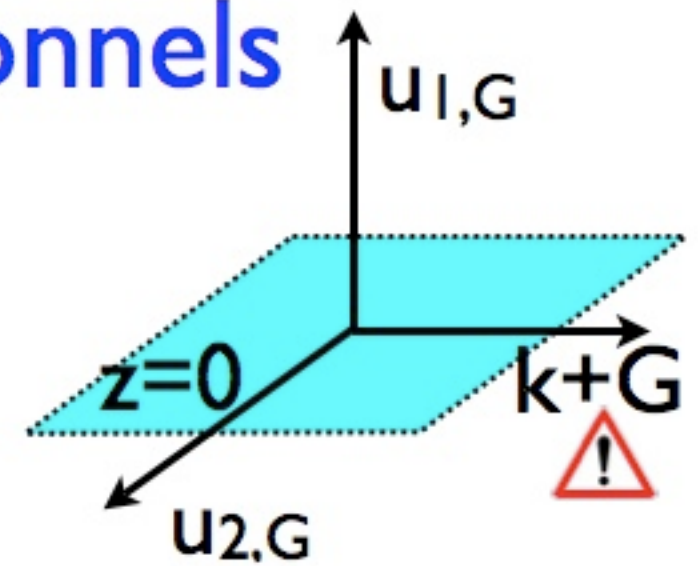
Si il n'y a pas de symétrie miroir, on ne peut pas séparer en deux polarisations TE et TM indépendantes

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

$k+G$ est dans le plan x,y

$u_{1,G}$ peut être choisi sur Oz et $u_{2,G}$ pour compléter le trièdre direct $\{u_{1,G}, u_{2,G}, k+G\}$



$$\left\{ \sum_{G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} |k+G'| |k+G| \begin{bmatrix} \vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & -\vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \\ -\vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & \vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{1,G'} \\ h_{2,G'} \end{bmatrix} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \begin{bmatrix} h_{1,G} \\ h_{2,G} \end{bmatrix} \right\}_{\forall G \in R.R.}$$

devient :

TM : $h_{1,G} = 0$ pour tout G , $u_{1,G} = u_{1,G'}$ et $u_{2,G} \cdot u_{1,G'} = 0$

$$\text{TM} \quad \left\{ \sum_{G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} |k+G'| |k+G| h_{2,G'} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 h_{2,G} \right\}_{\forall G \in R.R.}$$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

pour m vecteurs du réseau réciproque, l'équation se réduit à la diagonalisation d'une matrice hermitienne $m \times m$ dont les vecteurs propres sont $(\omega/c)^2$ et les vecteurs propres $\{H_G\}$

TM

$$\left[\begin{pmatrix} |\mathbf{k} + \mathbf{G}_1| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_1| & \cdots & |\mathbf{k} + \mathbf{G}_1| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_m| & \cdots & |\mathbf{k} + \mathbf{G}_1| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_N| \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\mathbf{k} + \mathbf{G}_n| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_1| & \cdots & |\mathbf{k} + \mathbf{G}_n| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_m| & \cdots & |\mathbf{k} + \mathbf{G}_n| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_N| \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\mathbf{k} + \mathbf{G}_N| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_1| & \cdots & |\mathbf{k} + \mathbf{G}_N| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_m| & \cdots & |\mathbf{k} + \mathbf{G}_N| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}_N| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\kappa}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_1) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_m) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\kappa}(\mathbf{G}_n - \mathbf{G}_1) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_n - \mathbf{G}_m) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_n - \mathbf{G}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\kappa}(\mathbf{G}_N - \mathbf{G}_1) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_N - \mathbf{G}_m) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_N - \mathbf{G}_N) \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \\ C_N \end{pmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \\ C_N \end{pmatrix}$$

$$\hat{\kappa}(x,y) = \frac{1}{\epsilon(x,y)}$$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

TE : $h_{2G} = 0$ pour tout G et $u_{1,G} \cdot u_{2,G'} = 0$

l'angle $u_{2,G}, u_{2,G'}$ est le même que l'angle $(k+G), (k+G')$

et $|k+G||k+G'|u_{2,G} \cdot u_{2,G'} = (k+G) \cdot (k+G')$

$$\left\{ \sum_{G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} |k+G'| |k+G| \begin{bmatrix} \vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & -\vec{u}_{2,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \\ -\vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{2,G'} & \vec{u}_{1,G} \cdot \vec{u}_{1,G'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{1,G'} \\ h_{2,G'} \end{bmatrix} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \begin{bmatrix} h_{1,G} \\ h_{2,G} \end{bmatrix} \right\}_{\forall G \in R.R.}$$

devient :

$$\text{TE} \quad \left\{ \sum_{G' \in R.R.} \varepsilon_{G-G'}^{-1} (k+G')(k+G) h_{1,G'} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 h_{1,G} \right\}_{\forall G \in R.R.}$$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

pour m vecteurs du réseau réciproque, l'équation se réduit à la diagonalisation d'une matrice hermitienne $m \times m$ dont les vecteurs propres sont $(\omega/c)^2$ et les vecteurs propres $\{H_G\}$

TE

$$\left[\begin{pmatrix} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1) & \cdots & (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) & \cdots & (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1) & \cdots & (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) & \cdots & (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\mathbf{k} + \mathbf{G}_N) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1) & \cdots & (\mathbf{k} + \mathbf{G}_N) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) & \cdots & (\mathbf{k} + \mathbf{G}_N) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\kappa}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_1) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_m) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\kappa}(\mathbf{G}_n - \mathbf{G}_1) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_n - \mathbf{G}_m) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_n - \mathbf{G}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\kappa}(\mathbf{G}_N - \mathbf{G}_1) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_N - \mathbf{G}_m) & \cdots & \hat{\kappa}(\mathbf{G}_N - \mathbf{G}_N) \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{pmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix}$$

$$\hat{\kappa}(x,y) = \frac{1}{\epsilon(x,y)}$$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

Remarque: on peut aussi arriver aux mêmes systèmes d'équation en développant en ondes planes les équations :

$$\nabla \wedge \frac{1}{\varepsilon(r)} \nabla \wedge H_\omega(r) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H_\omega(r) \quad \text{et} \quad \frac{1}{\varepsilon(r)} \nabla \wedge \nabla \wedge E_\omega(r) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E_\omega(r)$$

on obtient:

$${}^{TE} \sum_n H_n(k + G_m) \cdot (k + G_m) \varepsilon_{G_m - G_n}^{-1} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H_n \quad \forall G_m \in R.R.$$

$${}^{TM} \sum_n E_n(k + G_n) \cdot (k + G_m) \varepsilon_{G_m - G_n}^{-1} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E_n \quad \forall G_m \in R.R.$$

comme on l'a vu précédemment l'équation sur E n'est pas hermitienne. On peut la rendre en faisant le changement de variable:

$$C_m = |k + G_m| E_m$$

$${}^{TM} \sum_n C_n |k + G_m| |k + G_n| \varepsilon_{G_m - G_n}^{-1} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 C_n \quad \forall G_m \in R.R.$$

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

un dernier petit effort de technique numérique avant une pause

Il reste à calculer la transformée de Fourier $1/\varepsilon(\mathbf{x},\mathbf{y})$

Dans le cas général il faut le faire numériquement en se mettant à profit toutes les symétries du cristal et en restreignant à la zone de Brillouin irréductible. En général avec des algorithmes de transformée de Fourier rapide

Pour certaines formes, il y a des solutions analytiques, par exemple pour des piliers ou des trous :

$$\varepsilon(G) = \varepsilon_a \delta_{G,0} + (\varepsilon_a - \varepsilon_b) \frac{2\pi R^2}{S_{cellule}} \frac{J_1(|G|R)}{|G|R}$$

ou J_1 est une fonction de Bessel du 1^{er} ordre
+ sommation sur le réseau

Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

méthode inverse et méthode de Ho

Tel qu'il a été décrit le formalisme utilise la transformée de Fourier de $1/\epsilon$ on peut aussi utiliser la transformée de Fourier de ϵ et inversé la matrice obtenue.

Pour un nombre fini d'ondes planes les deux approches diffèrent. En général, mais ce n'est pas une règle absolue, la méthode directe de Ho converge plus rapidement.

Etape	Méthode inverse	Méthode de Ho
*1 Calcul de la transformée de Fourier	$\epsilon^{-1}(G)=TF(1/\epsilon)$	$\epsilon(G)=TF(\epsilon)$
*2 Troncation	$[\epsilon^{-1}(G)]_N$	$[\epsilon(G)]_N$
*3 Inversion	-	$[\epsilon^{-1}(G)]_{N, Ho}=[\epsilon(G)]_N^{-1}$

ref: Phys. Rev. Lett. 65, 3152, 1990 et JOSA B, 13, 1870, 1996, pour une discussion plus complète voir la thèse de V. Zabelin, EPFL, n°_____.

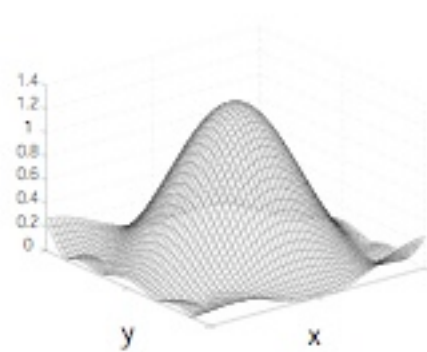
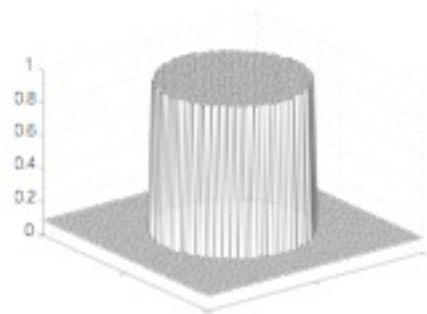
Méthode des ondes planes

Cas des systèmes bidimensionnels

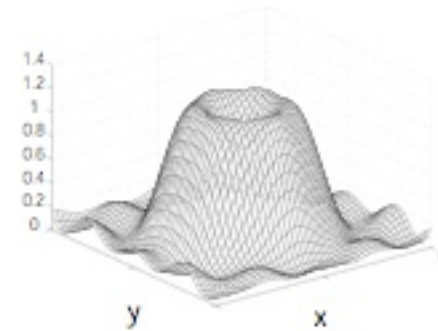
méthode inverse et méthode de Ho

inverse method

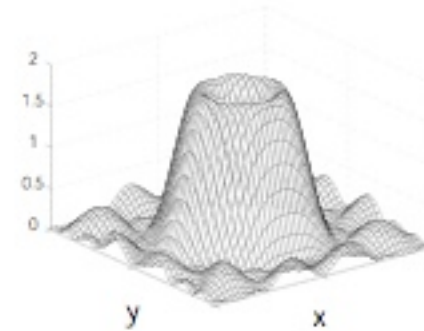
untruncated
'real' structure



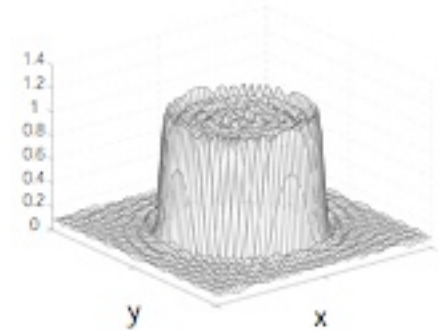
Gmax=2
N=13



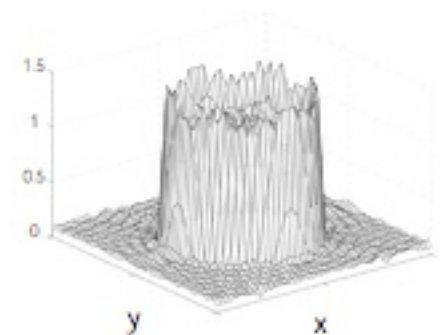
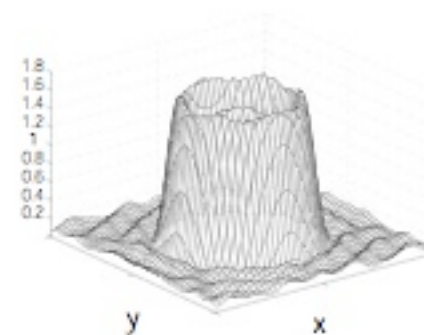
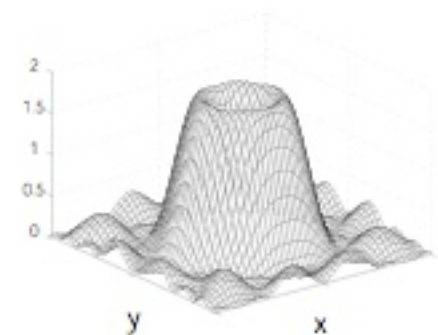
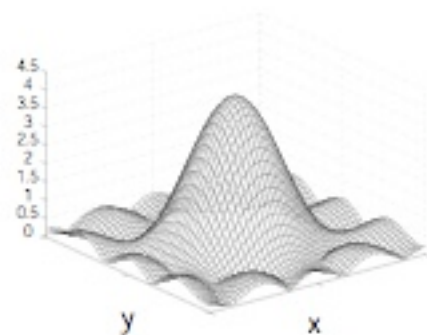
Gmax=4
N=43



Gmax=8
N=163



Gmax=20
N=1009



Ho's method

Méthode des ondes planes limites du modèle

*2D & 3D

la méthode onde plane est surtout utilisée pour les réseaux bidimensionnels, elle converge très lentement.

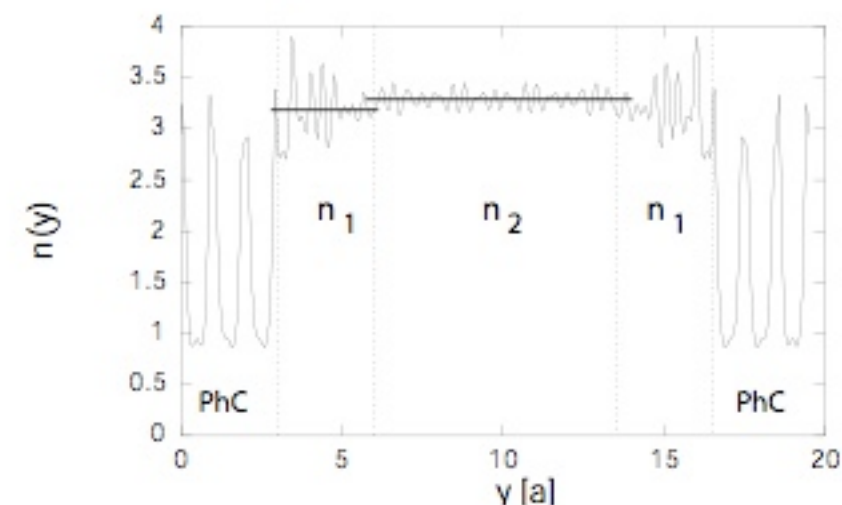
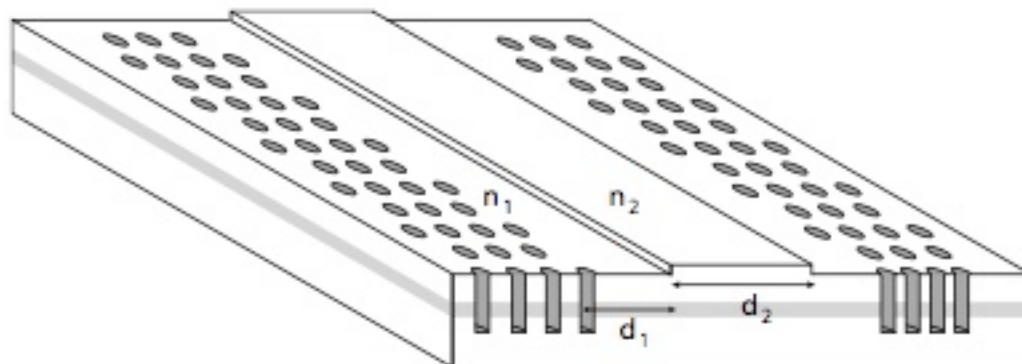
	2D	3D
Nb ondes planes par direction	α	α
Nb ondes planes par cellule	α^2	α^3
Taille mémoire	$(\alpha^2)^2 = \alpha^4$	$(2\alpha^3)^2 = 4\alpha^6$
Temps de calcul	$2(\alpha^2)^3 = 2\alpha^6$	$(2\alpha^3)^3 = 8\alpha^9$

(2: polarisation non séparable)

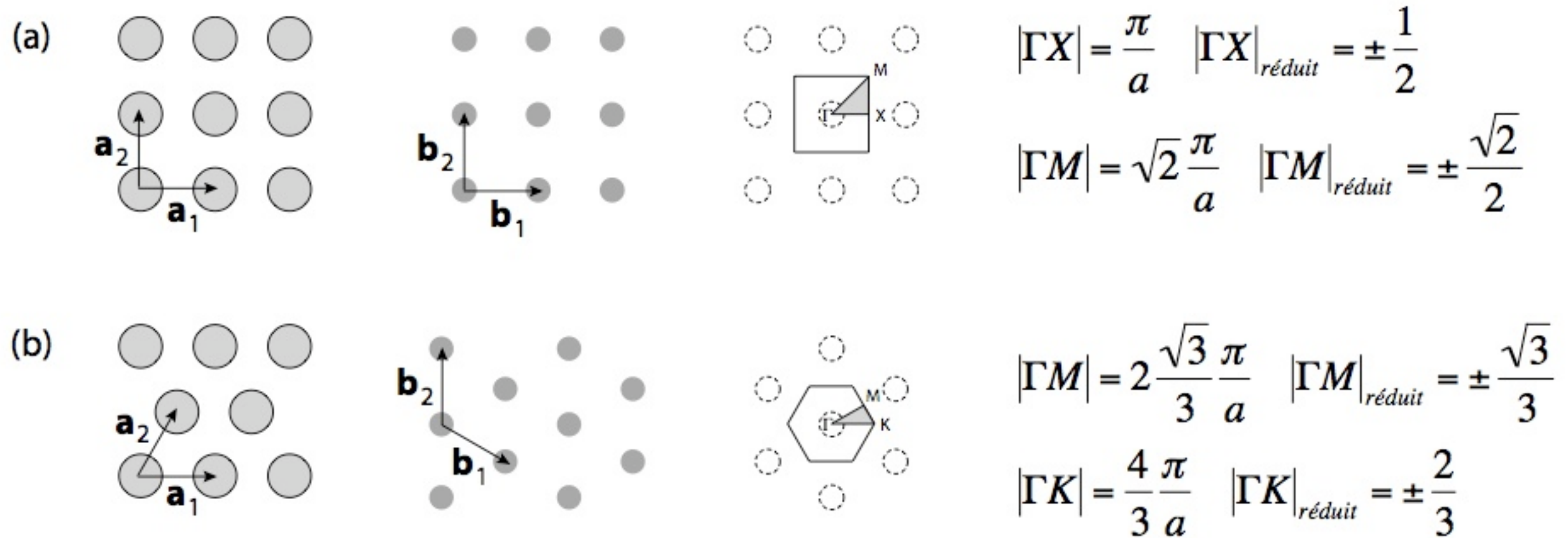
*Pertes, valeurs complexes et milieu dispersif ou non-linéaire

temps de vie ($E+i\gamma$), longueur de pénétration ($k+i\rho$), absorption ($n+ik$), $\epsilon(\lambda)$
possible mais délicat

*Prise en compte simultanée de grands et petits contraste d'indice



Bestiaire des systèmes bidimensionnels

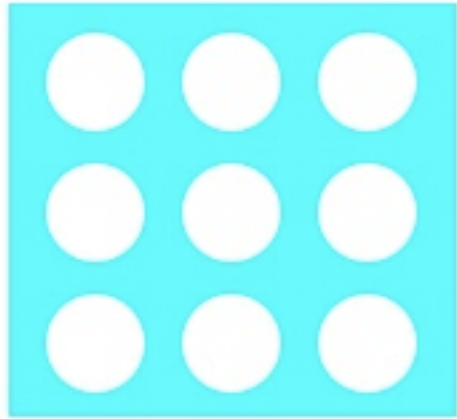


Attention : contrairement à l'intuition la distance ΓK n'est pas égale à π/a

	geometry	
	square lattice	triangular lattice
direct vectors	$\mathbf{a}_1 = (1, 0); \mathbf{a}_2 = (0, 1)$	$\mathbf{a}_1 = (1, 0); \mathbf{a}_2 = (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$
reciprocal vectors	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0); \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, -\frac{1}{3}\sqrt{3}); \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, \frac{2}{3}\sqrt{3})$
f	$\frac{R^2 \pi}{a^2}$	$\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{R^2}{a^2}$
unit cell surface	a^2	$\frac{\sqrt{3}}{2} a^2$

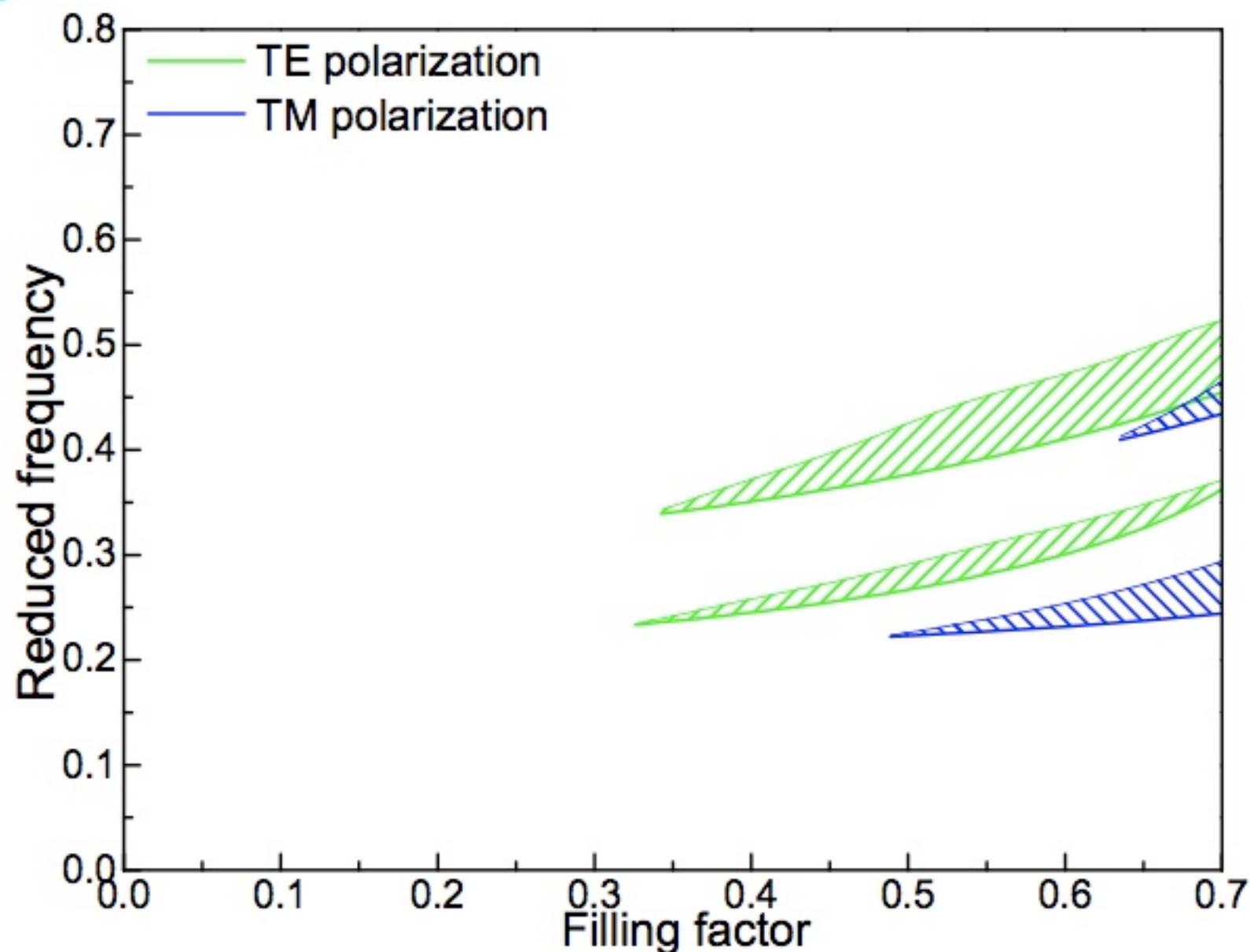
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau carré, trous



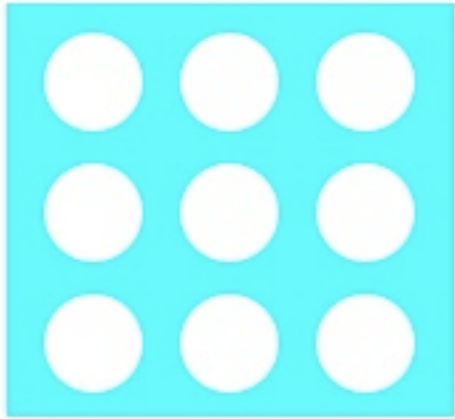
facteur de remplissage = f_{air}

$n=3.36$

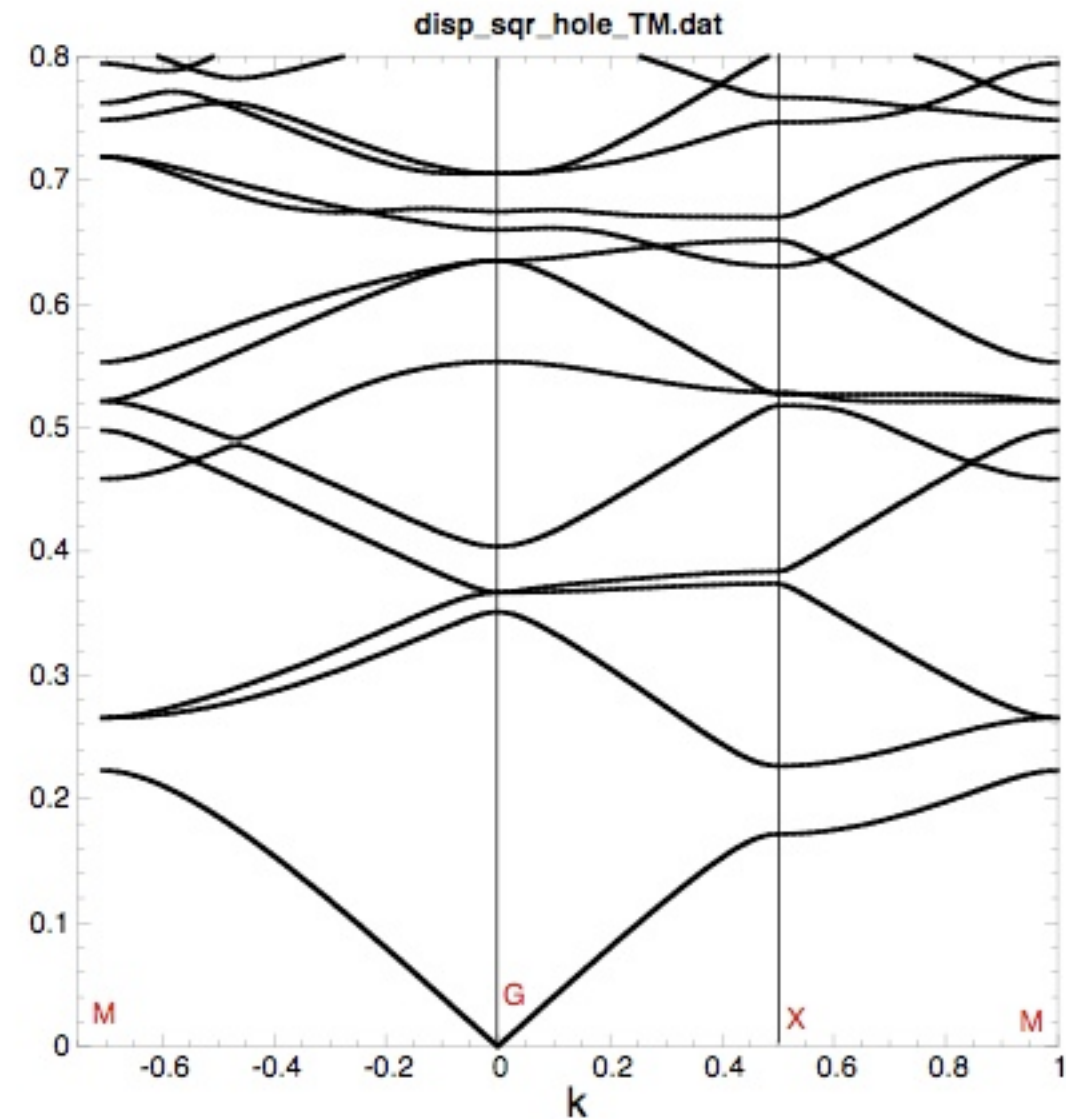
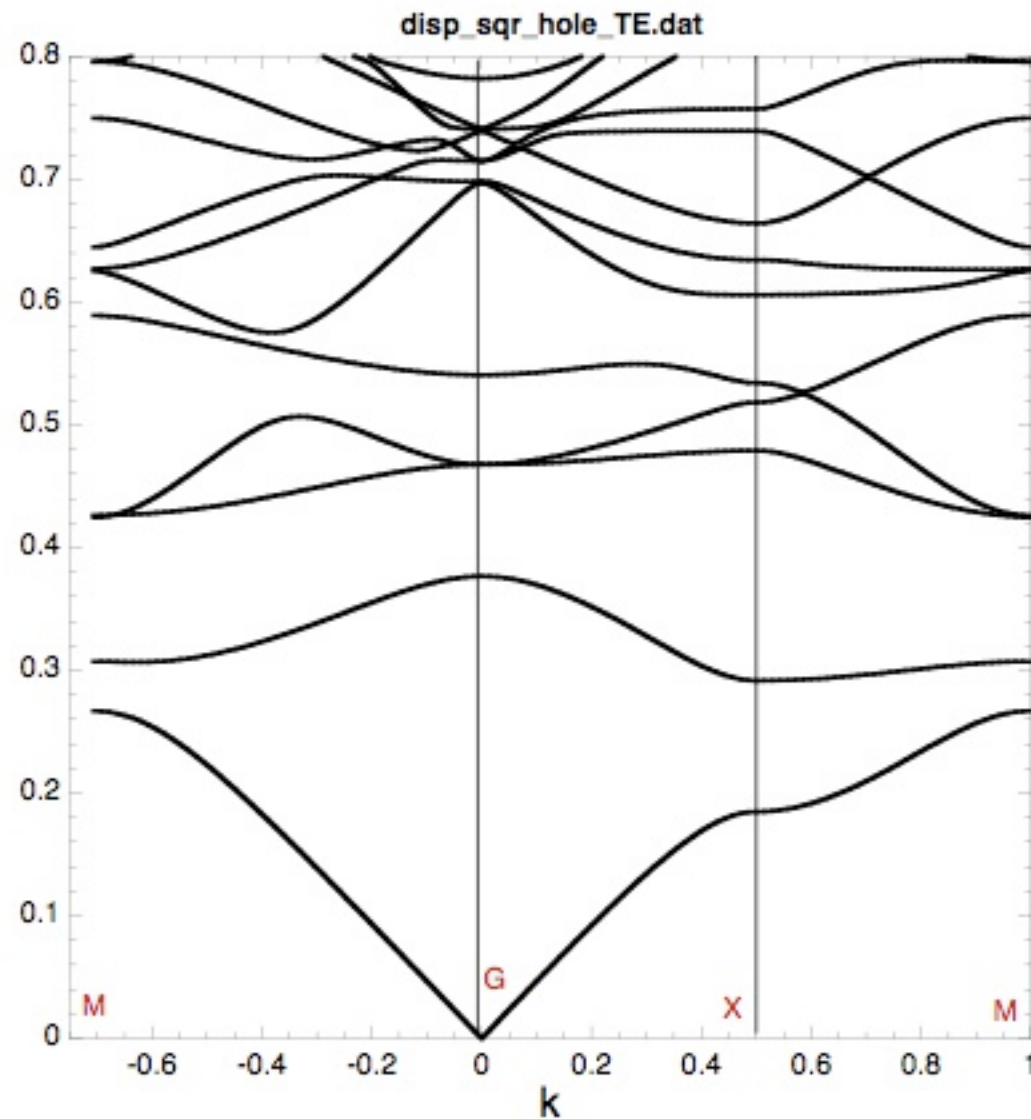


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau carré, trous



facteur de remplissage = $f_{\text{air}} = 50 \%$
 $n=3.36$



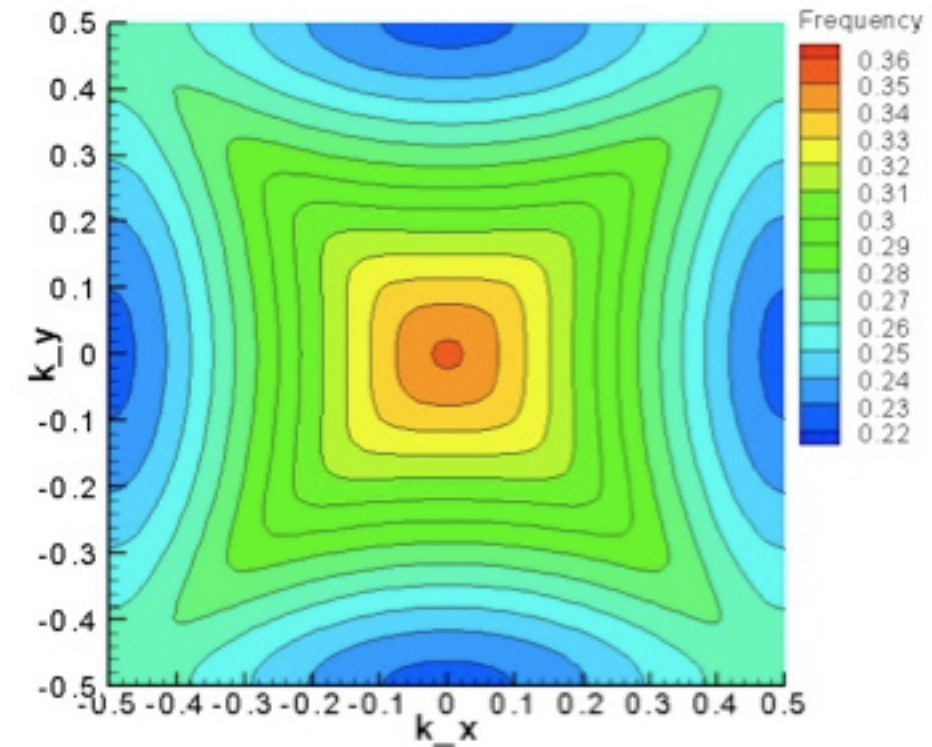
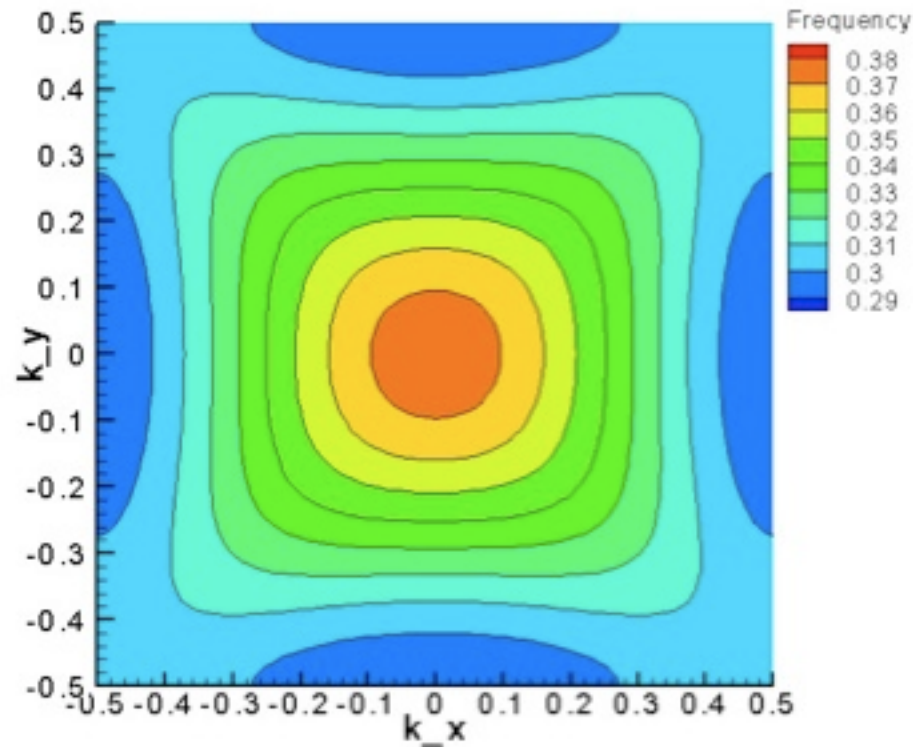
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau carré, trous

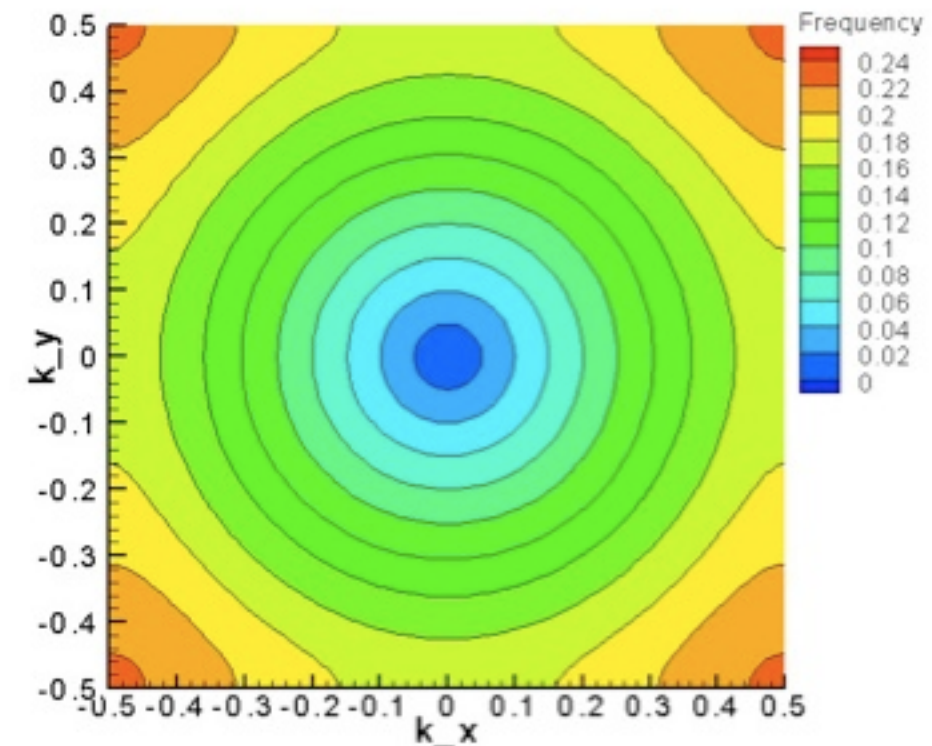
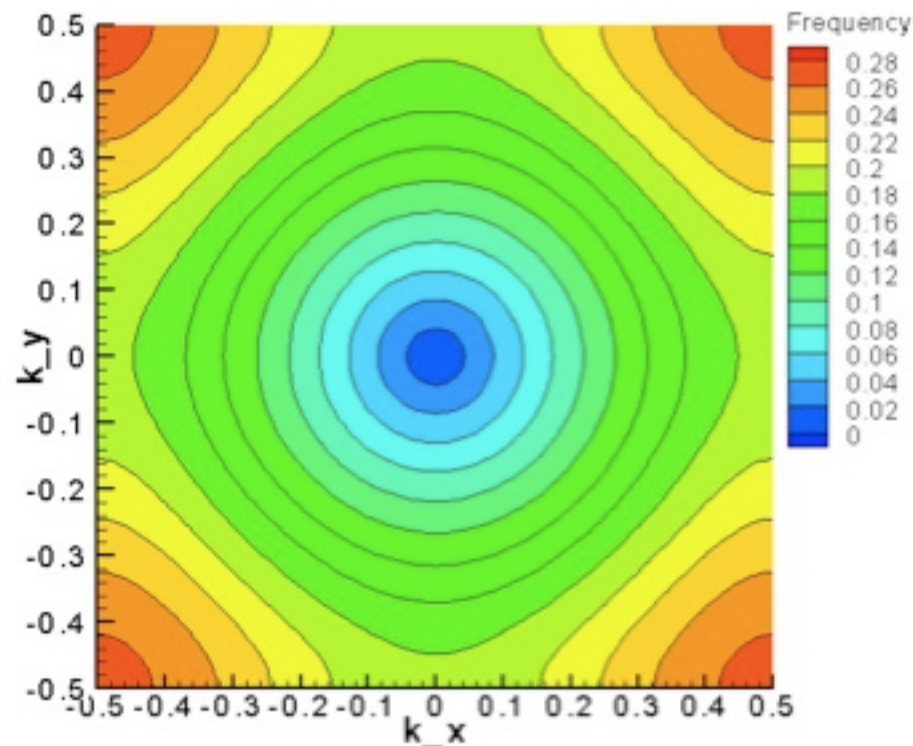
TE

TM

2

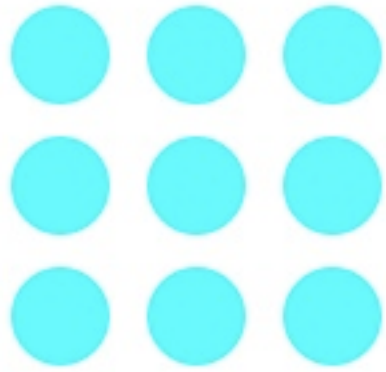


1

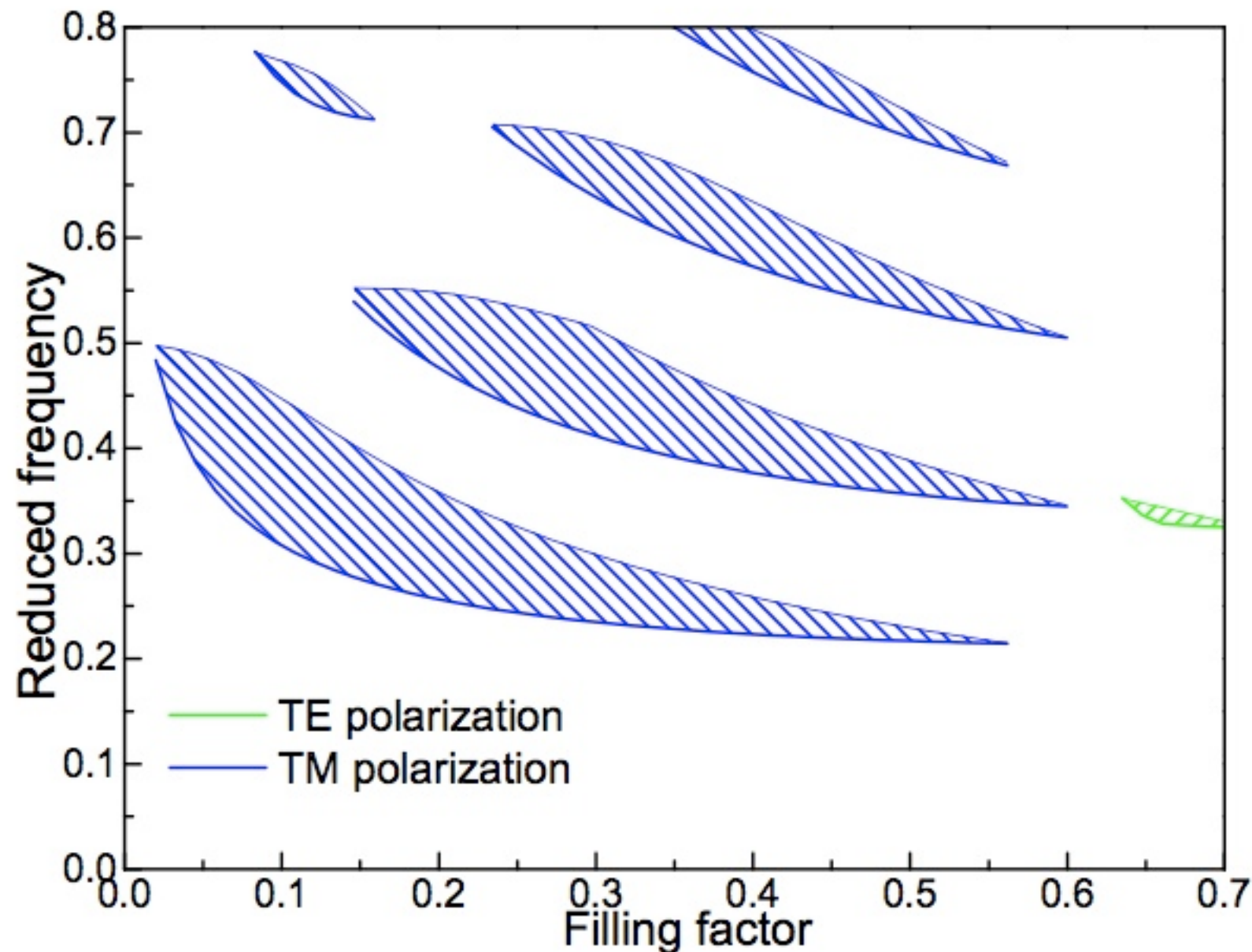


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau carré, piliers

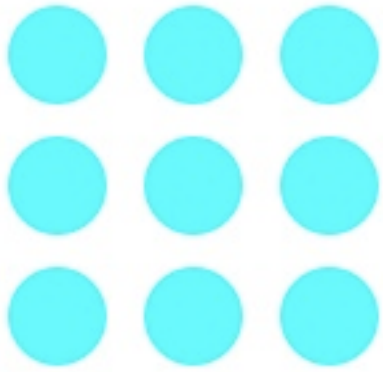


facteur de remplissage = $f_{\text{diél}}$
 $n=3.36$

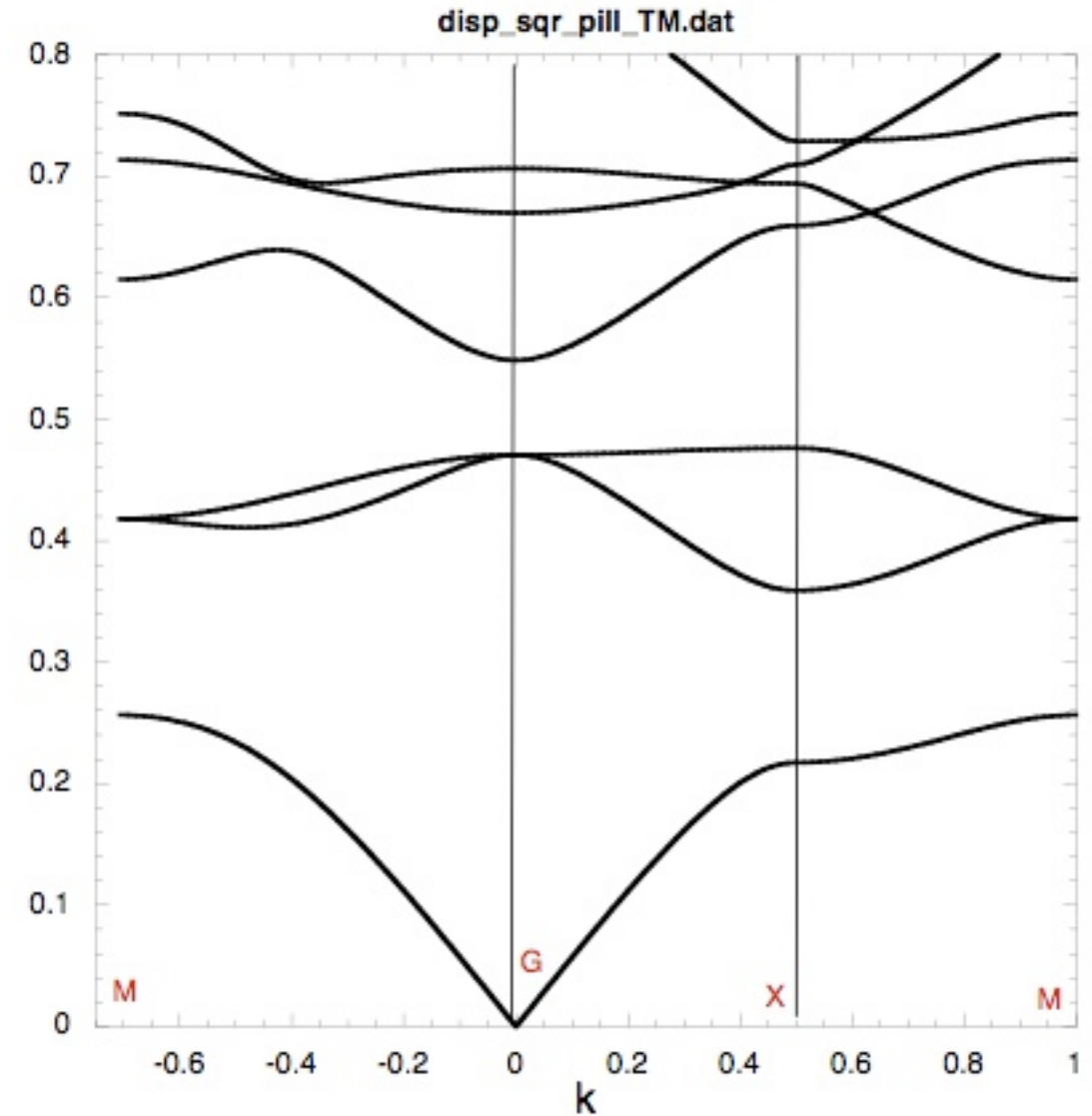
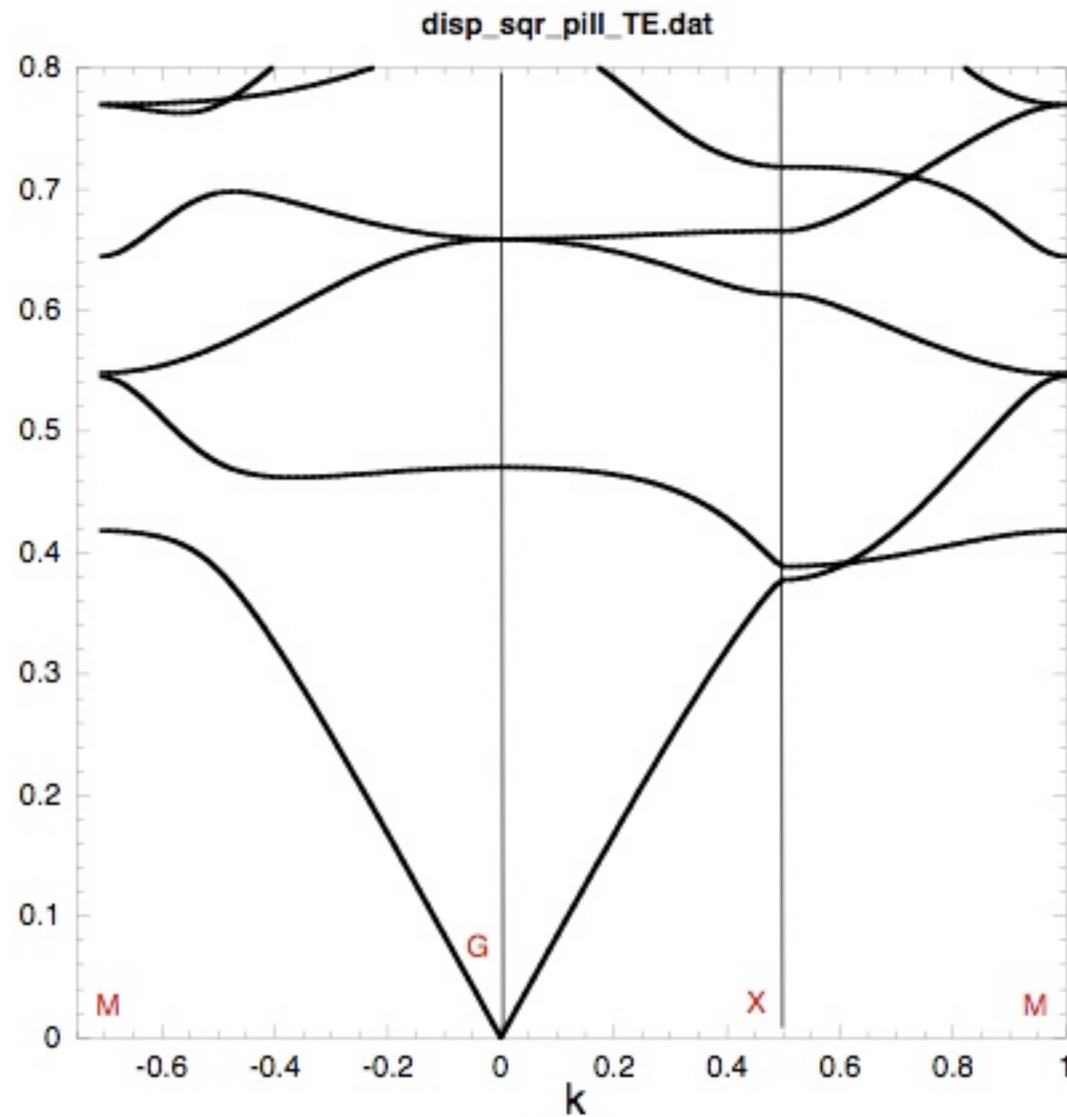


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau carré, piliers



facteur de remplissage = $f_{\text{diél}} = 20\%$
 $n=3.36$



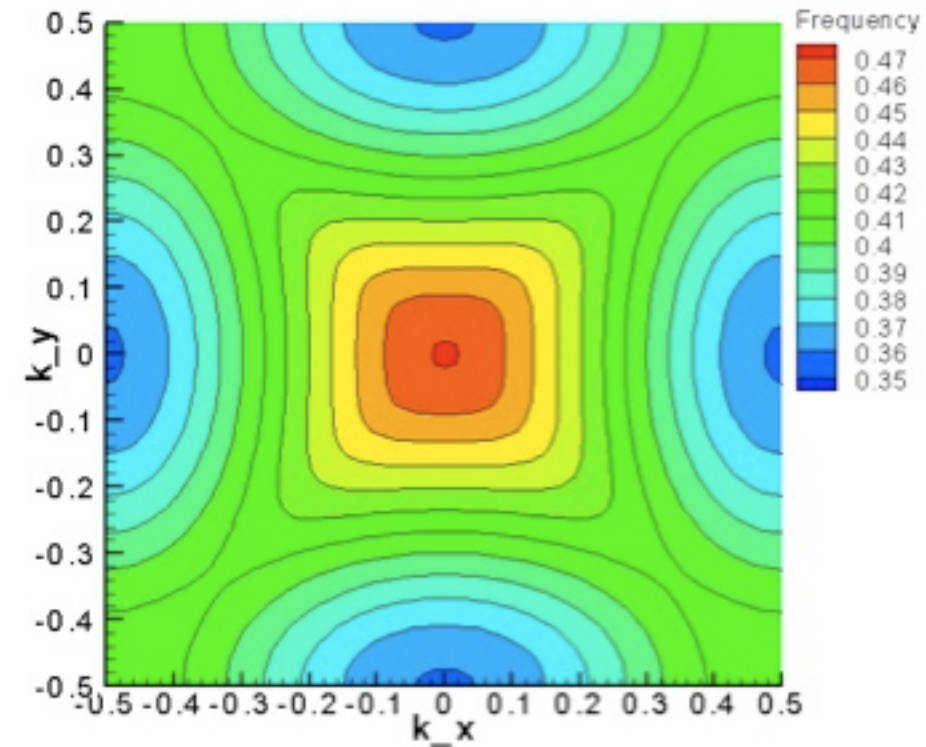
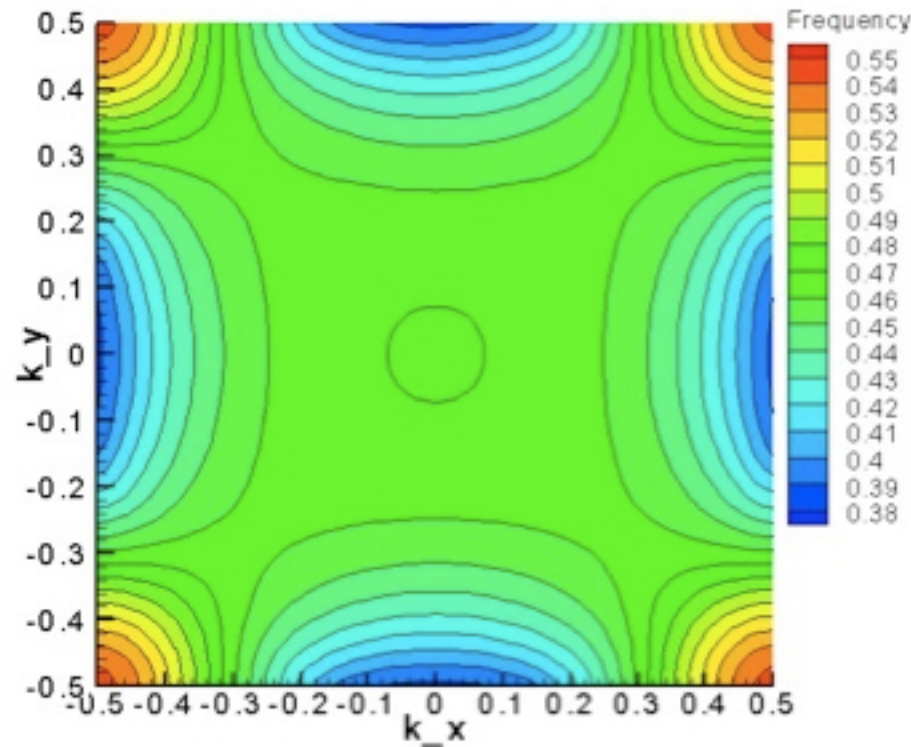
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau carré, piliers

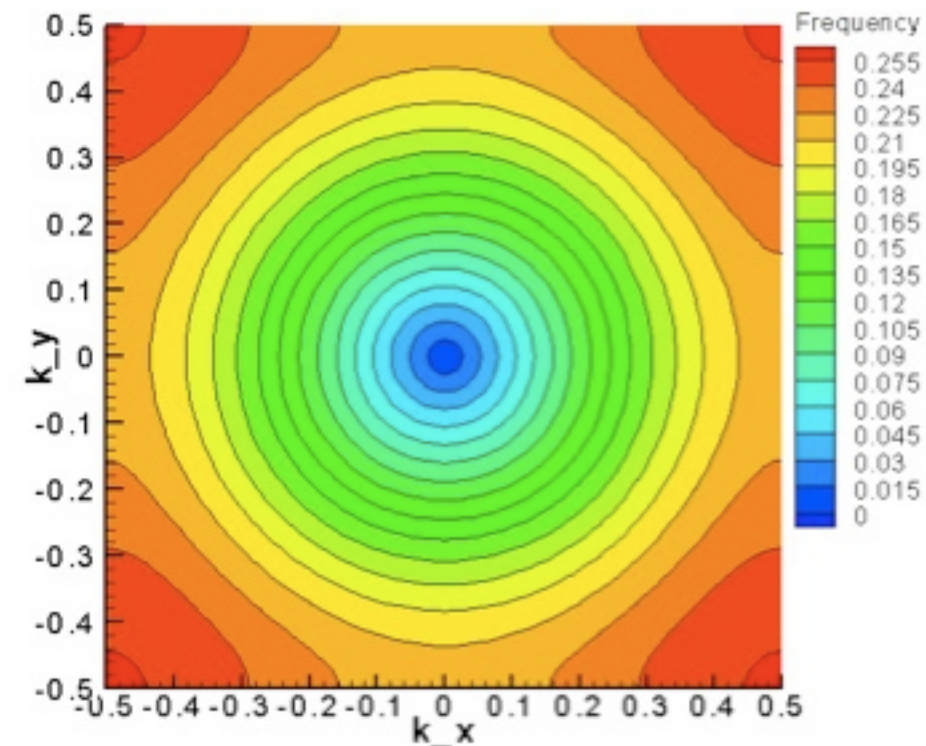
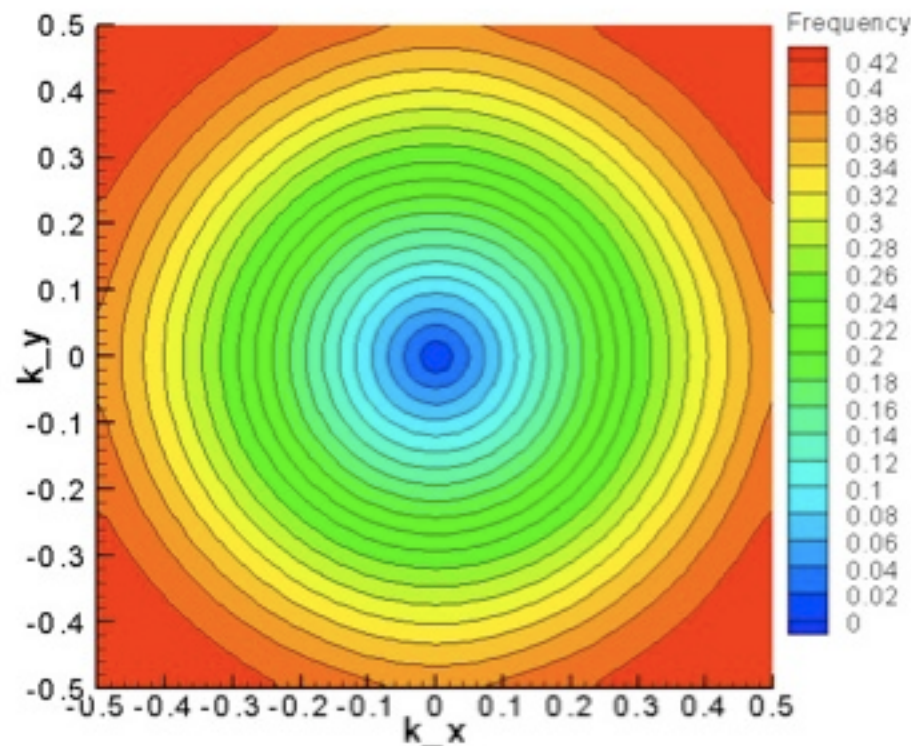
TE

TM

2

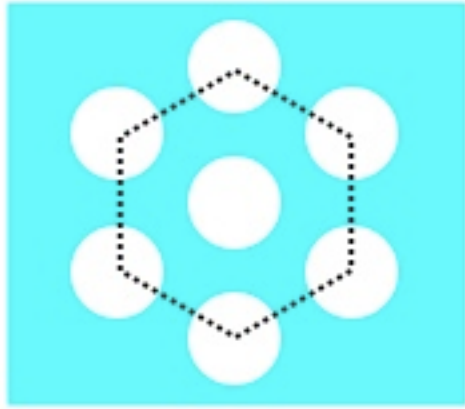


1

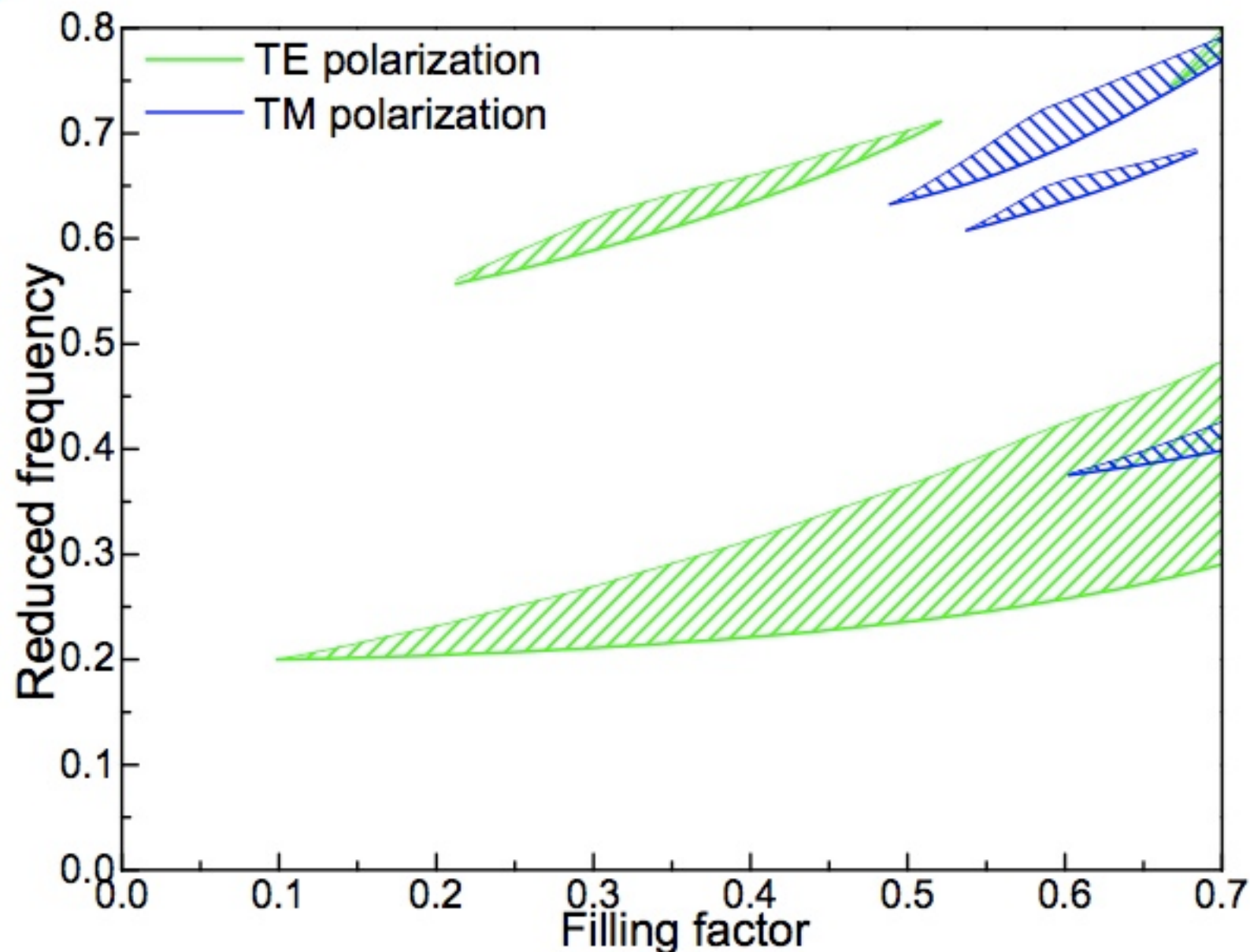


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau triangulaire, trous

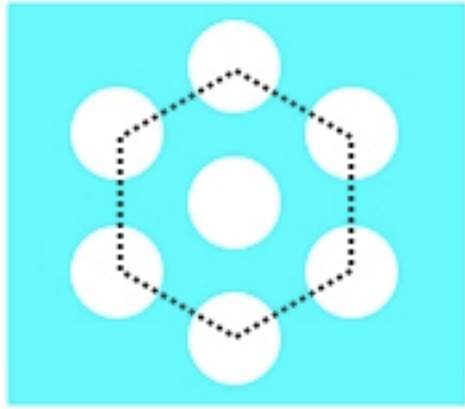


facteur de remplissage = f_{air}
 $n=3.36$

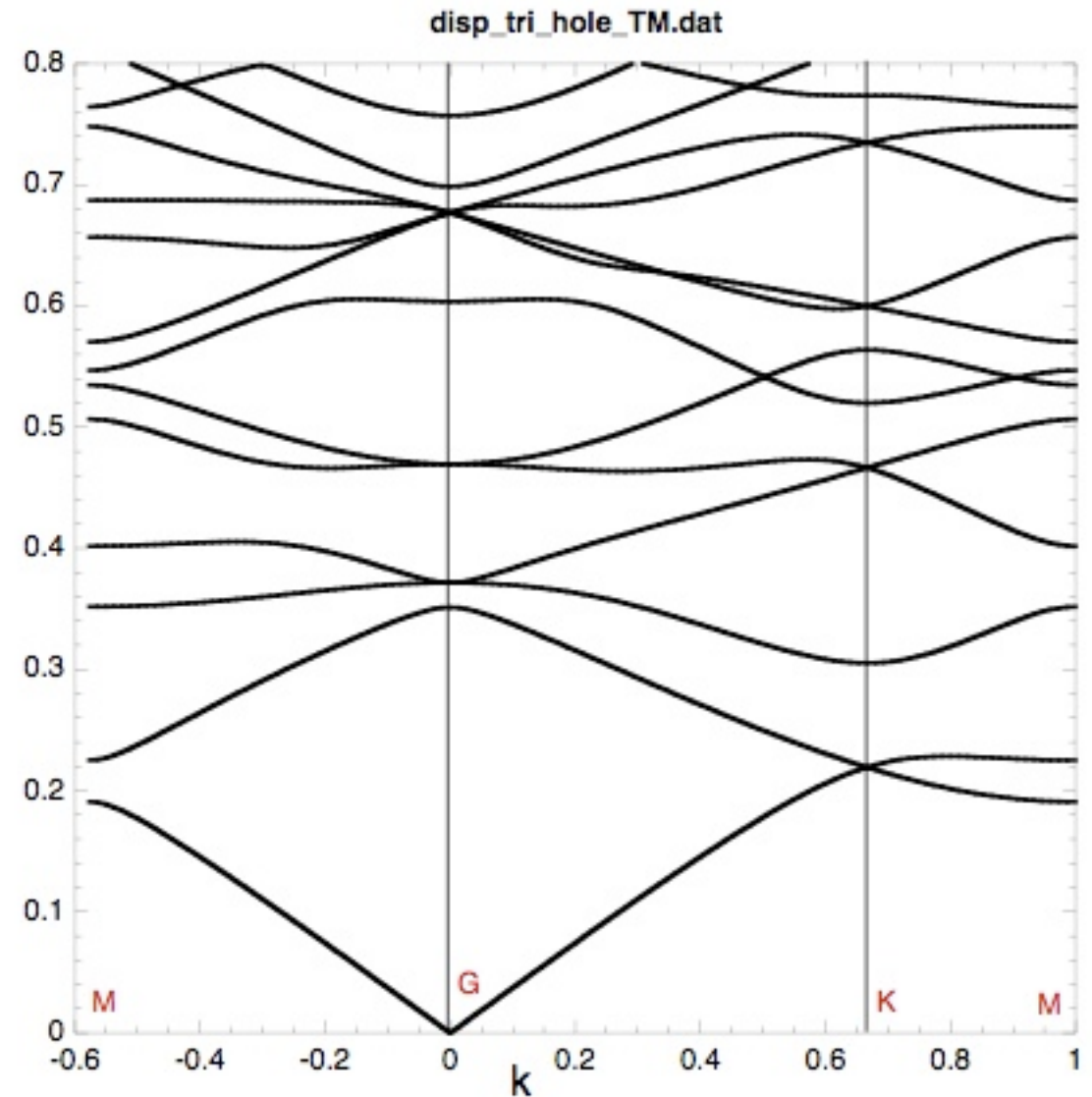
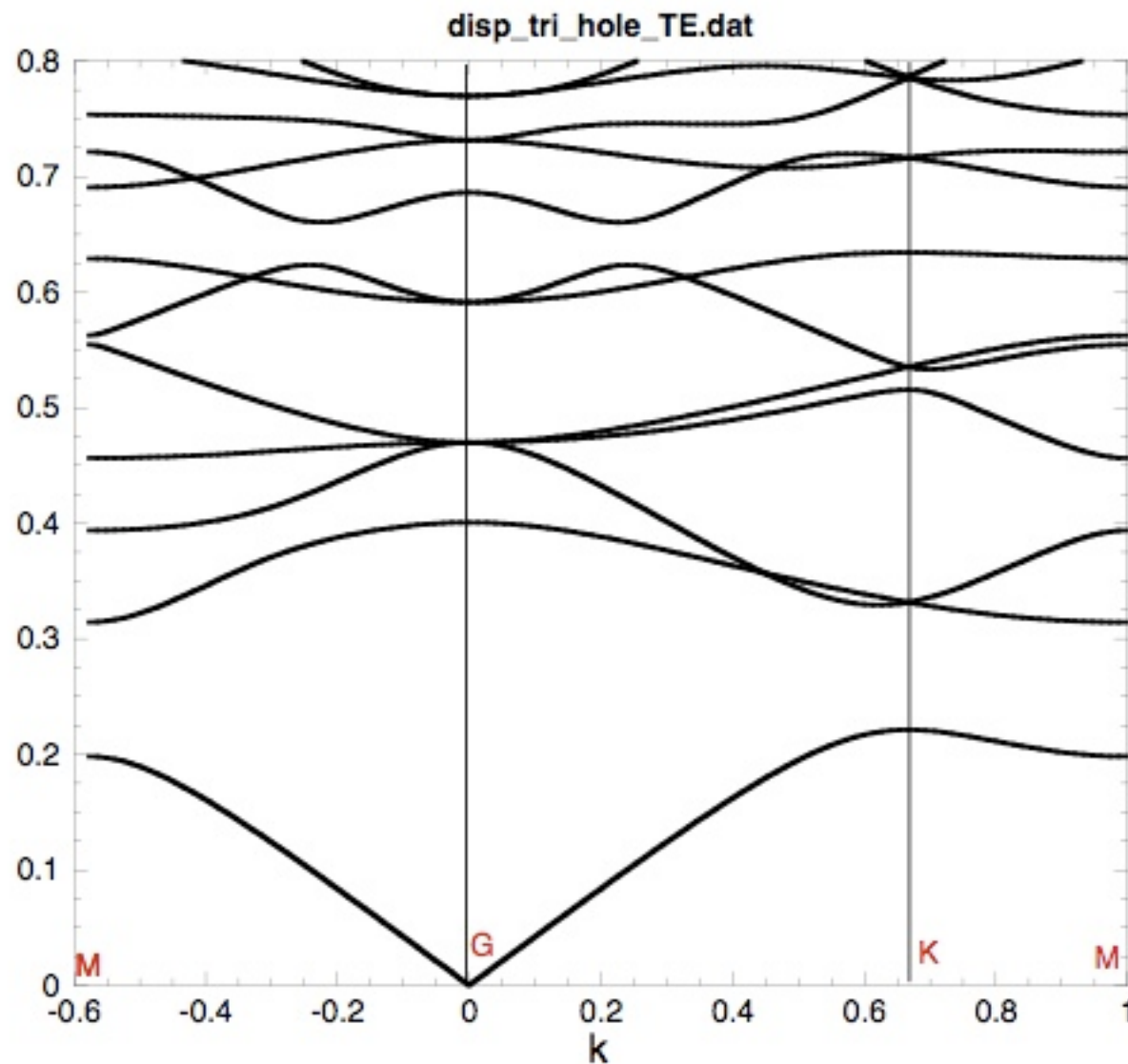


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau triangulaire, trous



facteur de remplissage = $f_{\text{air}} = 40 \%$
 $n=3.36$



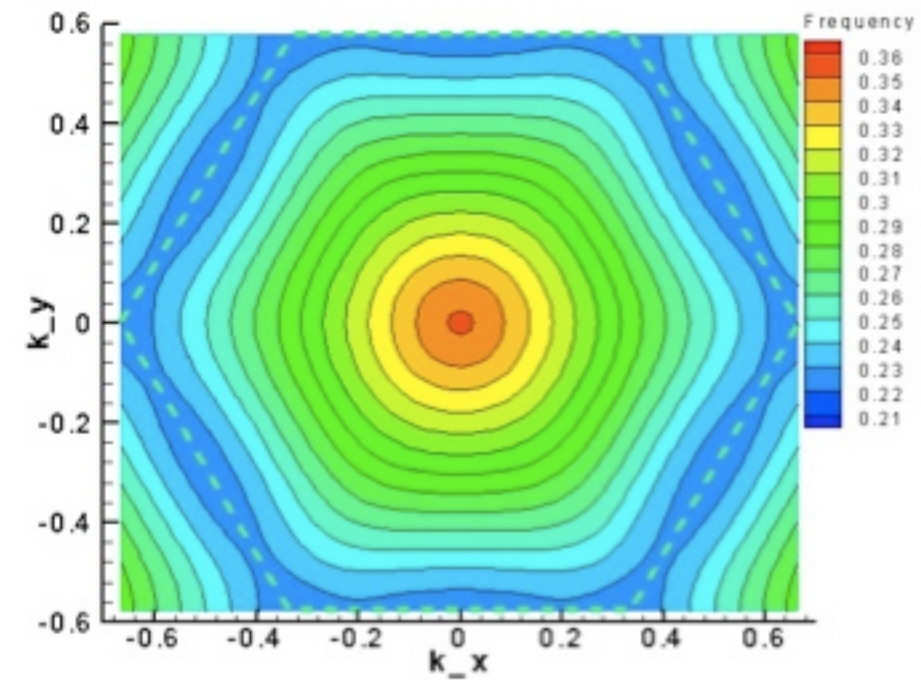
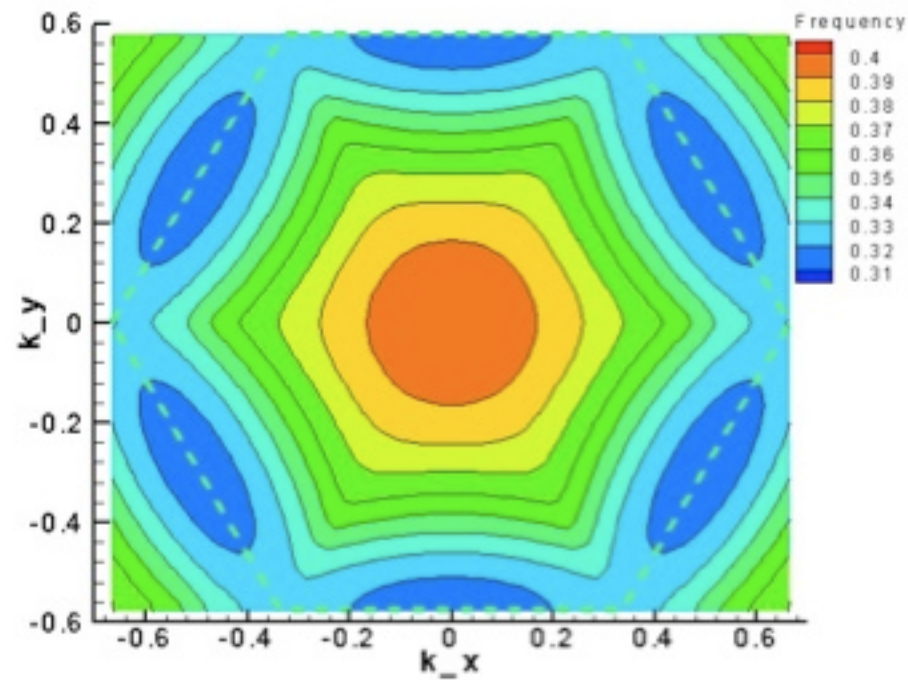
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau triangulaire, trous

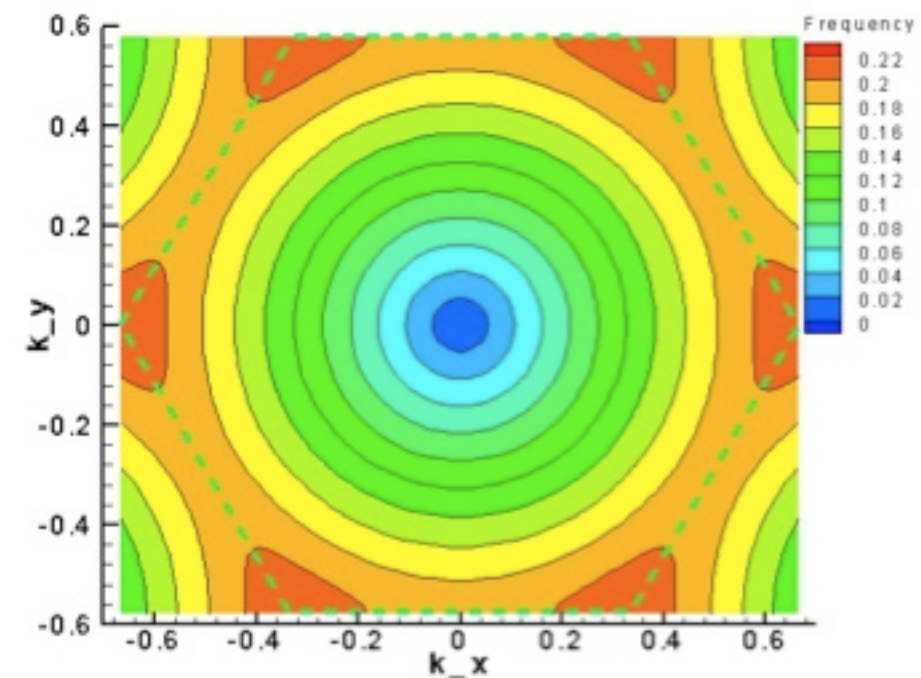
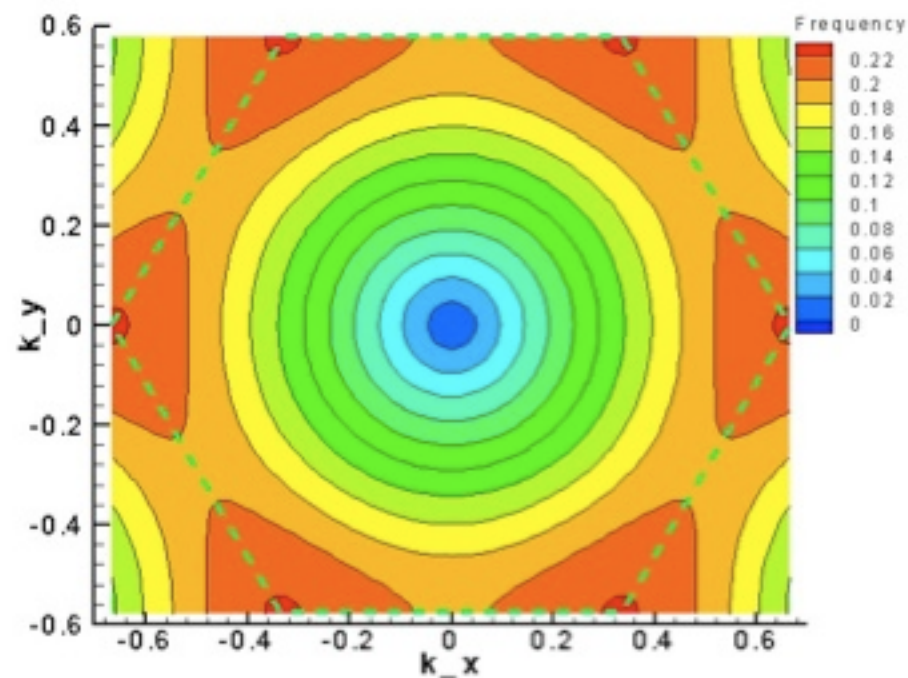
TE

TM

2

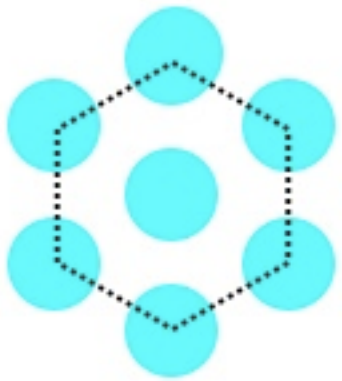


1

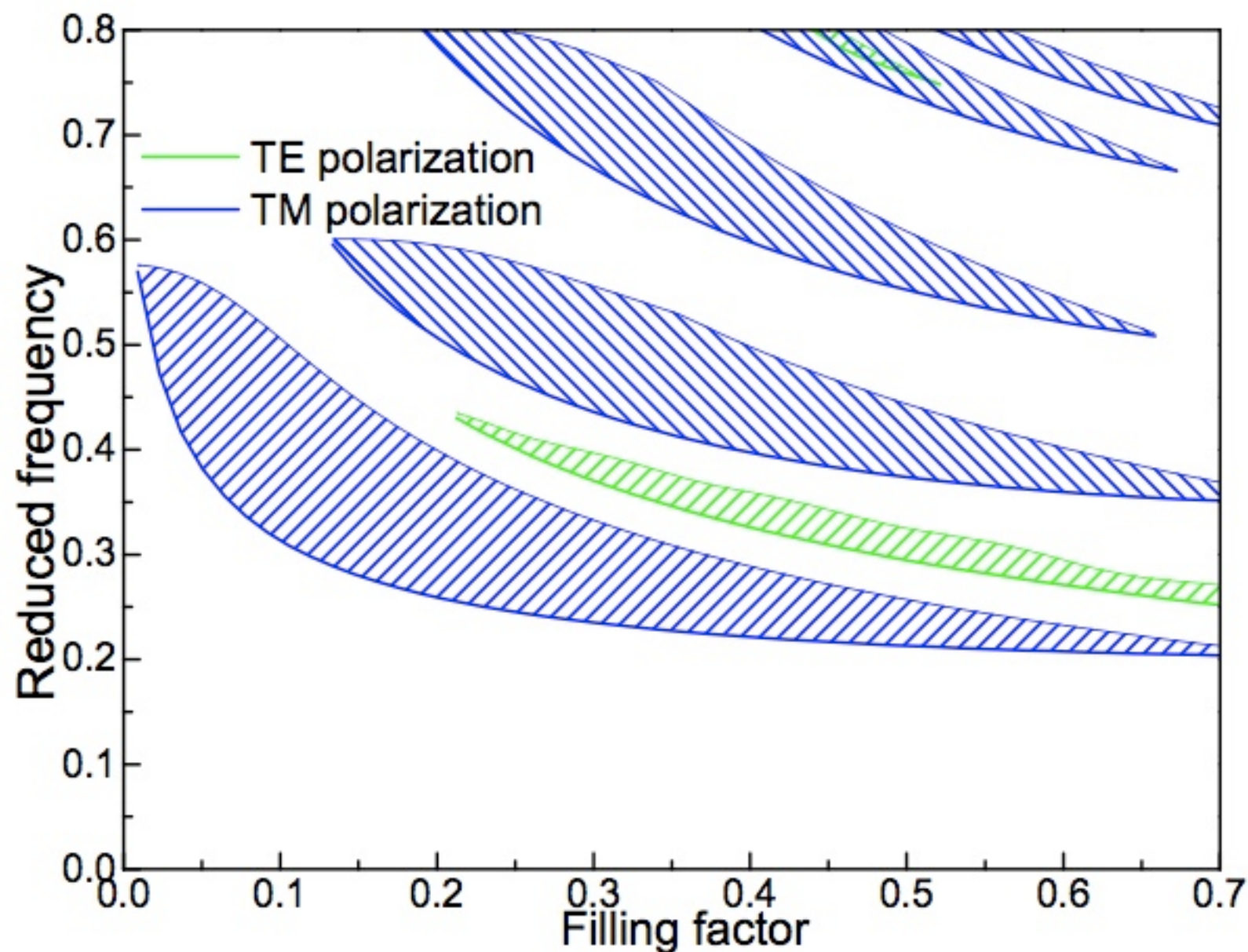


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau triangulaire, piliers

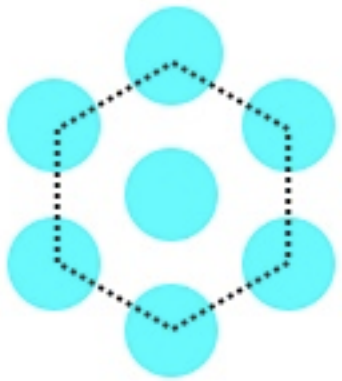


facteur de remplissage = $f_{\text{diél}}$
 $n=3.36$

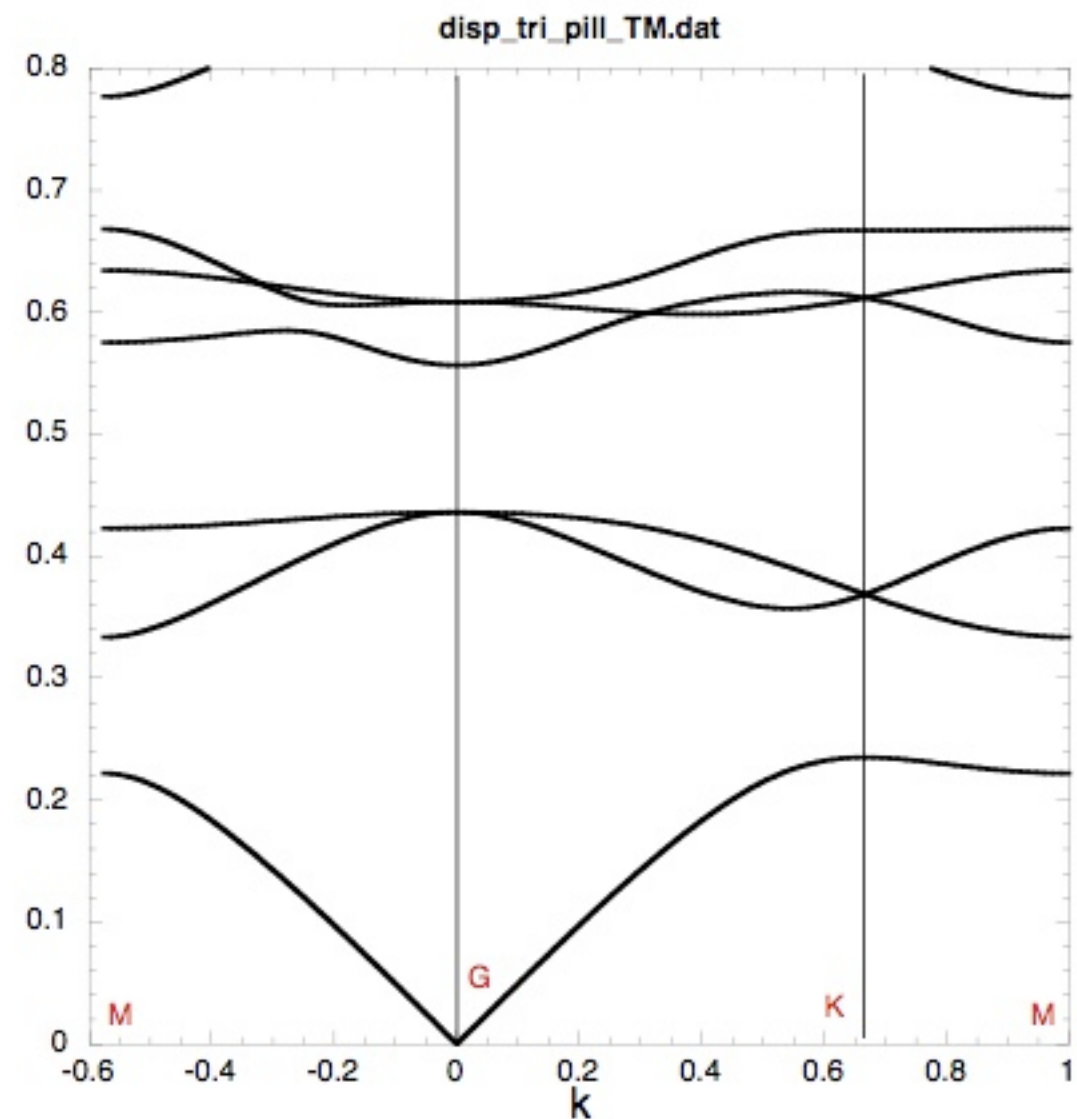
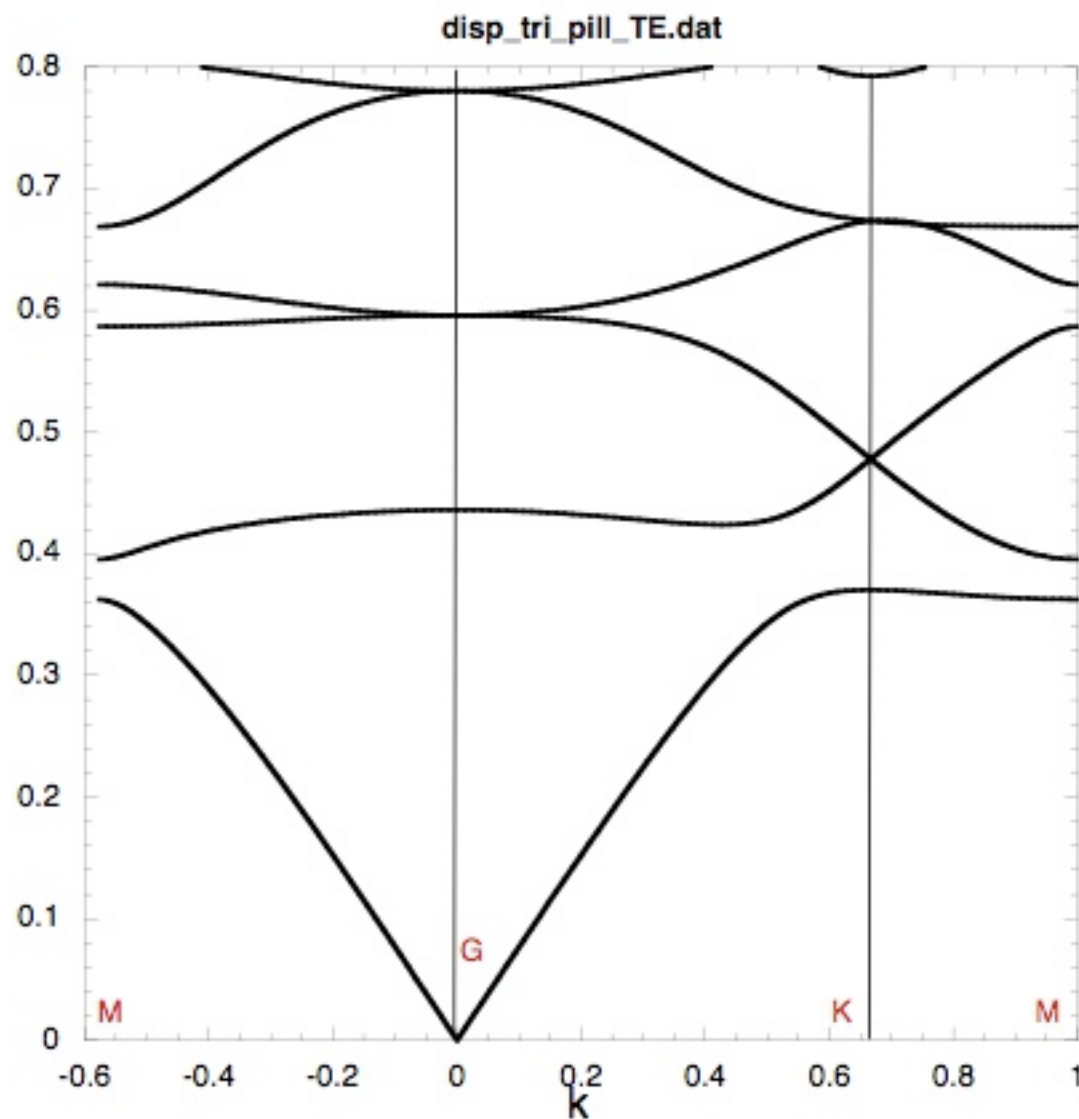


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau triangulaire, piliers



facteur de remplissage = $f_{\text{diél}} = 30 \%$
 $n=3.36$



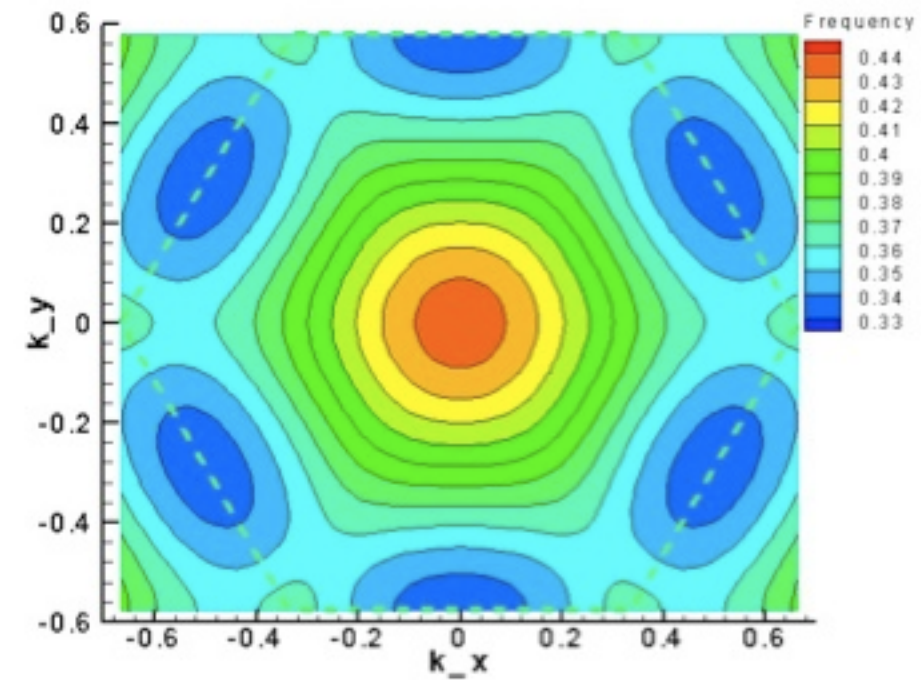
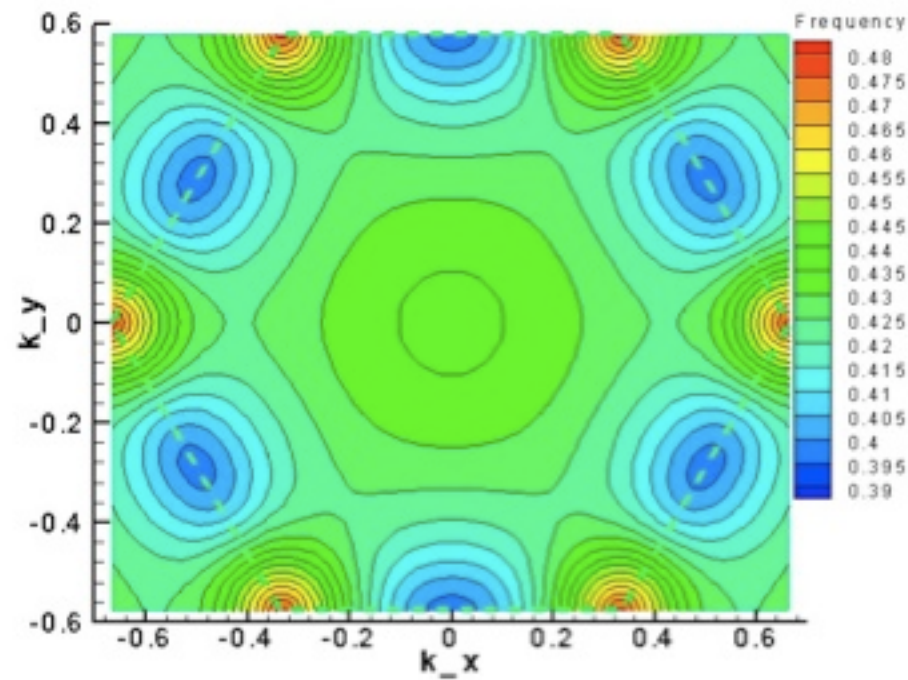
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau triangulaire, piliers

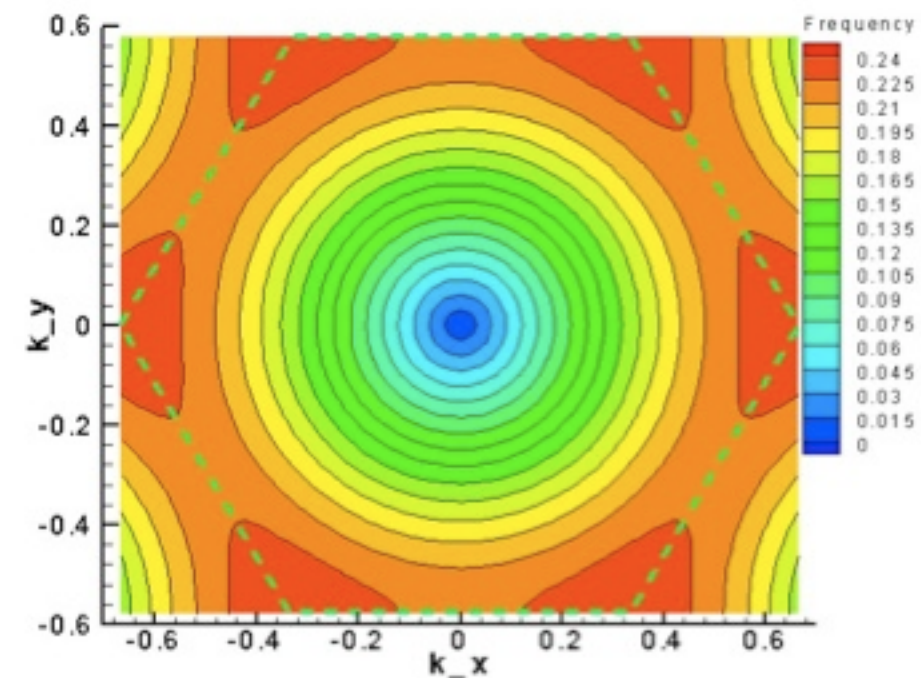
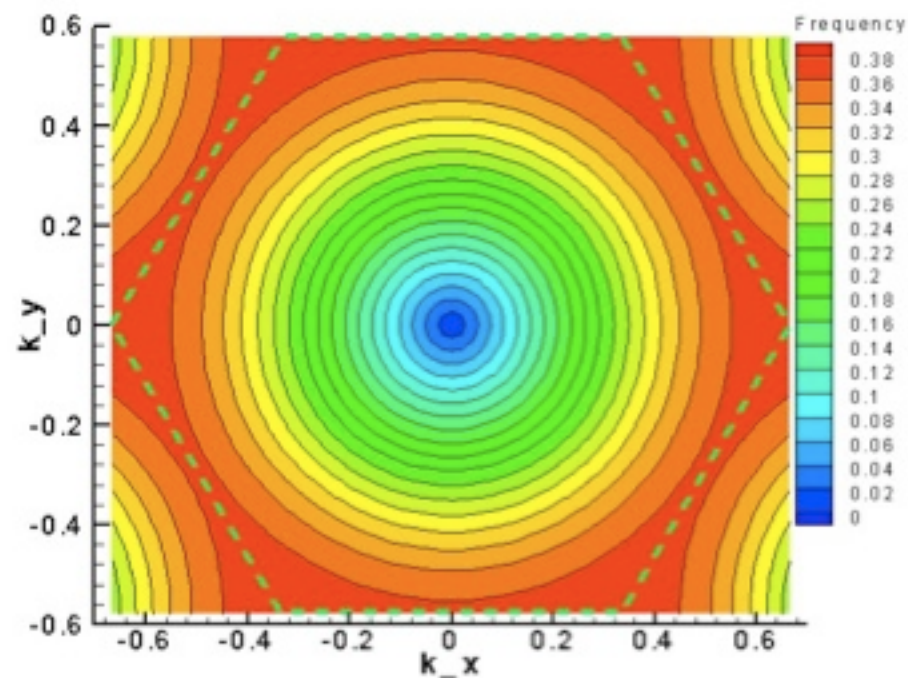
TE

TM

2

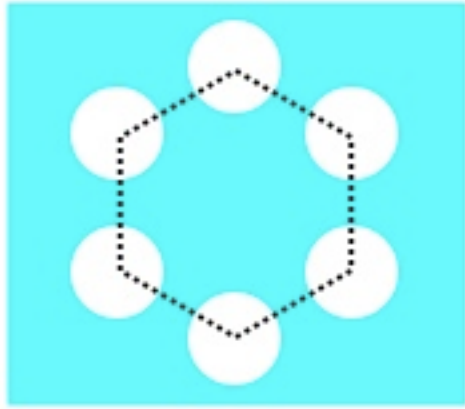


1

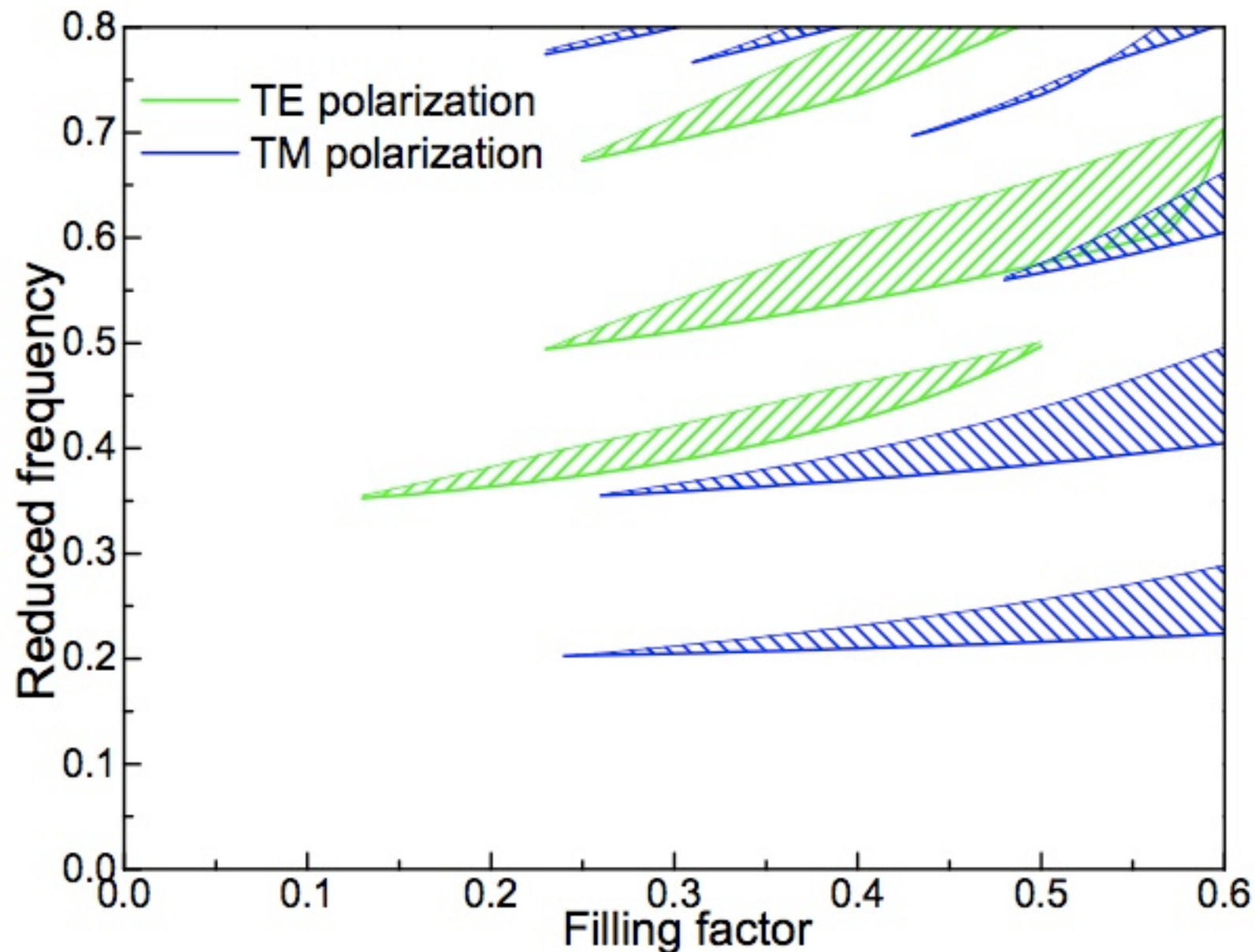


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, trous

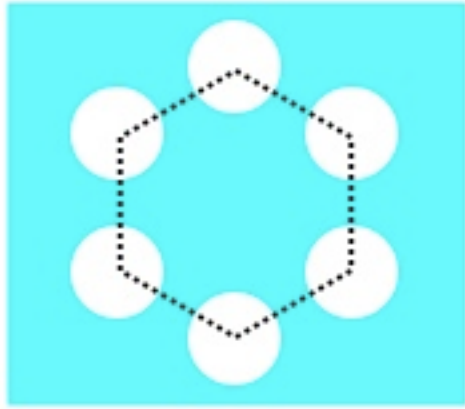


facteur de remplissage = f_{air}
 $n=3.36$

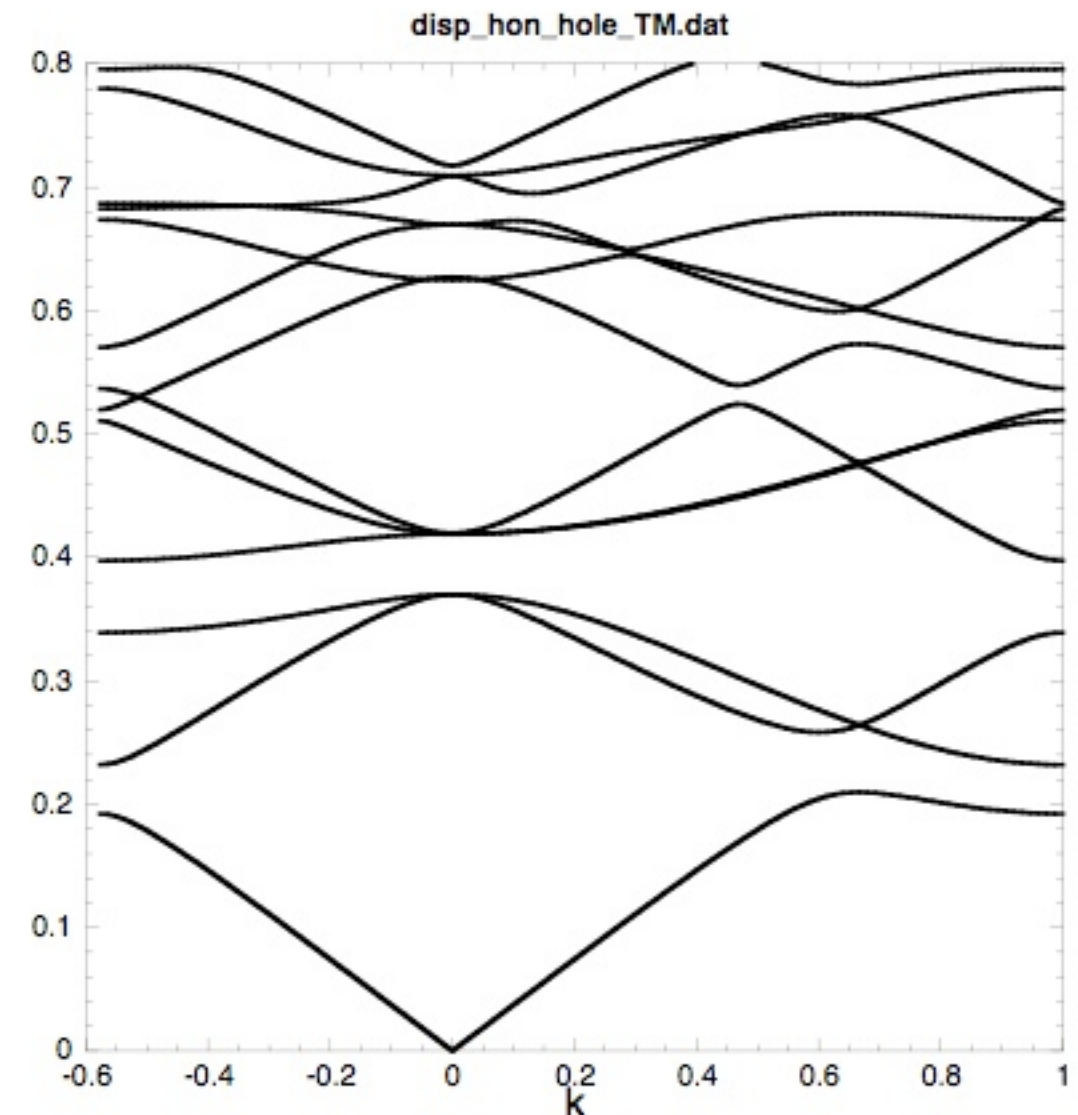
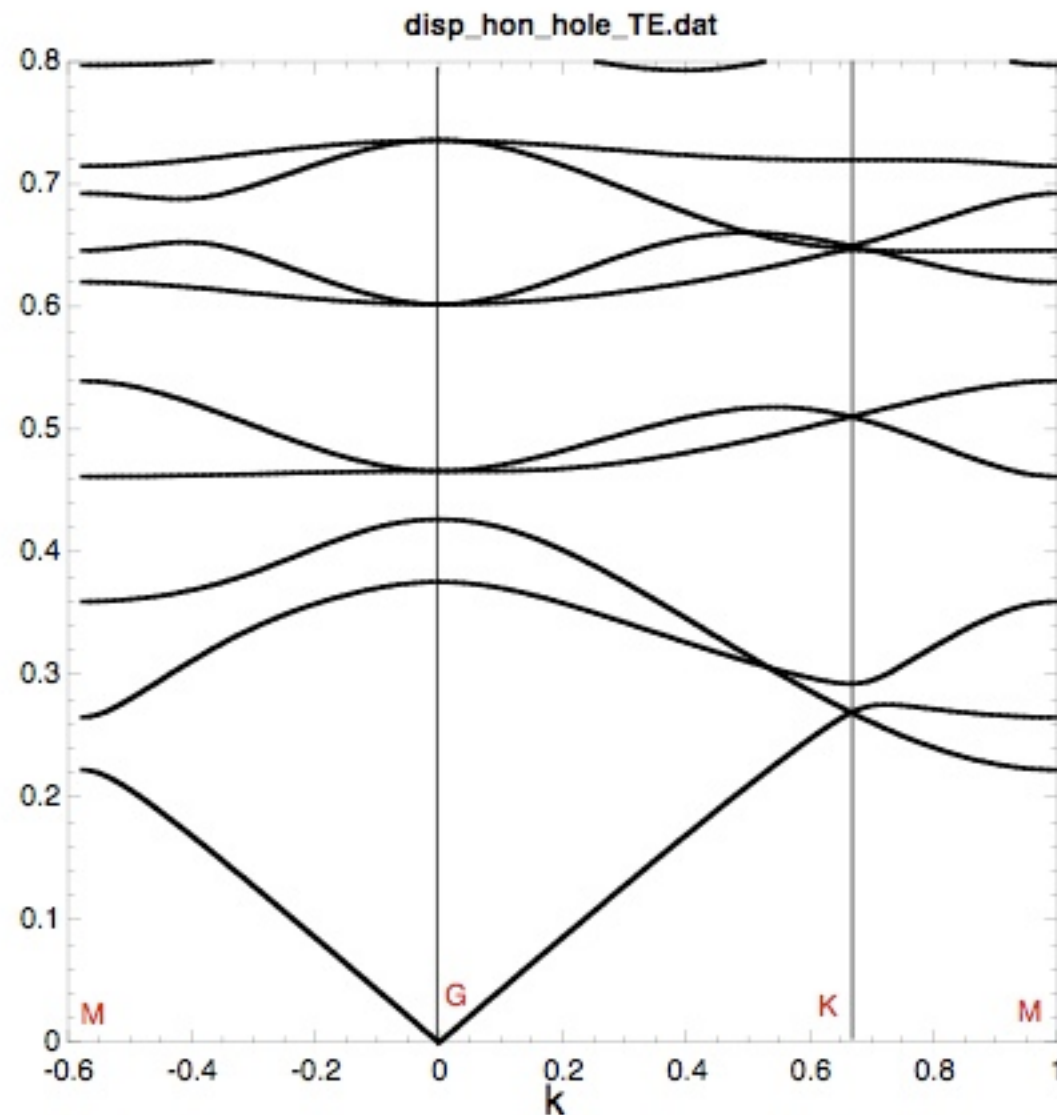


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, trous



facteur de remplissage = $f_{\text{air}} = 40 \%$
 $n=3.36$



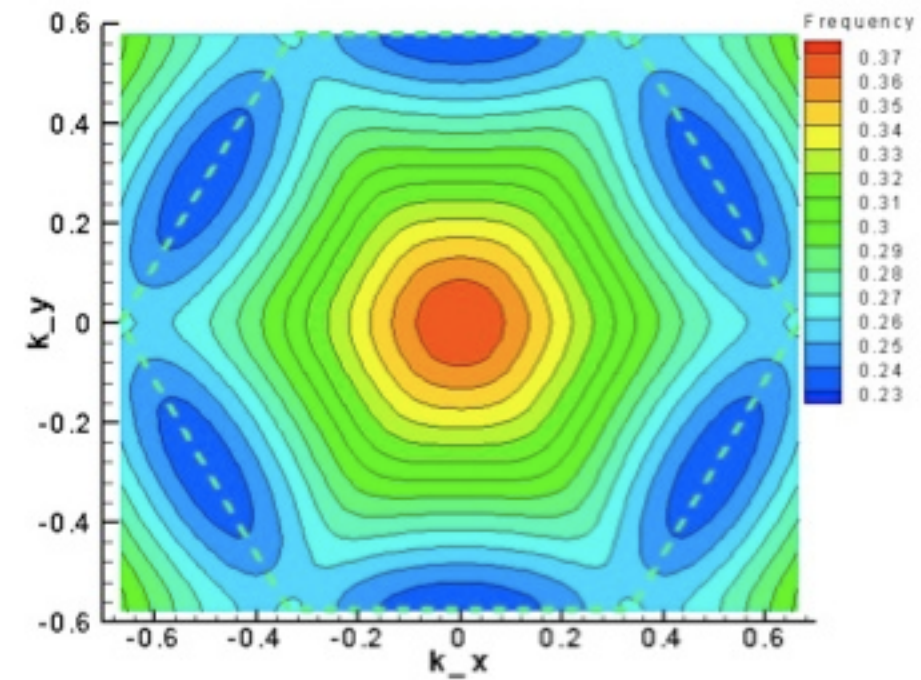
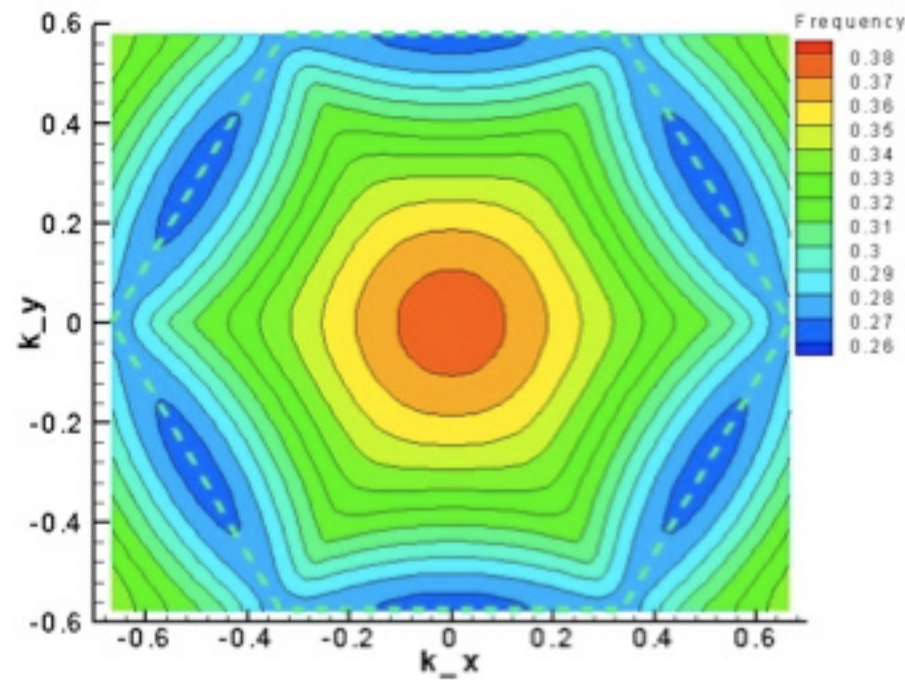
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, trous

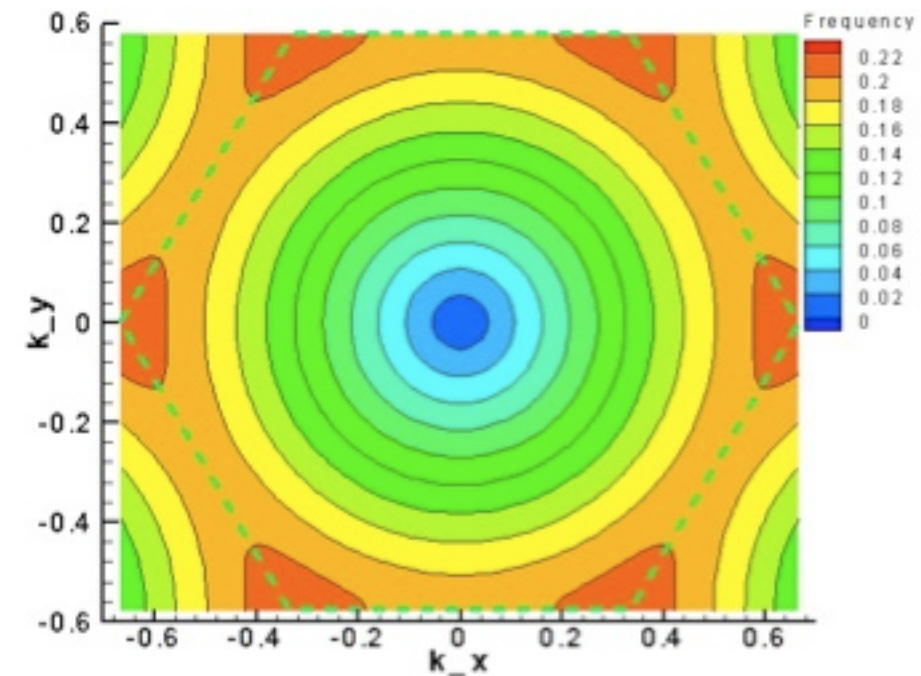
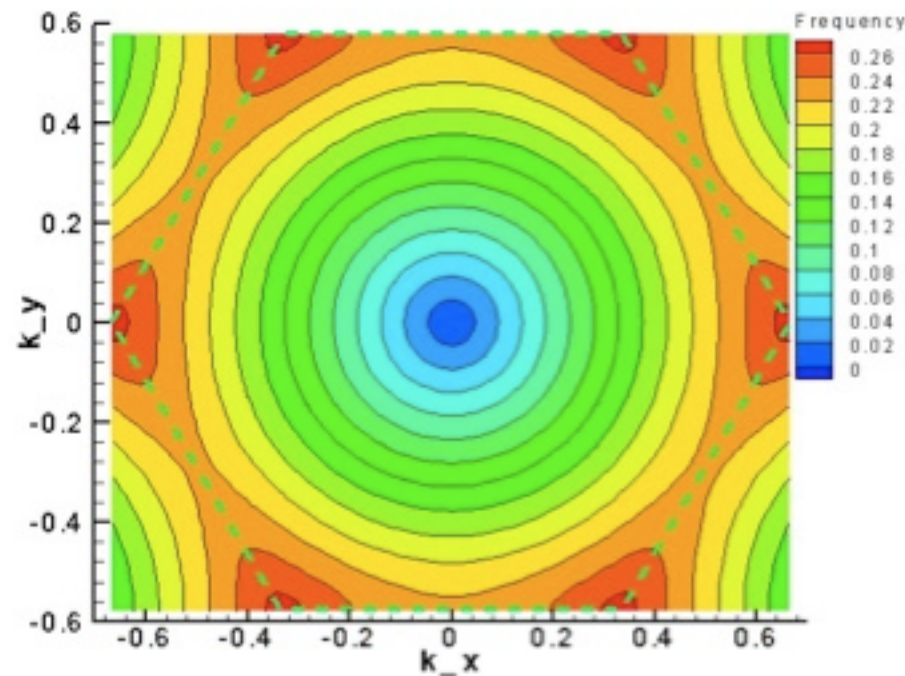
TE

TM

2



1



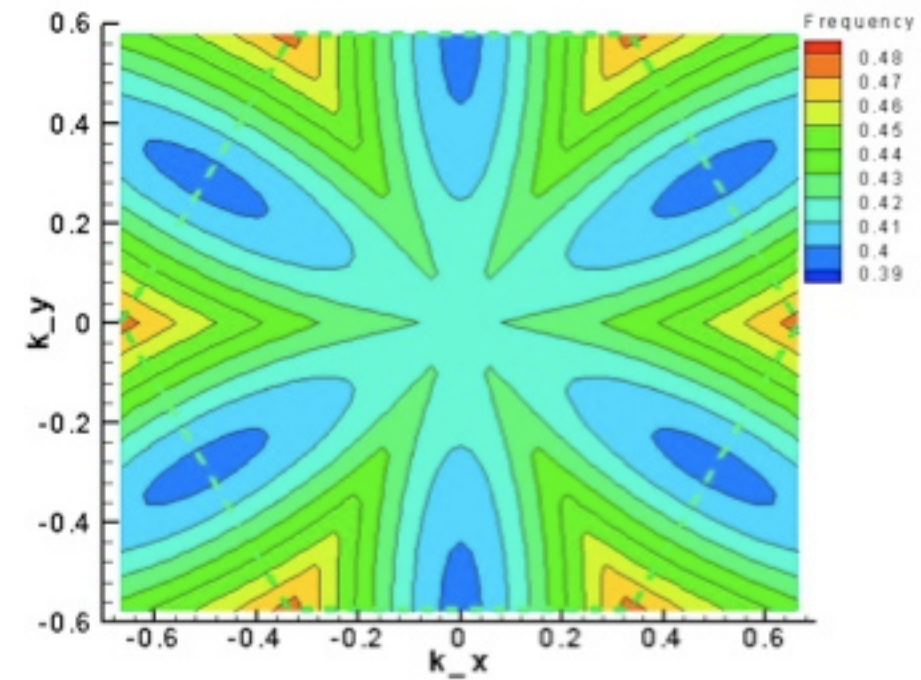
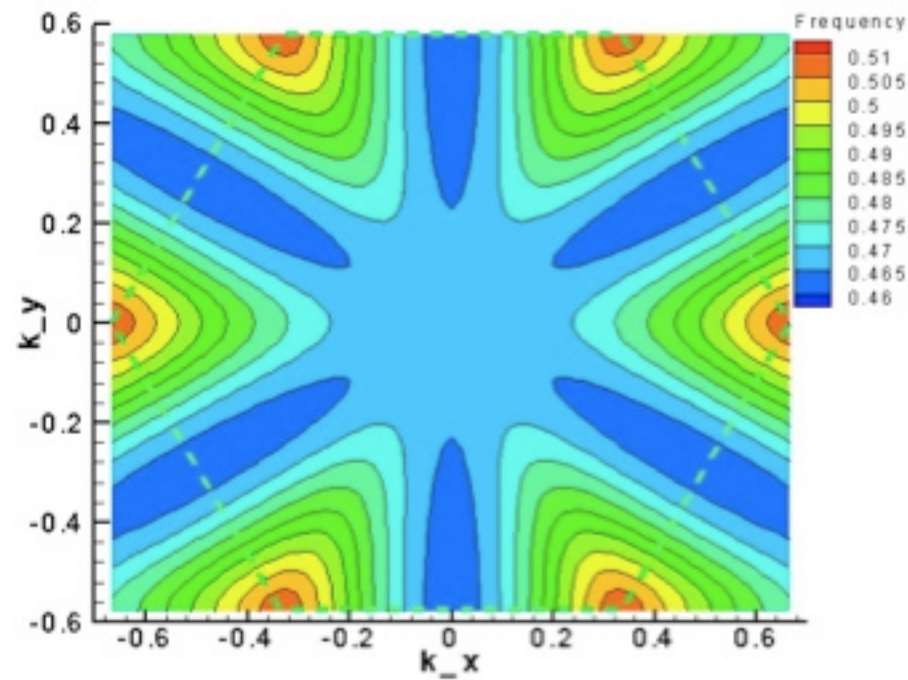
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, trous

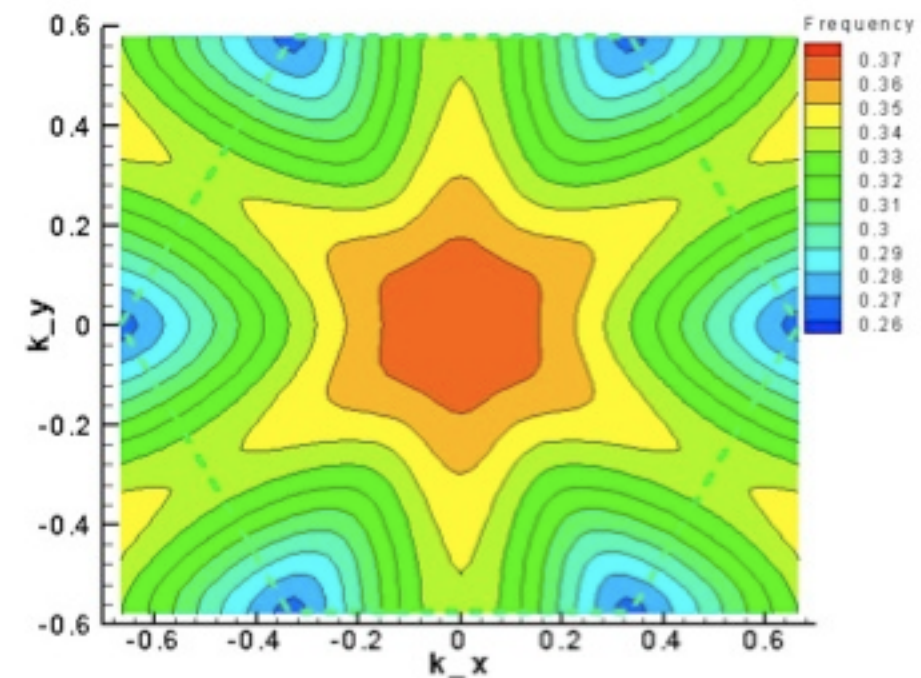
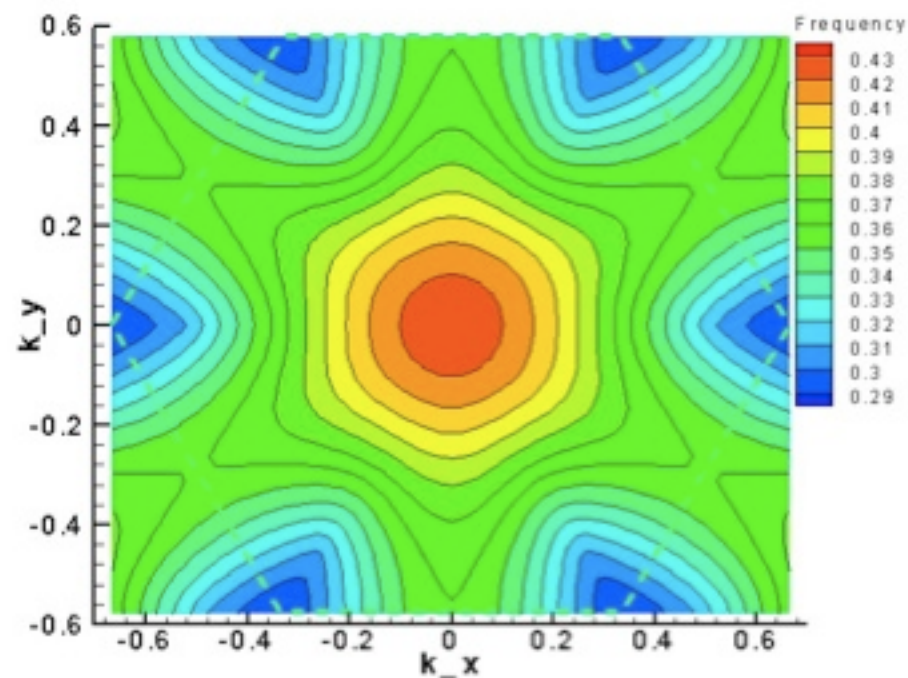
TE

TM

4

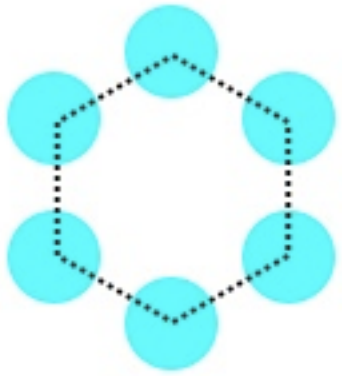


3



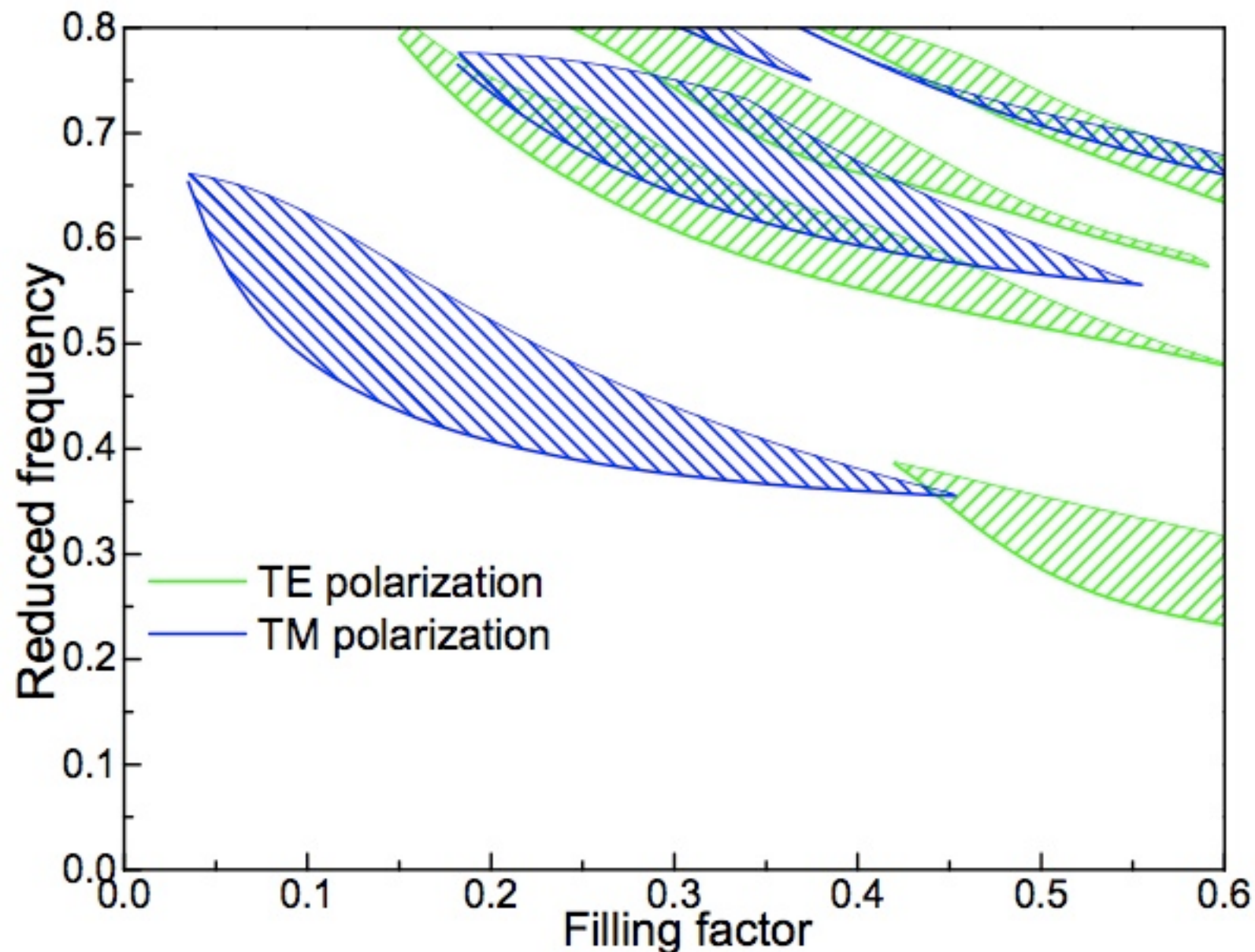
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, piliers



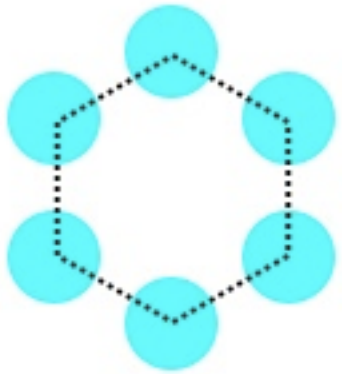
facteur de remplissage = $f_{\text{diél}}$

$n=3.36$

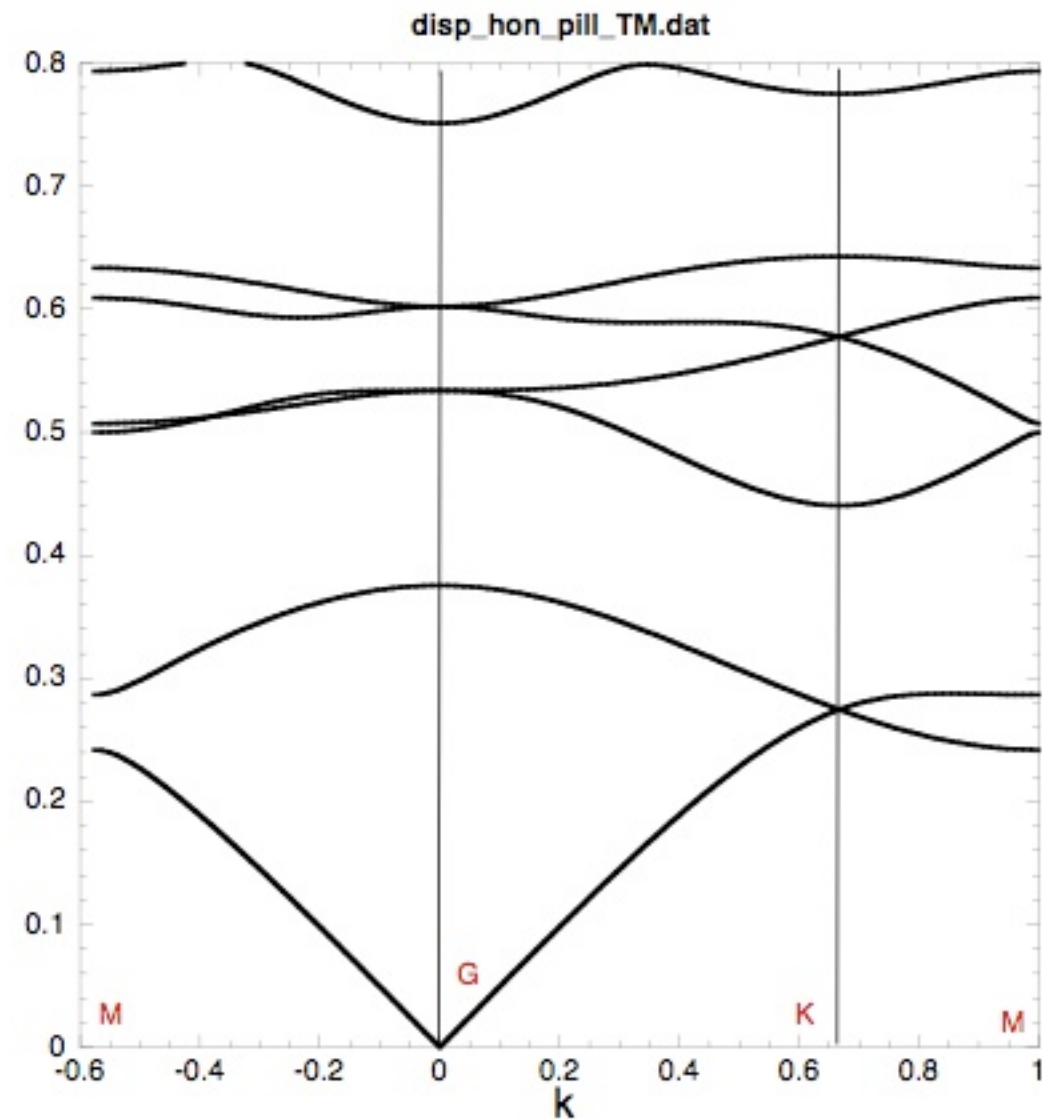
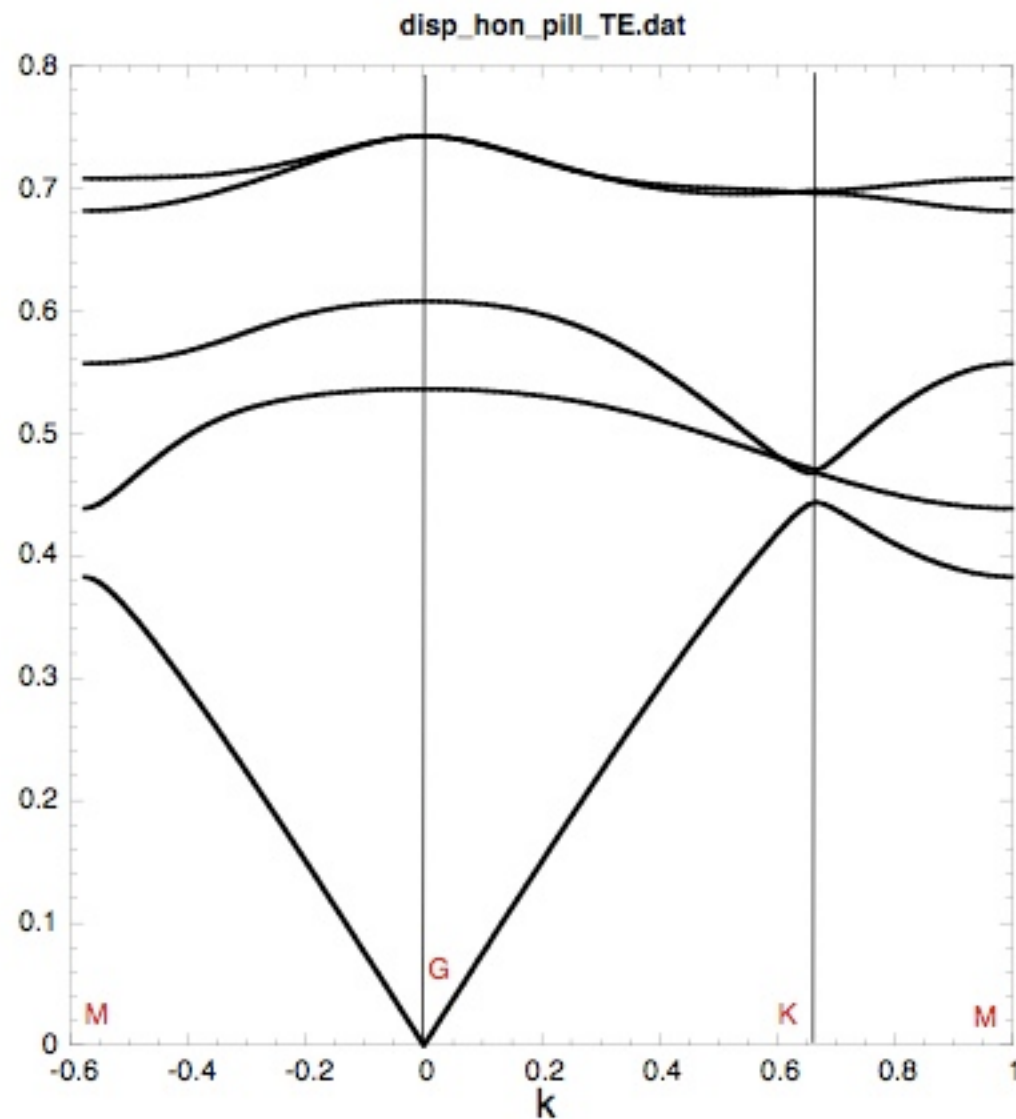


Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, piliers



facteur de remplissage = $f_{\text{diél}} = 30\%$
 $n=3.36$



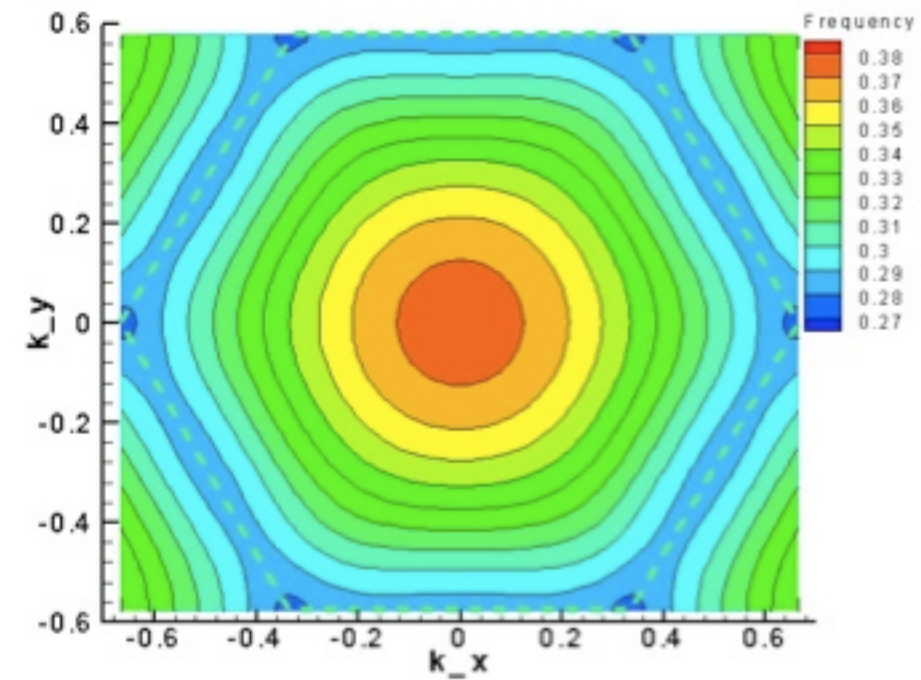
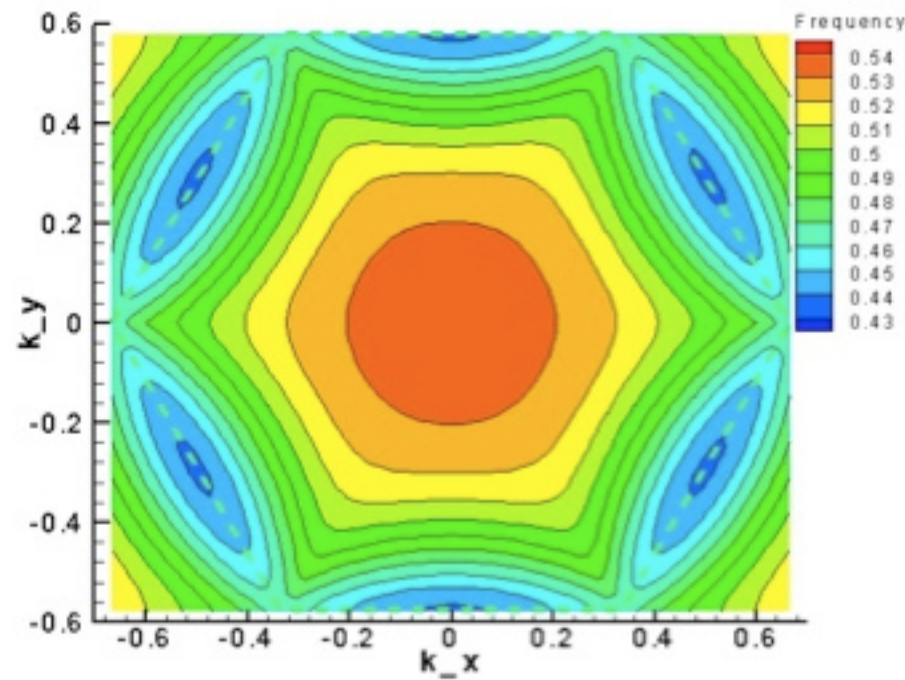
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, piliers

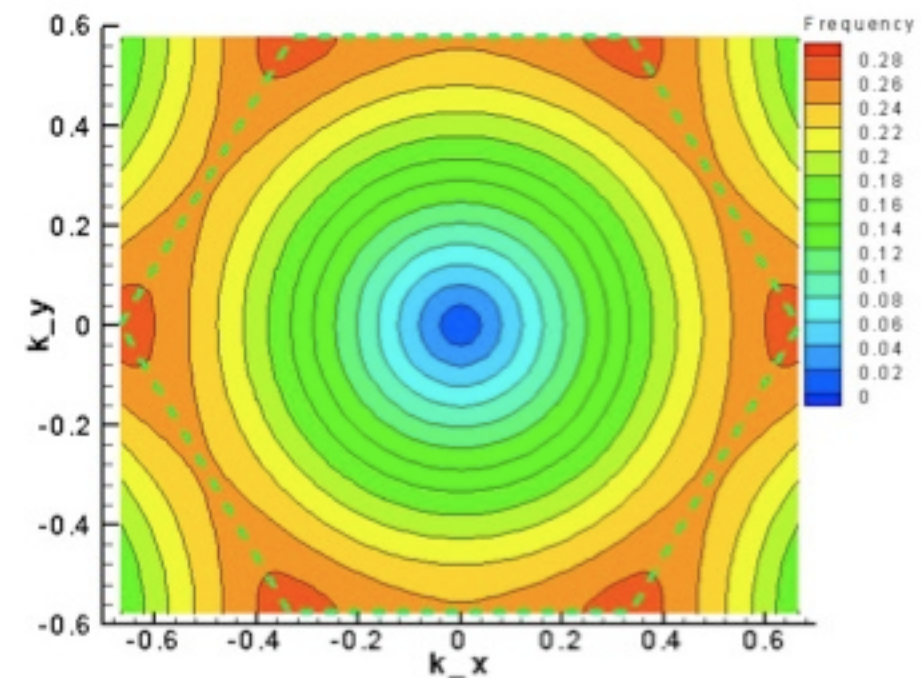
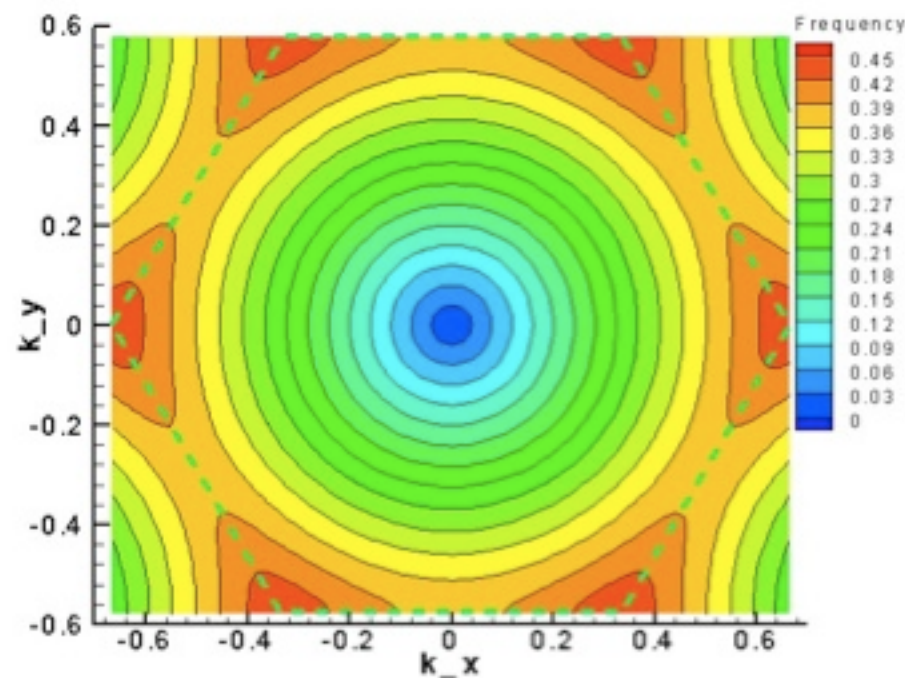
TE

TM

2



1



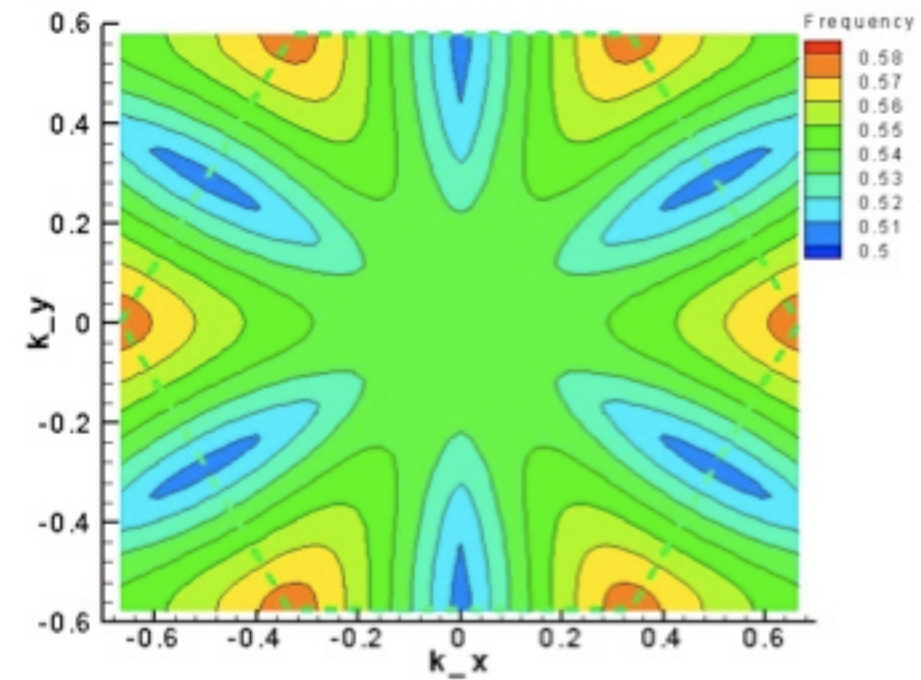
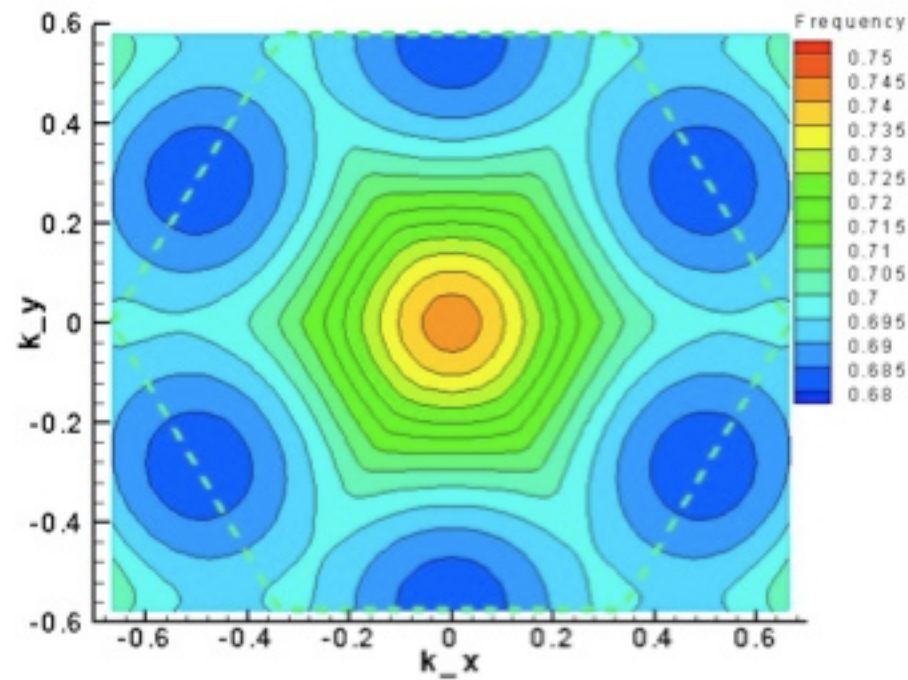
Bestiaire des systèmes bidimensionnels

Réseau graphite, piliers

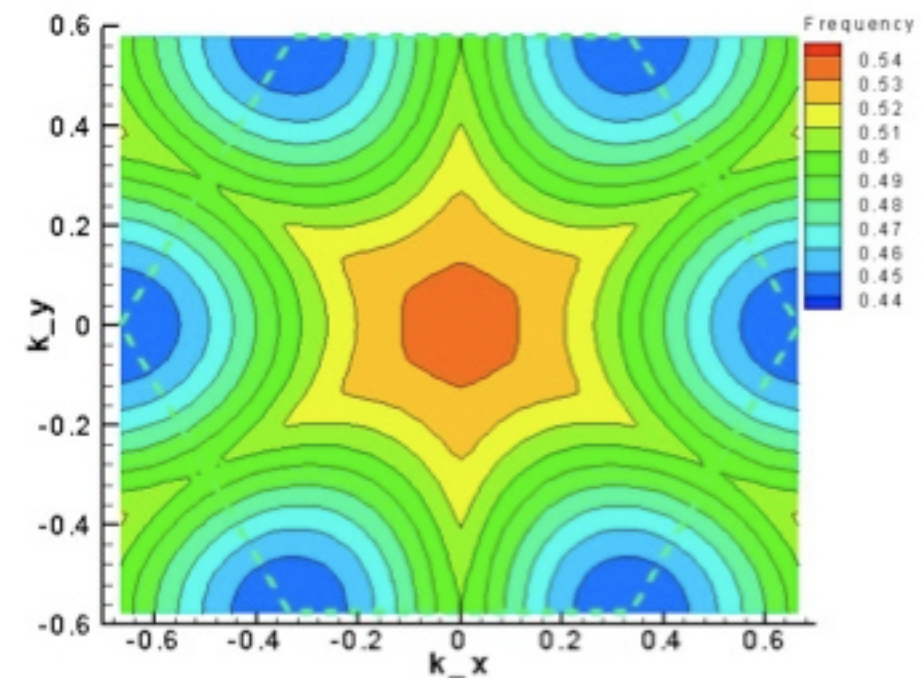
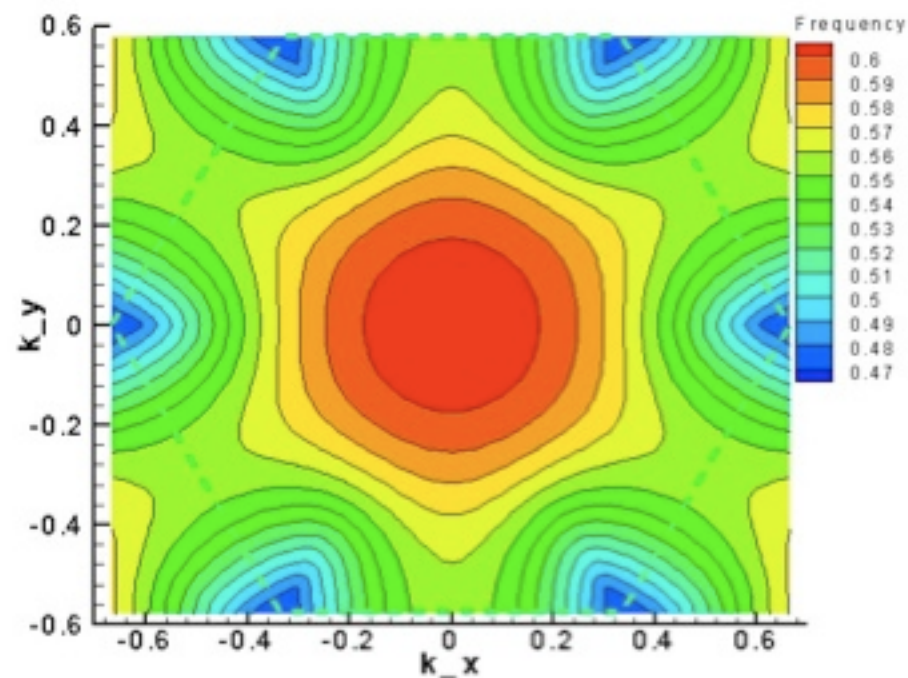
TE

TM

4



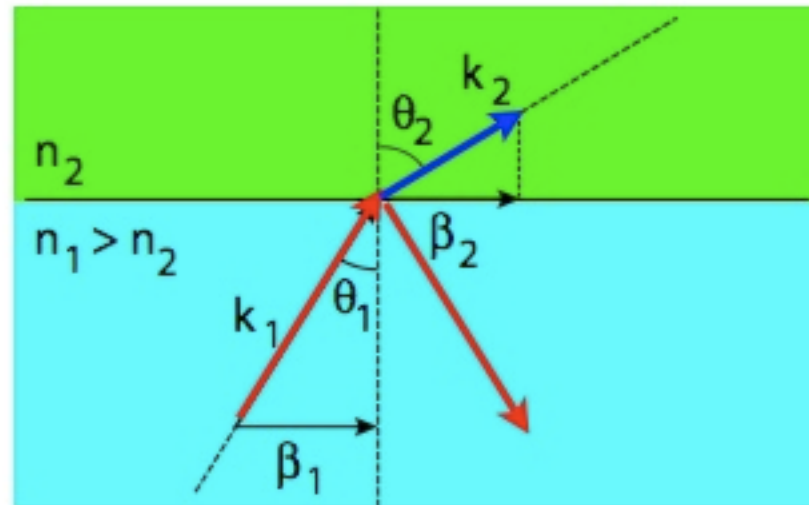
3



Cas 2D et propagation hors plan cône de lumière

Rappel: réfraction et réflexion vues comme un phénomène de diffusion entre courbes de dispersion.

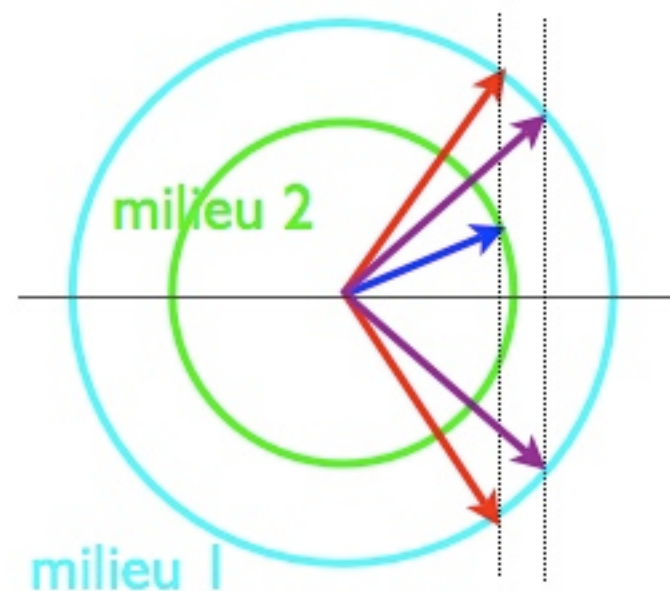
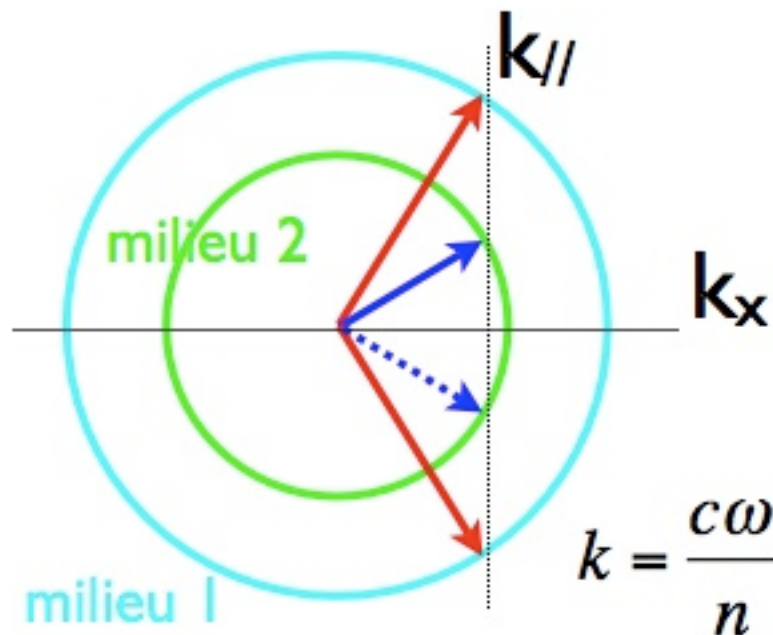
Ibn Sahl (c. 984) (aussi connues sous le nom de lois de Snell-Descartes, c.1631) :



$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{n_2}{n_1}$$

n'est autre que la conservation de $k_{//}$ à l'interface (invariance par translation) :

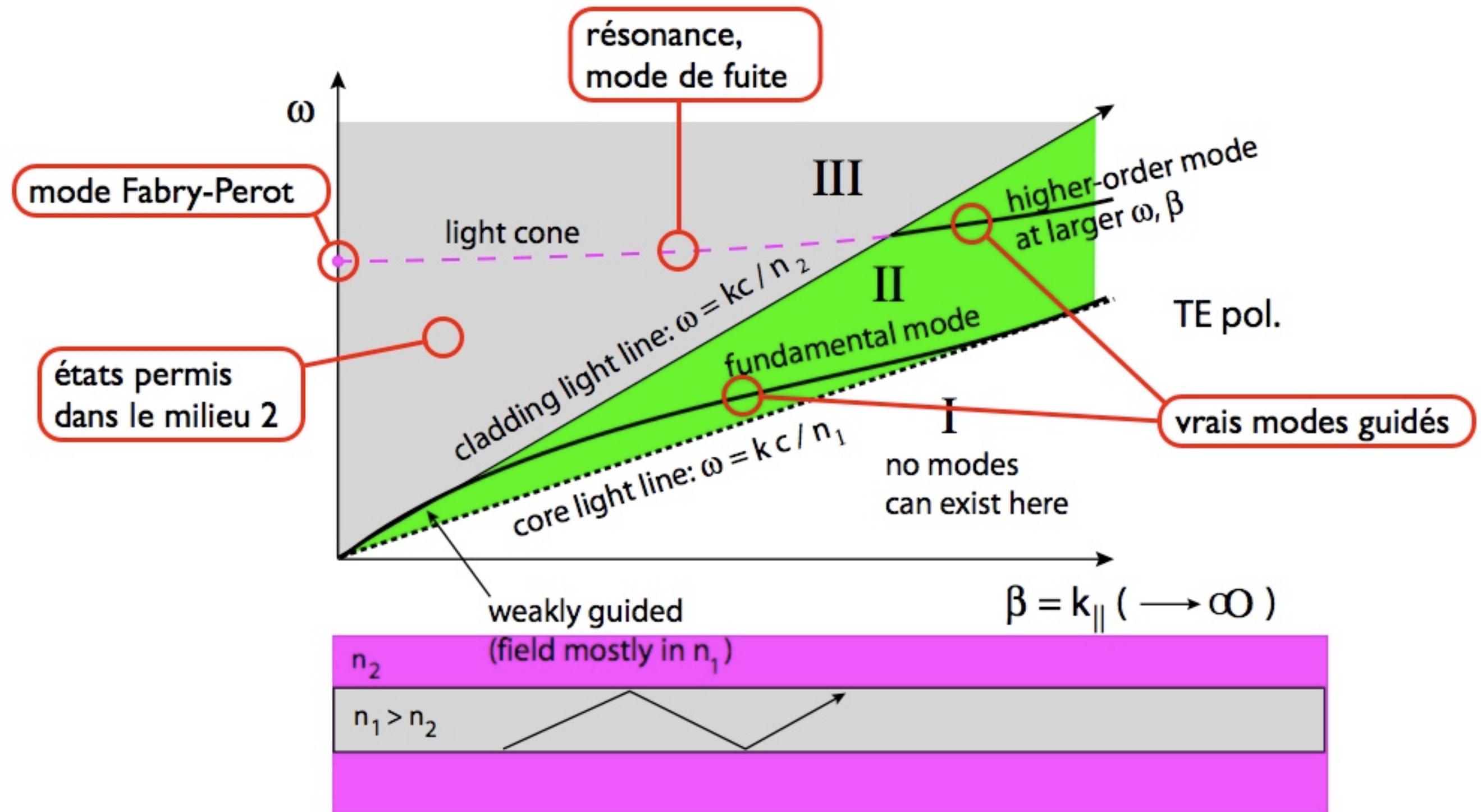
$$k_0 n_1 \sin \theta_1 = k_0 n_2 \sin \theta_2 \quad \beta_1 = \beta_2$$



Réflexion total interne :

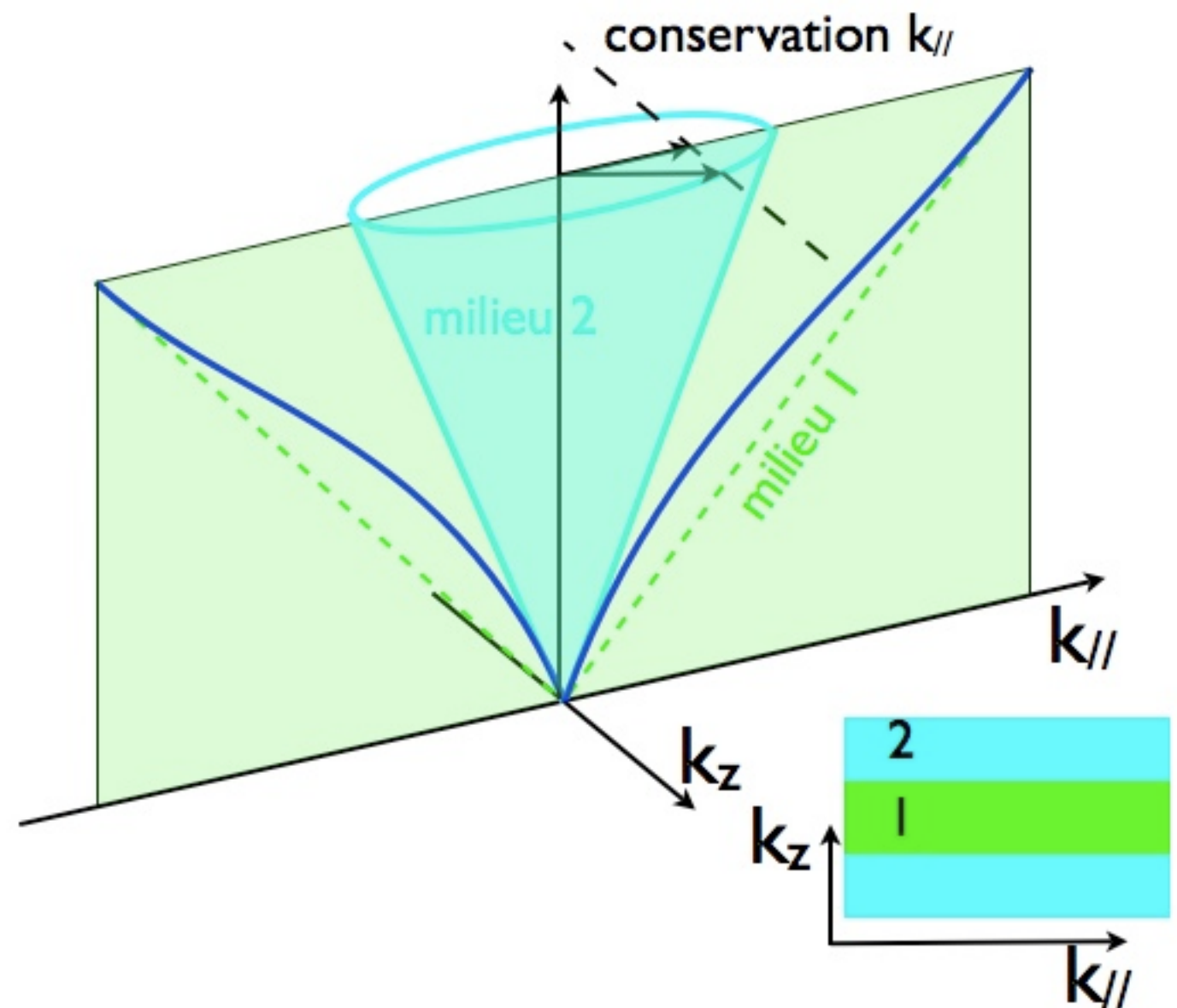
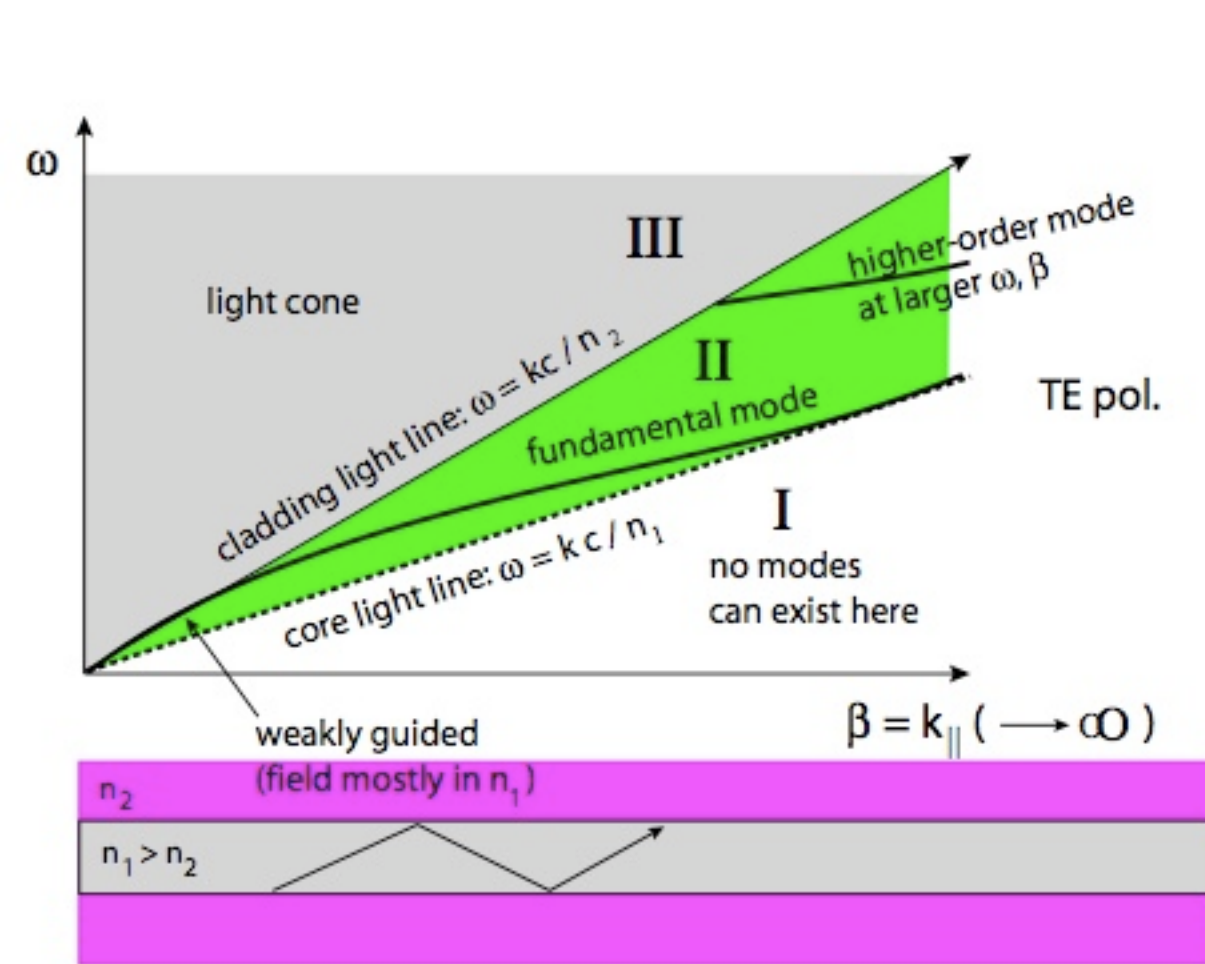
- * $k < n_2 \omega / c$:
couplage 1 vers 2 possible
- * $k > n_2 \omega / c$:
couplage 1 vers 2 impossible

Cas 2D et propagation hors plan cône de lumière



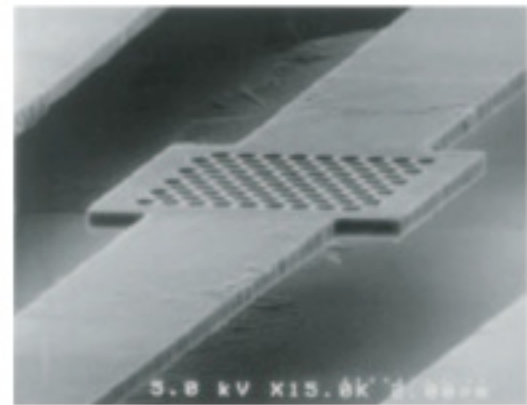
Lame mince et guide d'onde

Cas 2D et propagation hors plan cône de lumière



Remarque: le continuum d'états à l'intérieur du cône de lumière provient de la **projection du diagramme de dispersion sur $k_{||}$** du milieu gaine qui est semi-infini

Cas 2D et propagation hors plan cône de lumière

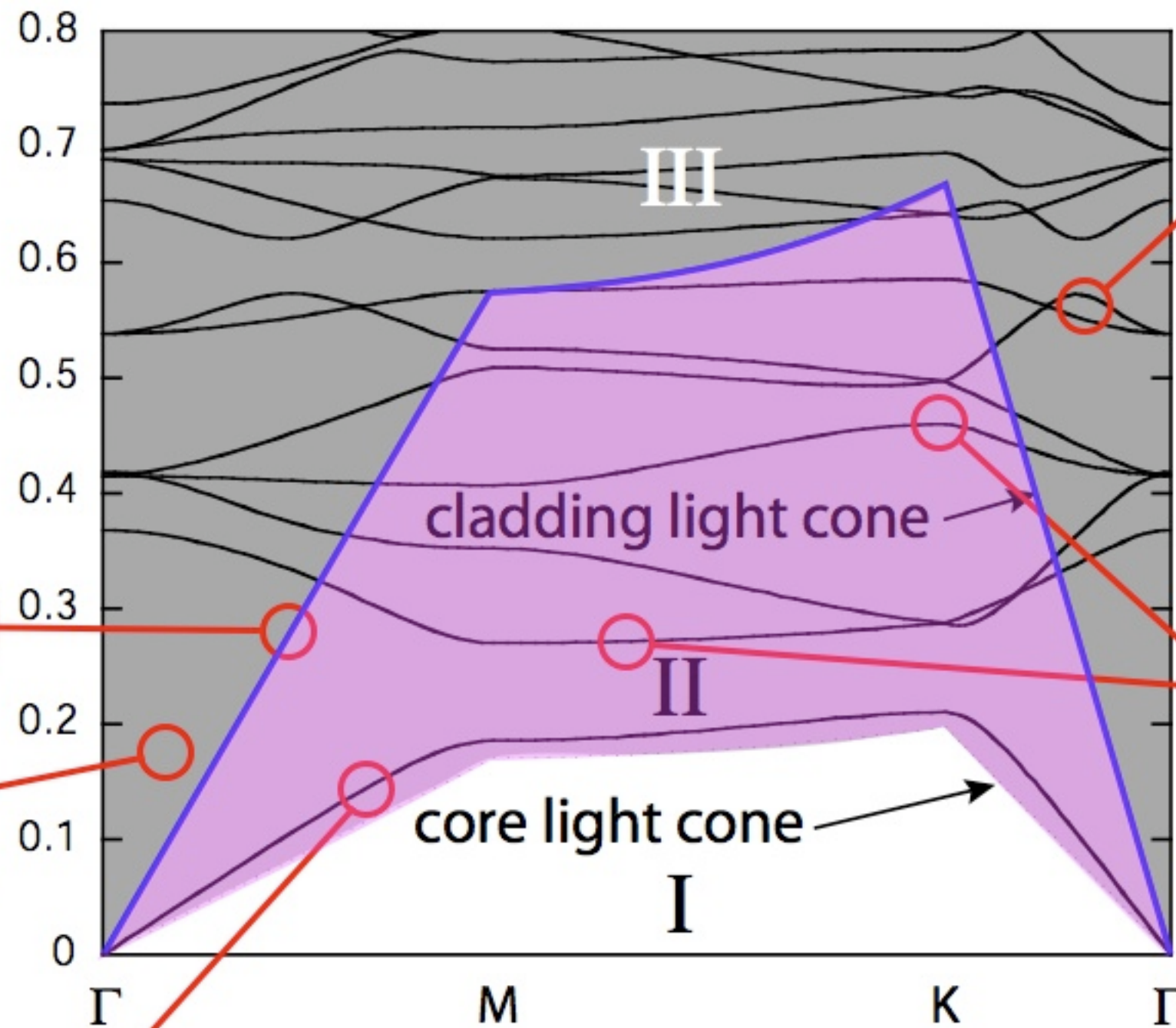


$$u = a/\lambda$$

cône de lumière (air)

états permis
dans le milieu 2

cas d'un guide faible
contraste d'indice. Il n'y a
pas de vrais modes confinés



résonances

cladding light cone

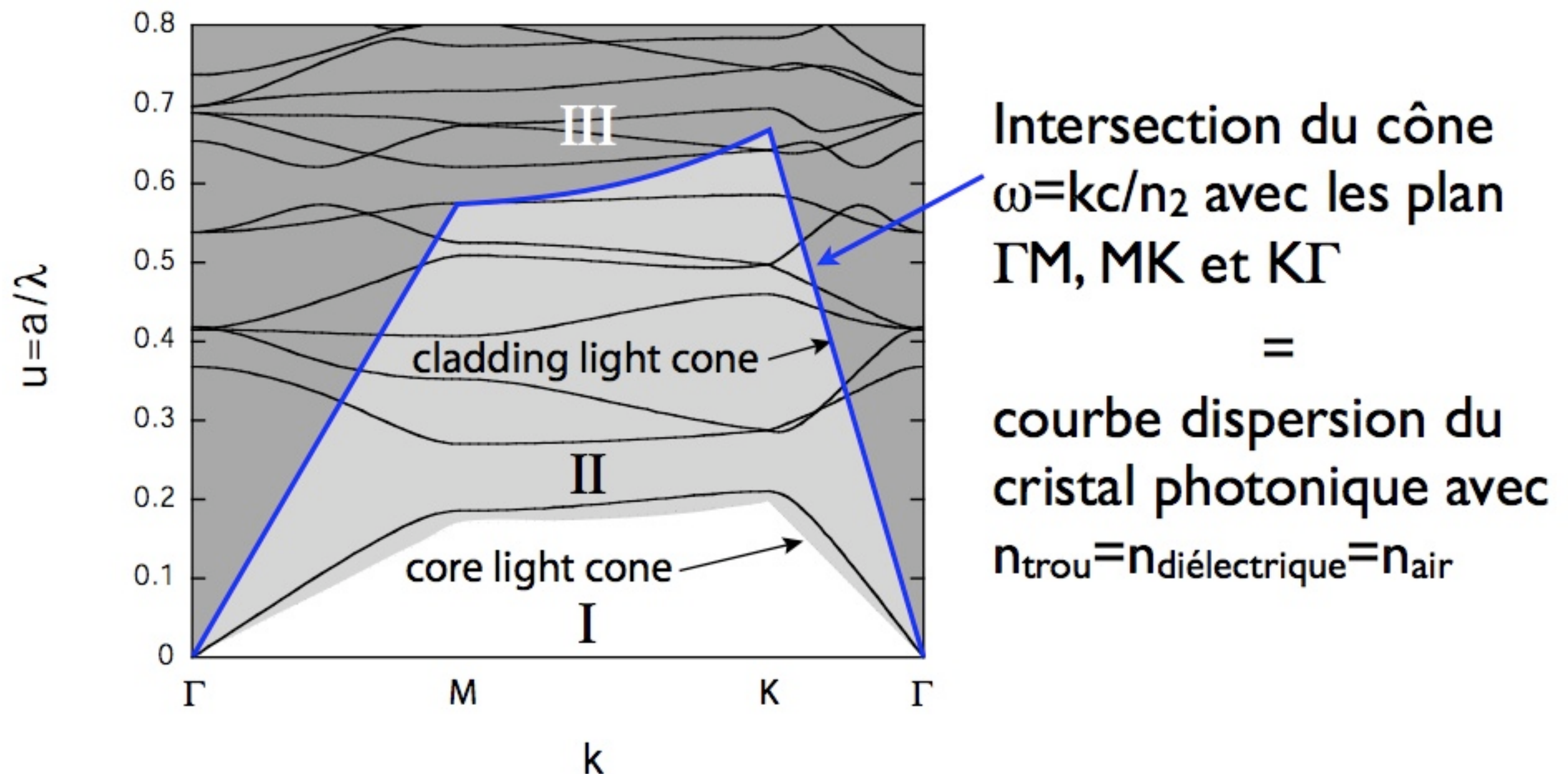
core light cone

vrais modes de
cristaux photoniques

Membrane

Cas 2D et propagation hors plan cône de lumière

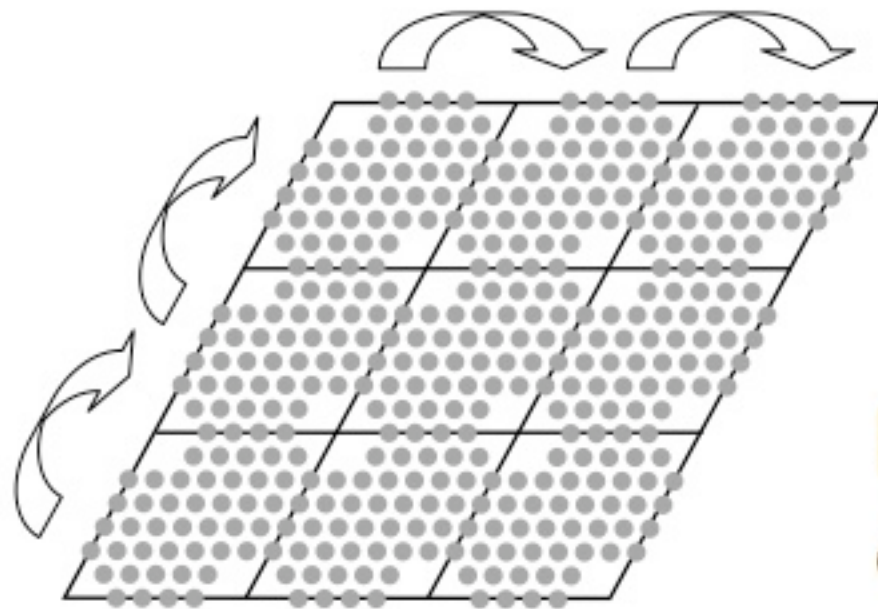
Idem: le continuum d'états à l'intérieur du cône de lumière provient de la **projection du diagramme de dispersion sur $k_{//}$** du milieu gaine et **repliée sur la première zone de Brillouin**



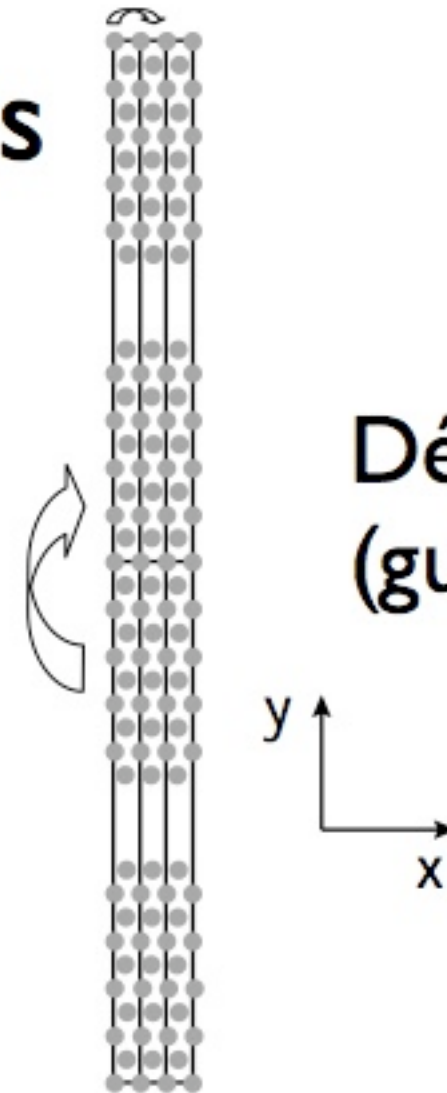
Cas 2D et modes de défauts super-cellule

But: calcul de modes de défauts

Nouvelle cellule élémentaire
agrandie α fois dans la direction
 a_1 et β fois dans a_2



Défaut ponctuel



**Défaut linéaire
(guide d'onde)**

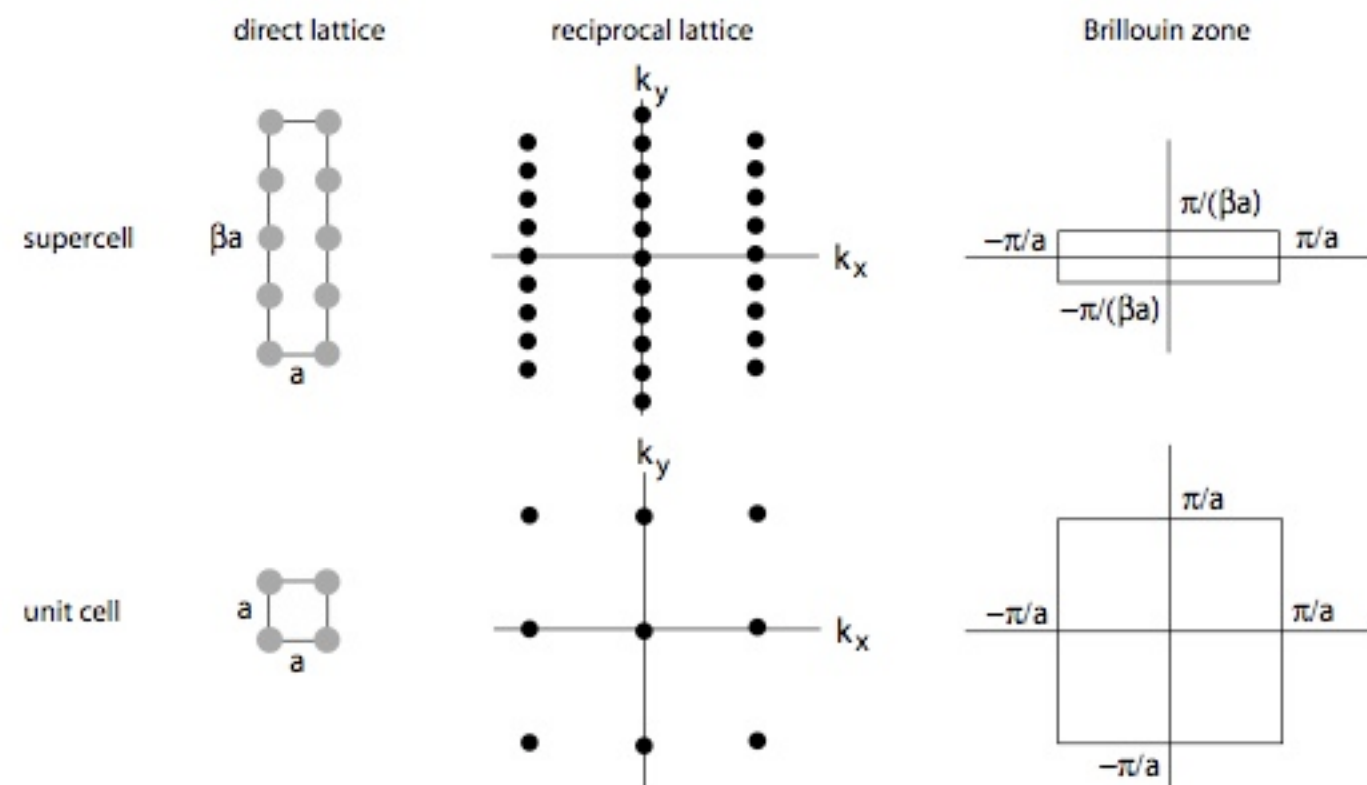
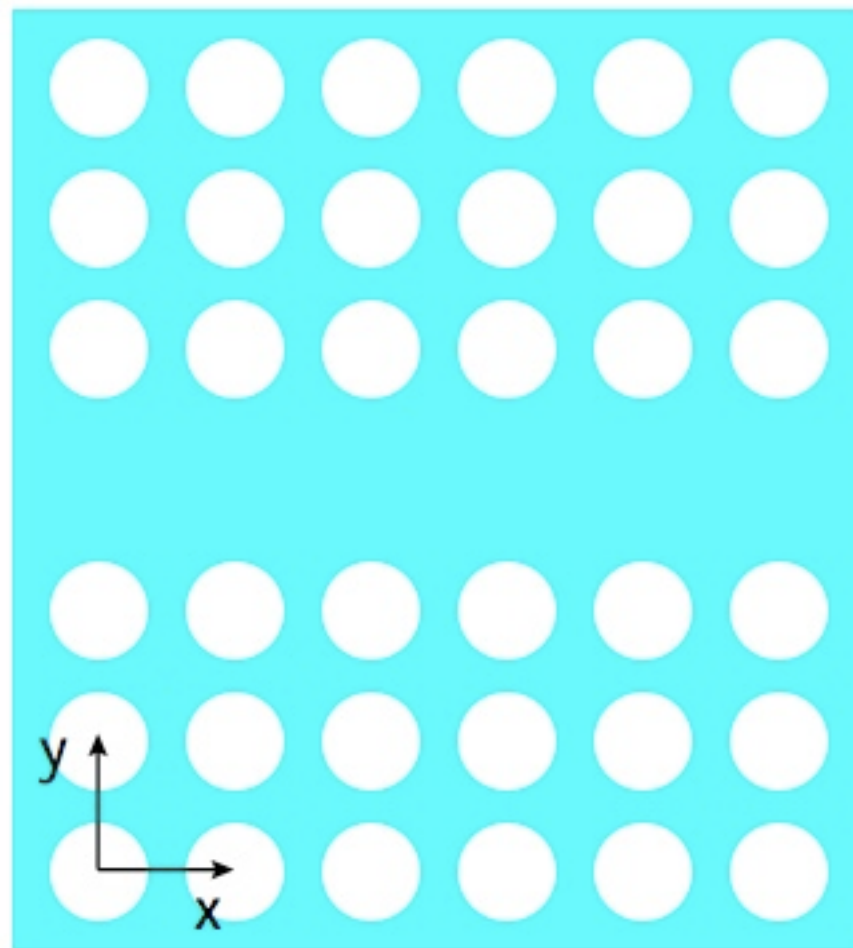
Pour la même précision que la cellule
élémentaire d'origine il faut N ondes planes

$$N = \frac{G_{\max}^2 \pi}{\left(\frac{2\pi}{\alpha a}\right) \left(\frac{2\pi}{\beta a}\right)} = \alpha \beta N_0$$

Cas 2D et modes de défauts

super-cellule et structure de bande projetée

Cas d'un défaut linéaire (guide d'onde)



Bon nombre quantique réduit à k_x

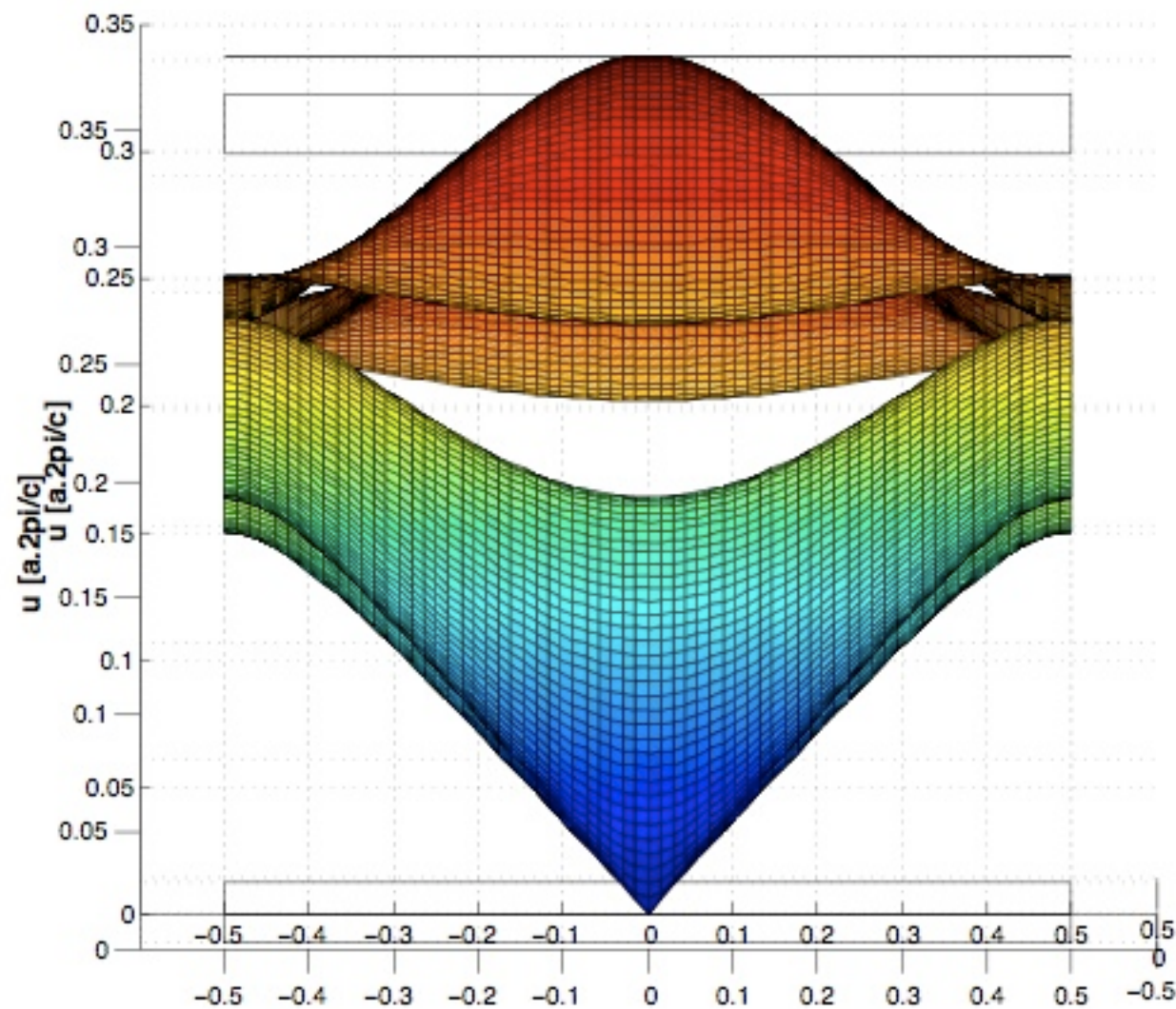
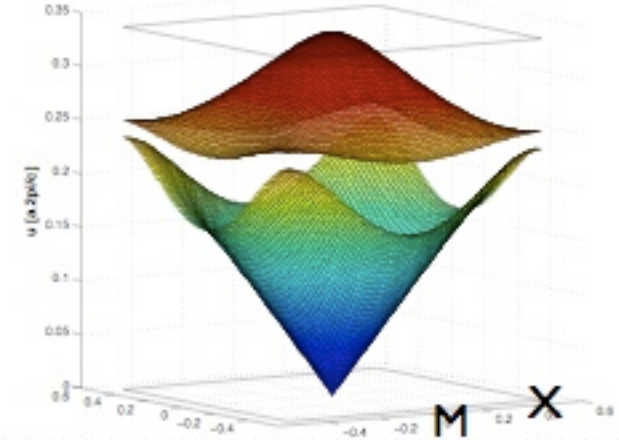
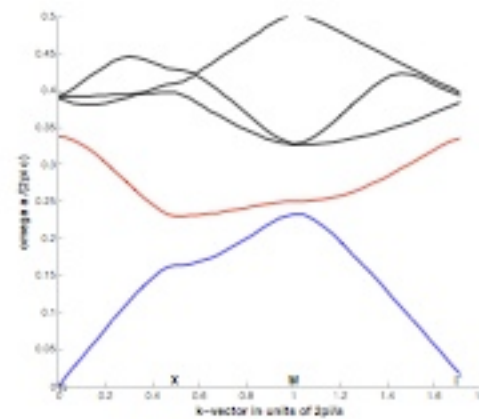
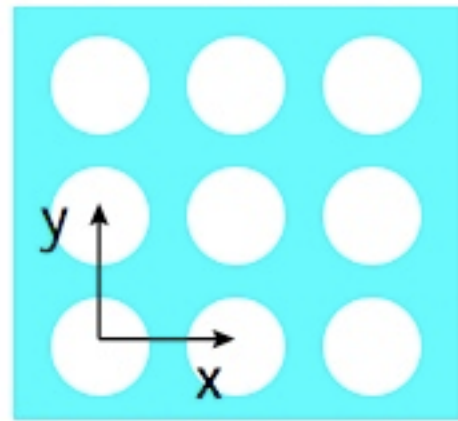
Réseau carré

De la même manière il faut **projeter sur k_x** le diagramme de dispersion du milieu gaine (le cristal photonique) qui est semi-infini.

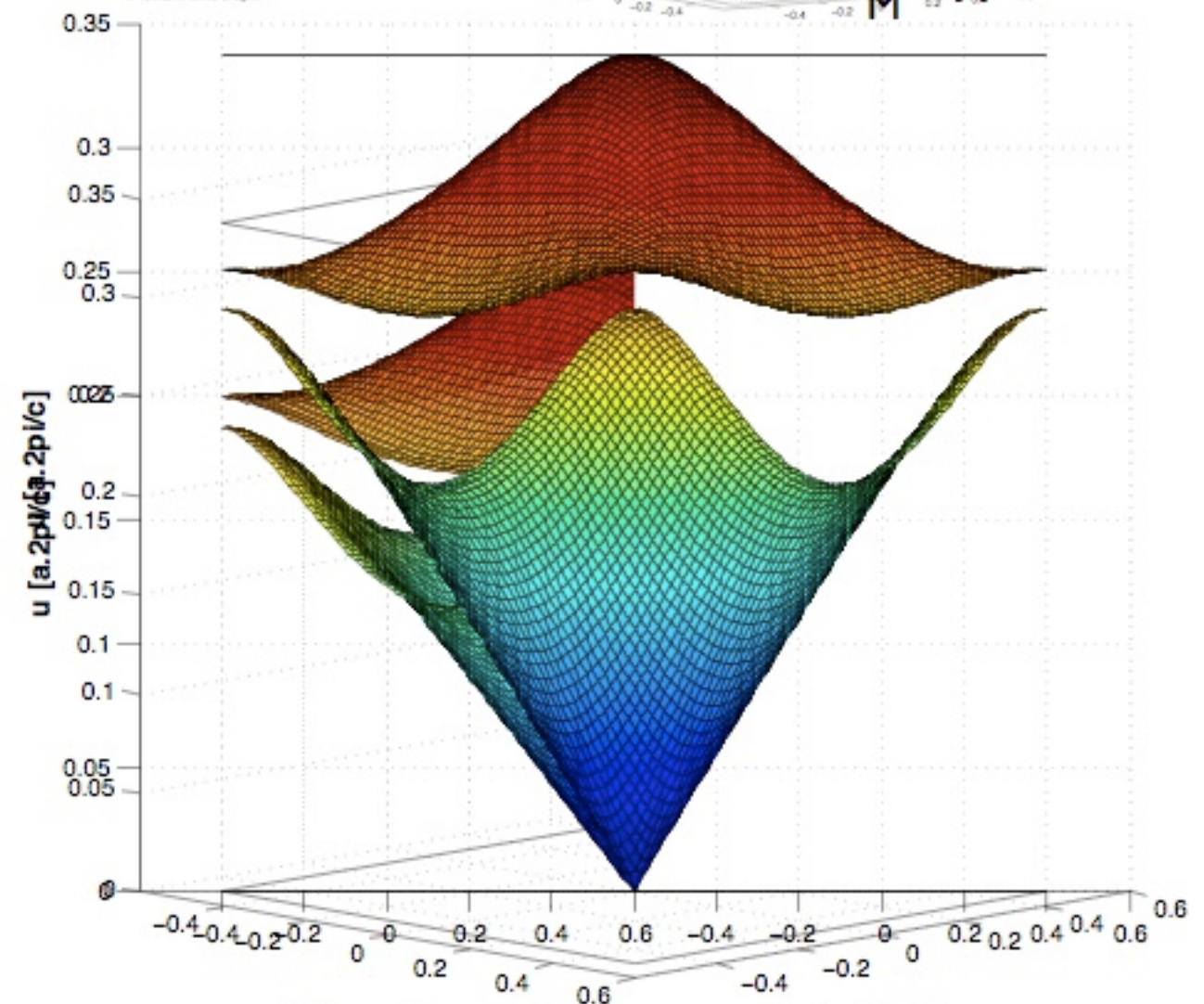
Cas 2D et modes de défauts

super-cellule et structure de bande projetée

Réseau carré



Projection sur ΓM

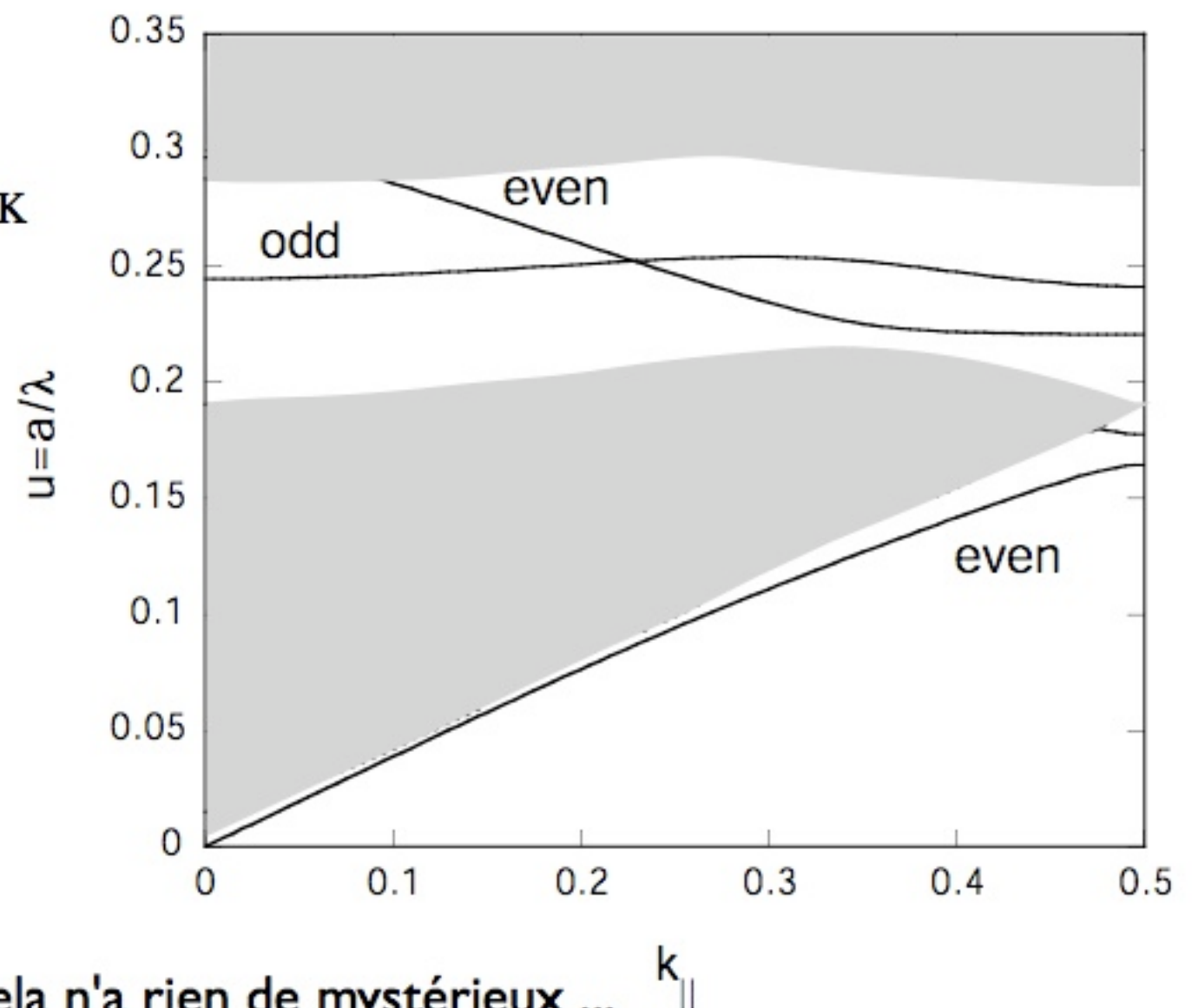
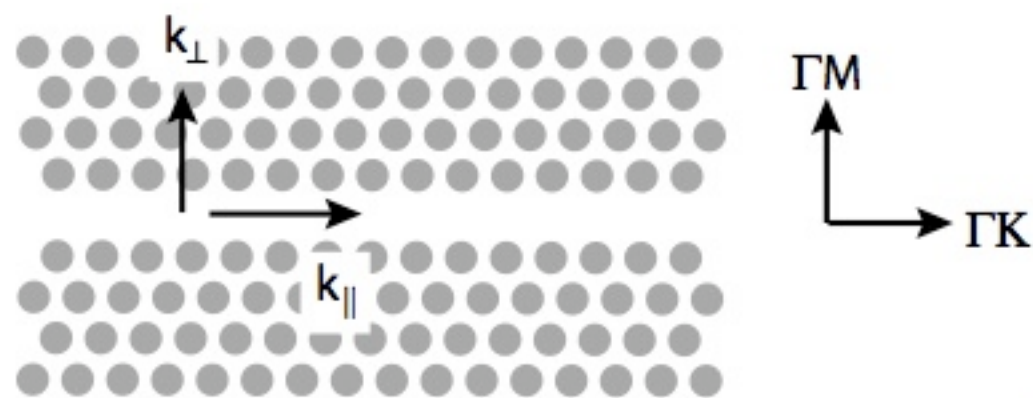


Projection sur ΓX

Cas 2D et modes de défauts

super-cellule et structure de bande projetée

Le cas du réseau triangulaire est un peu plus délicat : ΓK n'a pas la même longueur pour un réseau unidimensionnel et un réseau triangulaire de **même** période a et il faut tenir compte des portions qui sortent de la première zone de Brillouin du réseau hexagonal



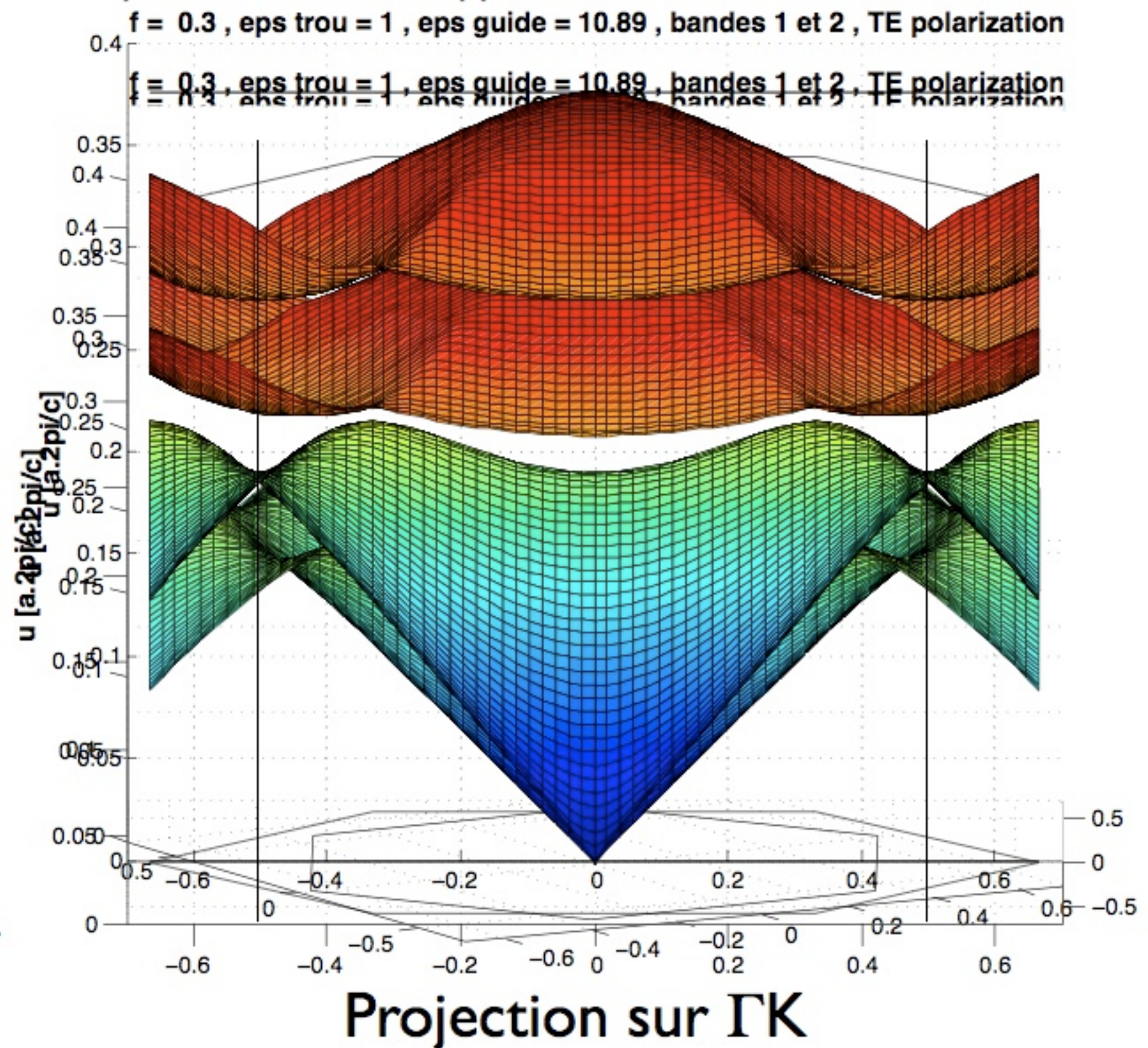
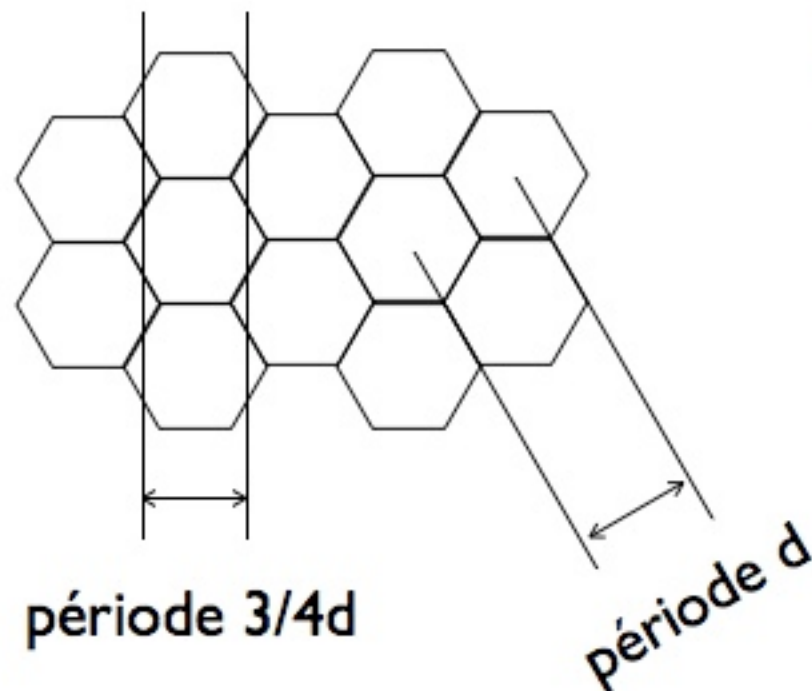
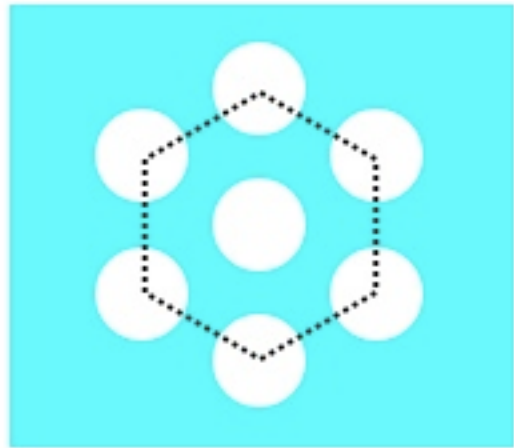
On peut faire ce genre de construction, mais cela n'a rien de mystérieux ...

Cas 2D et modes de défauts

super-cellule et structure de bande projetée

... si on se souvient que les courbes de dispersion sont des nappes à deux dimensions

Réseau triangulaire



Autres méthodes

Méthode Korringa-Kohn-Rostocker (KKR)

- *matrice de diffraction de la cellule élémentaire
- *fonction de Green de la structure périodique
- Plus complexe mais plus stable
- Donne directement la densité d'états et la densité locale d'états

-J. Phys. Cond. Matt. 6, 171, 1994

-Phys. Rev. B, 51, 2068, 1995

Méthode liaisons fortes

- *base de fonctions localisées
- *structure périodique et intégrales de recouvrement
- Il n'existe pas de base de fonctions suffisamment localisées
- Calcul ab initio des éléments de matrices ou bien déterminés par comparaison avec un calcul onde plane
- base adaptée à la description de défauts

-Phys. Rev. Lett., 81, 1405, 1998 (résonances de Mie)

-Phys. Rev. B, 61, 4381, 2000