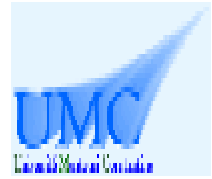




REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE



N°d'ordre :.....
Série :.....

THÈSE

Pour l'obtention du diplôme de
Doctorat en Sciences

Option
Electronique

Présentée par
Amel LABBANI

Intitulée

**MATERIAUX BIP A BASE DE NANOPARTICULES
METALLIQUES ET SEMICONDUCTRICES
ETUDE DES PROPRIETES OPTIQUES PAR FDTD**

Soutenu-le :...../...../2009

DEVANT LE JURY :

Président	: Mr. A. CHAABI	Prof. Univ. Constantine (Algérie)
Rapporteurs	: Mme R. SAOUDI	M.C. hors classe-HDR. Univ. Saint-Étienne (France)
	Mr. A. BENGHALIA	Prof. Univ. Constantine (Algérie)
Examineurs	: Mr. A TISHCHENKO	Prof. Univ. Saint-Étienne (France)
	Mr. A BOUDRIOUA	Prof. Univ. Paris 13 (France)
	Mr. T. FORTAKI	M.C. Univ. Batna (Algérie)

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire de thèse a été effectué au sein du laboratoire Hubert Curien de l'université Jean MONNET Saint-Étienne FRANCE, ainsi qu'au Laboratoire Hyperfréquences et Semi-conducteurs (L.H.S) de l'université MENTOURI Constantine ALGERIE dans le cadre d'une cotutelle.

J'adresse mes sincères remerciements à Madame **R. SAOUDI**, M.C. H.D.R. à l'université Jean MONNET de Saint-Étienne qui a acceptée et bien voulu assurer la direction de cette thèse au laboratoire Hubert Curien ainsi qu'à Monsieur **A. BENGHALIA** professeur et directeur du laboratoire L.H.S de l'université MENTOURI Constantine pour avoir co-dirigé ce travail de recherche.

Qu'ils trouvent ici tout mon respect et ma gratitude pour avoir proposé et dirigé ce travail ainsi que pour leurs aides, la confiance et surtout la patience qu'ils m'ont témoignée tout au long de ces années de thèse.

Je suis très reconnaissante à Monsieur **Abdelhafid CHAABI**, Professeur à la Faculté des Sciences de l'Ingénieur de l'Université MENTOURI Constantine, pour avoir accepté de présider ce jury.

J'exprime toute ma gratitude et mes vifs remerciements à **Mr. A. TISHCHENKO** Professeur à l'université de Saint-Étienne (France), à **Mr. M.A. BOUDRIOUA** Professeur à l'université Paris 13 (France) et à **Mr. M. T. FORTAKI** Maître de Conférence à l'université de Batna (Algérie), pour avoir accepté d'examiner mon travail et participer à mon jury de thèse.

Je ne saurais oublier de remercier toutes les personnes qui me sont chères et en particulier mon mari **Hichem** qui m'a soutenue et encouragée durant ce travail, et à qui je dédicace ce mémoire de thèse.

Sommaire

Introduction générale.....	1
Chapitre 1.....	4
Les Cristaux photoniques.....	4
1. Propriétés physiques.....	4
1.1.Introduction.....	4
1.2. Concept de base	6
1.3. Cristal photonique à une dimension (miroir de Bragg) ...	8
1.4. Diagrammes de	9
bandes.....	
1.4.1. Rappels : réseau réciproque et zone de Brillouin	
Irréductible.....	9
• Réseau réciproque.....	9
• Zone de Brillouin irréductible.....	10
• Le réseau carré.....	11
• Le réseau triangulaire.....	12
• Le réseau hexagonal.....	13
1.4.2. Bande interdite photonique 1D.....	13
1.4.2.1. Largeur de la bande interdite photonique.....	17
1.4.3. Cristal photonique 2D - Diagramme de bandes.....	20
1.4.4. Cristal photonique à trois dimensions- Diagrammes de	
bandes.....	22
1.5. Les défauts.....	24
1.5.1. Microcavité	25
1.5.2. Guides d'ondes.....	27
2. Notre approche expérimentale d'élaboration.....	27
2. 1. La	28
fusion.....	
2. 2. Couches minces de silice obtenues par un procédé	
sol-gel – NP d'argent :.....	29
3. Conclusion	33

Chapitre 2.....	35
Rappels de la méthode FDTD.....	35
1. Introduction.....	35
2. Méthode des ondes planes.....	35
3. Méthode des différences finies temporelles (FDTD).....	38
3.1. Principe de la méthode.....	39
3.2. Discrétisation des équations de Maxwell et algorithme de Yee.....	41
3.3. Condition de stabilité	45
3.4. Conditions aux limites.....	45
• Condition de Mur.....	46
• Les PML de Bérenger.....	46
4. Autres méthodes.....	48
4.1. La méthode des matrices de transfert.....	48
4.2. La méthode des réseaux de diffraction.....	48
4.3. La méthode des liaisons fortes.....	48
5. Conclusion.....	49
 Chapitre 3.....	 50
Propriétés optiques des BIP à base de NP ZnS dans une matrice de verre massif modélisées par FDTD.....	50
1. Introduction.....	50
2. Permittivité diélectrique d'un verre massif dopé avec des NP ZnS.....	51
3. Modélisation d'un miroir de Bragg 1D composé de NP Zns+verre/verre.....	55

3.1. Diagramme de bandes.....	55
3.2. Influence de la concentration de NP ZnS sur la réflexion.....	58
4. Modélisation de structures BIP 2D à base de NP ZnS.....	59
4.1. Structure hexagonale de NP ZnS/verre.....	59
4.2. Carte des bandes interdites.....	61
4.3. Influence de la forme des particules sur les bandes interdites.....	62
4.3.1. Discussion des résultats obtenus.....	63
4.4. Microcavité composé de NP ZnS/verre.....	65
4.5. Structure hexagonale NP ZnS+verre/verre.....	66
4.5.1. Résultats obtenus.....	66
5. Conclusion.....	69
Chapitre 4.....	71
Modélisation de quelques propriétés optiques de BIP à base de	
NP Ag dans un verre massif.....	71
1. Introduction.....	71
2. Modèle de Drude.....	72
3. Détermination de la permittivité diélectrique d'un verre massif en	
présence de nanoparticules d'argent.....	76
3.1. Permittivité diélectrique d'un verre massif dopé avec des	
nanoparticules d'argent.....	76
3.1.1. Effet de la concentration des NP d'argent.....	78
3.1.2. Effet de taille.....	80
4. Simulation d'un miroir de Bragg 1D composé par des	
NP Ag+verre / verre par FDTD.....	82
4.1. Diagramme de bandes.....	82
4.2. Calcul de la réflexion.....	85
4.2.1. Coefficient de réflexion en fonction	
du facteur de remplissage f	85

5. Conclusion.....	90
Conclusion générale.....	91
Références bibliographiques.....	93

Introduction Générale

Introduction générale

C'est en 1987 que E. Yablonovitch [1] et S. John [2], en voulant diminuer l'émission spontanée de la lumière dans les semi-conducteurs et les lasers, proposent une nouvelle géométrie pour faire un miroir de Bragg. L'idée consiste à utiliser une structuration périodique de l'indice optique capable d'influer sur la propagation des ondes électromagnétiques et plus précisément d'inhiber l'émission spontanée en bord de bande. Ces nouveaux matériaux appelés « cristaux photoniques » (CPhs) désignent des matériaux artificiels dont la permittivité diélectrique est modulée périodiquement. Cette modulation, à condition que le contraste d'indice entre les matériaux qui composent le CPh soit suffisant, perturbe la propagation des ondes lumineuses dans certaines gammes de longueurs d'onde. Ainsi des bandes interdites photoniques peuvent apparaître et ce quel que soit l'angle d'incidence. Cela en fait des réflecteurs efficaces, multidirectionnels, et compacts.

Le premier CPh connu est le miroir de Bragg. Il s'agit d'un empilement de couches de matériaux diélectriques de haut et bas indice alternés qui présente des bandes de fréquences pour lesquelles la propagation de la lumière est interdite. Ces miroirs sont des CPhs unidimensionnels (1D) dont les bandes interdites proviennent d'interférence constructives et destructives se produisant aux interfaces de chaque couche [3]

La première structure tridimensionnelle (3D) présentant une bande interdite complète a été proposée par Yablonovitch en 1991 [4]. Cependant, la difficulté de fabrication et de créer des défauts (cavités ou guides) dans les structures photoniques tridimensionnelles, a contraint la communauté scientifique à se tourner d'avantage vers les cristaux photoniques bidimensionnels (2D) [5].

La modulation d'indice selon plusieurs dimensions est généralement réalisée en creusant des trous dans les matériaux diélectriques [6], en empilant des billes [7, 8] ou des tiges diélectriques sous une forme appelée « tas de bois » [9].

Plusieurs méthodes ont été utilisées pour la fabrication des cristaux photoniques à bande interdite. Les plus courantes viennent des technologies de la microélectronique et concernent essentiellement les semi-conducteurs. Ces techniques sont chères et lourdes dans leur mise en œuvre. L'approche de l'auto-assemblage [10] est utilisée davantage ces dernières années pour fabriquer des cristaux photoniques à bande interdite complète dans le visible en ajustant de façon appropriée l'indice de la structure. Dans la recherche de solutions alternatives notre laboratoire Hubert Curien utilise une nouvelle méthode d'élaboration des BIP à base de nanoparticules. Cette méthode utilise simultanément une insolation laser continu UV et le recuit thermique proposée par [11]. Son originalité est qu'elle permet une croissance locale et contrôlée des nanoparticules (métalliques ou semi-conductrices). Celles-ci ne poussent qu'au niveau du point qui a vu l'irradiation.

Nous sommes intéressés par la modélisation des cristaux photoniques et leurs propriétés optiques par la méthode FDTD. Cette méthode, simple à mettre en œuvre, est basée sur la discrétisation temporelle et spatiale des équations de Maxwell. Le calcul de toutes les composantes de champs à tous les instants et sur tout le domaine de calcul permet d'obtenir de nombreuses informations précises. Elle nous donne la cartographie du champ à l'intérieur du cristal ainsi que les coefficients de réflexion, transmission et absorption de la structure à étudier.

Les applications potentielles des cristaux photoniques sont très vastes : réalisation des cavités résonantes de taille très réduite, des guides d'ondes [12], des virages [13], des filtres sélectifs [14], des multiplexeurs - démultiplexeurs [15] et des fibres optiques [16]. Ces matériaux vont donner de nouveaux composants optoélectroniques autrement plus performants et compacts que ceux classiques que nous connaissons maintenant.

L'introduction d'un défaut au sein de ces structures périodiques permet de générer un état permis à l'intérieur de la bande interdite photonique. A cette fréquence les ondes électromagnétiques peuvent se propager à l'intérieur du CPhs.

Ce manuscrit comprend quatre chapitres.

Dans le premier chapitre, nous rappelons le concept de base des cristaux photoniques et les différents types de BIP qui peuvent en résulter ainsi que leurs propriétés physiques. La condition d'ouverture d'une bande interdite photonique ainsi que les différentes applications optiques qui peuvent en découler de ces matériaux sont également abordées. Nous avons

donné également une nouvelle méthode d'élaboration de BIP à base de nanoparticules (semi-conductrices où métalliques) développées au laboratoire Hubert Curien.

Le deuxième chapitre est consacré aux rappels de quelques méthodes qui peuvent être mises en œuvre pour la modélisation des cristaux photoniques. Nous avons mis l'accent sur la FDTD (Finite Domain Time Difference) car c'est la technique que nous avons utilisé pour modéliser les propriétés optiques des BIP à base de nanoparticules élaborées au Laboratoire Hubert Curien.

Dans le troisième chapitre nous nous sommes intéressés aux propriétés optiques de BIP à base de nanoparticules de ZnS (NP ZnS) dans la silice. Nous avons modélisé un miroir de Bragg 1D formé d'un matériau composite (NP ZnS + verre) dans du verre. Ces bandes interdites ainsi que le domaine de réflectance, sont étudiés en fonction du facteur de remplissage, f , des nanoparticules. La dernière partie de ce chapitre comprend les calculs des diagrammes de dispersion d'une structure 2D constituée de nanoparticules placées périodiquement dans la matrice hôte selon une structure hexagonale. Ils sont effectués en tenant compte de la forme, la taille, la répartition spatiale et la modification de l'indice optique du verre en présence des NP ZnS. Nous avons montré également la possibilité d'avoir une nanocavité avec un tel système.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude de quelques propriétés optiques d'un miroir de Bragg à base de nanoparticules de Ag (NP Ag) dans du verre. L'évolution de la permittivité diélectrique du verre en présence des NP Ag en fonction du facteur de remplissage f et de la taille des nanoparticules a été présentée. Les calculs des diagrammes de dispersion ainsi que de la réflectance avec et sans absorption du miroir de Bragg 1D formé d'un matériau composite (NP Ag + verre)/verre, ont été menés en fonction de plusieurs paramètres.

Ce manuscrit se termine par une conclusion générale

Chapitre 1

Chapitre 1

Les Cristaux photoniques

1. Propriétés physiques

1.1. Introduction :

Les matériaux à bandes interdites photoniques avec l'abréviation BIP en anglais : (Photonic Band Gap, PBG), ont suscité un très vif intérêt au sein de la communauté scientifique depuis leur invention par E. Yablonivitch en 1987 [1]. Ces matériaux, appelés « cristaux photoniques » (PC, Photonic Cristal) sont des milieux transparents dans lesquels l'indice optique varie de manière périodique. Cette variation périodique peut être réalisée dans une, deux ou les trois directions de l'espace.

Grâce à l'analogie formelle qui existe entre les équations de Maxwell régissant la propagation des ondes électromagnétiques dans un milieu diélectrique et l'équation de Schrödinger pour les électrons, on peut appréhender les cristaux photoniques avec les outils et les concepts développés en physique du solide. Dans les solides, le potentiel périodique du réseau ionique crée des bandes d'énergie pour la propagation des électrons. Certaines bandes d'énergie peuvent être complètement interdites aux électrons. De la même façon, dans une structure de permittivité diélectrique périodique, l'énergie des photons dans le cristal peut se décrire par des bandes photoniques, dont certaines peuvent être interdites. Une radiation lumineuse qui a son énergie dans la bande interdite photonique ne pourra pas pénétrer dans le matériau, quelle que soit son incidence ou sa polarisation.

Les cristaux photoniques sont classés en trois types, selon leur dimensionnalité : 1D, 2D, 3D. Le matériau le plus simple a une permittivité diélectrique qui est périodique suivant une dimension. Ce type de structure peut constituer un miroir de Bragg lequel est composé d'un empilement alterné de couches de bas et haut indice optique. Cette périodicité peut être généralisée à 2 ou 3 dimensions (Figure 1).

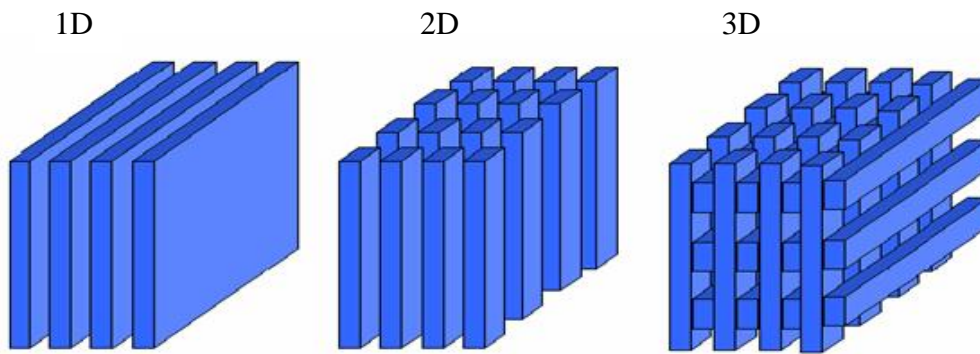


Figure 1 : Représentation schématique de cristaux photoniques uni-dimensionnels (1D), bi-dimensionnels (2D) et tri-dimensionnels (3D).

Puisque les propriétés optiques d'un BIP sont obtenues pour des périodes de la permittivité diélectrique du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de l'onde électromagnétique avec laquelle il va interagir, pour travailler dans le domaine de l'optique. Les dimensions caractéristiques de ces matériaux devront être de l'ordre de la centaine de nanomètre.

La structuration périodique du matériau à cette échelle est très difficile, voire impossible. C'est pour cette raison que les premières structures ont été réalisées pour des longueurs d'ondes millimétriques [4]. Il a fallu attendre les progrès des techniques de lithographie et de gravure pour voir apparaître pour la première fois en 1996 des BIP de dimensions submicrométriques [6].

Les cristaux photoniques ouvrent la voie à la réalisation de nombreuses fonctions optiques grâce aux possibilités de confinement de la lumière qui pourraient révolutionner la fabrication des circuits intégrés optoélectroniques. La majorité des applications des cristaux photoniques repose sur leur bande interdite photonique. Il est nécessaire d'introduire des défauts dans la structure périodique afin de disposer d'une fréquence permise dans la bande interdite. Les défauts ponctuels permettent de faire des micro-résonateurs dont la fonction est de réaliser des sources de lumière, intenses et très confinées spatialement. Les défauts linéaires réalisent des guides d'ondes, leur intérêt par rapport à ceux traditionnels c'est qu'ils présentent de faibles pertes au niveau des courbures. Le rapprochement de guides d'ondes et de défauts ou cavités résonnantes dans un CPh amène à des possibilités de filtrage et de multiplexage en longueur d'onde dans le cadre de l'optique intégrée [17, 18], intéressantes pour le monde des télécommunications optiques.

1.2. Concept de base :

Les équations gouvernant la propagation de la lumière dans un matériau périodique de permittivité diélectrique $\epsilon(\mathbf{r})$, sont les équations de Maxwell. Ces dernières amènent à une équation d'onde qui, dans un milieu homogène, isotrope, non magnétique et en absence de charges s'écrit de la manière suivante :

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

avec \mathbf{E} : champ électrique

\mathbf{H} : champ magnétique

c : célérité dans le vide

$\epsilon(\mathbf{r})$: permittivité diélectrique

Dans l'équation (1.1), l'opérateur apparaissant dans le membre de gauche est hermitien. De plus, $\epsilon(\mathbf{r})$ étant périodique, l'équation (1.1) est l'analogue formelle de l'équation de Schrödinger décrivant le mouvement des électrons dans le potentiel périodique d'un cristal et qui s'écrit sous la forme:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

avec $V(\mathbf{r})$: potentiel atomique

\hbar : constante de Planck divisée par 2π

m : masse de l'électron

Il est possible d'identifier le champ électrique \mathbf{E} à la fonction d'onde ψ , et le terme $\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\mathbf{r})$

au terme $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(\mathbf{r}))$. La permittivité diélectrique joue, pour les photons, un rôle similaire au

potentiel atomique périodique des électrons de masse m dans un cristal. Cette analogie formelle qui existe entre les électrons et les photons va nous permettre d'appliquer les outils et les concepts développés en physique du solide, tels que les notions de réseau réciproque, zone de Brillouin et le théorème de Bloch pour la résolution de l'équation d'onde.

La périodicité spatiale de $e(\mathbf{r})$ permet de mettre les solutions sous la forme d'ondes de Bloch $\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{u}_k(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ avec $\hat{u}_k(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \hat{u}_k(\mathbf{r})$ et \mathbf{a} vecteur de périodicité du réseau. Le vecteur d'onde \mathbf{k} de l'électron (ou du photon) dans le cristal est défini de telle sorte que le trièdre $(\hat{E}, \hat{H}, \mathbf{k})$ soit direct avec $k^2 = n^2 \omega^2 / c^2$. L'indice optique du milieu est n étant défini tel que $n = \sqrt{\epsilon_r(\mathbf{r})}$. Chaque valeur de \mathbf{k} , de la zone de Brillouin irréductible que nous définirons plus loin, donne une série de fréquences propres ω_n . A chaque ω_n est associé un vecteur propre \hat{H}_k . L'ensemble des solutions discrètes ω_n donne le diagramme de bandes du cristal photonique, où l'entier n désigne le numéro de bande.

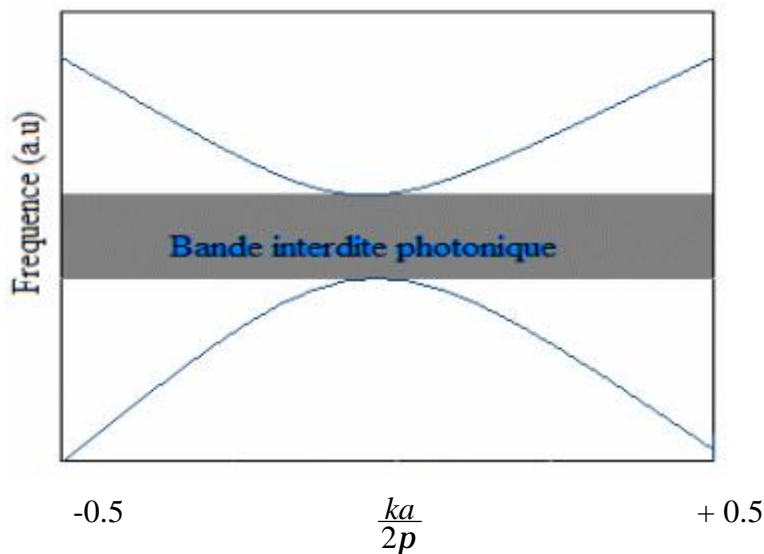


Figure 2 : Représentation schématisée d'un diagramme de bandes

La zone grise représente une bande interdite photonique. Cela signifie qu'un photon incident qui arrive avec une longueur d'onde comprise dans cet intervalle ne pourra pas se propager à l'intérieur du matériau. Donc la seule possibilité pour lui c'est qu'il soit réfléchi par celui-ci (figure 2).

1.3. Cristal photonique à une dimension (miroir de Bragg) :

Ces structures sont souvent utilisées sous le nom de miroir de Bragg (figure 3). Elles sont constituées par un empilement périodique de couches diélectriques d'indices différents et d'épaisseur $\lambda/4$, où λ étant la longueur d'onde autour de laquelle le matériau doit interdire la propagation de la lumière en incidence normale. Comme nous le développerons plus loin, le miroir fonctionnera comme un BIP si le contraste d'indice, Δn , est suffisamment grand entre les deux types de films qui le composent. La réalisation de ce type de composant est relativement simple. Mais les diagrammes de dispersions ainsi créés sont sensibles à l'angle d'incidence de l'onde.

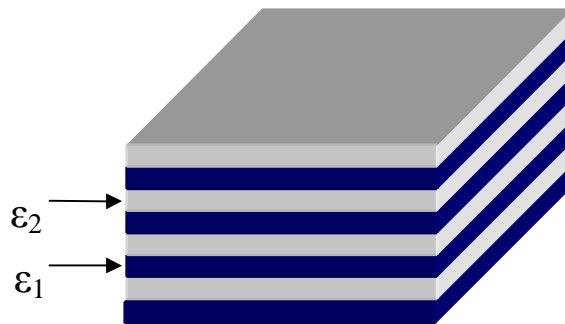


Figure 3 : Schéma d'un cristal photonique 1D : miroir de Bragg

Par rapport à un miroir de Bragg classique, celui à cristal photonique présente un avantage certain dans la mesure où il permet d'avoir une grande réflectance avec un nombre de couches réduit, ce qui permet de s'affranchir du même coup des problèmes de contraintes mécaniques. Ceci n'a été rendu possible que grâce à un contraste d'indice important.

Pour obtenir un contrôle de la bande interdite quel que soit l'angle d'incidence il faut étendre la périodicité de la permittivité diélectrique à 2 ou 3 dimensions.

Un exemple de diagramme de dispersion 1D d'un miroir de Bragg BIP est représenté sur la figure 4. On voit apparaître trois bandes interdites et trois bandes permises. Sur la figure l'ordonnée correspond aux fréquences des modes calculés et l'abscisse au vecteur d'onde dans ce matériau.

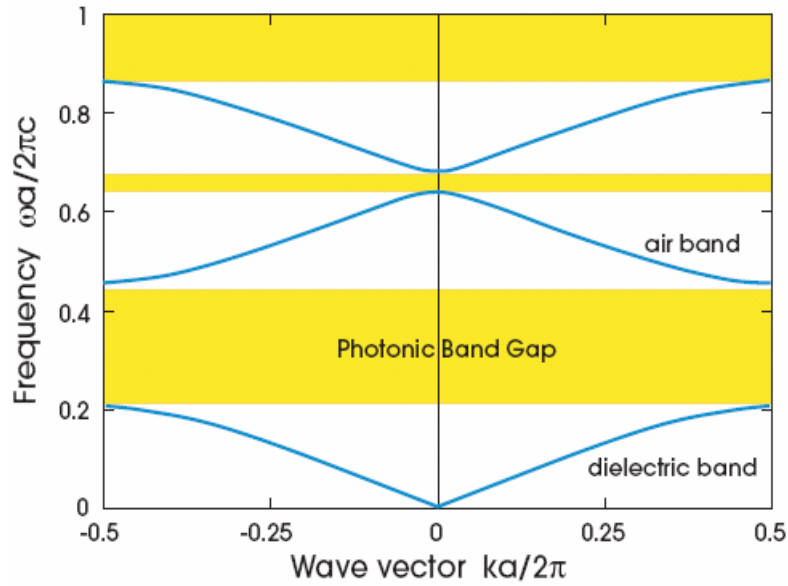


Figure 4 : Structure de bandes à une dimension d'un miroir de Bragg BIP [19]

1.4. Diagrammes de bandes

1.4.1. Rappels : réseau réciproque et zone de Brillouin irréductible

Pour calculer les diagrammes de bandes il faut considérer pour chaque cristal, toutes les directions de propagation possibles. Comme en physique du solide [20], on montre que pour certaines symétries du cristal, on peut limiter l'étude aux vecteurs d'ondes k situés à l'intérieur d'une zone restreinte appelée zone de Brillouin irréductible. Le vecteur k varie le long des directions de hautes symétries de cette zone qui fait partie du réseau réciproque. Nous allons définir dans la section suivante le réseau réciproque et la zone de Brillouin.

- **Réseau réciproque**

Considérons une structure périodique à deux dimensions représentée sur la figure 5.

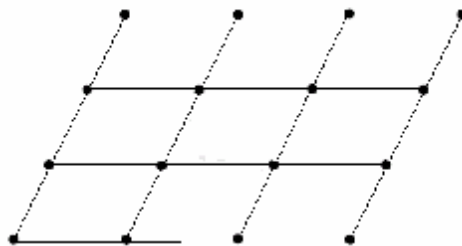


Figure 5 : Réseau direct

Sur cette figure apparaissent neuf mailles élémentaires, l'ensemble de ces mailles constitue un réseau direct. Nous pouvons obtenir une maille élémentaire de même surface de la manière suivante :

- on trace les lignes qui relient un nœud donné à tous ses voisins
- on trace les médiatrices de ces segments.

Le plus petit volume enclos de cette façon est la maille élémentaire de Wigner-Seitz [21] comme le montre la figure 6.

De cette façon nous pouvons obtenir le réseau réciproque de n'importe quelle structure. Tout l'espace peut aussi être rempli par ces mailles.

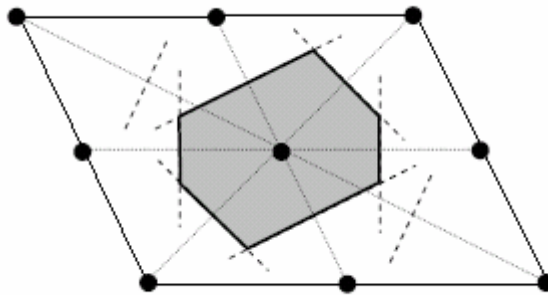


Figure 6 : Maille élémentaire de Wigner-Seitz du réseau direct.

• Zone de Brillouin irréductible

La fréquence des ondes planes se propageant dans un milieu bidimensionnel forme une fonction périodique du vecteur \vec{a} , qui définit la direction de propagation, dans le réseau réciproque. La plus petite aire issue de ces vecteurs \vec{a} est une zone fondamentale qui s'appelle : *la première zone de Brillouin*.

Pour construire cette zone, nous plaçons au centre de la cellule d'origine Γ du réseau réciproque pour tracer des vecteurs joignant l'origine aux nœuds voisins de ce même réseau. Nous construisons ensuite les médiatrices de ces vecteurs.

La plus petite aire interceptée par ces médiatrices est la zone de Brillouin irréductible (figure 7). La zone de Brillouin irréductible contient l'ensemble des vecteurs d'ondes du photon qui permettent de décrire de façon complète le diagramme de bandes.

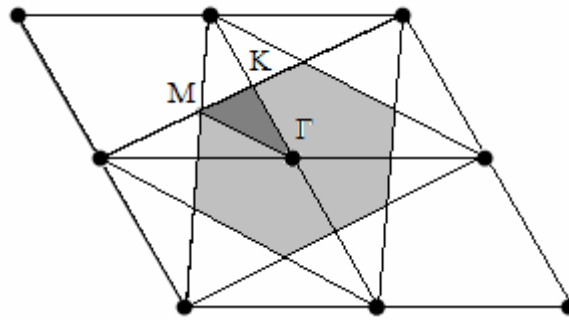


Figure 7 : Construction de la zone de Brillouin irréductible

La zone de Brillouin irréductible (gris foncé) correspond à un triangle dont les sommets sont les points de haute symétrie de l'espace réciproque Γ , M et K . Pour définir la structure de bande du cristal photonique correspondant à ce réseau, on représentera la variation de fréquence des différents modes propres en fonction du module du vecteur d'onde le long des directions de haute symétrie ΓM , ΓK et KM .

Nous présentons sur la figure 8, plusieurs types de réseaux : réseau carré, réseau triangulaire et réseau hexagonal.

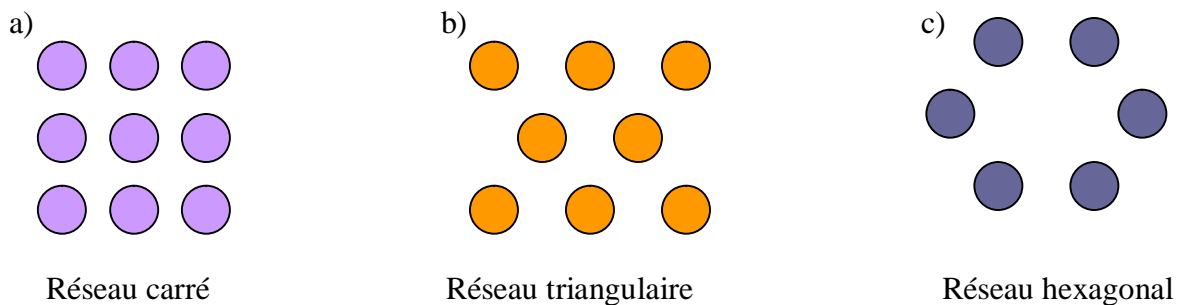
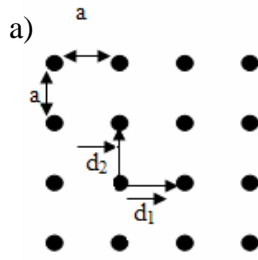


Figure 8 : Différents réseaux

- **Le réseau carré**

La maille primitive d'un réseau carré est formée d'un côté de longueur a [22]. Sa zone de Brillouin irréductible est un triangle dont les points remarquables sont les points Γ , X et M (figure 9 c). Pour obtenir les fréquences autorisées à se propager dans le cristal photonique, nous faisons balayer au vecteur d'onde k , le contour défini par les points de symétrie de la zone de Brillouin.

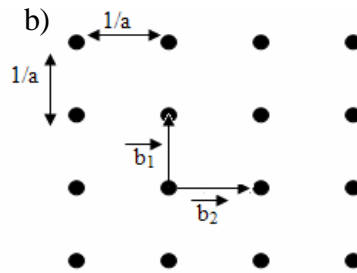
Réseau direct



$$\mathbf{r}_{d_1} \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{r}_{d_2} \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}$$

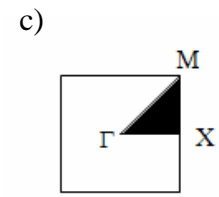
Réseau réciproque



$$\mathbf{r}_{b_1} \begin{pmatrix} 1/a \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{r}_{b_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/a \end{pmatrix}$$

zone de Brillouin irréductible



$$\Gamma(0;0)$$

$$X \left(\frac{1}{2a}; 0 \right)$$

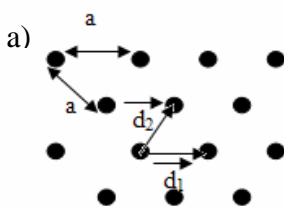
$$M \left(\frac{1}{2a}; \frac{1}{2a} \right)$$

Figure 9 : Représentation a) d'un réseau carré ; b) de son réseau réciproque ; c) de sa zone de Brillouin irréductible

• Le réseau triangulaire

La maille primitive est un triangle équilatéral. Chaque nœud du réseau triangulaire est espacé de son proche voisin d'une même distance a (figure 10). La zone de Brillouin irréductible est un hexagone. Ses points remarquables sont: Γ , P et Q.

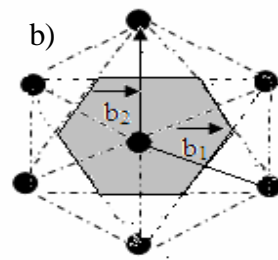
Réseau direct



$$\mathbf{r}_{d_1} \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{r}_{d_2} \begin{pmatrix} \frac{a}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

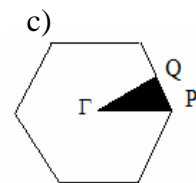
Réseau réciproque



$$\mathbf{r}_{b_1} \begin{pmatrix} \frac{1}{a} \\ \frac{1}{a\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{r}_{b_2} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2}{a\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

zone de Brillouin irréductible



$$\Gamma(0;0)$$

$$Q \left(\frac{1}{2a}; \frac{1}{2a\sqrt{3}} \right)$$

$$P \left(\frac{2}{3a}; 0 \right)$$

Figure 10 : Représentation a) d'un réseau triangulaire b) de son réseau réciproque c) de sa zone de Brillouin irréductible

La structure triangulaire est en réalité un cas particulier d'une classe des structures hexagonales. Pour une même structure, la bande interdite du réseau carrée est nettement plus étroite que celle du réseau triangulaire. Ce type de réseau nécessite un contraste d'indice moins élevé pour créer une bande interdite que pour une structure carrée

- **Le réseau hexagonal**

La géométrie la plus utilisée dans la littérature pour réaliser les structures BIP 2D est la structure hexagonale [23]. On peut obtenir un réseau hexagonal en ôtant quelques motifs au réseau triangulaire précédent. La figure 11 en donne les principales caractéristiques.

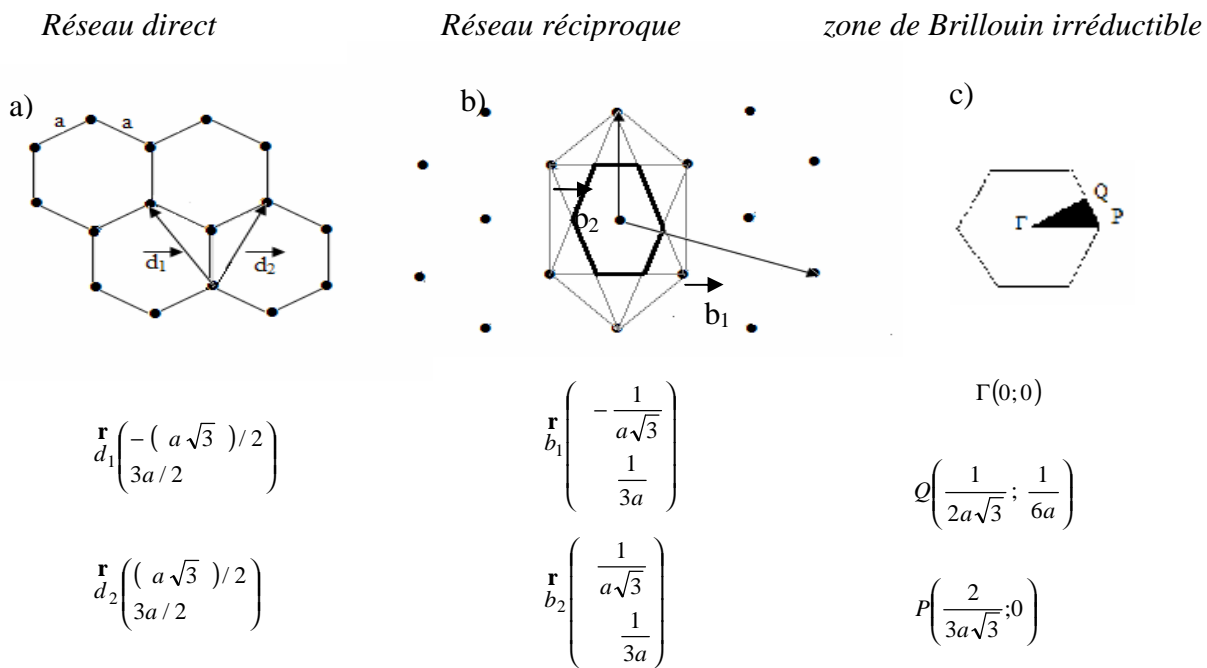


Figure 11 : Représentation a) d'un réseau hexagonale b) de son réseau réciproque c) de sa zone de Brillouin

1.4.2. Bande interdite photonique 1D

Dans le cas d'une onde plane se propageant dans un empilement unidimensionnel de couches d'indices différents, le problème peut être résolu analytiquement. Un développement semblable peut être trouvé dans [24] ou bien dans [25]. Comme exemple, nous considérons le cas d'une incidence normale où le champ électrique est parallèle à l'axe Oz (figure 12).

L'équation de propagation du champ électrique $E(x,t)$ s'écrit :

$$\frac{c^2}{e(x)} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}, \quad (1.4)$$

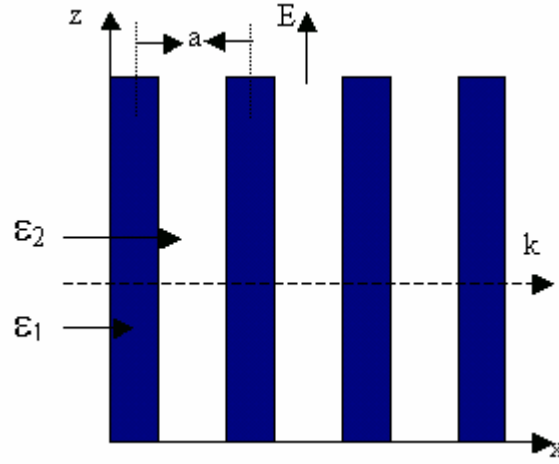


Figure 12 : Géométrie d'un cristal photonique 1D

La permittivité diélectrique est une fonction périodique de période a :

$$e(x) = e(x + a) \quad (1.5)$$

Il en est de même pour son inverse $e^{-1}(x)$. Donc on peut développer $e^{-1}(x)$ en séries de Fourier :

$$e^{-1}(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \exp\left(i \frac{2\pi m}{a} x\right) \quad (1.6)$$

Où C_m sont les coefficients de Fourier et m représente un entier naturel, en considérant la permittivité diélectrique $e(x)$ réelle, $C_{-m} = C_m^*$.

La périodicité du système impose aux modes propres du champ électrique $E(x, t)$, d'être des modes de Bloch. Ce qui signifie que tout mode propre s'écrit :

$$E(x, t) \equiv E_k(x, t) = u_k(x) \exp(i(kx - w_k t)) \quad (1.7)$$

w_k est la fréquence du mode propre, et $u_k(x)$ est une fonction périodique telle que :

$$u_k(x + a) = u_k(x) \quad (1.8)$$

Les modes de Bloch peuvent être décomposés en séries de Fourier, l'équation (1.7) s'écrit:

$$E_k(x,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} E_m \exp\left\{i\left(k + \frac{2p m}{a}\right)x - i w_k t\right\} \quad (1.9)$$

où les $\{E_m\}$ sont les coefficients de Fourier associés.

Pour simplifier les calculs nous allons supposer que seulement les composantes avec $m=0$, $m=\pm 1$ sont prédominantes et les autres sont négligeables dans le développement de $e^{-1}(x)$.

L'équation (1.6) devient:

$$e^{-1}(x) \approx C_0 + C_1 \exp\left(i \frac{2p}{a} x\right) + C_{-1} \exp\left(-i \frac{2p}{a} x\right) \quad (1.10)$$

Nous substituons les développements (1.9) et (1.10) dans l'équation d'onde (1.4). En effectuant les dérivées et en regroupant les termes, nous obtenons :

$$C_1 \left\{k + \frac{2(m-1)p}{a}\right\}^2 E_{m-1} + C_{-1} \left\{k + \frac{2(m+1)p}{a}\right\}^2 E_{m+1} \approx \left\{\frac{w_k^2}{c^2} - C_0 \left(k + \frac{2mp}{a}\right)^2\right\} E_m \quad (1.11)$$

Soit, pour $m=0$:

$$E_0 \approx \frac{c^2}{w_k^2 - C_0 c^2 k^2} \left\{C_1 \left(k - \frac{2p}{a}\right)^2 E_{-1} + C_{-1} \left(k + \frac{2p}{a}\right)^2 E_1\right\} \quad (1.12)$$

Et pour $m=-1$:

$$E_{-1} \approx \frac{c^2}{w_k^2 - C_0 c^2 (k - 2p/a)^2} \left\{C_1 \left(k - \frac{4p}{a}\right)^2 E_{-2} + C_{-1} k^2 E_0\right\} \quad (1.13)$$

Si $w_k^2 \approx C_0 c^2 k^2$, les modes E_0 et E_{-1} dominent le développement du champ électrique en bord de la zone de Brillouin $\left(k \approx \frac{p}{a}\right)$. Cela nous permet de négliger les autres termes et on obtient un système de deux équations:

$$(w_k^2 - C_0 c^2 k^2) E_0 - C_1 c^2 \left(k - \frac{2p}{a}\right)^2 E_{-1} = 0 \quad (1.14)$$

$$-C_{-1} c^2 k^2 E_0 + \left\{ w_k^2 - C_0 c^2 \left(k - \frac{2p}{a}\right)^2 \right\} E_{-1} = 0 \quad (1.15)$$

Ces équations sont linéaires et le système (1.14) possède une solution non triviale si son déterminant s'annule :

$$\begin{vmatrix} w_k^2 - C_0 c^2 k^2 & -C_1 c^2 \left(k - \frac{2p}{a}\right)^2 \\ -C_{-1} c^2 k^2 & w_k^2 - C_0 c^2 \left(k - \frac{2p}{a}\right)^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (1.16)$$

En extrémité de zone de Brillouin, le calcul de ce déterminant devient simple et donne deux solutions qui sont les extrémités de la courbe de dispersion :

$$w_{\pm} = \frac{cp}{a} \sqrt{C_0 \pm |C_1|} \quad (1.17)$$

Ainsi, aucun mode n'existe dans l'intervalle de fréquence :

$$\frac{pc}{a} \sqrt{C_0 - |C_1|} < w < \frac{pc}{a} \sqrt{C_0 + |C_1|} \quad (1.18)$$

Cet intervalle que l'on appelle bande interdite (*gap*) disparaît totalement lorsque $C_1=0$. On peut interpréter ces résultats de la façon suivante : lorsqu'on se rapproche des bords de la zone de Brillouin irréductible, les modes de vecteur d'onde $k \approx p/a$ et $k \approx -p/a$ commencent à se mélanger sous l'effet de la périodicité de la modulation de la permittivité diélectrique. Ceci conduit à une levée de dégénérescence et à l'apparition de la bande interdite photonique (figure 13). Le milieu forme alors un réflecteur parfait, d'où le nom de *miroir de Bragg*.

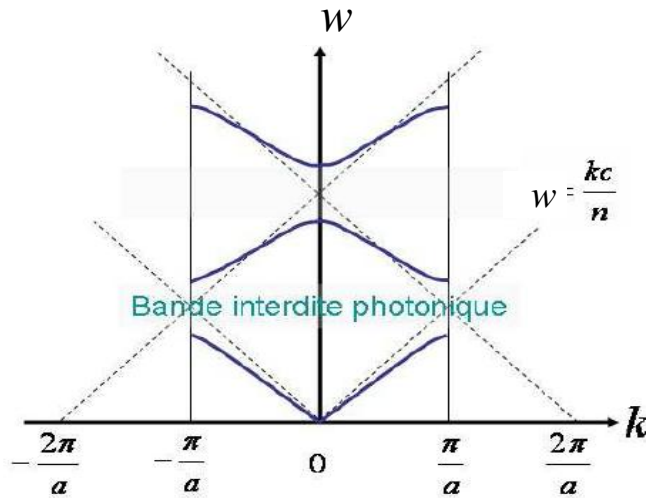


Figure 13 : Diagramme de dispersion pour un BIP 1D. Les limites de la première zone de Brillouin sont représentées par les deux traits verticaux, et les droites de dispersion d'un matériau uniforme en pointillés [26]

1.4.2.1. Largeur de la bande interdite photonique

La largeur de la bande interdite photonique (Gap) d'un réseau périodique unidimensionnel dépend du contraste d'indice, Δn , des deux milieux qui le composent. Le Gap sera d'autant plus important que Δn est grand (figure 14.b et figure 14.c).

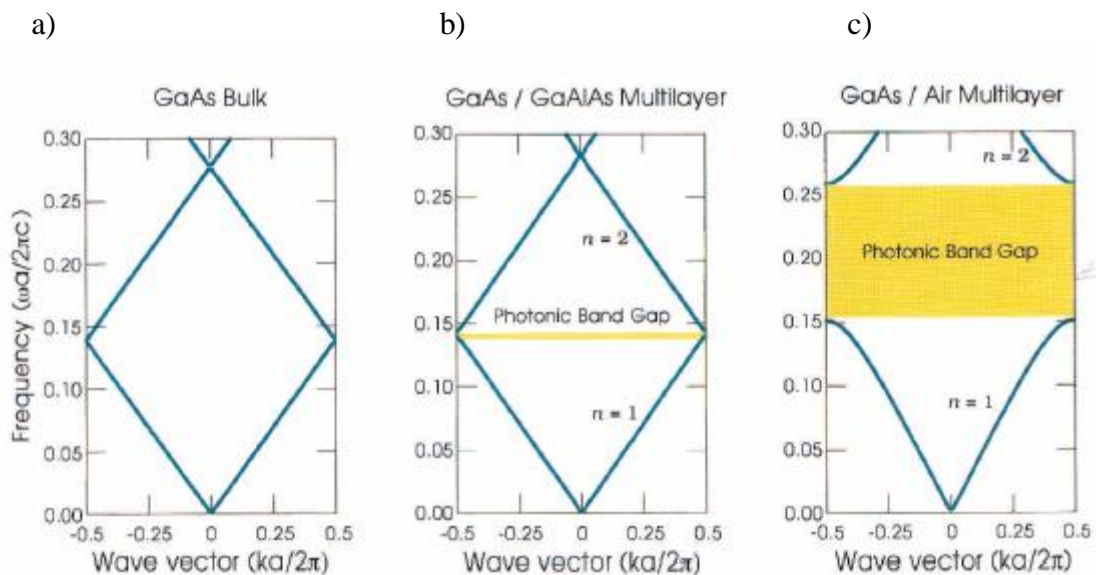
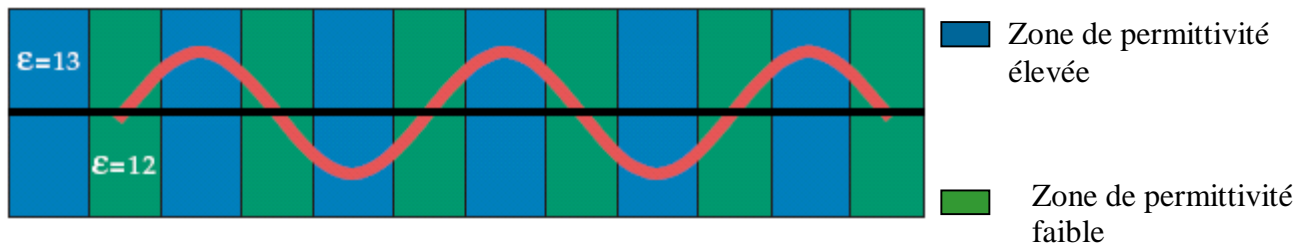


Figure 14 : Modifications de la largeur du Gap en fonction de Δn : a) couches de permittivité $\epsilon = 13$ et 13 ; b) $\epsilon = 13$ et 12 et c) $\epsilon = 13$ et 1 [19].

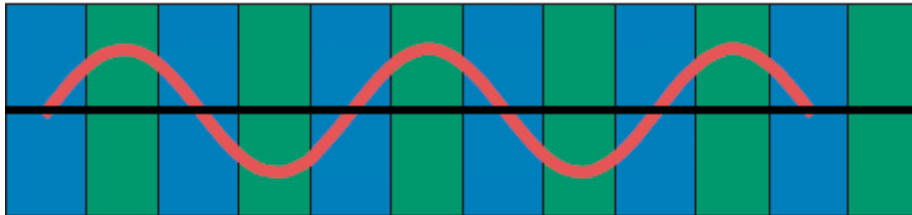
Pour un empilement de couches d'épaisseurs optiques successives $l/4$, la largeur du Gap (en longueur d'onde) est proportionnelle à la différence d'indice (au premier ordre).

La fréquence centrale du gap dépend de la localisation de l'onde dans le réseau. Il y'a deux localisations possibles d'une onde stationnaire dans un réseau unidimensionnel : soit un champ électrique ayant son maximum d'énergie dans le matériau de haut indice, soit les maxima sont situés dans le matériau de bas indice (figure 15 a et 15 b) [19].

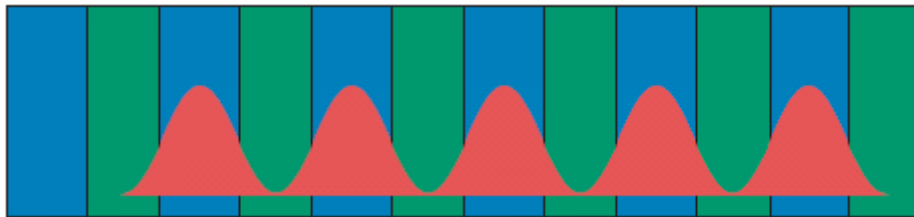
Les modes de basse fréquence (respectivement haute) concentrent leur énergie dans les zones de haut indice (respectivement bas). Si le champ électrique a son maximum d'amplitude dans les régions de haut indice (respectivement bas), les modes concentrent leur énergie dans la bande $n = 1$ (respectivement $n = 2$).



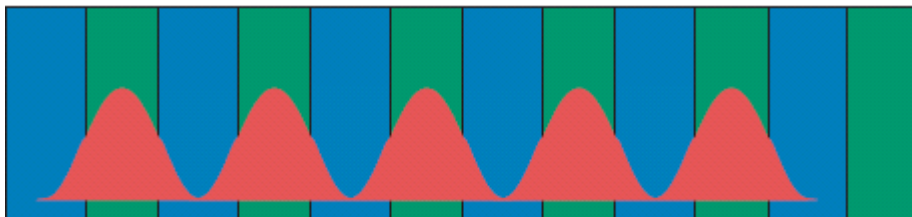
a) Champ électrique pour un mode situé dans la bande 1 ($n = 1$) [19].



b) Champ électrique pour un mode situé dans la bande 2 ($n = 2$) [19].



c) Energie locale du champ électrique dans la bande 1 ($n = 1$) [19].



d) Energie locale du champ électrique dans la bande 2 ($n = 2$) [19].

Figure 15 : Illustration des modes associés à la première structure de bande photonique de la figure 14 : a) Champ électrique dans la bande 1 ; b) Champ électrique dans la bande 2 ; c) Energie locale dans la bande 1 ; d) Energie locale dans la bande 2

1.4.3. Cristal photonique 2D - Diagramme de bandes

Un cristal BIP bidimensionnel [27-28] est une structure dont la permittivité diélectrique est modulée périodiquement dans deux dimensions et reste homogène dans la troisième. Ces structures périodiques sont par exemple composées de cylindres diélectriques parallèles. Elles présentent une relative simplicité géométrique qui facilite les modélisations théoriques et les études expérimentales. La comparaison entre les deux ne s'en trouvera que plus simplifiée. Afin d'ouvrir des bandes interdites photoniques larges, il faut un contraste d'indice entre la matrice hôte et les tiges suffisamment grand [29]. La meilleure configuration est obtenue avec des cylindres de haut indice dans une matrice hôte de bas indice (généralement de l'air) ou inversement. Une des géométries standard d'un BIP 2D peut être formée d'un ensemble de trous percés dans un diélectrique transparent. Dans ces structures 2D, le confinement de la lumière se fait dans le plan perpendiculaire aux cylindres (figure 16).

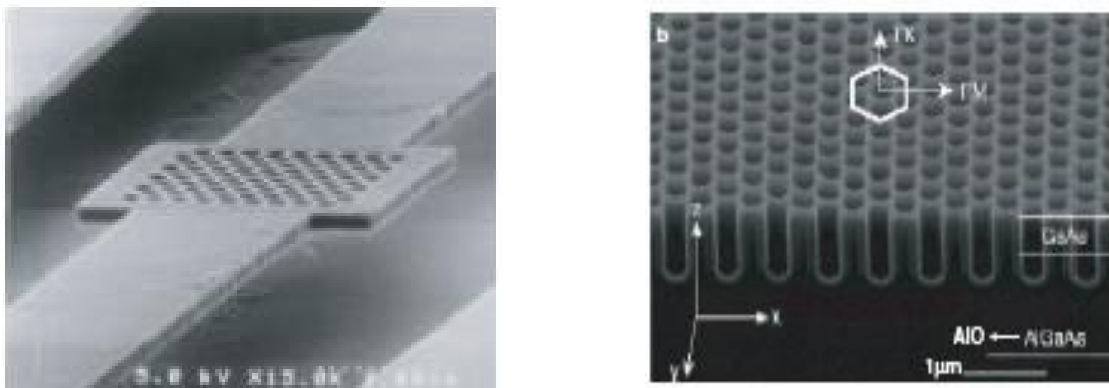


Figure 16 : Exemple d'un cristal photonique bidimensionnel [29]

Pour étudier le comportement d'une onde électromagnétique incidente sur une telle structure deux polarisations sont possibles :

La polarisation électrique TE correspond au cas où le champ électrique \vec{E} est parallèle aux cylindres infinis. Alors que celle magnétique TM correspond au cas où \vec{E} leur est perpendiculaire (figure 17).

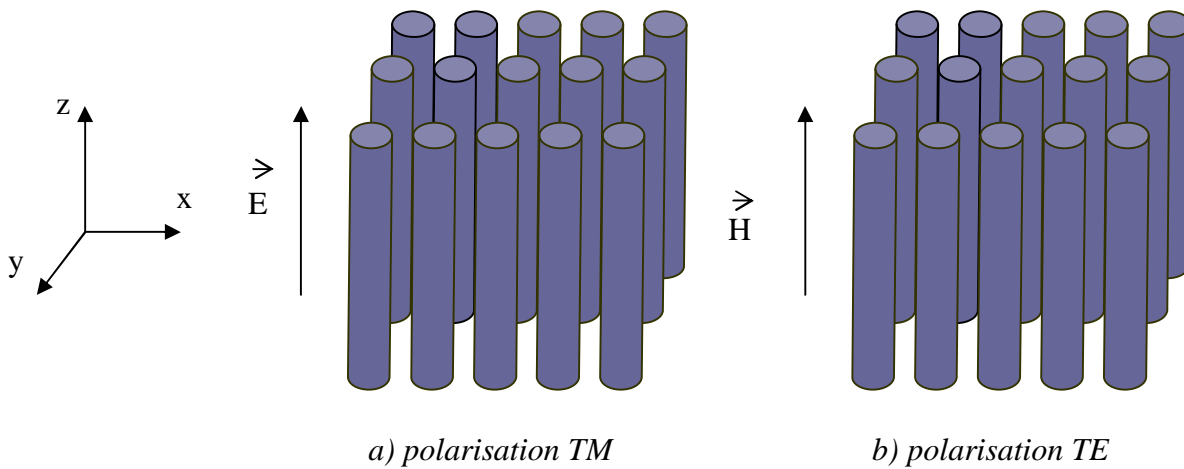


Figure 17 : Représentation des polarisations TE et TM dans un BIP 2D

Dans les cristaux 2D, les ondes électromagnétiques se propagent dans le plan perpendiculaire aux tiges et peuvent être séparées en deux polarisations TE ou TM. Les bandes interdites qui apparaissent dans chaque cas doivent se superposer pour former une bande interdite totale. Elle empêche ainsi la propagation de l'onde incidente quelle que soit sa polarisation. Nous présentons sur la figure 18 l'exemple d'un diagramme de bande d'un cristal photonique 2D en polarisation TE et TM.

En réalité, nous ne pouvons obtenir théoriquement une bande interdite complète que dans le cas des structures 3D, où il n'y a aucune propagation de l'onde incidente quelle que soit la polarisation et la direction de l'onde incidente.

Les diagrammes de la figure 18 représentent:

- en abscisse, le parcours fait par le vecteur d'onde lorsqu'il décrit le contour formé par les points de haute symétrie Γ, M, K de la première zone de Brillouin
- en ordonnée, les fréquences des modes calculés

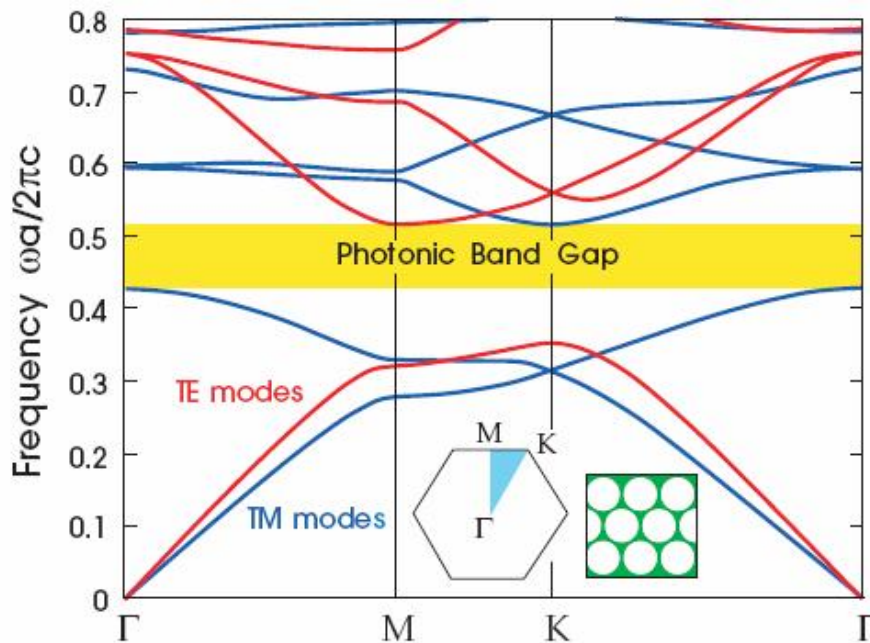


Figure 18 : Diagramme de bande d'un BIP 2D en polarisation TM et TE [19]

1.4.4 Cristal photonique à trois dimensions- Diagrammes de bandes

Les cristaux photoniques tridimensionnels sont des structures dont la permittivité diélectrique est structurée périodiquement dans les trois directions. Elles ont été les deuxièmes à être réalisées par Yablonovitch après les réseaux de Bragg. Son objectif était d'obtenir une bande interdite complète pour toutes les directions de l'espace. Il existe un grand nombre de structures possibles (figure 19). Mais seulement quelques-unes présentent une bande photonique interdite complète. Ho, Chan et Soukoulis [30] ont été les premiers à montrer théoriquement qu'il est possible d'avoir une bande interdite complète avec un réseau de type diamant mais impossible de l'avoir avec un réseau cubique face centré (CFC) [31-32].

La réalisation technologique des BIP 3D est particulièrement difficile s'ils sont destinés à fonctionner dans le visible. Les techniques généralement mises en œuvre sont particulièrement lourdes.

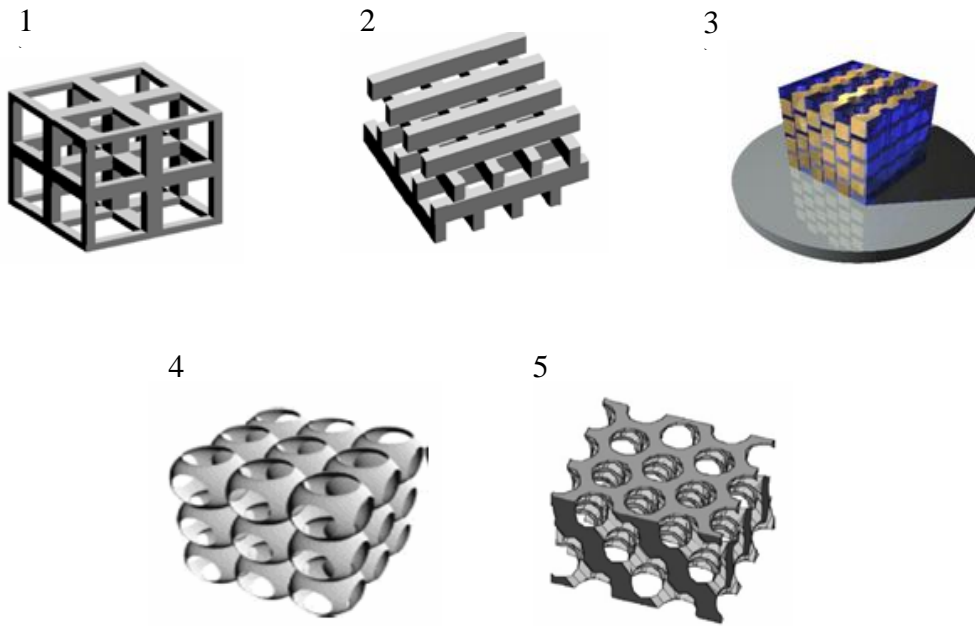


Figure 19 : Différentes structures 3D : la structure cubique (1) ; tas de bois (2) ; structure multicouches (3) ; les opales (4) et la Yablonovite (5) [33]

La première structure tridimensionnelle expérimentale avec un gap complet fut réalisée par E.Yablonovitch, dans le domaine des micro-ondes en 1991[4]. Cette structure est réalisée en perçant mécaniquement des trous selon trois axes du réseau de type diamant.

Il a été possible avec les progrès de la microfabrication, d’observer des bandes interdites tridimensionnelles complètes dans le proche infrarouge, pour des structures du type « tas de bois » [9].

La figure 20 montre un exemple de diagramme de bandes d’un réseau diamant de sphères d’air dans un diélectrique à haute permittivité ($\epsilon = 13$) [19].

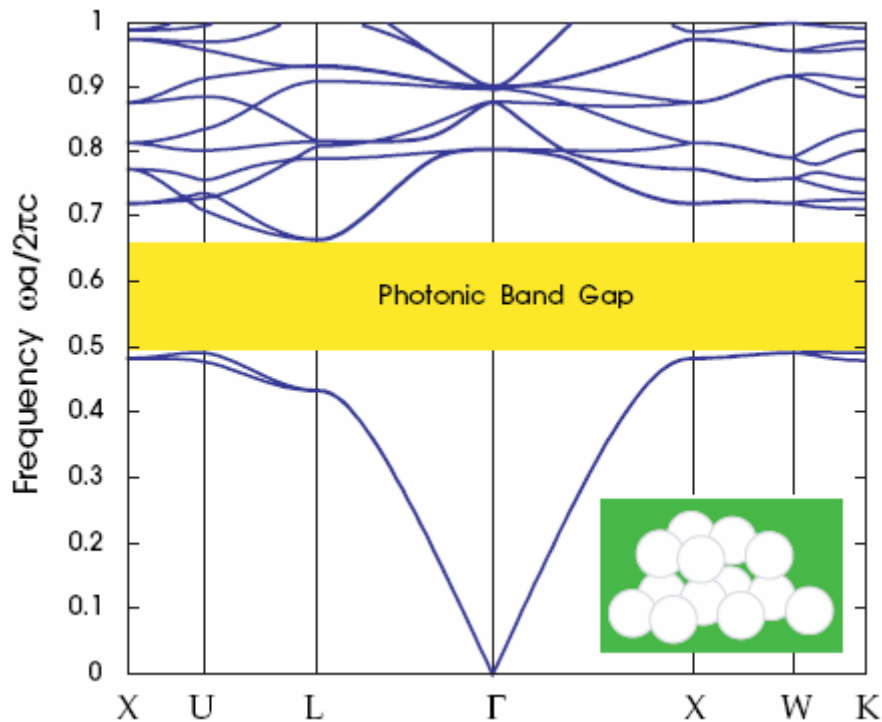


Figure 20 : Exemple d'un diagramme de bande d'un réseau diamant de sphères d'air dans un diélectrique à haute permittivité ($\epsilon = 13$) [19].

1.5. Les défauts

Les défauts dans les semi-conducteurs ont pour effet d'induire des niveaux d'énergie autorisés dans la bande interdite [34]. La création de défauts dans un cristal photonique consiste à briser la périodicité du réseau et introduire des niveaux d'énergies permis dans la bande interdite [35, 24]. Dans le cas d'un réseau de trous, le défaut peut consister en l'absence d'un ou plusieurs trous. Il existe principalement deux types de défauts, les défauts ponctuels (cavités) et les défauts linéaires (guide d'ondes). Il reste néanmoins possible de jouer sur plusieurs paramètres pour obtenir une grande variété de défauts (variation de la taille des trous et de leurs formes par exemple).

1.5.1. Microcavité

Le défaut ponctuel peut être créé en modifiant les caractéristiques d'une cellule du réseau. Pour les cristaux photoniques composés de tiges diélectriques, on peut enlever une tige comme on peut modifier sa permittivité ou sa géométrie (figure 21). Cela correspond à une cavité résonante. Plus généralement, on peut faire varier le rayon de la tige ou du trou pour faire varier les caractéristiques du diagramme de bandes.

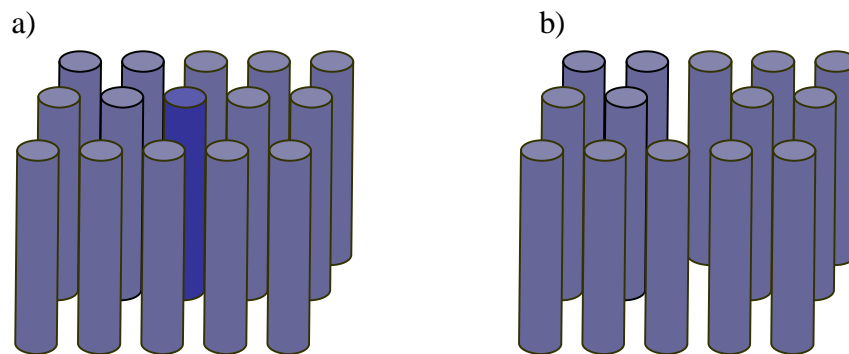


Figure 21 : Défauts ponctuels : a) Modification de la permittivité d'une tige (il vaut mieux faire la tige centrale en rouge) b) Absence de la tige centrale

Les modes électromagnétiques introduits par le défaut sont appelés modes de défaut. Le diagramme de bande d'une structure BIP avec défaut s'obtient en faisant varier le vecteur \vec{k} le long du contour défini par les points de hautes symétries de la zone de Brillouin irréductible. Le mode de défaut se loge dans la bande interdite (figure 22). La fréquence correspondante est la fréquence propre de résonance de la microcavité. Si on injecte dans ce défaut un mode électromagnétique dont la fréquence appartient à la bande interdite photonique, la lumière ne pourra pas se propager dans le cristal mais elle sera piégée et confinée autour du défaut (figure 23). Seuls certains modes y sont donc autorisés. Les fréquences de ces modes dépendent du défaut. En faisant varier le rayon r du défaut, on peut atteindre une certaine gamme de fréquences dans la bande interdite [36].

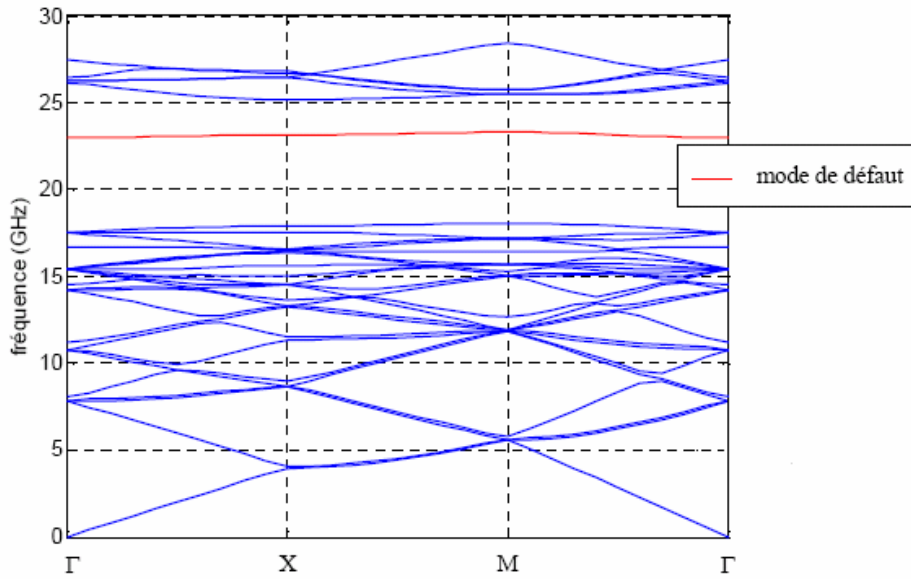


Figure 22 : Diagramme de dispersion d'une structure 2D avec défaut [37]

L'intérêt des cavités est de réaliser des sources de lumière, intenses et très confinée spatialement. Elles peuvent offrir la possibilité d'utiliser l'effet laser si leur facteur de qualité est suffisamment élevé.

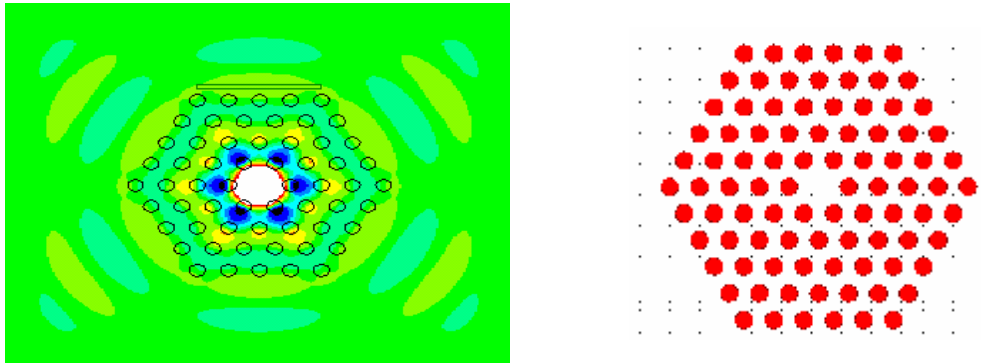


Figure 23 : Microcavité de la structure hexagonale de GaAs dans l'air montrant la distribution du champ E_y autour du défaut en polarisation TE (simulée par le logiciel Rsoft)

1.5.2. Guides d'ondes

En introduisant un défaut linéaire (omission d'une ou plusieurs rangées de motifs élémentaires), il est possible de guider la lumière selon une direction choisie. La lumière va se propager le long de ce guide avec une fréquence appartenant à la bande interdite photonique du cristal (figure 24 a). Des guides d'ondes classiques à base de matériaux diélectriques sont réalisés depuis longtemps. L'onde se propage dans le diélectrique d'indice fort et se réfléchit totalement sur les bords qui sont constitués d'un diélectrique d'indice plus faible. L'intérêt des guides d'ondes BIP par rapport à ceux traditionnels c'est qu'ils présentent de faibles pertes au niveau des courbures (figure 24 b). Le fait de recourber l'un de ces guides sur lui-même permet d'obtenir un anneau et seuls quelques modes peuvent rester dans cet anneau.

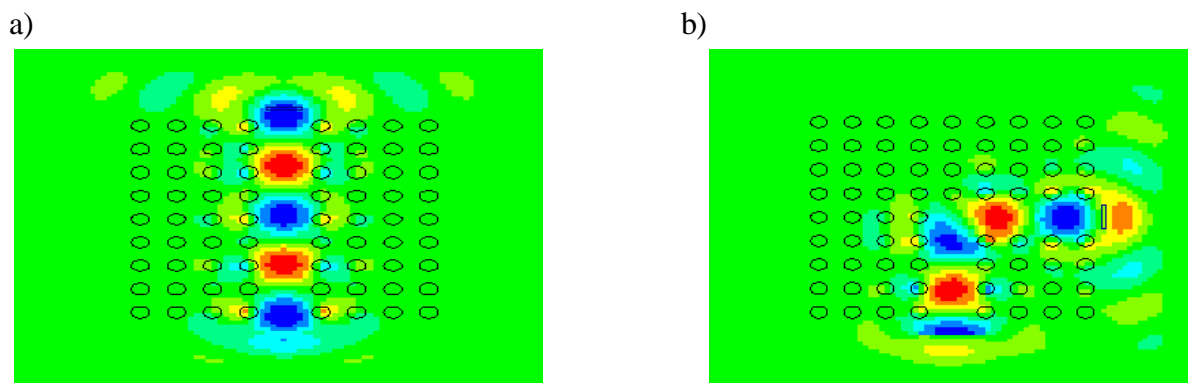


Figure 24 : Guide d'onde de la structure GaAs dans l'air à motif carré montrant la distribution du champ E_y autour du défaut en polarisation TE
a) Rectiligne b) Courbures à 90° (simulée par le logiciel Rsoft)

2. Notre approche expérimentale d'élaboration

Pour la fabrication des cristaux photoniques à bande interdite plusieurs technologies existent dans la littérature. Les plus courantes viennent des technologies de la microélectronique et concernent essentiellement les semi-conducteurs. Ces techniques sont chères et lourdes dans leur mise en œuvre. Au laboratoire Hubert Curien on utilise une nouvelle méthode d'élaboration des BIP à base de nanoparticules (NP) métalliques ou semi-conductrices. Cette approche utilise simultanément une insolation laser continu UV et le recuit thermique [11].

L'originalité de cette technique est qu'elle permet de contrôler la distribution de tailles des NP et de les faire croître préférentiellement dans la zone irradiée. L'élaboration peut être effectuée en fonction de la concentration des NP, de la température de recuit, de la puissance et du temps d'insolation. Le matériau ainsi fabriqué a un indice optique qui peut être ajustable en jouant sur les paramètres cités ci-dessus. L'intérêt de tels types de BIP par rapport à ceux que nous avons présenté précédemment c'est la possibilité de moduler leurs propriétés optiques, par exemple les diagrammes de bandes, par l'ajustement de l'indice optique entre les zones avec NP et sans ; de ce matériau composite.

L'objectif dans cette partie est de présenter brièvement quelques méthodes utilisées au laboratoire Hubert Curien pour la synthèse de BIP à base de nanoparticules semi-conductrices ou métalliques enterrées dans différentes matrices hôtes. Des BIP sont obtenus avec ces matériaux composites si le contraste d'indice entre zone avec NP et sans est assez important. Deux technologies à base de nanoparticules sont mises en œuvre au laboratoire. La première concerne la synthèse de NP semi-conductrices ou métalliques dans des verres massifs obtenus par fusion à haute température. La seconde approche est le procédé Sol-gel qui permet la formation de NP métalliques dans des couches minces de diélectriques mésoporeuses. Le rôle des pores est d'imposer la taille des NP élaborées.

2.1. La fusion

Au cours de la fusion, le mélange vitrifiable est transformé en une masse liquide. Les poudres utilisées dans cette méthode sont les suivantes :

- Un matériau vitreux pour remplir le rôle de matrice hôte, dans notre cas c'est de la silice.
- Un métal sous forme d'oxyde ou un semi-conducteur,
- Un agent réducteur pour favoriser les processus de germination et de croissance.

La première étape de cette méthode de synthèse consiste à faire fondre le verre dans un creuset et à y dissoudre dans des proportions identiques de quelques pourcents de ZnS ou l'oxyde d'argent. Le mélange est porté à très haute température dans un four. La fusion est achevée lorsqu'il n'y a plus de particules solides dans le liquide qui devient alors très

visqueux. Si la fusion se passe bien le verre massif obtenu est transparent. Suivent après les étapes de découpe et de polissage avant les traitements thermiques+UV et les caractérisations optiques (absorption, émission, micro-raman) des échantillons fabriqués. L'objectif est d'obtenir, dans le verre massif ainsi formé, de larges zones d'homogénéité au sein desquelles des nanoparticules (NP) peuvent se former après recuit thermique et insolation UV simultanés adéquats (figure 25).

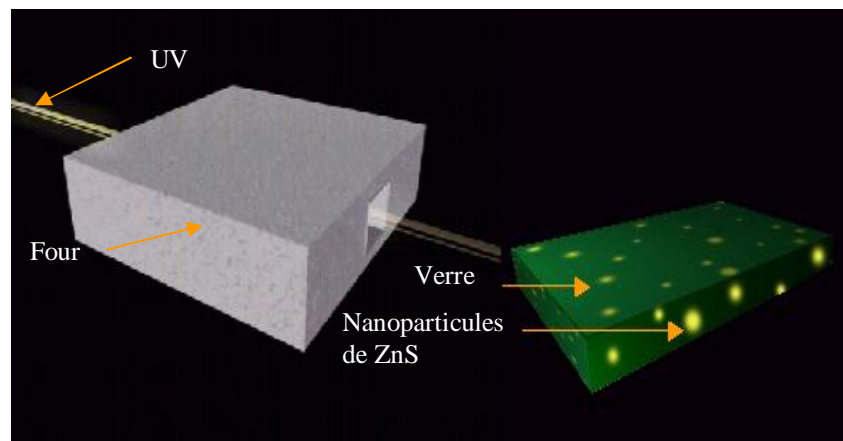


Figure 25 : Croissance de NP par traitements thermiques +UV simultanés

2. 2. Couches minces de silice obtenues par un procédé sol-gel – NP d'argent :

La technique sol-gel a été décrite pour la première fois par le chimiste Ebelem en 1845. C'est un procédé qui permet d'avoir des couches minces de silice à basse température ($T < 200^{\circ}\text{C}$) et il n'est pas rare d'opérer à une température ambiante. Il utilise des précurseurs chimiques pouvant produire des céramiques ou des verres [38].

Le sol-gel [39, 40] est une méthode d'élaboration de matériaux permettant la synthèse de verres massifs ou en couches minces, de céramiques et de composés hybrides organo-minéraux, à partir de précurseurs en solution. Elle ne nécessite pas d'équipement lourd et spécifique.

Cette méthode est basée sur l'utilisation d'un sol obtenu à partir de précurseurs d'alcoxydes métalliques ou organométalliques. Ce sol, solution contenant des particules en suspension, polymérise à basse température pour former un gel humide. Celui-ci sera densifié par recuit thermique à une température T comprise entre 300°C et 500°C pour donner un produit inorganique sous forme de gel sec, de verre ou de polycristal.

Plusieurs méthodes de séchage du gel peuvent être employées figure 26 a :

- Le gel peut être séché dans des conditions douces (4). Il durcit en se compressant : c'est un xérogel (e) (formation des verres et céramiques).
- Le solvant peut être évaporé dans des conditions critiques (5) (vitesse d'évaporation importante et constante) pour former un gel très compact : c'est un aérogel (f)
- Il est possible de répandre le sol sur une surface (6 et 7) pour former des films de xérogels en couches minces (techniques de spin-coating ou dip-coating) (h).

Le dip-coating ou trempage-tirage : cette méthode consiste à immerger le substrat dans la solution contenant le « sol » et à le retirer dans des conditions très contrôlées et stables pour obtenir un film d'épaisseur régulière figure 26 b. Lors de la remontée, le liquide va s'écouler sur le substrat. A la fin de l'écoulement, le substrat est recouvert d'un film uniforme et poreux.

Dans le procédé sol-gel, des unités monomères $[\text{SiO}_4]$ sont enchaînées pour construire le réseau désordonné de la silice vitreuse. Ce procédé peut être utilisé dans différents domaines tels que l'encapsulation et l'élaboration de matériaux hyper-poreux, mais c'est dans la réalisation de dépôts en couches minces qu'il trouve sa principale application.

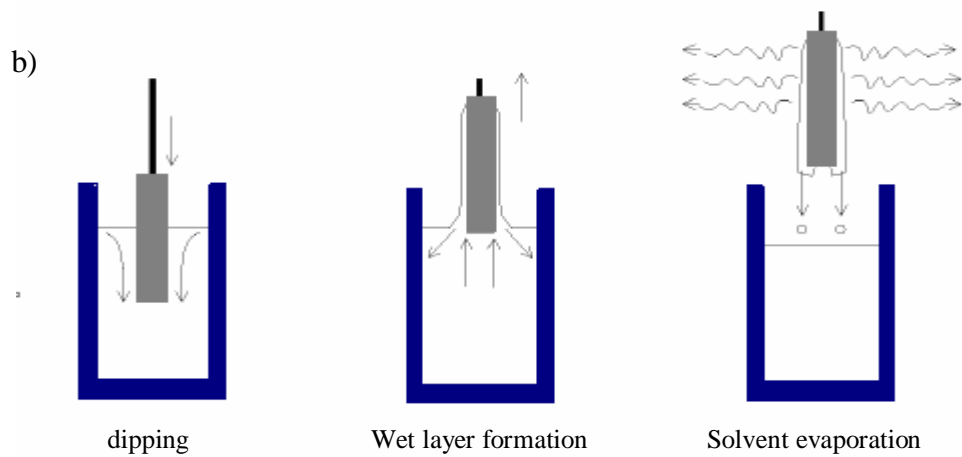
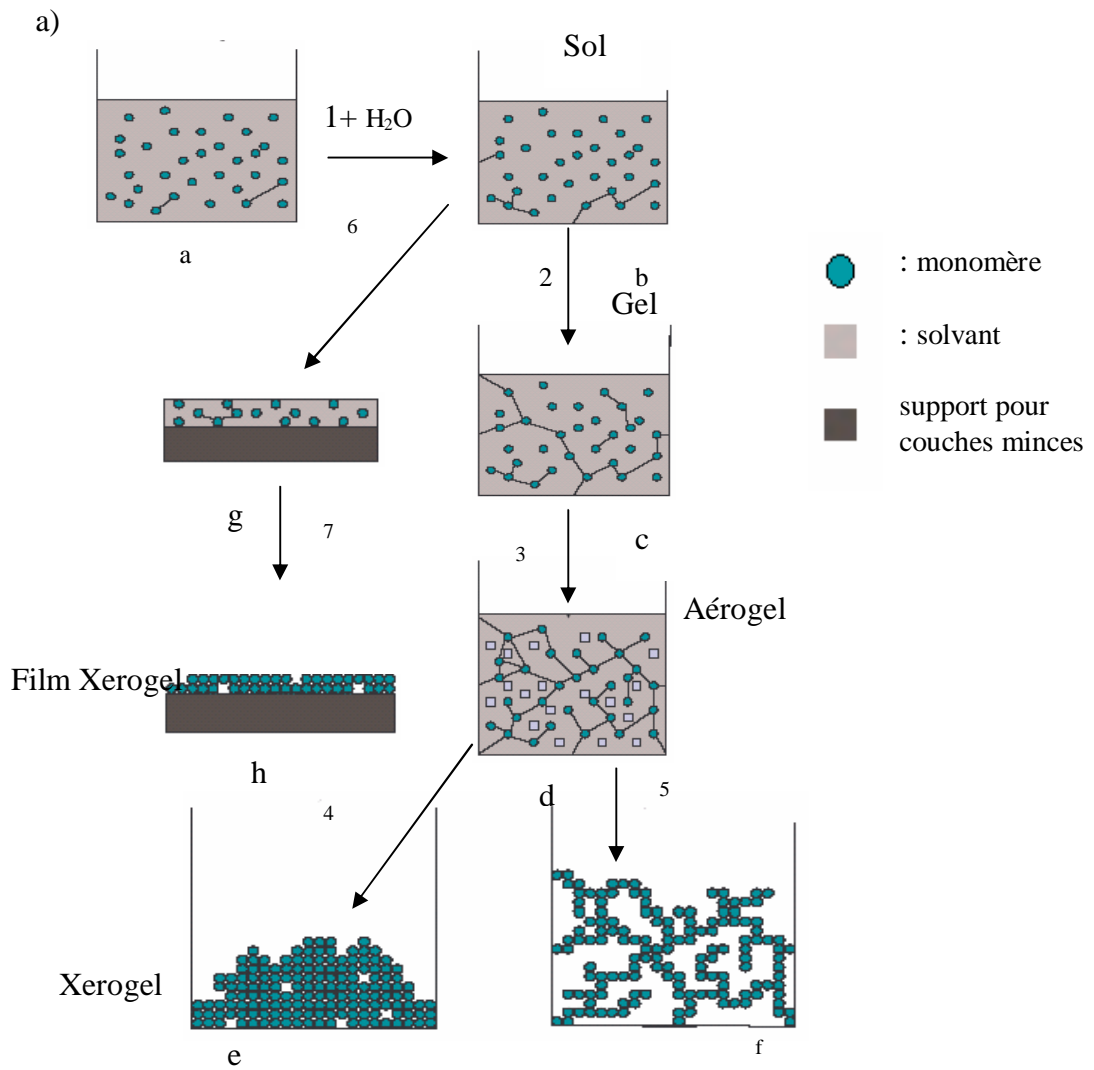


Figure 26: a) Principales étapes d'une synthèse d'un matériau par voie sol-gel
 b) Dépôt de couches minces par dip-coating : le substrat est immergé dans la solution et remonté à vitesse constante

La figure 27 montre les changements structuraux du film déposé par dip-coating, changements produit par le drainage de la solution, l'évaporation des solvants et la condensation [41]. Tous ces phénomènes physico-chimiques sont simultanés.

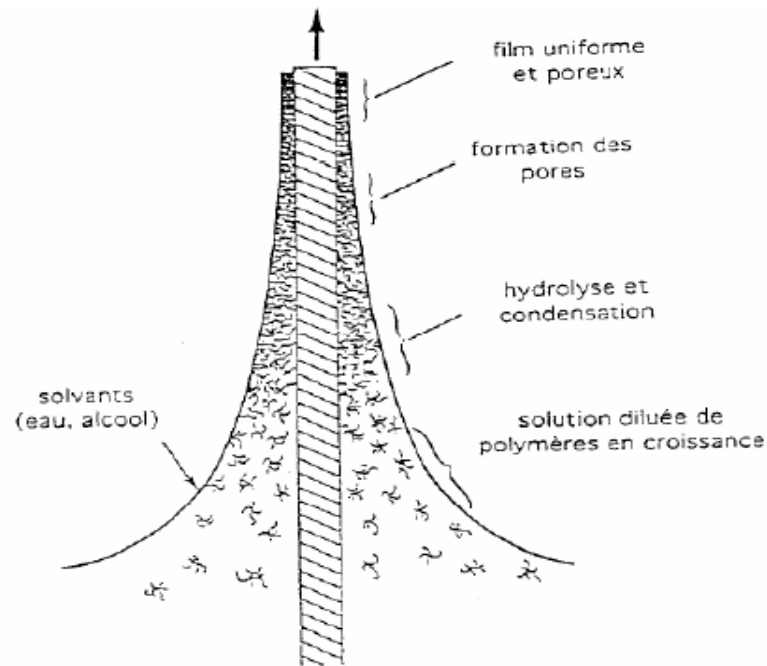


Figure 27: Schéma de la formation de la couche par la méthode du dip-coating

La figure 28 montre la méthode de synthèse permettant d'obtenir des NP d'argent dans la silice. Cette méthode consiste à mélanger le précurseur triéthoxysilane $\text{Si}(\text{OEt})_3$ avec un catalyseur acide, la réaction va être activée de différentes manières selon le catalyseur. Ceci se traduit par des vitesses de réaction et de gélification conduisant à la formation de fibres. L'étape suivante est la polymérisation qui est l'étape de croissance des chaînes : on immerge le substrat dans la solution contenant AgNO_3 et F127 (spin-coating). Le liquide va s'écouler sur le substrat pour former un film poreux qui va être séché à une température ambiante avant l'insolation UV (244nm). Les nanoparticules d'argent seront ainsi formées dans la silice. Le mélange d'un catalyseur basique avec le précurseur triéthoxysilane favorise l'obtention de grosses particules tandis que dans la condition acide, la nucléation est favorisée [42].

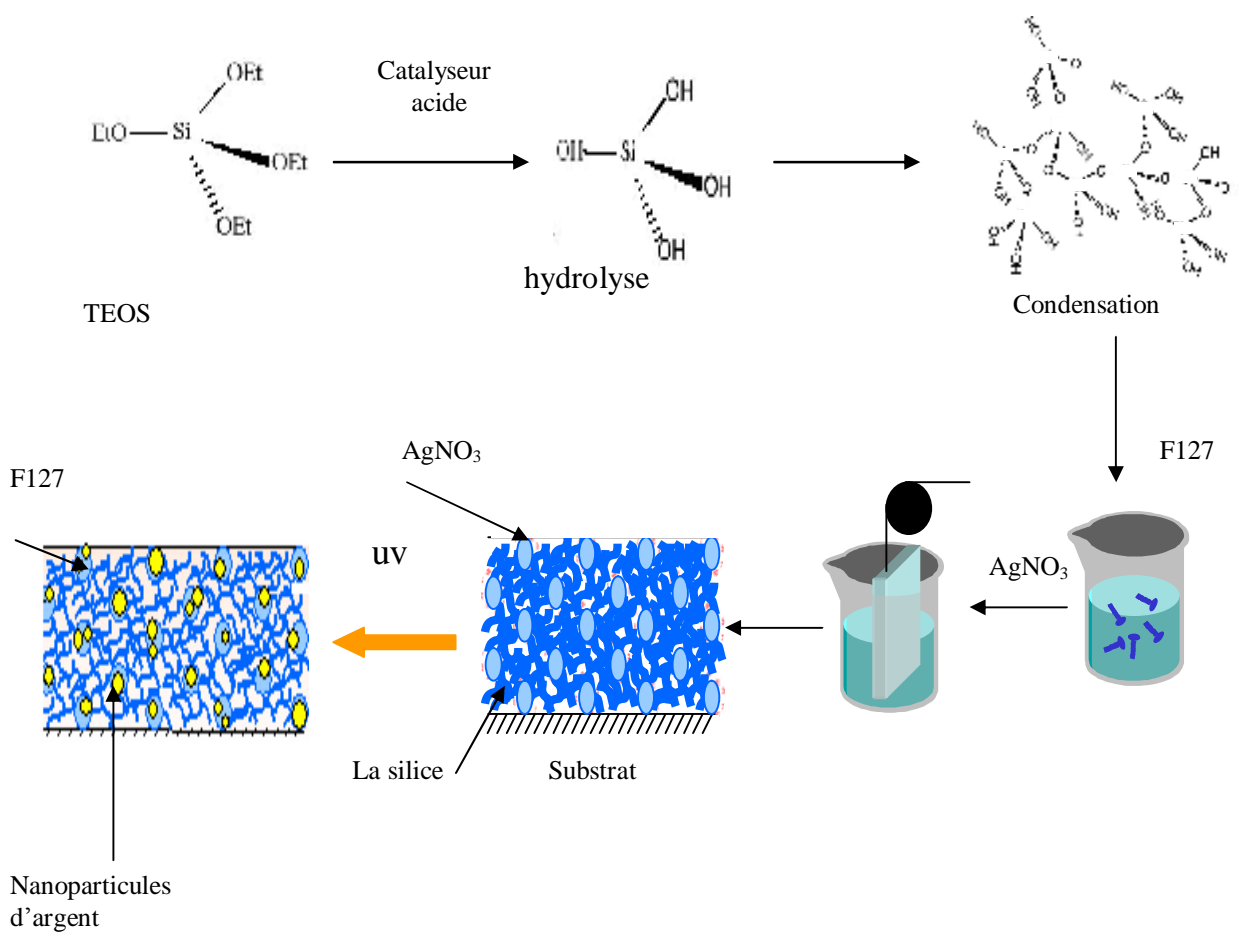


Figure 28 : Elaboration des nanoparticules d'argent par un procédé sol-gel

3. Conclusion

Grâce à la ressemblance entre l'équation de Schrödinger et l'équation de propagation des ondes électromagnétiques, dans ce chapitre nous avons montré qu'un matériau, dont la permittivité diélectrique varie périodiquement à l'échelle de la longueur d'onde, a la particularité de présenter des bandes interdites photoniques qui interdisent la propagation de la lumière dans la structure.

Nous avons aussi présenté que les cristaux photoniques ouvrent la voie à la réalisation de nombreuses fonctions optiques grâce aux possibilités de confinement de la lumière qui pourraient révolutionner la fabrication des circuits intégrés optoélectroniques.

Nous avons montré une nouvelle méthode d'élaboration des BIP à base de nanoparticules (semi-conductrices ou métalliques) développées au laboratoire Hubert Curien. Cette approche utilise simultanément une insolation laser continu UV et le recuit thermique.

Etant donné le vif intérêt suscité par les cristaux photoniques (BIP), notre étude s'est orientée sur la modélisation de ces structures.

Chapitre 2

Chapitre 2

Rappels de la méthode FDTD

1. Introduction

En raison de leurs propriétés optiques accordables en fonction de leur indice, ces nouveaux matériaux élaborés au laboratoire présentent un intérêt certain pour les applications en photonique, optoélectronique et optique intégrée. Il est donc important pour nous de prévoir leurs caractéristiques physiques par la modélisation de façon à caler au mieux, pour une application définie, les propriétés voulues. La FDTD nous paraît un outil adéquat pour répondre à ce type de problématique. Dans ce chapitre nous en faisons un court rappel. Nous mentionnerons également d'autres méthodes.

Le comportement de la lumière dans un cristal BIP de dimension finie ou infinie est régi par les équations de Maxwell. D'une manière générale, la modélisation des cristaux photoniques passe par le calcul des diagrammes de dispersion, de la réflexion et de la transmission. Les méthodes les plus citées dans la littérature pour l'étude des cristaux photoniques sont [43, 44]: Méthode des ondes planes (PWM) ; Méthode des différences finies temporelles (FDTD) ; Méthode des matrices de transfert ; Méthode des matrices de diffraction ; Méthode des modes couplés.

Parmi toutes ces méthodes, les plus répandues sont la méthode des ondes planes et la méthode FDTD utilisée dans nos simulations.

2. Méthode des ondes planes

La méthode des ondes planes était la première méthode utilisée pour la détermination des modes propres et du diagramme de dispersion des structures périodiques de dimensions infinies [45-48]. Inspirée de la méthode de calcul de bande utilisée en physique du solide pour les matériaux à bande interdite électronique, elle est basée sur la décomposition de la permittivité et des ondes de Bloch sur une base de Fourier utilisant les vecteurs réciproques

du cristal. Les équations de Maxwell sont représentées dans le domaine fréquentiel et transformées en un problème aux valeurs propres dont la résolution permet d'obtenir les relations de dispersion reliant la fréquence au vecteur d'onde.

Les équations de Maxwell s'écrivent pour une onde plane qui se propage dans un milieu diélectrique non magnétique, linéaire, isotrope et en absence de charges et de courant, de la manière suivante :

$$\nabla \times \left(\frac{1}{e_r(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \right) + m_0 e_0 \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \left(\frac{1}{e_r(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right) + m_0 e_0 \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.2)$$

Les équations (2.1 et 2.2) se résolvent en décomposant la norme complexe $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et $e_r(\mathbf{r})$ en série de Fourier spatiale de la forme [45,46] :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot e^{j\omega t} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot e^{j\omega t} \quad (2.4)$$

En simplifiant les équations (2.1 et 2.2), on obtient :

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) = \frac{\omega^2}{c^2} e_r(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})) = \frac{\omega^2}{c^2} e_r(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

Compte tenu de la périodicité de $e_r(\mathbf{r})$, Les champs $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ satisfont au théorème de Bloch et peuvent être décomposés sous la forme:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) \cdot e^{ik \cdot \mathbf{r}} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = v_k(\mathbf{r}) \cdot e^{ik \cdot \mathbf{r}} \quad (2.8)$$

Où les fonctions $u_k(\mathbf{r})$ et $v_k(\mathbf{r})$ sont périodiques, il est donc possible de développer $e_r(\mathbf{r})$, $u_k(\mathbf{r})$ et $v_k(\mathbf{r})$ en séries de Fourier :

$$e_r(\mathbf{r}) = \sum_G e_r(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.9)$$

$$E(\mathbf{r}) = u_k^r(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \left(\sum_G u_k^r(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_G u_k^r(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \quad (2.10)$$

$$H(\mathbf{r}) = v_k^r(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \left(\sum_G v_k^r(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_G v_k^r(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \quad (2.11)$$

où \mathbf{G} : est un vecteur du réseau réciproque et $e_r(\mathbf{G})$, $u_k^r(\mathbf{G})$ et $v_k^r(\mathbf{G})$ sont les composantes dans l'espace réciproque de $e_r(\mathbf{r})$, $u_k^r(\mathbf{r})$ et $v_k^r(\mathbf{r})$ (que l'on peut déterminer par une intégrale de Fourier). Alors l'équation (2.5) devient :

$$-(\mathbf{G}+\mathbf{k}) \times \left\{ (\mathbf{G}+\mathbf{k}) \times u_k^r(\mathbf{G}) \right\} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{G'} e_r(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \cdot u_k^r(\mathbf{G}') \quad (2.12)$$

C'est un système linéaire de dimension infinie car il y a une infinité de vecteurs \mathbf{G} du réseau réciproque. Les développements en séries peuvent être limités à N ondes planes. En considérant les trois dimensions de l'espace, le système est de dimension 3N. La diagonalisation, qui doit être effectuée pour chaque valeur de \mathbf{k} , permet alors de déterminer les valeurs propres $\omega_n(\mathbf{k})$ (n servant à numéroter les valeurs propres). En pratique, les valeurs de \mathbf{k} sont limitées à certaines directions de symétrie de la zone de Brillouin irréductible. Les diagrammes de dispersion du cristal photonique sont alors obtenues. De manière générale les fréquences $\omega_n(\mathbf{k})$ recouvrent continûment le spectre d'énergie, quand les vecteurs \mathbf{k} décrivent la première zone de Brillouin irréductible. Dans certains cas, il existe des domaines d'énergie dans lesquels aucun mode $\omega_n(\mathbf{k})$ n'est accessible : ce sont les bandes interdites photoniques.

Pour calculer le diagramme de dispersion d'une structure périodique par la méthode des ondes planes, il faut définir une cellule et un réseau périodique selon lequel cette cellule se répète pour couvrir entièrement l'espace. La cellule peut être uniquement le motif du cristal photonique pour un cristal sans défauts, mais peut être de dimension plus grande (supercellule) pour tenir compte d'un défaut, ponctuel ou linéaire dans le cristal (cas des cavités ou guides d'onde).

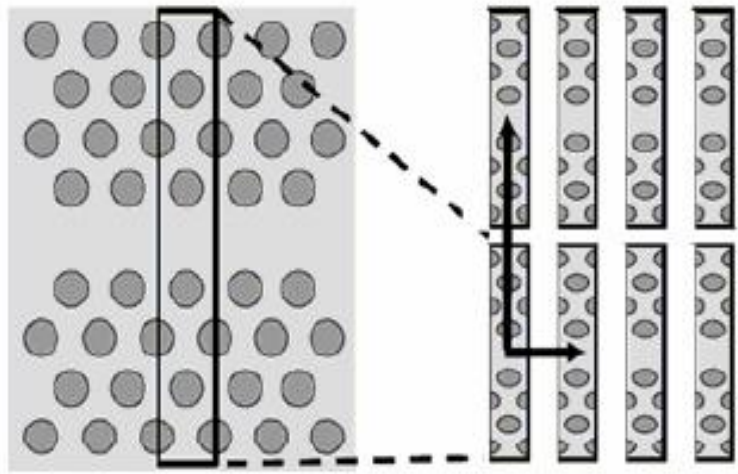


Figure 29 : Exemple de définition d'une super-cellule dans le cas d'un défaut linéaire [49]

3. Méthode des différences finies temporelles (FDTD)

La méthode FDTD (Finite Difference Time Domain) a été initialement proposée par Kane S. Yee en 1966 [50] pour résoudre les problèmes impliquant les équations de Maxwell dans les milieux isotropes avec les conditions aux limites. Il a développé les premiers algorithmes de calcul concernant l'approche temporelle. Elle a été ensuite appliquée aux cristaux photoniques. La méthode FDTD permet une résolution numérique des équations de Maxwell par une fine discrétisation spatio-temporelle. L'espace est divisé en cellules élémentaires (mailles élémentaires). Elle possède de nombreux avantages [51, 52] :

- Le calcul de toutes les composantes de champs à tous les instants et sur tout le domaine de calcul permet d'obtenir de nombreuses informations, grâce à l'utilisation de la transformée de Fourier. Elle est particulièrement intéressante pour connaître la réponse spectrale d'un système [53,54].
- La possibilité de donner des résultats précis même sur les structures à fort contraste d'indice comme les cristaux photoniques.
- La résolution des équations dans le domaine temporel, permet d'appréhender visuellement la propagation d'une onde électromagnétique dans un matériau périodique. Cela a permis d'étudier l'évolution de la transmission et de la réflexion à l'intérieur du cristal photonique à étudier.
- L'étude de réseaux de taille finie grâce aux conditions aux limites absorbantes ou bien

de réseau de taille infini en utilisant les conditions de mur magnétique ou de mur électrique [55].

- La possibilité d'intégrer dans l'algorithme de résolution de nombreuses sources (ondes planes, modes guidés,)

3.1. Principe de la méthode

La FDTD a pour but la résolution numérique des équations de Maxwell en utilisant les différences finies dans les domaines spatial et temporel. Dans le cas d'un matériau isotrope, non dispersif, transparent, sans courant ni charges électriques, deux des quatre équations s'écrivent :

$$\mathbf{rot} \mathbf{E} = -\mathbf{m} \frac{\dot{\mathbf{H}}}{\partial t} \quad (2.13)$$

$$\mathbf{rot} \mathbf{H} = -\mathbf{e} \frac{\dot{\mathbf{E}}}{\partial t} + \mathbf{sE} \quad (2.14)$$

Les projections des relations (2.13 et 2.14) s'écrivent, dans un repère cartésien (x, y, z) :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mathbf{m}} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mathbf{m}} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \quad \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mathbf{m}} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\mathbf{e}} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \quad \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\mathbf{e}} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\mathbf{e}} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (2.16)$$

La réduction de ce système dans un plan (x, y) permet de le découpler en deux sous systèmes indépendants :

- 1) En mode TM (transverse magnétique), le système fait intervenir les composantes (E_x, E_y, H_z):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{1}{\mathbf{m}} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\mathbf{e}} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mathbf{e}} \left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.17)$$

2) En mode TE (transverse électrique), le système fait intervenir les composantes (H_x, H_y, E_z) :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{e} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{1}{m} \left(-\frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{m} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.18)$$

Le développement limité de Taylor au deuxième ordre nous permet d'obtenir les dérivées temporelles et spatiales des fonctions (E_x, E_y, H_z) et (H_x, H_y, E_z) . Rappelons brièvement cette discrétisation en utilisant une fonction f à une seule variable u .

Supposons que f est continue et connue aux points $u_1 = u_0 - \alpha$ et $u_2 = u_0 + \alpha$ (figure 30). Il est possible d'évaluer numériquement la dérivée de f en u_0 en utilisant un développement limité de Taylor aux points u_1 et u_2 .

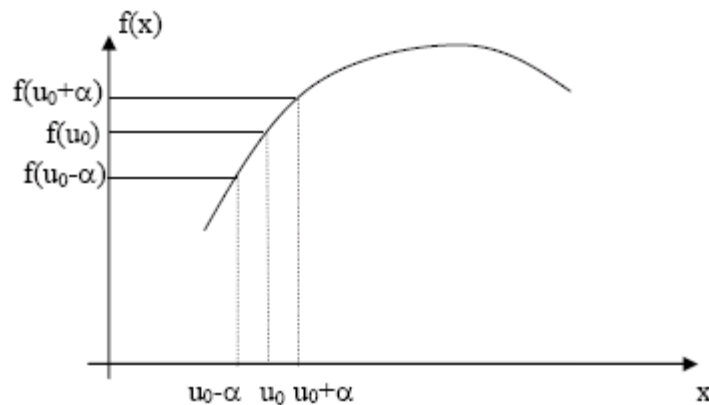


Figure 30 : Calcul de la dérivée de $f(x)$ en u_0

Ce qui donne :

$$f(u_0 - a) = f(u_0) - a \frac{\partial f}{\partial u}(u_0) + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial u^2}(u_0) - \dots + \frac{a^i}{2!} \frac{\partial^i f}{\partial u^i}(u_0) \quad (2.19)$$

Et :

$$f(u_0 + a) = f(u_0) + a \frac{\partial f}{\partial u}(u_0) - \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial u^2}(u_0) + \dots - \frac{a^i}{i!} \frac{\partial^i f}{\partial u^i}(u_0) \quad (2.20)$$

La dérivée de f au point u_0 est approchée de manière centrée en calculant la différence entre les équations (2.19) et (2.20) à l'ordre 2, comme suit :

$$\frac{\partial f}{\partial u}(u_0) = \frac{f(u_0 + a) - f(u_0 - a)}{2a} + \mathcal{O}(a^2) \quad (2.21)$$

Cette solution génère une erreur d'ordre 2 ($\mathcal{O}(a^2)$), beaucoup plus intéressante qu'une erreur d'ordre 1.

3.2. Discrétisation des équations de Maxwell et algorithme de Yee

L'algorithme de Yee utilise un maillage spatial où chaque composante du champ \vec{E} est entourée par 4 composantes du champ \vec{H} , et inversement. L'espace est divisé en cellules élémentaires parallélépipédiques, à l'intérieur desquelles sont calculées les 6 composantes orthogonales des champs électromagnétiques.

La forme des équations de Maxwell permet de calculer le champ électrique au milieu des arêtes des mailles. Les composantes du champ magnétique sont déterminées au centre des faces (figure 31).

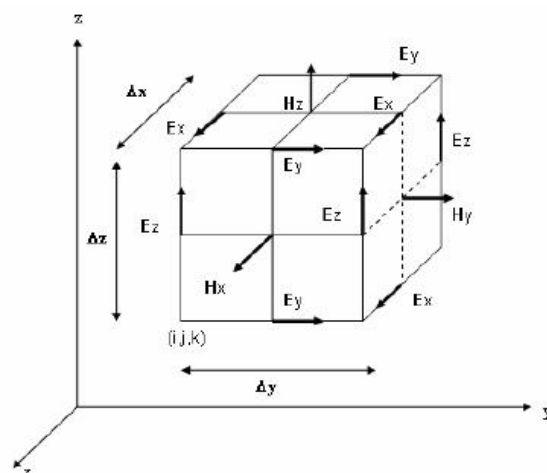


Figure 31 : Cellule cubique de yee

L'espace 3D est discrétisé par un maillage de pas $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$, où Δ représente le pas de discrétisation dans l'espace, et Δt celui du temps.

Les champs électriques et magnétiques seront évalués respectivement aux instants $n.\Delta t$. et $(n + 1/2).\Delta t$ avec n un entier naturel. Les discrétisations spatiales des composantes du champ électrique et magnétique seront décalées de $\Delta / 2$ (figure 32).

Les équations finales discrétisées sur cet espace et dans le temps permettent de calculer la valeur d'une composante de champs en un point de la grille à un instant $t + \Delta t$ en fonction de:

- cette même composante au temps précédent t
- des valeurs de champs voisines (4 composantes E si on calcule une composante H mais seulement 2 composantes H si on calcule une composante E), calculées au temps $t - \Delta t / 2$ (figure 33)

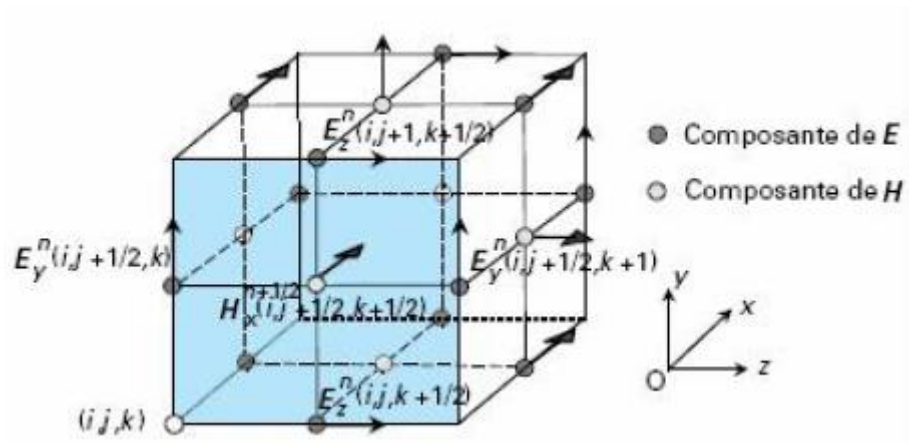


Figure 32 : Position des composantes de champs E et H dans l'espace discrétisé selon la méthode de yee

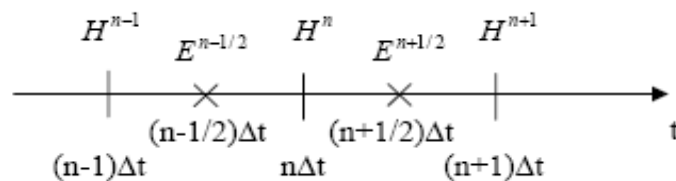


Figure 33 : Décomposition numérique du calcul

Les différentes composantes des champs à l'instant t sont évaluées en fonction de ces mêmes composantes à l'instant $t - \Delta t$ et des composantes de champ voisines ($t - \Delta t/2$), (figure 32). L'évolution du champ électromagnétique en fonction du temps est donc déterminée en chaque point du réseau par un processus itératif. En partant de :

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (2.22)$$

A l'aide des équations suivantes :

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) - H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})}{\Delta t} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial y} = \frac{E_x^n(i+\frac{1}{2}, j+1) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j)}{\Delta y} \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = \frac{E_y^n(i, j+\frac{1}{2}) - E_y^n(i+1, j+\frac{1}{2})}{\Delta x} \quad (2.25)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{m(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})\Delta} \left[E_x^n(i+\frac{1}{2}, j+1) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j) + E_y^n(i, j+\frac{1}{2}) - E_y^n(i+1, j+\frac{1}{2}) \right] \quad (2.26)$$

Le calcul des deux composantes de \vec{E} se fera de la manière que précédemment, ce qui nous donne :

$$E_x^{n+1}(i+\frac{1}{2}, j) = E_x^n(i+\frac{1}{2}, j) + \frac{\Delta t}{e(i+\frac{1}{2}, j)\Delta} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}) \right] \quad (2.27)$$

$$E_y^{n+1}(i, j + \frac{1}{2}) = E_y^n(i, j + \frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{e(i, j + \frac{1}{2})\Delta} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \right] \quad (2.28)$$

La figure 34 donne l'organigramme de la procédure de calcul utilisé

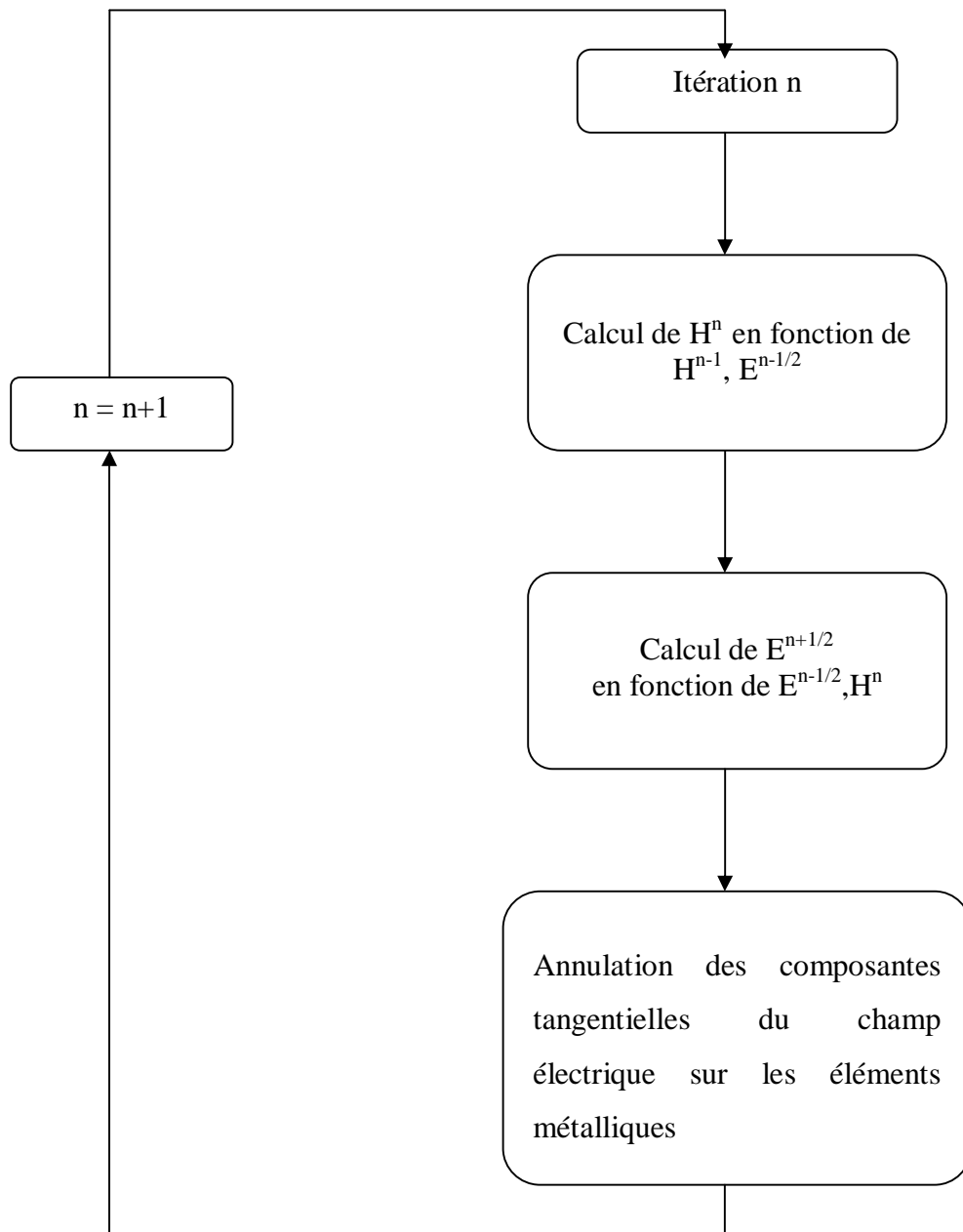


Figure 34 : Organigramme de l'algorithme de calcul des champs par FDTD

3.3. Condition de stabilité

Le premier problème à régler pour éviter l'instabilité numérique est le fait qu'en une itération temporelle, un point quelconque d'une onde ne doit pas pouvoir traverser plus d'une cellule FDTD. En effet, l'algorithme ne peut propager l'onde que d'un nœud vers un nœud adjacent. Le pas d'échantillonnage temporel devra donc être choisi suffisamment petit pour éviter cette erreur. Le critère suivant a été démontré (critère de stabilité de Courant-Friedrichs-Lewy) [56] :

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.29)$$

Où :

$\Delta x, \Delta y, \Delta z$: les pas de discrétisation dans l'espace.

c : la vitesse de propagation d'une onde plane dans le milieu,

Δt : le pas d'échantillonnage temporel.

Cette condition de stabilité implique, si les pas de discrétisation dans les trois directions spatiales sont égaux, à l'inégalité suivante :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{c\sqrt{3}} \quad (2.30)$$

3.4. Conditions aux limites

La mémoire d'un ordinateur étant naturellement limitée, le calcul du champ électromagnétique sera réalisé dans un espace fini. Dans le cas d'un système ouvert cela pose un problème pour le calcul de ce champ sur la frontière de la zone d'étude.

Une première solution est de fixer les composantes du champ à une valeur nulle du domaine et de ne pas appliquer l'algorithme de base. Des réflexions non physiques apparaissent alors sur ces bords et perturbent fortement le comportement de la structure. On utilise donc un algorithme pour ces composantes de bord qui simule aux frontières du domaine de calcul

l'infinité de l'espace. L'utilisation de conditions aux limites performantes est finalement la difficulté majeure de la mise en œuvre de cette technique de calcul qui fait toujours l'objet de nouvelles publications.

Deux familles de solutions existent :

- **Condition de Mur**

La technique utilisée par Mur [57] repose sur un principe posé par Engquist et Madja [58] qui n'est applicable que dans le cas d'un maillage FDTD cartésien. Ce principe est basé sur la factorisation des opérateurs aux dérivées partielles dans l'équation de l'onde.

- **Les PML de Bérenger**

Les PML (Perfectly Matched Layer) [59] est une technique basée sur le placement d'un absorbant artificiel sur le bord de la cellule. Pour éviter toutes réflexions à la frontière, on réalise une condition d'adaptation d'impédance. Si dans le vide une onde plane à incidence normale sur un milieu de conductivité électrique σ et de conductivité magnétique équivalente σ^* alors il y aura adaptation d'impédance si dans les PML on a :

$$\frac{\underline{S}}{e_0} = \frac{\underline{S}^*}{m_0} \quad (2.31)$$

Où e_0 désigne la permittivité du vide et m_0 la perméabilité magnétique.

Dans ces conditions l'onde n'est pas réfléchi à l'interface entre les deux milieux et s'atténue dans la partie absorbante, où le matériau absorbant est défini par une certaine épaisseur (nombre de mailles).

L'onde plane incidente est décomposée fictivement en deux ondes :

- Une onde incidente normale, qui vérifie la condition (2.31) et qui n'est donc pas réfléchi à l'interface entre les milieux non absorbant et absorbant.
- Une onde à incidence rasante pour laquelle aucune absorption n'apparaît. Cette onde ne subit par conséquent aucune réflexion.

Il faut rajouter tout autour de la structure des couches de type PML pour absorber l'onde incidente arrivant avec une incidence quelconque sans réflexions (figure 35).

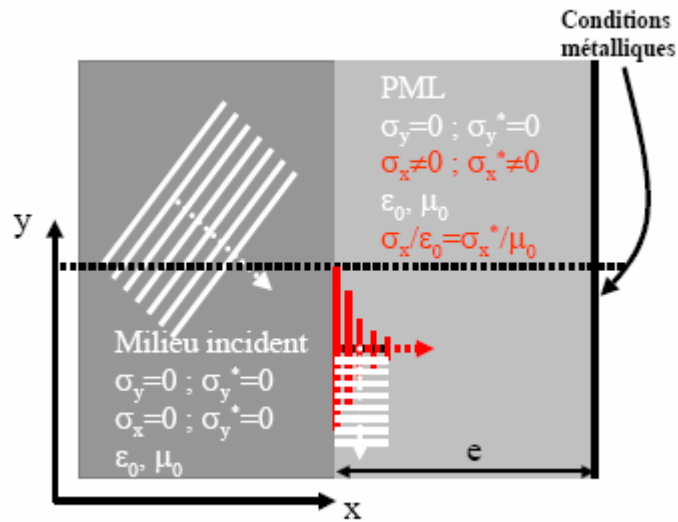


Figure 35: Fonctionnement d'un milieu de type PML

La figure 36 montre l'utilisation des PML pour un système à 2D

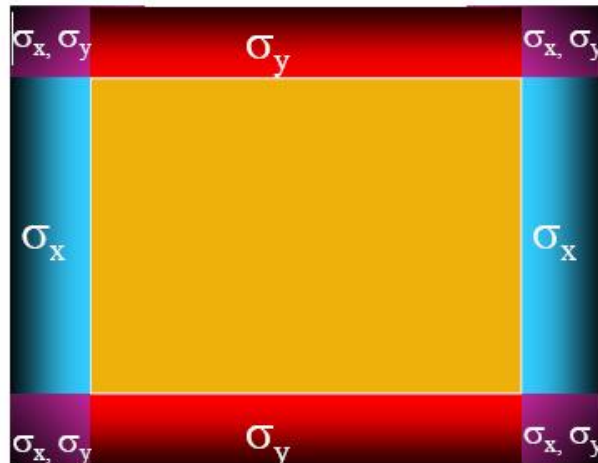


Figure 36 : Utilisation des couches absorbantes de type PML dans le cas d'une structure 2D

4. Autres méthodes

4.1. La méthode des matrices de transfert

C'est une méthode souvent utilisée pour déterminer les coefficients de réflexion et de transmission des structures unidimensionnelles. Une adaptation au cas bidimensionnel a été réalisée par Pendry [60, 61].

La structure est divisée en une succession de couches et une matrice de transfert permet de relier les champs dans une couche à ceux de la couche précédente

La fréquence est ici une variable, et non plus une inconnue comme dans le cas des ondes planes. Ainsi, il est possible, par cette méthode, de remonter à la structure de bande puisque l'on calcule les éventuels vecteurs d'onde de propagation en fonction de la fréquence.

De plus, l'éventuelle dépendance en fréquence de la permittivité diélectrique sera plus facilement prise en compte.

L'avantage de cette méthode par rapport à la méthode FDTD c'est qu'elle occupe peu d'espace mémoire.

4.2. La méthode des réseaux de diffraction

C'est une méthode qui est basée sur une description du cristal photonique comme un ensemble de réseaux de diffraction successifs [62,63]. Les champs sont décomposés dans chaque région séparant ces réseaux et la théorie des réseaux est appliquée pour relier les coefficients de cette décomposition d'une région à l'autre. La matrice de diffusion qui caractérise le milieu est obtenue par un système de relations [62]. L'intérêt de cette méthode est qu'elle donne aussi les pertes intrinsèques avec les modes guidés et les résonances (ce sont les pôles de la matrice de diffusion).

4.3. La méthode des liaisons fortes

Par cette méthode on développe le champ électromagnétique sur une base de fonctions d'onde localisées, par analogie avec la description des liaisons fortes pour les orbitales électroniques des solides cristallins. La base des fonctions d'onde localisées est déterminée en calculant les fonctions de Wannier du cristal BIP parfait. Cette méthode semble être particulièrement rapide pour la détermination des états liés à des défauts dans le cristal.

5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté quelques méthodes pour la modélisation des cristaux photoniques. La méthode que nous avons utilisée pour la modélisation des BIP est la méthode FDTD. La simplicité qui comporte le cœur de l'algorithme de résolution et les équations de base, la rendent très accessible et compréhensible. Le calcul de toutes les composantes de champs à tous les instants et sur tout le domaine de calcul permet d'obtenir de nombreuses informations précises. On peut aussi obtenir des spectres en divers points de la structure ainsi que des cartes de champs à partir de la propagation d'un seul pulse temporel. Elle permet l'utilisation de sources des profils spatiaux (ondes planes, sources ponctuelles) et des profils temporels (harmoniques, impulsions)

Chapitre 3

Chapitre 3

Propriétés optiques des BIP à base de NP ZnS dans une matrice de verre massif modélisées par FDTD

1. Introduction

Ce chapitre, est consacré à la modélisation des cristaux photoniques 1D et 2D à base de nanoparticules de ZnS. Nous montrerons qu'il est possible d'obtenir des structures de bandes interdites photoniques pour une matrice de verre dopée avec des nanoparticules de ZnS malgré le contraste d'indice relativement peu élevé. La largeur de ces bandes varie avec le facteur de remplissage volumique f occupé par les particules.

Notre choix s'est porté sur ZnS en raison des larges possibilités d'applications qu'il offre en photonique et optoélectronique. Avec sa bande interdite large, directe et une énergie de 3.7eV, le ZnS a attiré beaucoup d'intérêt des recherches en raison de ses excellentes propriétés de la luminescence [64-65] et de la photochimie [66]. Ses applications dans les cristaux photoniques sont utilisées dans le domaine du visible et l'IR.

Le choix du verre comme matrice hôte est dictée par ses propriétés de transparence, d'homogénéité et sa facilité de fabrication et d'usinage. De plus il est l'un des matériaux les plus utilisés en optique. Avec les techniques actuelles de micro/nanostructuration, il constitue un matériau de choix pour les dispositifs photoniques passifs et actifs du futur [1].

Notre système 2D est constitué de NP ZnS placées périodiquement dans la matrice hôte selon une structure hexagonale. Les bandes interdites photoniques sont obtenues en polarisation TE en choisissant le rayon des particules et la période de la structure.

D'autre part, nous avons calculé la réflexion du champ électromagnétique par une structure 1D composé de ZnS + verre/verre et NP ZnS + verre/verre. Nous avons montré l'effet du facteur volumique occupé par les nanoparticules dans la matrice sur le coefficient de réflexion.

2. Permittivité diélectrique d'un verre massif dopé avec des NP ZnS

Il est possible d'obtenir un nouveau matériau en dopant du verre avec des nanoparticules de ZnS (figure 37). La modification de l'indice optique du verre est ajustée en fonction du paramètre f qui représente la fraction volumique occupée par les nanoparticules de ZnS dans la matrice hôte. son expression est :

$$f = a \frac{l}{3p\tilde{n}} \left[\operatorname{Im} \left(\frac{e_n - \tilde{n}^2}{e_n + 2\tilde{n}^2} \right) \right]^{-1} \quad (3.1)$$

$$a = f \frac{3p\tilde{n}}{l} \operatorname{Im} \left(\frac{e_n - \tilde{n}^2}{e_n + 2\tilde{n}^2} \right) \quad (3.2)$$

avec :

a : extinction du matériel composite

e_n : permittivité de NP ZnS

\tilde{n} : indice du matériau composite verre + NP ZnS

λ : longueur d'onde du vide

Dans cette approche on suppose que les nanoparticules de ZnS ont la même permittivité diélectrique que ZnS massif.

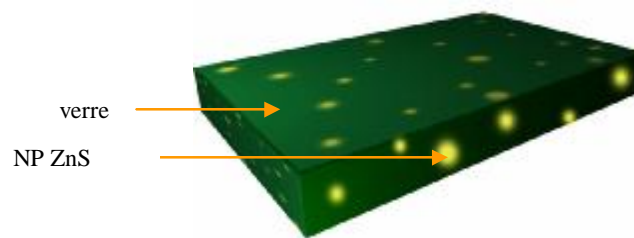


Figure 37: Schéma du matériau composite formé de verre dopé de NP ZnS

La permittivité diélectrique du matériau composite, ϵ , est calculée en utilisant la théorie de Maxwell-Garnett [67]. ϵ est décrite par la relation [68] :

$$e = e_m \frac{e_n (1+2f) + 2e_m (1-f)}{e_n (1-f) + e_m (2+f)} \quad (3.3)$$

avec e_n : permittivité de la nanoparticule de ZnS

e_m : permittivité diélectrique du verre.

La dimension finie des particules et leur concentration sont prises en compte par le paramètre f . Celui ci représente la fraction volumique occupée par les nanoparticules de ZnS dans le verre.

Les variations, en fonction de la longueur d'onde, des parties réelles et imaginaires de \tilde{n} pour ZnS et SiO₂ massifs sont représentées sur les figures 38 ; 39 [69]. Dans nos simulations nous avons utilisé les valeurs expérimentales de l'indice optique de SiO₂ et ZnS massifs de Palik [70]

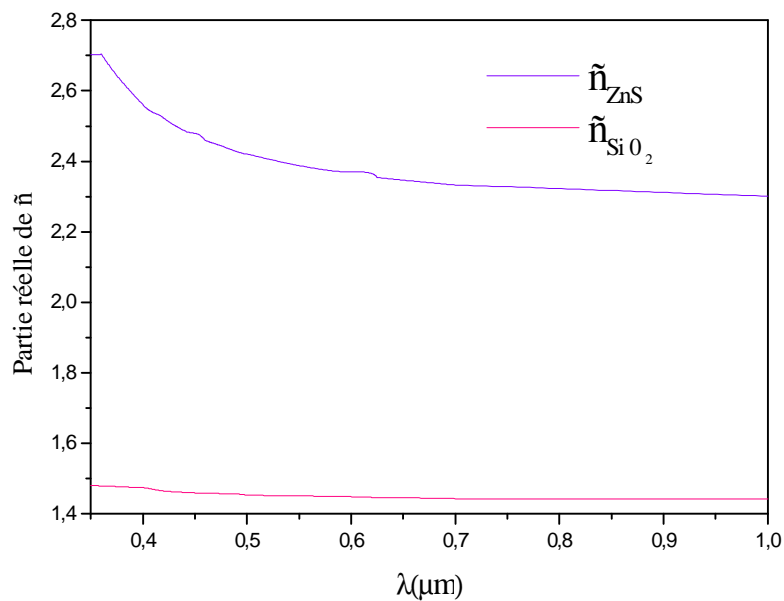


Figure 38: Parties réelles de ZnS et SiO₂ massifs en fonction de la longueur d'onde

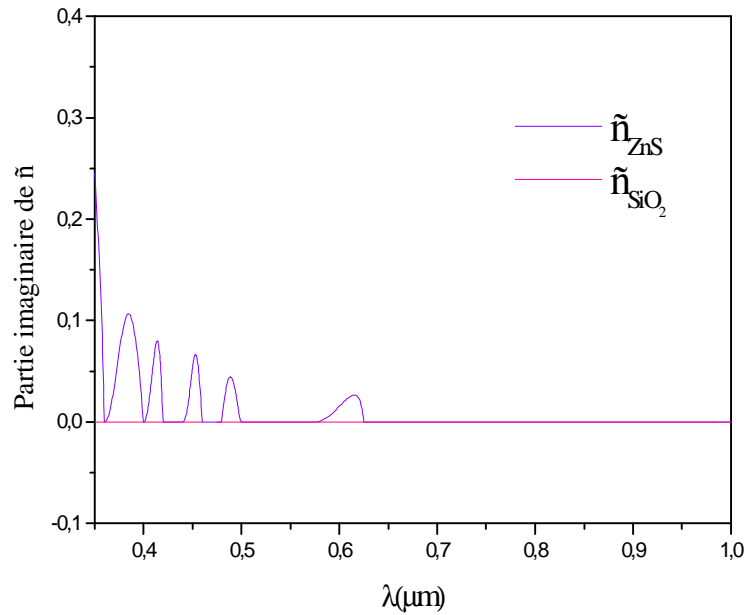


Figure 39: Parties imaginaires de \tilde{n} de ZnS et SiO₂ massifs en fonction de la longueur d'onde

On retrouve les zones de transparence et d'absorption habituelles de ZnS. Pour le domaine de longueur d'onde étudié, SiO₂ reste transparent. L'introduction de particules ZnS dans le verre a pour effet d'augmenter son indice et d'introduire des bandes d'absorption (figures 40 ; 41). L'augmentation d'indice est d'autant plus importante que f est grand. Les bandes d'absorption sont caractéristiques de ZnS.

Nous avons une augmentation de 5 % à 21% de la partie réelle de l'indice \tilde{n} du verre dopé avec les nanoparticules de ZnS quand f passe de 1% à 10% et de 1% à 40% respectivement à une longueur d'onde 0.7 μm .

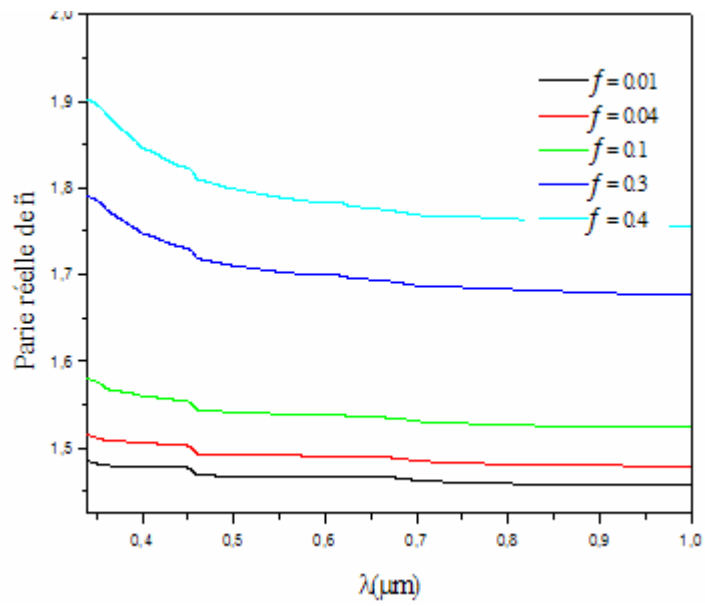


Figure 40 : Modification de la partie réelle de \tilde{n} de SiO_2 dopé avec des NP ZnS

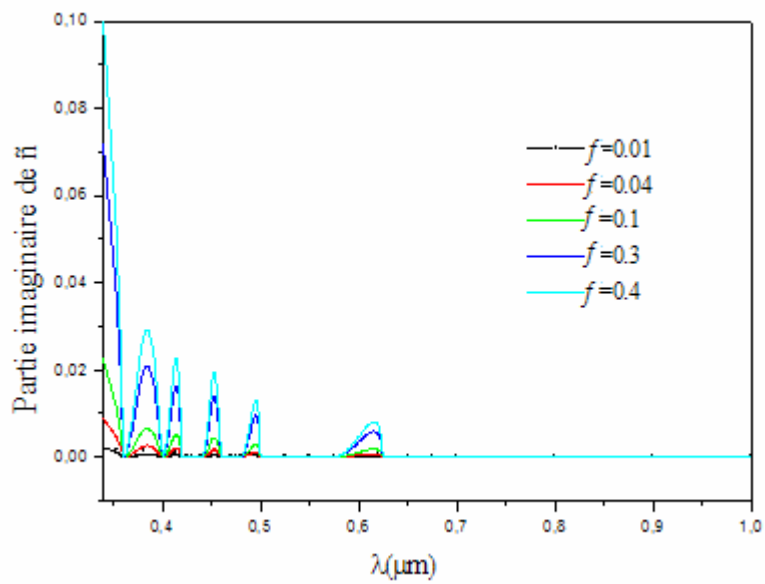


Figure 41: Modification de la partie imaginaire de \tilde{n} de SiO_2 avec des NP ZnS

3. Modélisation d'un miroir de Bragg 1D composé de NP ZnS+verre/verre

3.1. Diagramme de bandes

Nous modélisons ici les diagrammes de bandes de deux types de miroirs de Bragg. Nous présentons deux structures. La première est classique et est constituée de ZnS massif/verre (figure 42a) et la seconde est formée d'un matériau composite (NP ZnS+verre)/verre (figure 42b). Dans ce dernier cas nous étudions la modification des largeurs de bandes interdites pour deux valeurs de f . Enfin la comparaison des deux systèmes permet de montrer l'intérêt d'un miroir de Bragg à base NP ZnS.

Le miroir de Bragg de la figure 42(a) est supposé composé de ZnS et SiO₂ massifs [71]. Leurs indices sont pris égaux respectivement à 2.33 et 1.455. Ce système est modélisé comme un multicouche constitué de deux matériaux de bas et haut indice espacés périodiquement de

$$a = 0.195 \mu\text{m} \text{ et d'épaisseurs optiques respectives } d_{\text{SiO}_2} = \frac{1}{4n_{\text{SiO}_2}} = 0.12 \text{mm} \quad d_{\text{ZnS}} = \frac{1}{4n_{\text{ZnS}}} = 0.075 \text{mm}$$

Les résultats sont présentés en terme de fréquences $\omega a / 2\pi c = a / \lambda$, où c est la vitesse de la lumière et λ est la longueur d'onde du vide.

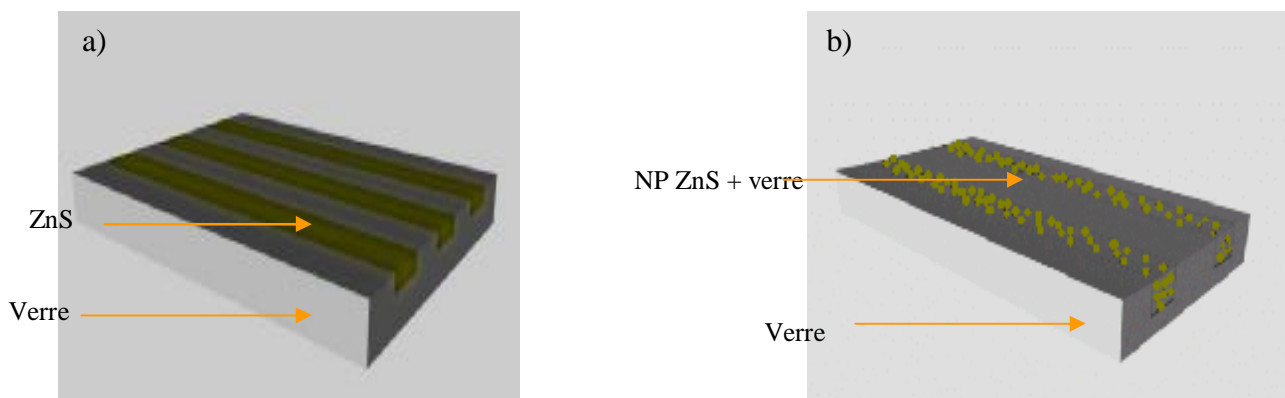


Figure 42 : Miroir de Bragg formé par : a) ZnS massif/verre. b) (ZnS+Verre)/Verre.

D'après la figure 43, on voit apparaître deux bandes interdites situées dans l'UV et le visible et dont les largeurs ont pour valeurs en allant des basses vers les hautes fréquences (0.0821) $wa / 2pc$ pour la première bande (G1) et (0.0726) $wa / 2pc$ pour la deuxième bande (G2).

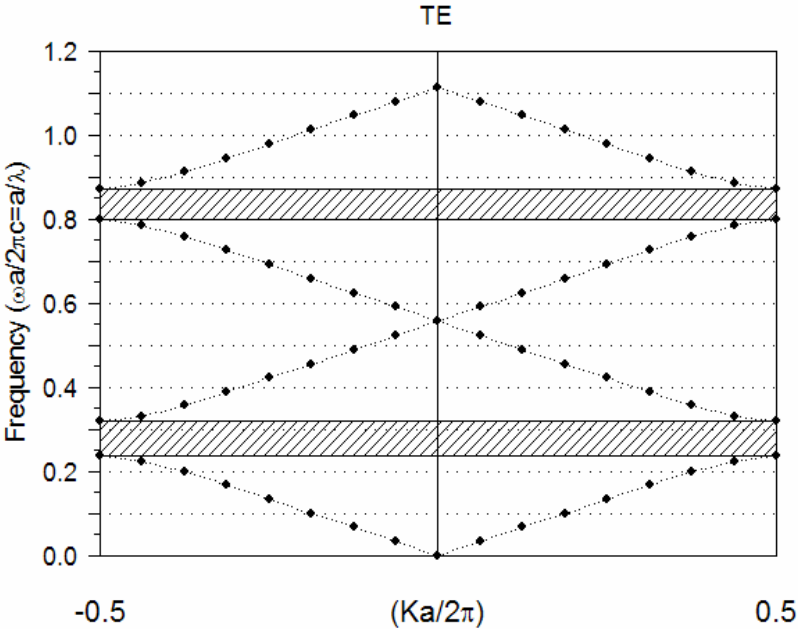


Figure 43 : Diagramme de dispersion d'un miroir de Bragg constitué de ZnS/verre

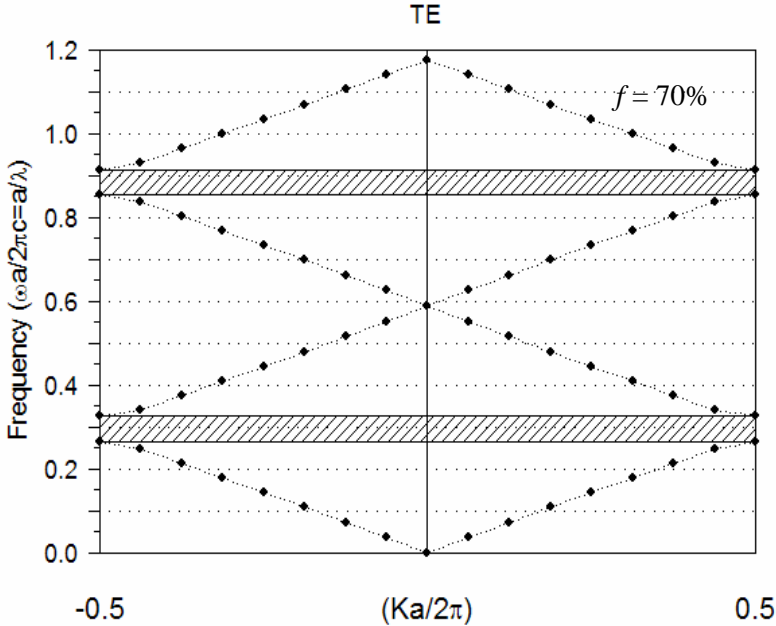


Figure 44 : Diagramme de dispersion d'un miroir de Bragg constitué de NP ZnS+verre/verre pour $f = 70\%$

De la même manière que précédemment, nous avons calculé le diagramme de bandes d'un miroir de Bragg constitué d'une couche composite (NP ZnS+verre) sur verre. La permittivité

du verre dopé a été calculée en utilisant la relation de Maxwell-Garnett [67]. Le facteur f est pris égal à : 70% ; 40% (figures 44 ; 45)

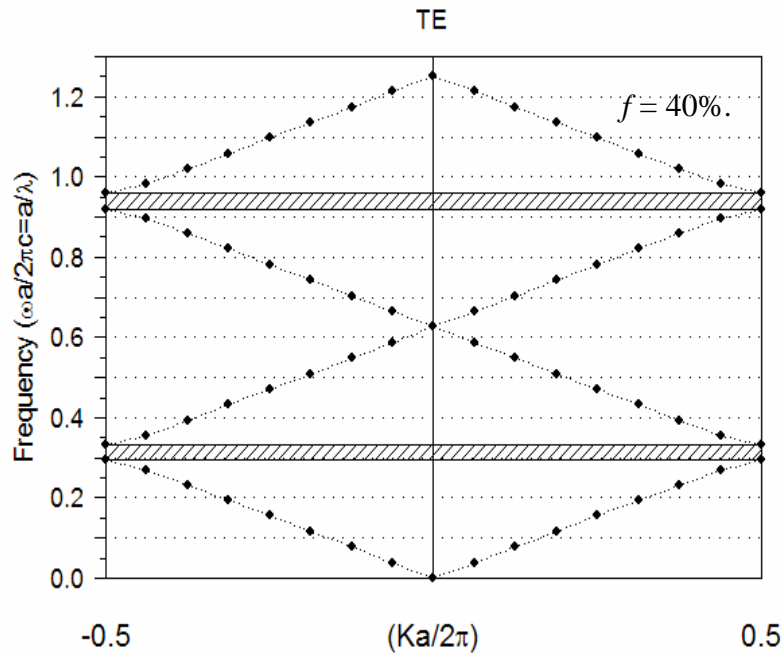


Figure 45: Diagramme de dispersion d'un miroir de Bragg constitué de (NPZnS+verre)/verre

Sur la figure 44, pour $f= 70\%$, nous observons la présence de deux bandes de largeurs $(\Delta\omega)=(0.062) \omega a / 2\pi c$ et $(0.058) \omega a / 2\pi c$ pour G1 est G2 respectivement. Similairement, la figure 45 montre que les valeurs de $(\Delta\omega)$ pour les deux bandes G1 et G2 sont respectivement égales à $(0.0384) \omega a / 2\pi c$ et $(0.038) \omega a / 2\pi c$ pour $f= 40\%$.

Nous pouvons expliquer ces deux observations par le fait que l'augmentation de $(\Delta\omega)$ est d'autant plus importante que f est grand et cela est du à l'accroissement du contraste d'indice. Ce type de matériau composite permet de fabriquer un miroir de Bragg calé sur une bande en longueur d'onde très étroite. L'ajustement des largeurs des bandes interdites est rendu possible grâce à celui de l'indice optique du matériau composite.

3.2. Influence de la concentration de NP ZnS sur la réflexion

Dans cette partie nous nous intéressons à l'influence de la concentration des nanoparticules de ZnS sur la réflexion du miroir de Bragg pour deux nombres de couches choisis (figure 46).

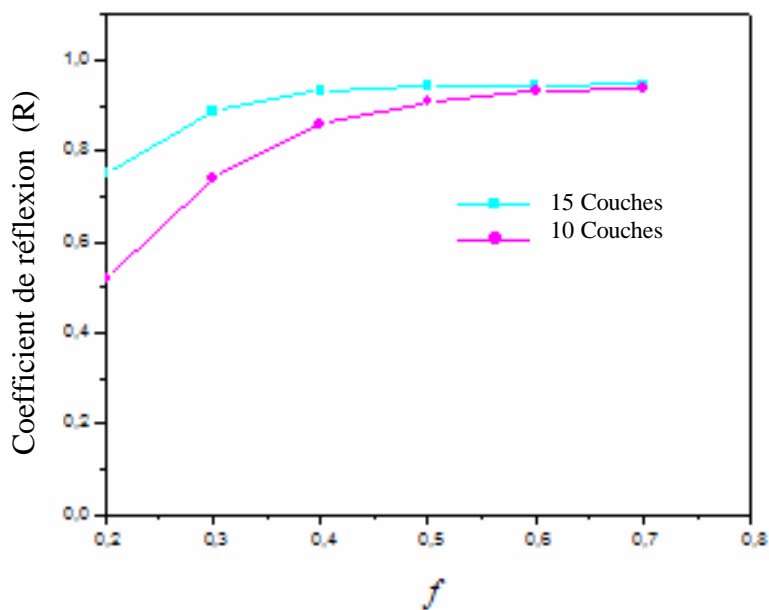


Figure 46: Coefficient de réflexion en fonction de f

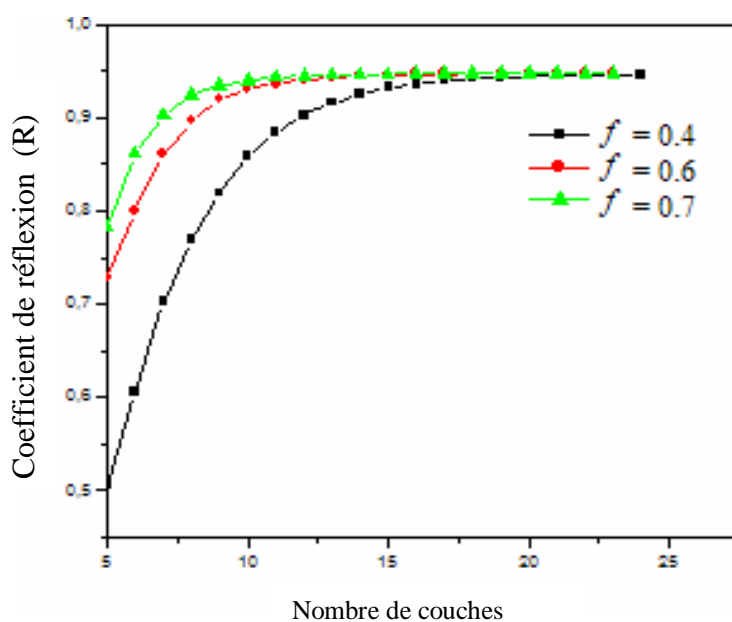


Figure 47: Coefficient de réflexion en fonction du nombre de couches

Une forte concentration en ZnS dans du verre donne un coefficient de réflexion (R) important. La figure 46 représente la variation de R en fonction de f pour 15 et 10 couches de NP ZnS + verre. Les résultats de nos simulations nous montrent que le coefficient de réflexion augmente avec f . La réflexion maximale pour 10 et 15 couches de NP ZnS + verre est respectivement égale à 50% et 75% pour $f= 20\%$. Sa valeur augmente quand on rajoute le nombre de couches. Les deux courbes se rejoignent et elles atteignent le maximum à la valeur 95% pour $f= 70\%$. Nous avons montré aussi l'effet de nombre de couches (N) de NP ZnS + verre sur le Coefficient de réflexion (R) (figure 46). Pour cela nous avons pris $f= 0.4, 0.6$ et 0.7 . Pour une faible concentration $f= 40\%$, $R= 86\%$ par contre pour un dopage fort $f= 70\%$, $R= 94\%$, ces résultats sont obtenus pour 10 couches de NP ZnS + verre. Le coefficient de réflexion atteint son maximum ($R= 94\%$) pour 17 couches du matériau composite quelque soit la concentration des nano-objets dans la matrice. Nous pouvons expliquer ces deux observations par le fait qu'on peut jouer soit sur la concentration des nanoparticules dans la matrice hôte ou bien sur le nombre de couches du matériau composite pour réaliser des miroirs avec un coefficient de réflexion important et une bande interdite large.

4. Modélisation de structures BIP 2D à base de NP ZnS

4.1. Structure hexagonale de NP ZnS/verre

Nous avons commencé par calculer le diagramme de dispersion d'une structure carrée de rangées de NP ZnS de rayon $r = 0.06\mu\text{m}$ dans une matrice de verre pour une période $a = 0.2\mu\text{m}$ et avec des permittivités diélectriques $e_{\text{ZnS}} = 5.438$, $e_{\text{SiO}_2} = 2.117$. Aucune bande interdite n'a été décelée pour les deux modes de polarisations TE et TM.

La structure considérée est un cristal photonique planaire dans le plan (x-z) avec des rangées de NP ZnS orientées dans la direction y enterrées dans du verre (figure 48). La périodicité de la structure est obtenue par la variation de la permittivité diélectrique de NP ZnS/verre.

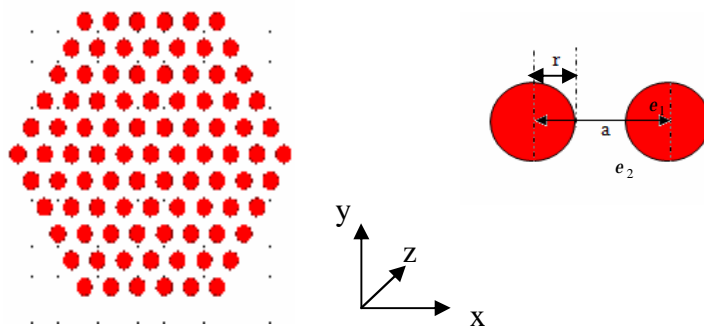


Figure 48 : Structure hexagonale 2D de rangées de NP ZnS dans une matrice de verre

Nous avons calculé en polarisation TE, nous avons pris les mêmes caractéristiques que pour la structure carrée ($a = 0.2 \mu\text{m}$, $r = 0.06 \mu\text{m}$, $e_{\text{ZnS}} = 5.438$ et $e_{\text{SiO}_2} = 2.117$).

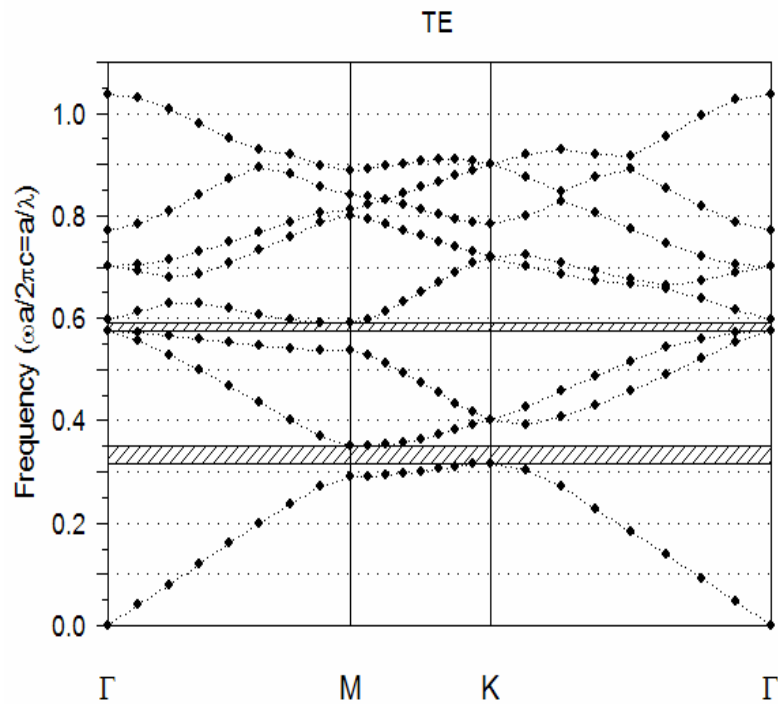


Figure 49 : Diagramme de dispersion d'une structure hexagonale de NP ZnS /verre en polarisation TE

La propagation de l'onde se fait selon la variation $\Gamma \rightarrow P \rightarrow Q$ du vecteur \vec{k} sur la zone de Brillouin irréductible. On observe deux bandes interdites l'une se situe dans le visible et l'autre dans l'UV avec des largeurs respectives $(0.037)_{wa/2pc}$ et $(0.029)_{wa/2pc}$ (figure 49). Aucune bande interdite n'a été observée en polarisation TM.

4.2. Carte des bandes interdites

La figure 49 représente les variations de la carte des bandes interdites en fréquence normalisée $wa/2pc$ en mode TE pour la structure hexagonale en fonction du rapport r/a . Les deux courbes montrent l'évolution des largeurs spectrales avec r/a des deux bandes de la figure 50.

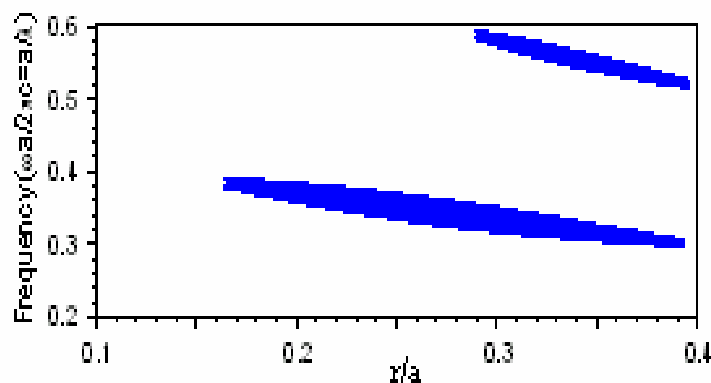


Figure 50 : Carte des bandes interdites d'une structure hexagonale en TE pour de NP ZnS dans une matrice de verre

Ces courbes permettent de choisir les points de fonctionnement d'un composant photonique 2D qui peut être imaginé avec une telle structure.

La structure hexagonale présente une bande interdite maximale dans le visible avec un rapport r/a situé dans l'intervalle de 0.25 à 0.3. Aucune bande interdite n'a été décelée en mode TM.

4.3. Influence de la forme des particules sur les bandes interdites

Il est intéressant de voir comment peut influencer la forme des particules sur les bandes interdites. Pour cela nous avons pris une structure hexagonale avec les mêmes caractéristiques précédentes a, e_{ZnS}, e_{SiO_2} , mais elle est constituée de particules de ZnS de formes elliptiques caractérisées par les paramètres $r_a = a/3 = 0.07\mu\text{m}$, $r_b = a/4 = 0.05\mu\text{m}$, où r_a et r_b sont respectivement les rayons majeurs et mineurs des NP ZnS (figure 51).

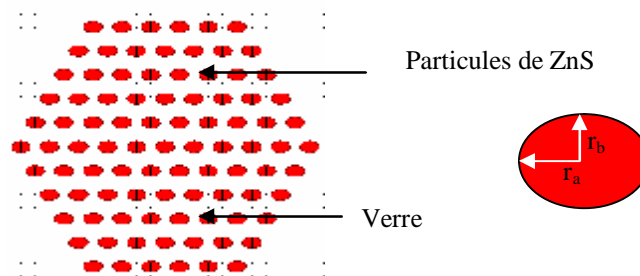


Figure 51 : Structure hexagonale 2D de rangées de NP ZnS de formes elliptiques dans du verre

La figure 52 montre que le diagramme de dispersion est profondément modifié par rapport au cas précédent. De plus, on remarque que la bande interdite dans l'UV disparaît complètement et celle du visible s'élargie elle passe de 0.035 à 0.041 $wa/2pc$. Une étude détaillée a été réalisée sur l'évolution de la bande interdite et de sa largeur en faisant varier le rayon majeur r_a et le rayon mineur r_b .

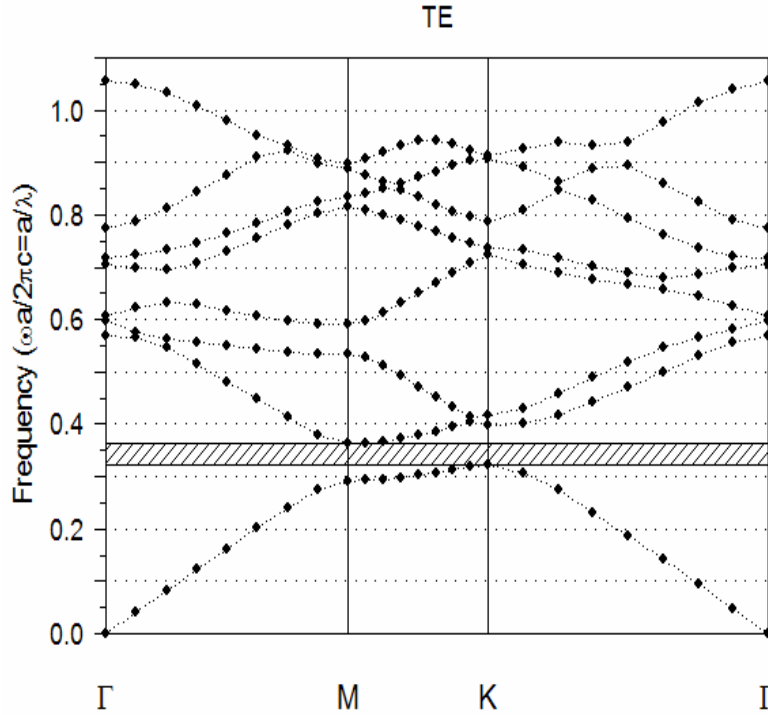


Figure 52 : Diagramme de dispersion d'une structure hexagonale de NP ZnS de formes elliptiques en polarisation TE ou le rayon majeur $r_a = 0.067\mu\text{m}$ et le rayon mineur $r_b = 0.05\mu\text{m}$.

4.3.1. Discussion des résultats obtenus

Pour un rayon majeur r_a fixé à $0.067\ \mu\text{m}$ et un rayon mineur r_b variable, deux bandes interdites ont été obtenues (figure 53) : l'une est située dans le visible et l'autre dans l'ultraviolet. Leurs largeurs de bande $\Delta\lambda$ passe par un maximum pour respectivement r_b égal à $0.048\ \mu\text{m}$ et $0.073\ \mu\text{m}$.

La largeur de la bande visible est très supérieure à celle de la bande UV. Cette dernière n'est observée qu'à partir de r_b valant $0.06\ \mu\text{m}$. Les maximums des bandes dans le visible et dans l'UV ($\Delta\lambda$) valent respectivement $0.073\ \mu\text{m}$ et $0.015\ \mu\text{m}$ (figure 53).

Pour r_b égal à $0.085\ \mu\text{m}$, il n'y a aucune bande interdite et $\Delta\lambda$ tombe naturellement à zéro.

Avec r_b fixé à $0.05\ \mu\text{m}$ et r_a variable, une seule bande située dans le visible est observée (figure 54). $\Delta\lambda$ passe par un maximum pour r_a égal à $0.095\ \mu\text{m}$ et atteint une valeur de saturation à partir de $r_a = 0.20\ \mu\text{m}$.

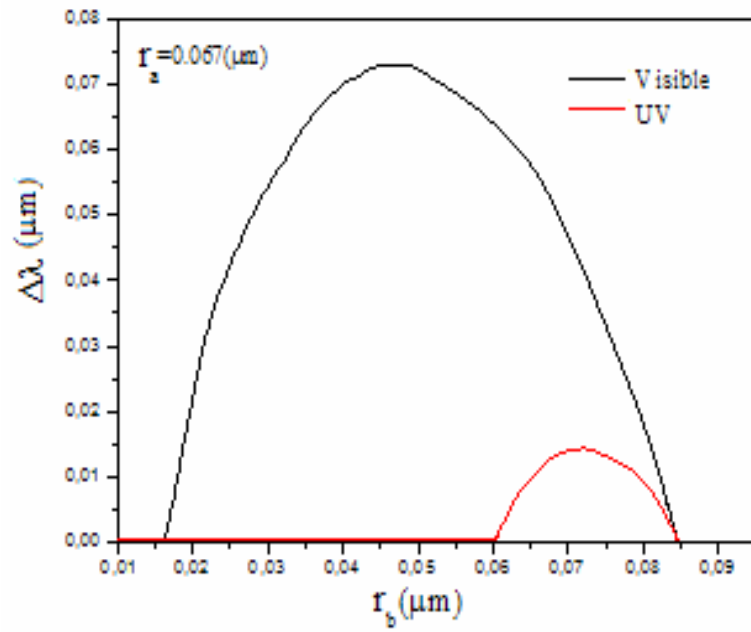


Figure 53 : Variation de la largeur $\Delta\lambda$ des bandes interdites visible et UV avec r_b variable et $r_a = 0.067 \mu\text{m}$.

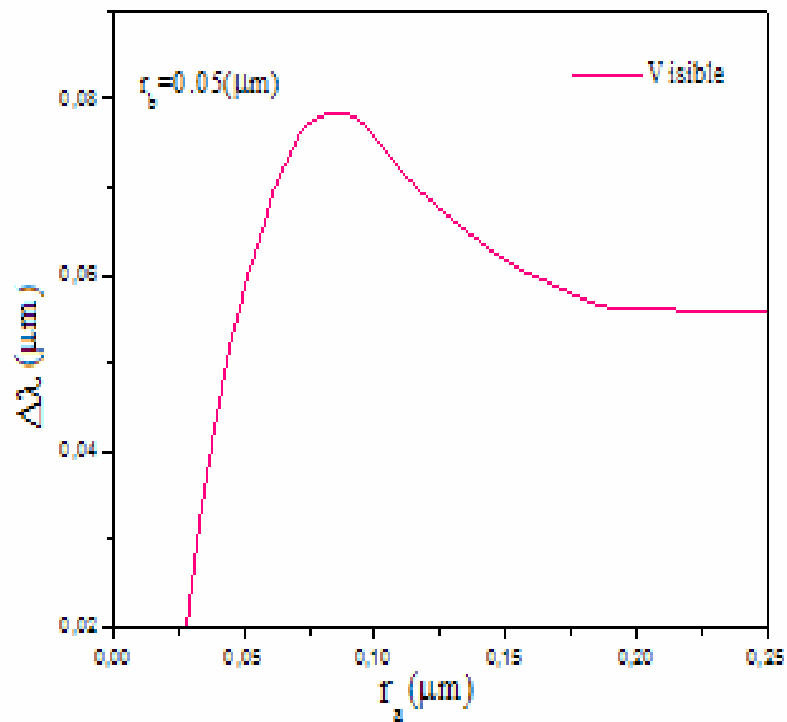


Figure 54 : Evolution de la largeur de la bande interdite visible avec r_a variable et $r_b = 0.05\mu\text{m}$.

4.4. Microcavité composée de NP ZnS/verre

On peut créer une microcavité monomode en introduisant un défaut ceci peut être obtenu en supprimant la nanoparticule centrale de la structure hexagonale NP ZnS /verre (figure 55). La suppression de la nanoparticule centrale équivaut à introduire dans la bande interdite de plus basse fréquence un état permis (figure 56) dont la longueur d'onde est égale à $0,6\mu\text{m}$. Le défaut est très local et peut être utilisé comme site de confinement de la lumière.

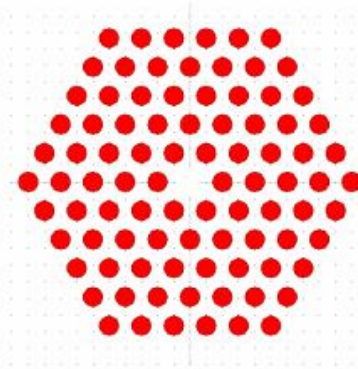


Figure 55 : Microcavité formée par la suppression de la NP ZnS centrale

Par ce moyen on peut créer une microcavité monomode de très grand facteur de qualité dont la répartition de l'intensité du champ électrique E_y , perpendiculaire au plan de la structure, est concentrée essentiellement sur le défaut (figure 57).

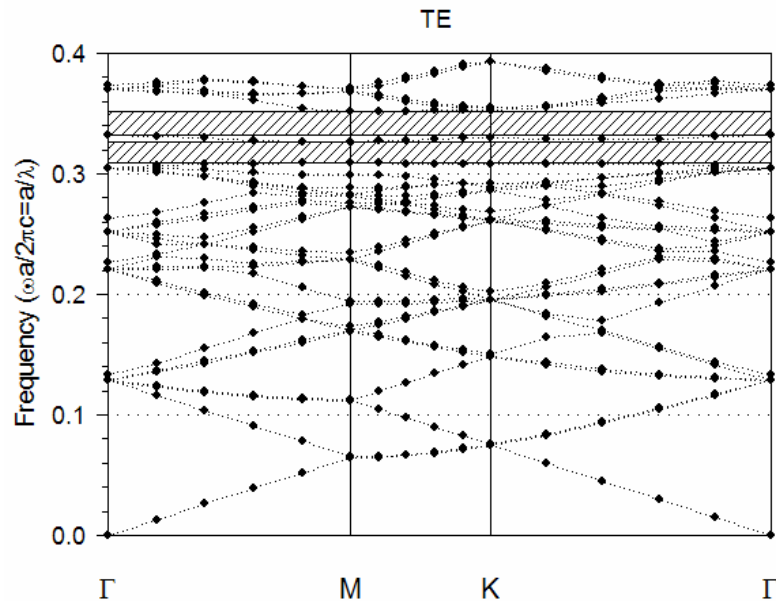


Figure 56 : Diagramme de bandes d'une structure hexagonale en TE avec une NP ZnS centrale supprimée

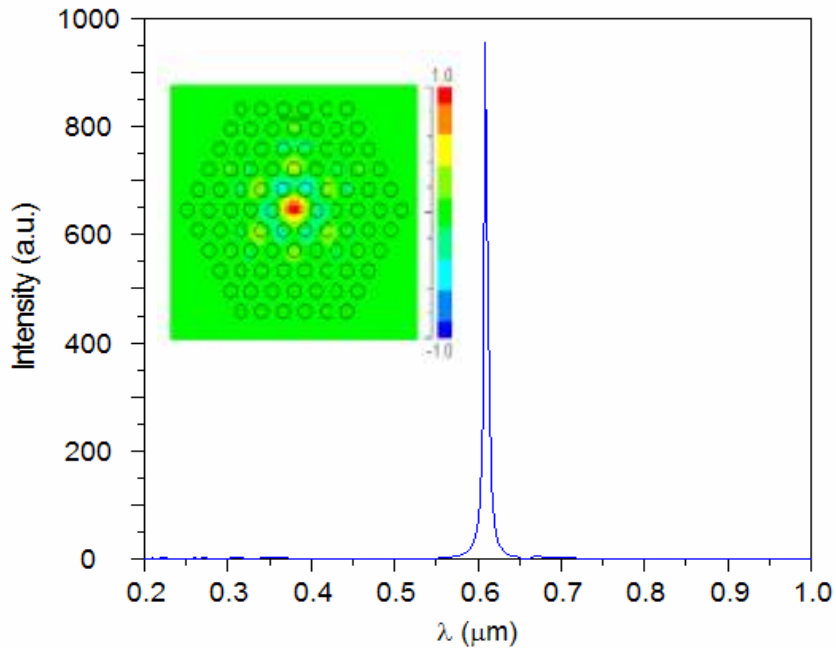


Figure 57 : Répartition de l'intensité du mode de défaut de la structure hexagonale pour des NP ZnS sphériques

Quand on parle de cavités optiques, l'application qui nous vient à l'esprit est la mise au point de lasers compacts. Il suffit d'insérer un matériau actif émettant à la bonne longueur d'onde à l'intérieur de la cavité pour obtenir un microlaser.

4.5. Structure hexagonale NP ZnS+verre/verre

De la même manière que précédemment nous avons calculé le diagramme de bandes d'une structure hexagonale constituée d'un matériau composite de NP ZnS et de verre se trouvant dans une matrice de verre. Les paramètres suivants ont été choisis pour la simulation :

$f = 70\%$; 80% , $a = 0.2\mu\text{m}$, $r = 0.06\mu\text{m}$, $n_{\text{SiO}_2} = 1.455$ et $n_{\text{ZnS}} = 2.332$.

4.5.1. Résultats obtenus

Une bande interdite (figure 58) située dans le visible est observée avec une largeur égale à $0.01152 (a/\lambda)$ pour $f = 70\%$, $\tilde{n} = 2.0314$ et $\Delta n = 0.5764$.

Comme on pouvait s'y attendre la bande interdite s'élargie quand f passe de 70% à 80% (figure 59), l'indice \tilde{n} augmente et devient égale à 2.1266 . Le contraste d'indice, Δn , vaut 0.6716 et donc la bande interdite s'élargie. Elle passe de $0.01152 (a/\lambda)$ à $0.01948 (a/\lambda)$.

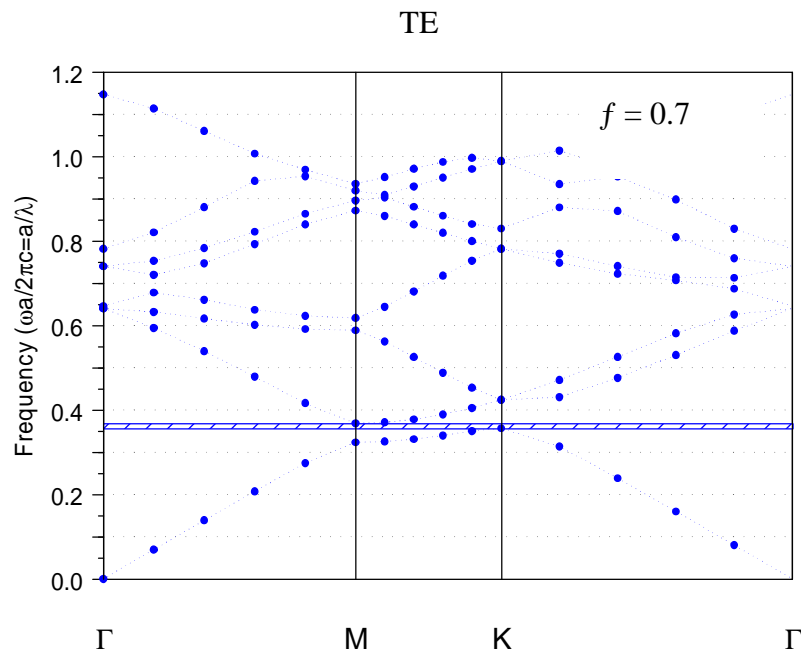


Figure 58 : Diagramme de bandes d'une structure hexagonale en verre dopée avec des NP (ZnS+Verre), pour $f= 0.7$ en mode TE

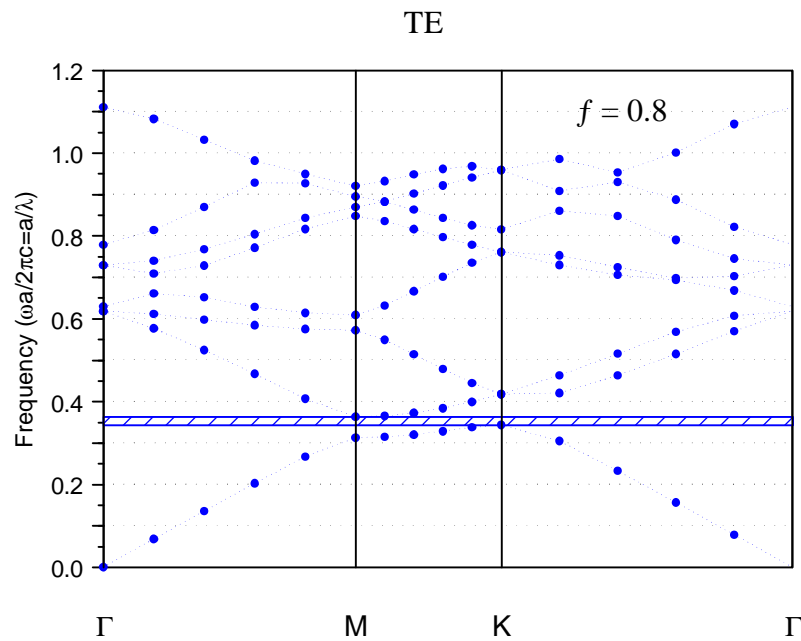


Figure 59 : Diagramme de bandes d'une structure hexagonale en verre dopée avec des NP (ZnS+Verre), pour $f= 0.8$ en mode TE

Avec une telle propriété il est possible de faire des miroirs à bandes très réduites qui réfléchissent la lumière dans le plan de la structure. Leurs largeurs peuvent être modulées en

fonction de la valeur de Δn . Aucune bande n'a été observée pour $f \leq 60\%$. Ce qui signifie qu'il faut que le matériau composite soit occupé à plus de 60% de son volume par des particules de (ZnS+Verre) pour pouvoir présenter des bandes interdites.

La création de défaut dans la périodicité en enlevant la nanoparticule centrale de la structure NP (ZnS+Verre)/verre crée un niveau d'énergie permis dans la bande interdite. La fréquence du mode du défaut pour f allant de 70% à 80% se décale des fréquences les plus élevées vers les fréquences les plus basses allant de $a/\lambda=0.3578$ à $a/\lambda=0.3491$; ce qui correspond respectivement à $\lambda_1 = 0.558\mu\text{m}$ et $\lambda_2= 0.573\mu\text{m}$ (figures 60; 61). Ce niveau permis peut représenter une source ponctuelle émettrice de lumière. Donc en gardant une dimension constante pour les NP (ZnS+Verre), il est possible d'augmenter progressivement la longueur d'onde d'émission du défaut en jouant sur la proportion du volume de la matrice hôte occupée par ces particules.

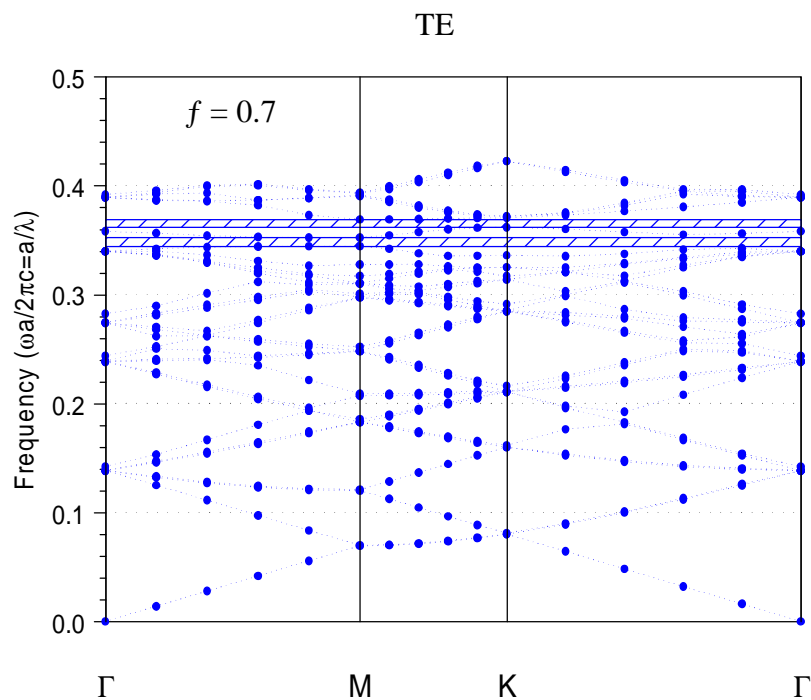


Figure 60 : Diagramme de bandes d'une microcavité créée dans une structure hexagonale avec $f= 0.7$

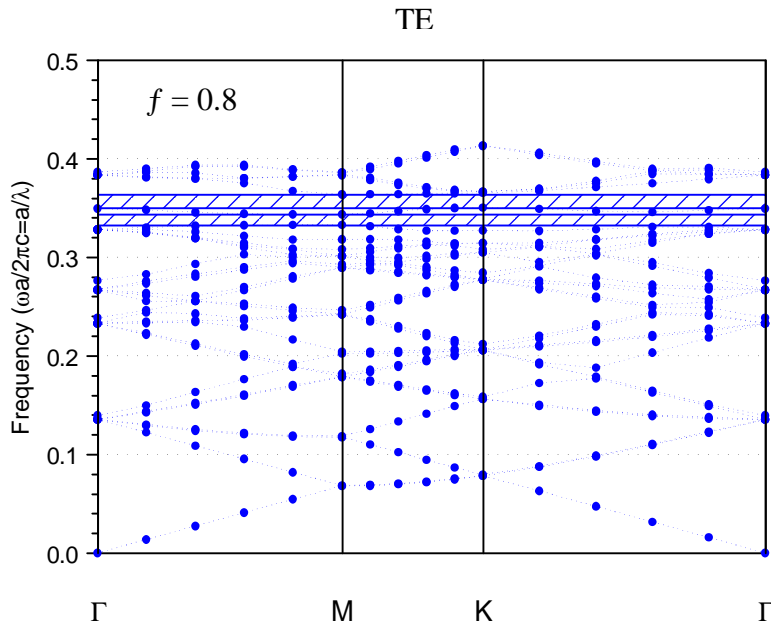


Figure 61 : Diagramme de bandes d'une microcavité créée dans une structure hexagonale avec $f=0.8$

5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons montré par des simulations FDTD 1D et 2D qu'il est possible de modifier l'indice du verre en présence de nanoparticules de ZnS. Ce changement permet d'obtenir un nouveau matériau avec des bandes interdites photoniques. Les simulations réalisées nous ont permis de déduire que la modification de l'indice optique du verre peut être ajustée en fonction de la concentration des NP ZnS. Un fort facteur volumique f , donne des bandes interdites et des coefficients de réflexion importants.

Nous avons trouvé des bandes interdites pour le système 1D constitué d'une couche composite (NP ZnS+verre) sur verre pour une concentration $f = 40\%$ et 70% . Enfin la comparaison des deux systèmes permet de montrer l'intérêt d'un miroir de Bragg à base NP ZnS. La permittivité du verre dopé a été calculée en utilisant la relation de Maxwell-Garnett. Pour le système 2D, aucune bande interdite n'a été trouvée dans la structure carrée pour les deux modes de polarisations TE et TM. Cependant, l'utilisation de mode TE dans le cas de la structure hexagonale donne des bandes interdites intéressantes.

L'exemple de la nanocavité que nous avons présenté nous donne une idée des systèmes photoniques simples que nous pouvons attendre avec ces nouveaux matériaux.

D'autres composants qui utilisent le concept des cristaux photoniques peuvent être imaginés et réalisés avec des nanoparticules semi-conductrices ou métalliques. L'intérêt de tels matériaux est qu'ils peuvent offrir l'avantage unique de tirer partie des propriétés de confinements électroniques et photoniques dans une même zone.

Chapitre 4

Chapitre 4

Modélisation de quelques propriétés optiques de BIP à base de NP Ag dans un verre massif

1. Introduction

Ces dernières années, un grand intérêt a été porté à l'étude des propriétés optiques des systèmes métalliques ou semi-conducteurs de taille nanométrique. Les nanoparticules (ou agrégats) métalliques ou semi-conductrices, formées par quelques dizaines à quelques milliers d'atomes sont à la base du développement très rapide des nanosciences. Leurs études, motivées à la fois par la compréhension des mécanismes fondamentaux et par des enjeux technologiques, constituent un thème important de la recherche actuelle en nanosciences. Les propriétés physiques nouvelles de ces matériaux sont différentes de celles des matériaux massifs. Elles sont dues au confinement quantique de leurs électrons. Les particules métalliques ont été utilisées dès l'Antiquité pour la coloration des verres [72]. En réalité la couleur des verres contenant des nanoparticules métalliques est attribuée au phénomène de résonance plasmon de surface. Celui-ci représente classiquement l'excitation des électrons de conduction de la particule en réponse à une onde électromagnétique, ceux-ci entrant dans un mouvement d'oscillation collective. Ce phénomène résonant n'est pas intrinsèque aux matériaux. Il est sensible à de nombreux paramètres tels que la taille [73] des particules, leur forme [74], la nature du milieu environnant [75,76], ou les interactions entre particules [77]. Dans le cadre de l'optique linéaire les métaux nobles présentent des propriétés optiques particulières caractérisées par une absorption très intense dans le domaine du visible.

Ce chapitre est consacré à la modélisation de quelques propriétés optiques (structures de bandes, réflexion d'un miroir de Bragg) d'un matériau composite obtenu par dopage d'un verre massif par des nanoparticules d'argent. Celles-ci sont supposées sphériques et sont disposées périodiquement dans la matrice hôte.

La permittivité diélectrique du verre dopé a été calculée en utilisant la relation de Maxwell-Garnett et celle de la nanoparticule métallique par le modèle de Drude. Les diagrammes de

bandes du miroir formé par NP Ag + verre/verre et son domaine de réflectance, sont abordés en fonction du facteur de remplissage f et de la taille des nano-objets. Pour nos simulations nous avons pris en compte la partie imaginaire (absorption) de la permittivité diélectrique des nanoparticules métalliques. Celle-ci génère une absorption dans le matériau composite.

2. Modèle de Drude

La théorie de Drude est une adaptation, effectuée en 1900, de la théorie cinétique des gaz aux électrons des métaux. En considérant les électrons d'un métal comme des particules classiques ponctuelles confinées à l'intérieur du volume défini par l'ensemble des atomes de l'échantillon, on obtient un gaz qui est entraîné dans un mouvement d'ensemble par une onde électromagnétique et qui est freiné dans ce mouvement par des collisions. Sous l'effet du champ électromagnétique, le métal se polarise et ses propriétés optiques peuvent être décrites par sa fonction diélectrique $\epsilon_n(\omega) = \epsilon' + i\epsilon''$. La permittivité diélectrique calculée par ce modèle prend alors la forme [78]:

$$\epsilon_n(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\mathbf{g})} \quad (4.1)$$

Dans le cas de l'argent on peut améliorer la formule de Drude pour tenir compte de la polarisabilité produite par les électrons, en ajoutant une constante:

$$\epsilon_n(\omega) = \epsilon_a - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\mathbf{g})} \quad (4.2)$$

Avec ϵ_a , la polarisabilité produite par les électrons, ω_p^2 la fréquence de plasma définie par: $\omega_p^2 = n_c e^2 / \epsilon_0 m$. Elle correspond à la densité de type électrons libres, n_c est le nombre d'électrons de conduction par unité de volume, m est la masse effective de l'électron, e sa charge élémentaire et ϵ_0 la permittivité diélectrique du vide. La fréquence de collision des électrons de conduction dans le métal s'écrit :

$$\mathbf{g} = \frac{v_F}{\mathbf{1}} + \frac{v_F}{r} \quad (4.3)$$

Avec v_F la vitesse de Fermi, \mathbf{l} le libre parcours moyen de l'électron dans le métal. Il est principalement lié au couplage électron phonon et $r = d/2$ le rayon de la nanoparticule.

La réduction de la taille de la nanoparticule a pour effet la modification de la partie imaginaire de la permittivité diélectrique car celle-ci dépend du taux de r , rayon de la nanoparticule.

Dans le cas de l'argent $\epsilon_a = 5.45$, $w_p = 1.72 \times 10^{16}$ rd/s, $v_F = 1.38 \times 10^6$ m/s, $\mathbf{l} = 52$ nm, [79].

Les figures 62 et 63 représentent les parties réelles et imaginaires de la permittivité diélectrique de la NP d'argent $e_n(w)$ telle qu'elle avait été calculée à partir du modèle de Drude pour un rayon de la nanoparticule $r = 1$ nm et 5 nm.

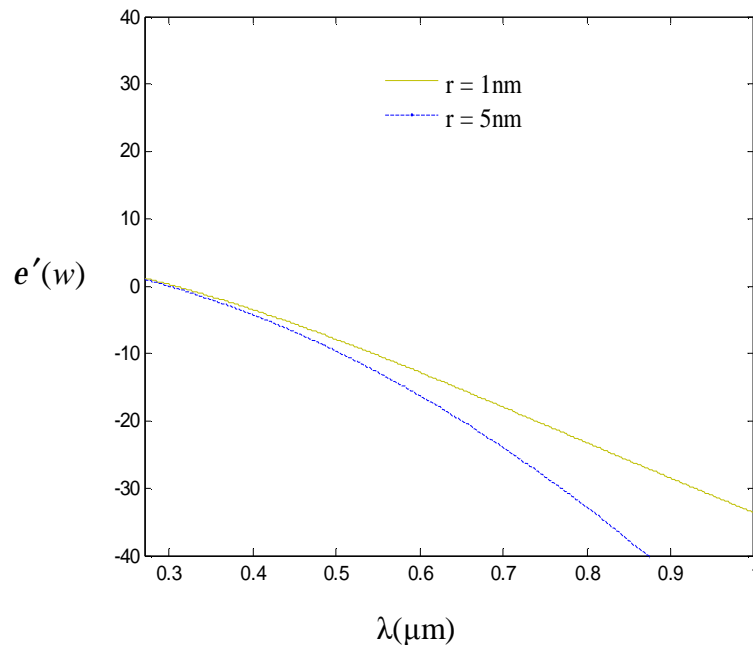


Figure 62 : Partie réelle $e'(w)$ de la permittivité diélectrique de la nanoparticule d'argent $e_n(w)$ dans du verre calculée d'après le modèle de Drude .

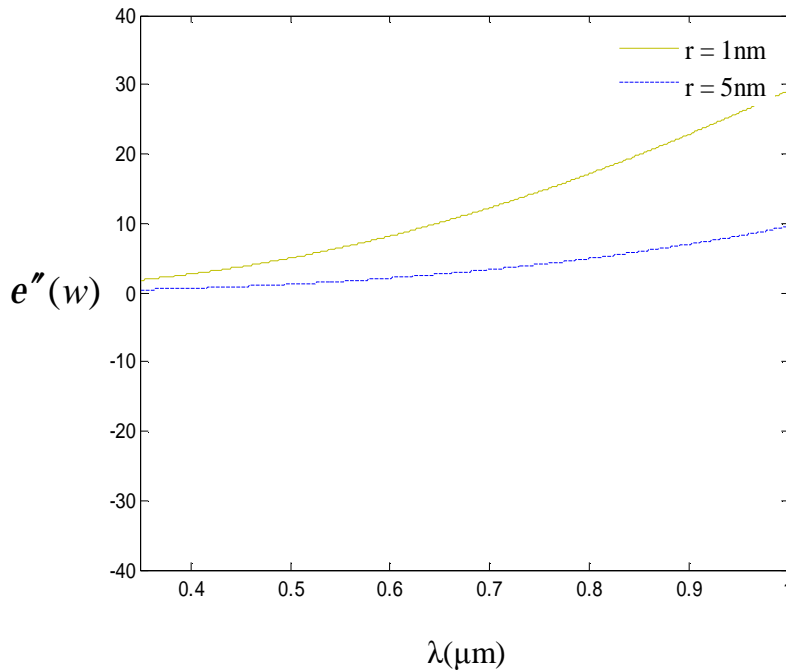


Figure 63 : Partie imaginaire $e''(\omega)$ de la permittivité diélectrique de la nanoparticule d'argent $e_n(\omega)$ dans du verre calculée d'après le modèle de Drude

Les parties réelle et imaginaire des permittivités diélectriques de l'argent massif, telles qu'elles sont données dans Palik [70] sont représentées sur les figures 64 et 65.

La croissance observée de la composante imaginaire de la permittivité électrique de l'argent à l'état massif $e''(\omega)$, est observée autour de 300nm, cette croissance marque le début des transitions interbandes. Le seuil des transitions interbandes, est localisé au pied du front de montée de $e''(\omega)$, on le définit comme l'énergie minimale nécessaire pour exciter un électron du haut de la bande de cœur liée vers le premier niveau au dessus du niveau de Fermi.

D'après les figures 62 et 63 on observe que les composantes réelle et imaginaire de la permittivité d'une nanoparticule de grosse taille se rapproche plus à celles de l'argent massif que pour les petites particules.

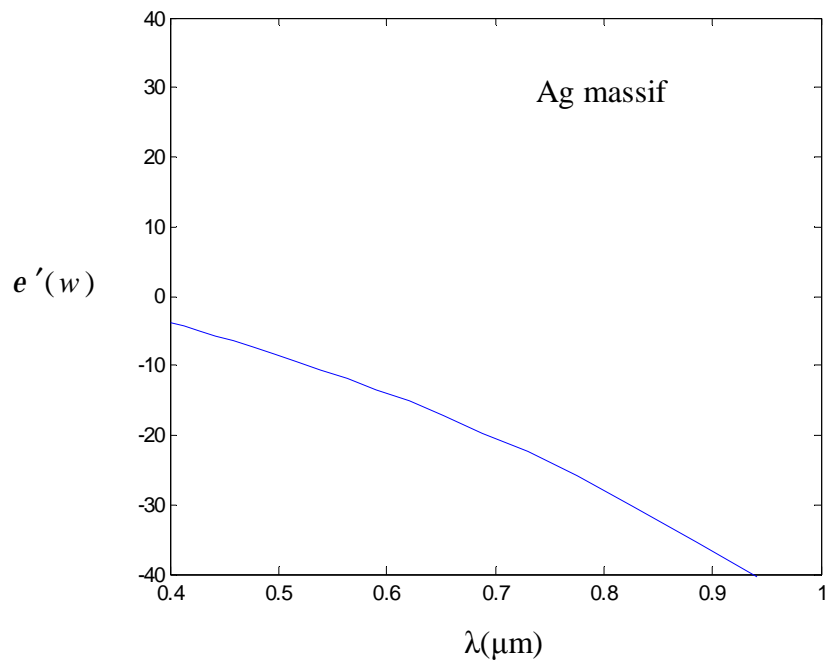


Figure 64 : Partie réelle $e'(w)$ de la permittivité diélectrique de l'argent à l'état massif (d'après Palik)

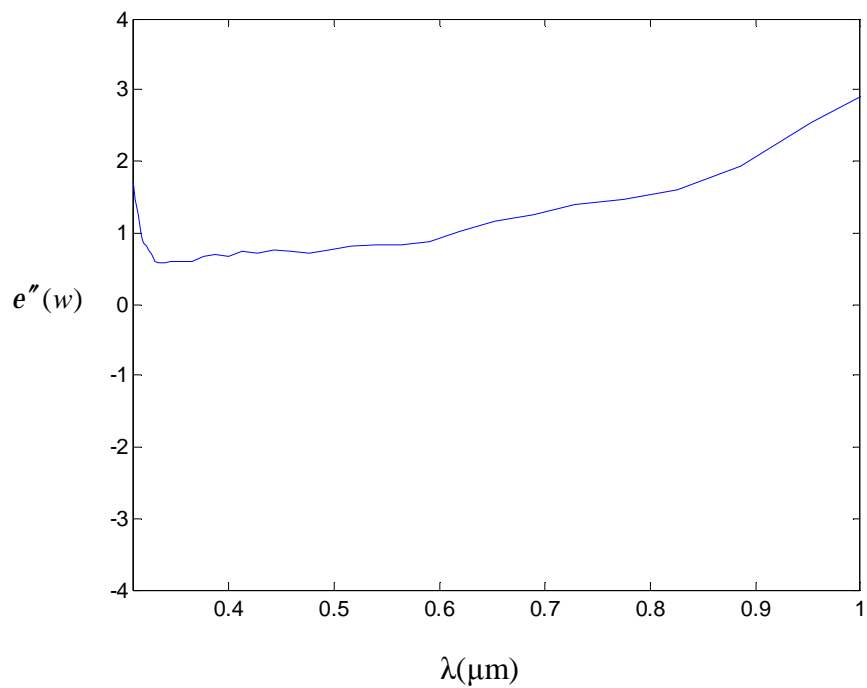


Figure 65 : Partie imaginaire $e''(w)$ de la permittivité diélectrique de l'argent à l'état massif (d'après Palik)

3. Détermination de la permittivité diélectrique d'un verre massif en présence de nanoparticules d'argent

3.1. Permittivité diélectrique d'un verre massif dopé avec des nanoparticules d'argent

Pour la détermination de la permittivité diélectrique du verre massif en présence de nanoparticules d'argent, nous utilisons la théorie de Maxwell-Garnett [67]. Elle considère des particules sphériques sans interaction les unes avec les autres. Autrement dit la concentration volumique des nano-objets noyés dans une matrice diélectrique doit être très faible. La contribution du champ induit par les autres particules au champ ressenti par chaque particule est alors négligeable. La taille des agrégats doit être très inférieure à la longueur d'onde de la lumière incidente. Cette approximation est dite quasi-statique car le champ appliqué sur chaque nanoparticule est considéré comme uniforme spatialement. A cette condition, il y a uniquement les modes de plasmon dipolaires qui sont excités dans la particule (figure 66).

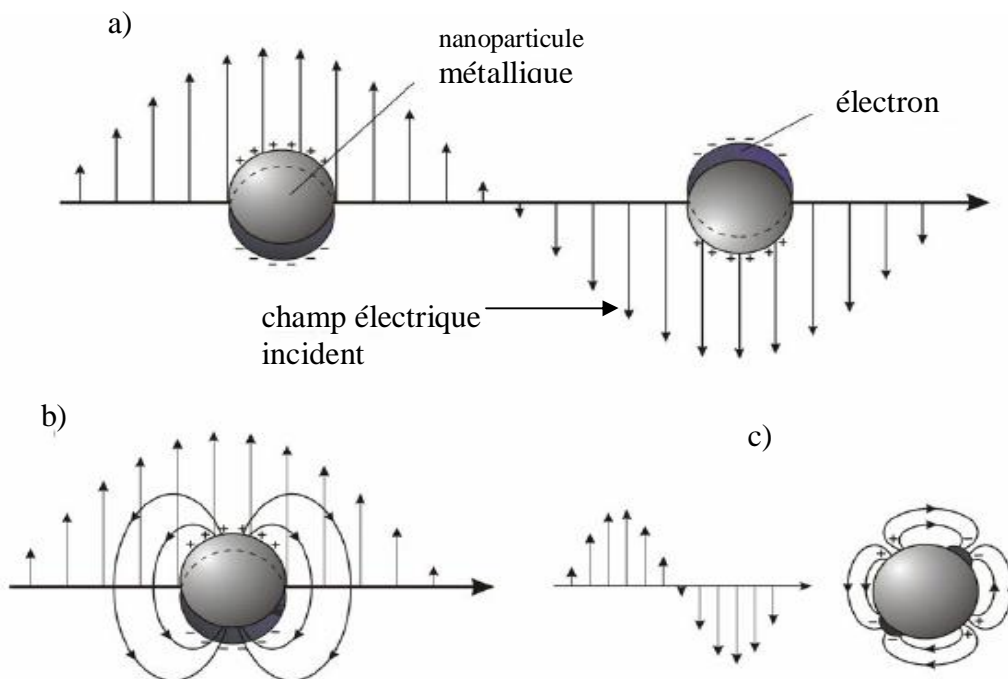


Figure 66 : a) Représentation de l'interaction d'une particule métallique avec la lumière (la taille de la particule est très inférieure à la longueur d'onde)

b) radiation dipolaire de la particule

c) radiation d'une particule large

Appelons $\tilde{\epsilon}$, la permittivité diélectrique du matériau composite (NP Ag+verre). Elle peut être mise sous la forme $\tilde{\epsilon} = \epsilon' + i\epsilon''$, avec ϵ' et ϵ'' respectivement ses parties réelle et imaginaire. Ce système est modélisé (figure 67) comme un matériau composite constitué de deux matériaux NP Ag +verre et le verre.



Figure 67 : Schéma du matériau composite formé de verre dopé de NP d'argent et le verre

La zone NP Ag + verre est assimilée à une couche d'indice $\tilde{n} = n + ik$ en désignant respectivement par n et k ses indices de réfraction et d'extinction. n et k sont donnés par [80] :

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} + \epsilon'}{2}} \quad (4.4)$$

$$k = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon'}{2}} \quad (4.5)$$

Nous avons considéré le cas de nanoparticules de Ag sphériques avec un diamètre $d = 10\text{nm}$ enterrées dans une matrice de verre. Le milieu environnant a une permittivité diélectrique $\epsilon_m = 2.12$ à une longueur d'onde $\lambda = 0.656\mu\text{m}$.

3.1.1. Effet de la concentration des NP d'argent

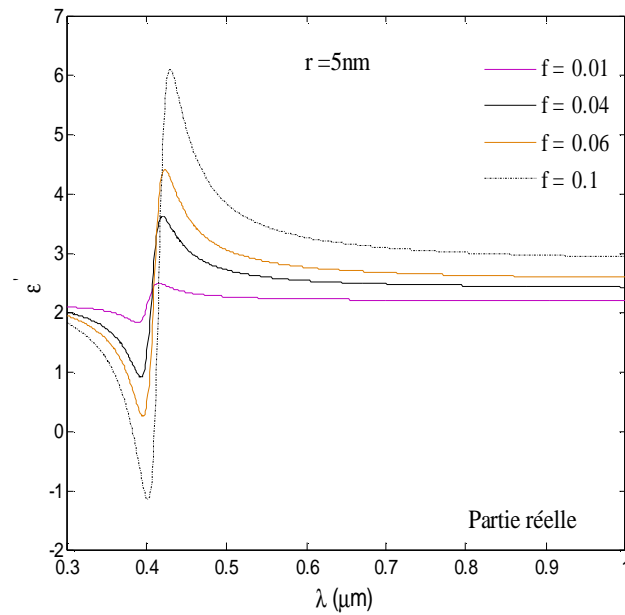


Figure 68 : Modification, en fonction de λ , de la partie réelle de la permittivité diélectrique d'un verre massif dopé avec des NP d'argent de rayon 5nm obtenue avec $f : 0.01, 0.04, 0.06, 0.1$

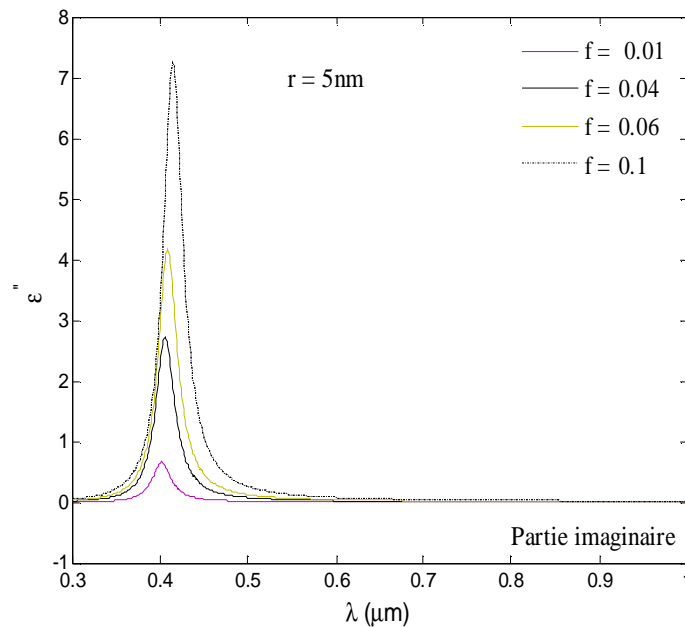


Figure 69 : Modification, en fonction de λ , de la partie imaginaire de la permittivité diélectrique d'un verre dopé avec des NP d'argent de rayon 5nm obtenue avec $f : 0.01, 0.04, 0.06, 0.1$.

Les figures 68 et 69 présentent les évolutions de ϵ' et ϵ'' du verre dopé avec les nanoparticules d'argent en fonction du facteur de remplissage volumique f pour un rayon des nanoparticules $r = 5\text{nm}$. La partie réelle de la permittivité représente la différence de déphasage de l'onde incidente entre le verre dopé et non dopé. Elle augmente avec la concentration des agrégats dans la matrice, pour f allant de 1% à 10% la valeur de ϵ' passe de 2.52 à 6.095 ce qui correspond respectivement à $\lambda = 0.414\ \mu\text{m}$ et $\lambda = 0.43\ \mu\text{m}$.

On observe également un amortissement de la bande de résonance de plasmon lorsque la concentration des particules d'argent dans la matrice diminue. Sur la figure 70, nous observons un déplacement de la position du maximum de la résonance vers le rouge quand f augmente. En ce qui concerne sa largeur à mi-hauteur nous remarquons qu'elle reste pratiquement constante (figure 71).

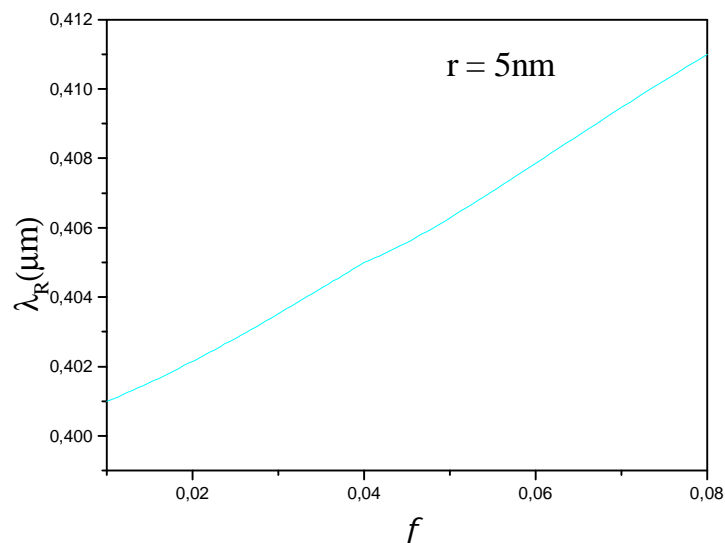


Figure 70 : Variation de la position de la résonance plasmon en fonction de f

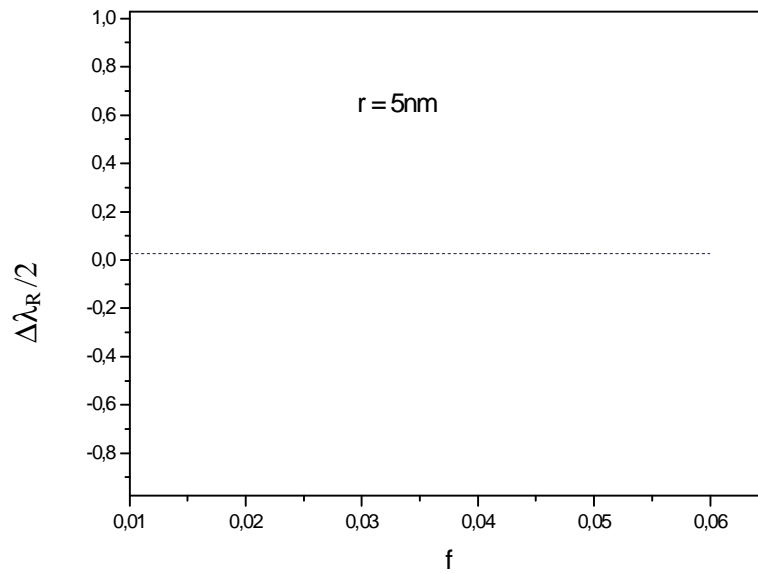


Figure 71 : Variation de la largeur à mi-hauteur de la résonance plasmon en fonction de f

3.1.2. Effet de taille

Les effets de taille sur la réponse optique des nanoparticules métalliques en matrice diélectrique ont récemment fait l'objet d'une étude très détaillée [81]. La référence [82] dresse une revue complète de ces effets.

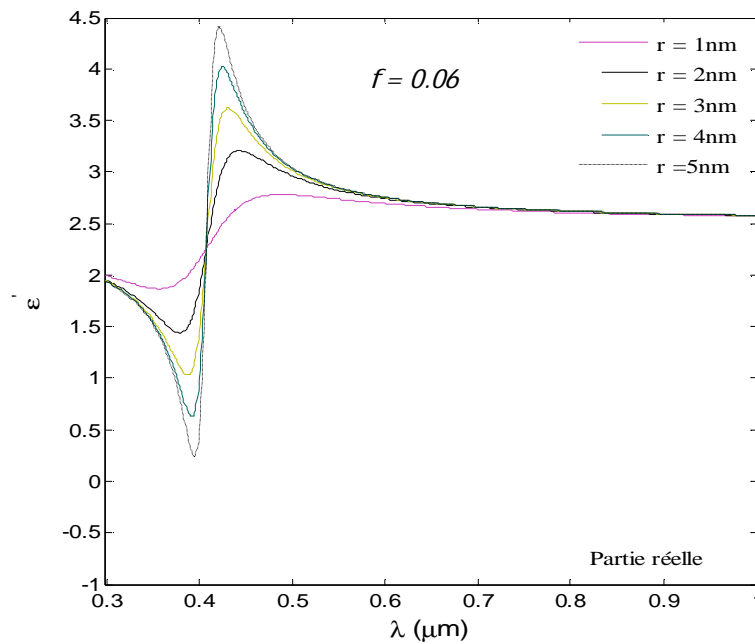


Figure 72 : Modification, en fonction de λ , de la partie réelle de la permittivité diélectrique d'un verre dopé avec des NP d'argent pour $f= 0.06$

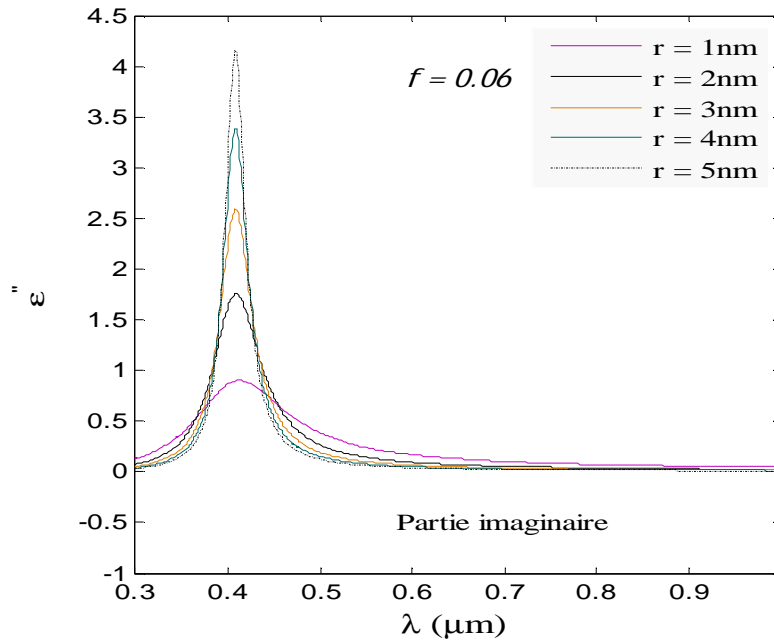


Figure 73 : Modification, en fonction de λ , de la partie imaginaire de la permittivité diélectrique d'un verre dopé avec des NP d'argent pour $f= 0.06$

La taille des nanoparticules présentes dans la matrice hôte affecte les caractéristiques de la résonance plasmon. Les figures 72 et 73 donnent ces modifications de ϵ' et ϵ'' pour un facteur de remplissage $f = 0.06$. On observe nettement que l'amplitude de la résonance de la partie réelle de la permittivité du verre dopé avec les NP d'argent augmente lorsque la taille de ces agrégats accroît. Pour une particule de taille de 1nm, l'amplitude de ϵ' est prise égale à 2.774, sa valeur augmente et devient égale à 4.406 pour une particule de taille de 5nm.

La partie imaginaire qui représente l'absorption des nanoparticules dans le matériau composite est importante pour les gros agrégats. Nous observons également que la résonance plasmon devient de plus en plus importante quand la taille des NP d'argent dans la matrice augmente. Son maximum se déplace légèrement vers le rouge. Nous constatons un élargissement de sa largeur à mi-hauteur lorsque la taille diminue. Pour $r = 1\text{nm}$, $\frac{\Delta I_R}{2} = 0.13$ μm par contre pour un rayon plus grand $r = 5\text{nm}$, $\frac{\Delta I_R}{2} = 0.026$ μm pour un facteur volumique $f= 0.06$ (figure 74).

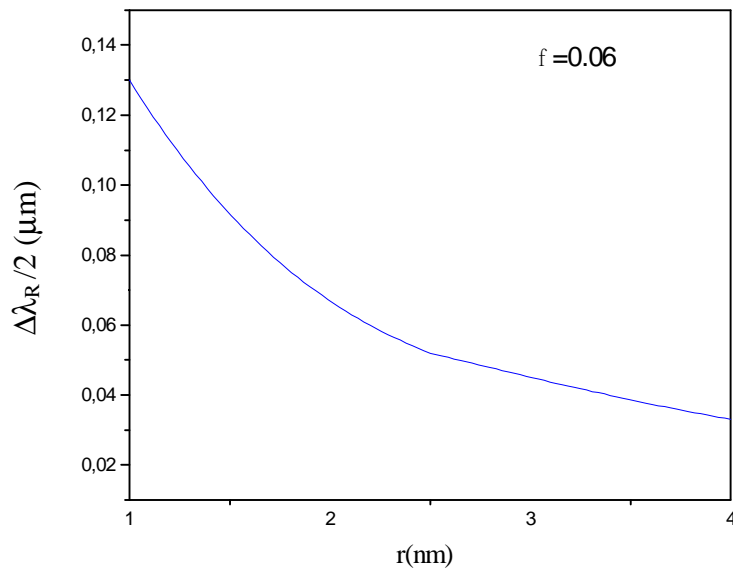


Figure 74 : Variation de la largeur à mi-hauteur de la résonance plasmon en fonction de la taille des NP d'argent

4. Simulation d'un miroir de Bragg 1D composé par des NP Ag +verre/ verre par la méthode FDTD

4.1. Diagramme de bandes

Il est possible d'obtenir une structure organisée 1D de nanoparticules d'argent enterrées dans un verre en utilisant soit un masque de phase soit un interférogramme. Celui ci a déjà été mis en oeuvre avec des particules d'argent dans de la gélatine [83]. Le résultat schématique de la structuration est donné sur la figure 75. Pour éviter les pertes d'énergie dans la matrice, nous avons utilisé le verre à cause de ces propriétés de transparence dans le domaine spectral (200nm à 800nm).

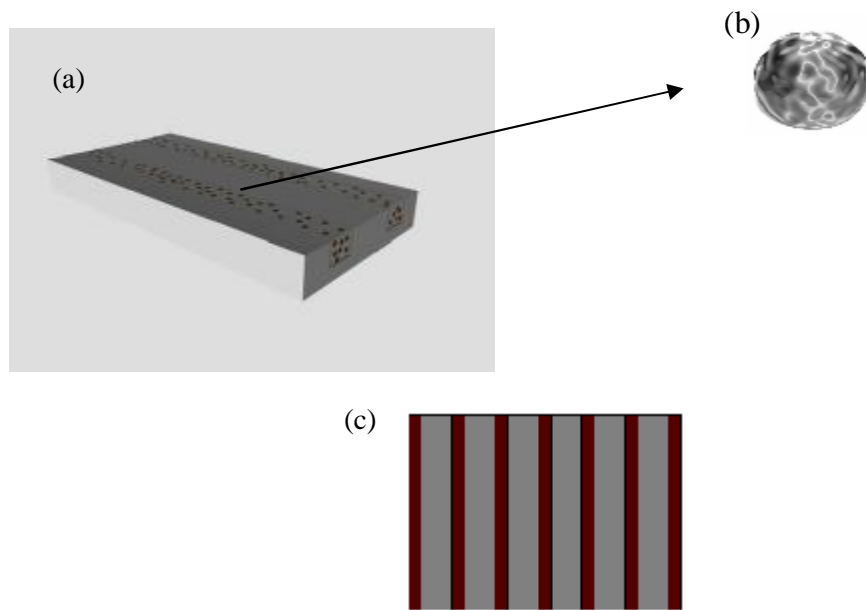


Figure 75 : Résultat schématique de la structuration :

- a) Structuration périodique de NP d'argent dans un verre,
- b) nanoparticule d'argent c) Modélisation FDTD

Nous avons simulé par la méthode FDTD en polarisation TE les diagrammes de bandes d'un miroir de Bragg composé d'une succession de zones comprenant respectivement des nanoparticules d'argent enterrées dans du verre et du verre. Ce système est modélisé comme un multicouche constitué de deux matériaux un bas et haut indice. La permittivité de SiO_2 ne comportant pas de nanoparticules de Ag est prise égale à 2.12 à la longueur d'onde $\lambda = 656.2\text{nm}$. La modification de la permittivité diélectrique du verre est ajustée en fonction du facteur volumique f . La zone (verre + NP Ag) est assimilée à une couche d'indice \tilde{n} . Les épaisseurs optiques du verre et du matériau composite sont respectivement : $d_{\text{verre}} = 0.11\mu\text{m}$ et $d_{\text{Ag+verre}} = 0.1\mu\text{m}$.

Pour $f = 4\%$, $\tilde{n} = 1.579 + i0.0058$, on note la présence de deux bandes interdites G_1 et G_2 situées dans le visible et l'UV dont les largeurs ont pour valeurs en allant des basses vers les hautes fréquences $(0.0256) a / \lambda$ et $(0.0256) a / \lambda$ (figure 76). Le matériau composite peut être utilisé comme réflecteur dans cet intervalle de longueur d'onde.

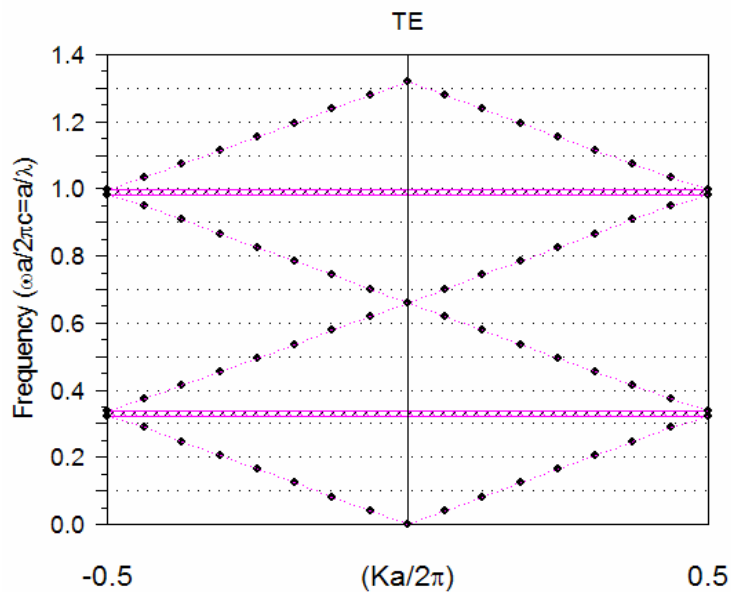


Figure 76 : Diagramme de dispersion d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag + Verre) / verre avec $f = 0.04$.

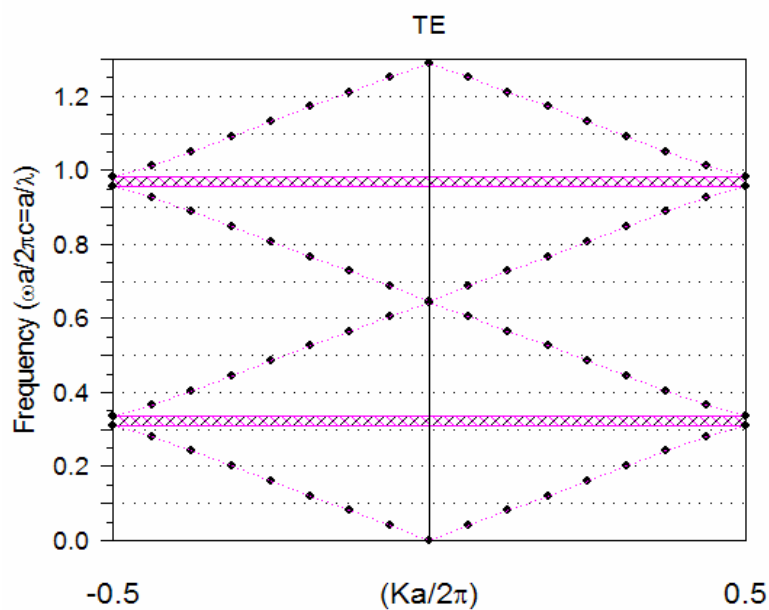


Figure 77 : Diagramme de dispersion d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag + Verre) / verre avec $f = 0.06$.

La largeur de bande $\Delta\omega$ est étroite à cause du contraste d'indice faible ($\Delta n = 0.123$).
 Pour $f = 6\%$, $\Delta n = 0.186$ les deux bandes s'élargissent et deviennent $(0.0322) a / \lambda$ et $(0.0322) a / \lambda$ (figure 77).

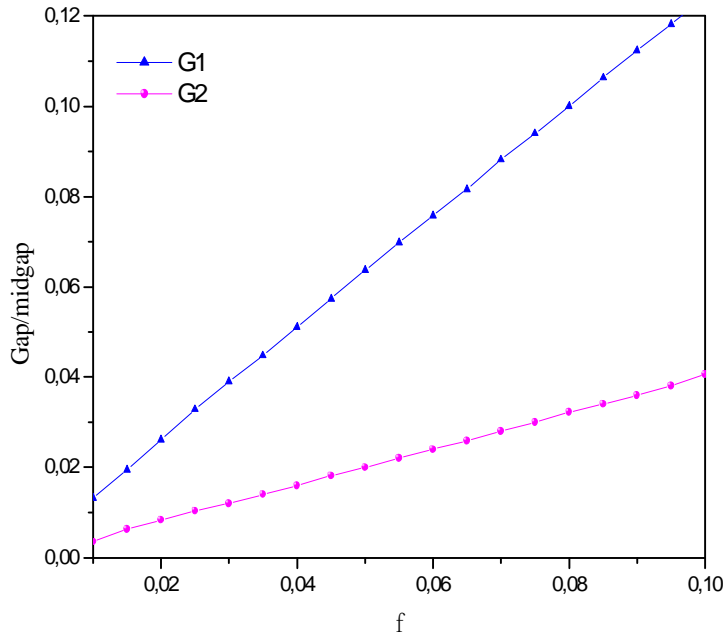


Figure 78 : Evolution de la largeur de la bande interdite d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag + Verre) / Verre en fonction de f .

La figure 78 représente l'évolution des largeurs des bandes interdites G_1 et G_2 en fonction de f . On observe que les deux bandes interdites sont d'autant plus larges que f est grand.

4.2. Calcul de la réflexion

4.2.1. Coefficient de réflexion en fonction du facteur de remplissage f

Une onde électromagnétique polarisée en mode TE, incidente dans le plan perpendiculaire à la structure est ainsi réfléchi dans l'intervalle de longueurs d'ondes λ compris entre $0.615\mu\text{m}$ – $0.686\mu\text{m}$ (figure 79) qui se trouve à l'intérieur de la bande interdite calculée précédemment pour $f = 4\%$ a son maximum $R_{\text{max}} = 67\%$ autour de la longueur d'onde $\lambda = 0.65\mu\text{m}$ pour 20 couches de NP Ag+ verre. Sur la figure 80, nous observons également que pour $f = 6\%$ la bande interdite s'élargit ($\lambda = 0.63\mu\text{m} - 0.694\mu\text{m}$) et le coefficient de réflexion devient plus important $R = 79\%$ autour de $\lambda = 0.662\mu\text{m}$. L'étude réalisée montre que la réflexion maximale se déplace vers le rouge quand f augmente.

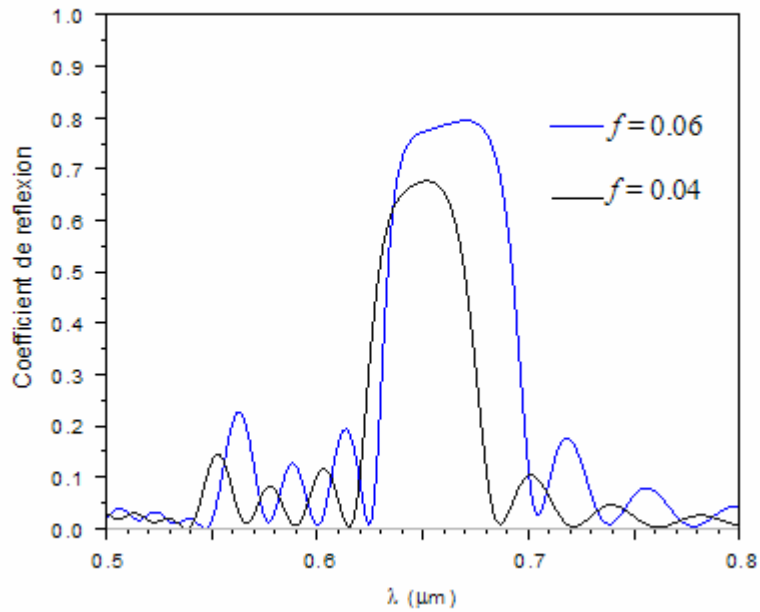


Figure 79 : Courbe de réflexion d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag +verre / verre) pour 20 couches de (NP Ag +verre) avec $f = 4\%$ et 6%

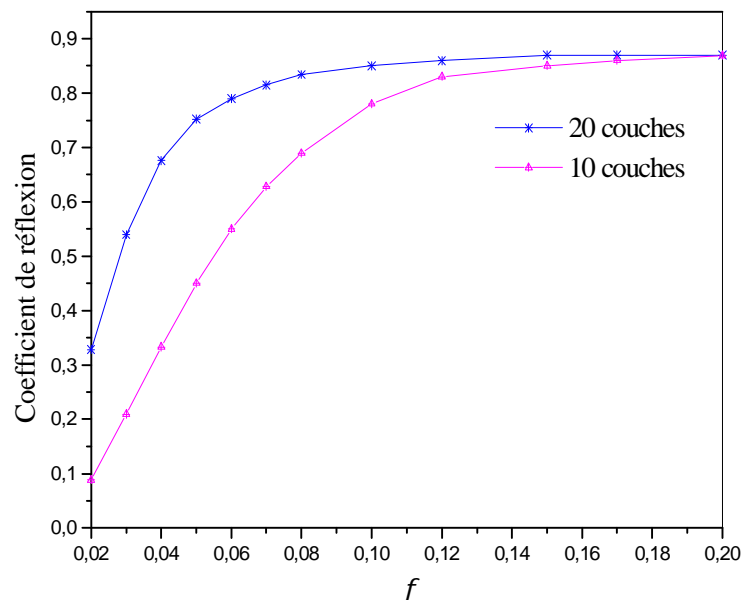


Figure 80: Variation du coefficient de réflexion en fonction de f pour 10 et 20 couches

La figure 80 représente l'évolution du coefficient de réflexion R de la structure périodique en fonction de f pour 20 et 10 couches. Nous remarquons que les deux courbes de réflexions se

rejoignent pour une valeur maximum $R = 87\%$ quand $f > 0.18$. Nous remarquons un amortissement de R lorsque la concentration des particules d'argent dans la matrice diminue. Pour une faible concentration $f = 2\%$ $R = 20.9\%$ et 32.8% pour 10 couches et 20 couches respectivement.

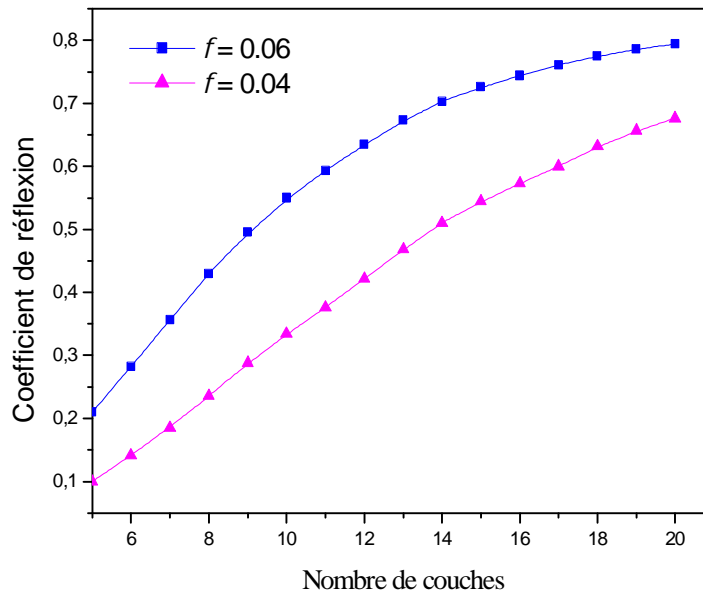


Figure 81 : Variation du coefficient de réflexion en fonction du nombre de couches

Afin d'étudier l'influence du nombre de couches sur la réflexion, nous présentons les coefficients de réflexions pour $f = 40\%$ et $f = 60\%$ (figure 81). Pour $f = 40\%$ $R = 33.4\%$, il augmente de 0.21% pour une concentration de 60% des agrégats dans la matrice, ces résultats sont obtenus pour 10 couches de NP d'argent + verre. De même le coefficient de réflexion augmente avec le nombre de couches.

On cherche toujours à travailler avec le gap le plus large et le coefficient de réflexion le plus important possible. Cependant nous avons vu que cela est possible si on arrive à choisir la concentration des particules dans la matrice hôte ou bien on augmente le nombre de couches.

De la même manière, nous avons simulé les bandes interdites et le coefficient de réflexion du miroir de Bragg représenté sur la figure 75 en négligeant la partie imaginaire de la permittivité du verre dopé avec les nanoparticules d'argent. Les calculs des diagrammes de bandes pour 20 couches de NP Ag+ verre avec une concentration volumique $f = 4\%$ montrent une forte similitude avec ceux calculés précédemment (figure 82).

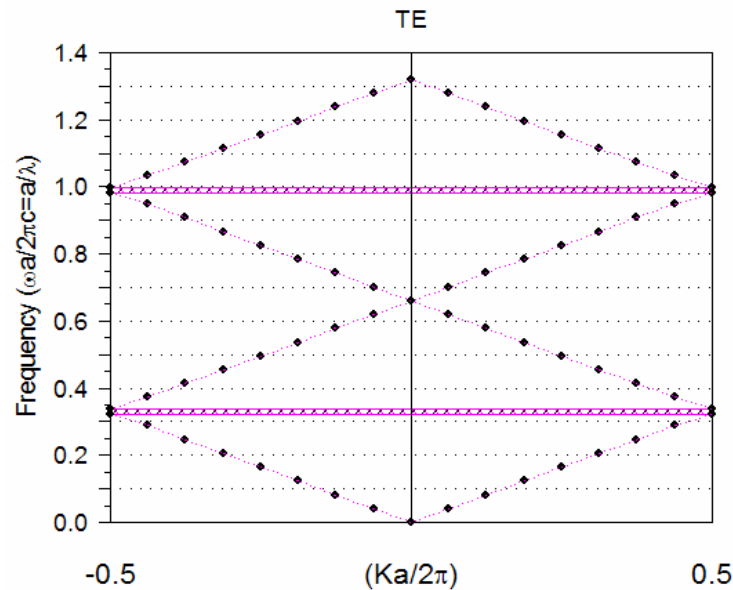


Figure 82 : Diagramme de dispersion d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag + Verre) / verre avec $f = 0.04$.

L'évolution des deux spectres de réflexion avec et sans la partie imaginaire du verre dopé avec les agrégats d'argent, est représentée sur les figures 83 (a) et (b) respectivement pour $f = 4\%$ et $f = 6\%$. L'étude réalisée montre que le matériau composite (avec et sans absorption) peut être utilisé comme un réflecteur dans le même intervalle de longueur d'onde. Pour $f = 4\%$ et $f = 6\%$, λ est compris entre $(0.615\mu\text{m} - 0.686\mu\text{m})$ et $(0.63\mu\text{m} - 0.694\mu\text{m})$ respectivement. Ces résultats sont obtenus pour 20 couches de NP Ag+ verre.

Notons que la valeur maximale du coefficient de réflexion pour le cas idéal où on néglige la partie imaginaire de la permittivité du matériau composite est plus importante. La différence d'écart entre les deux maximums (ΔR_{max}) des deux courbes augmente avec le facteur volumique f , $\Delta R_{\text{max}} = 0.09; 0.14$, respectivement pour $f = 4\% ; 6\%$.

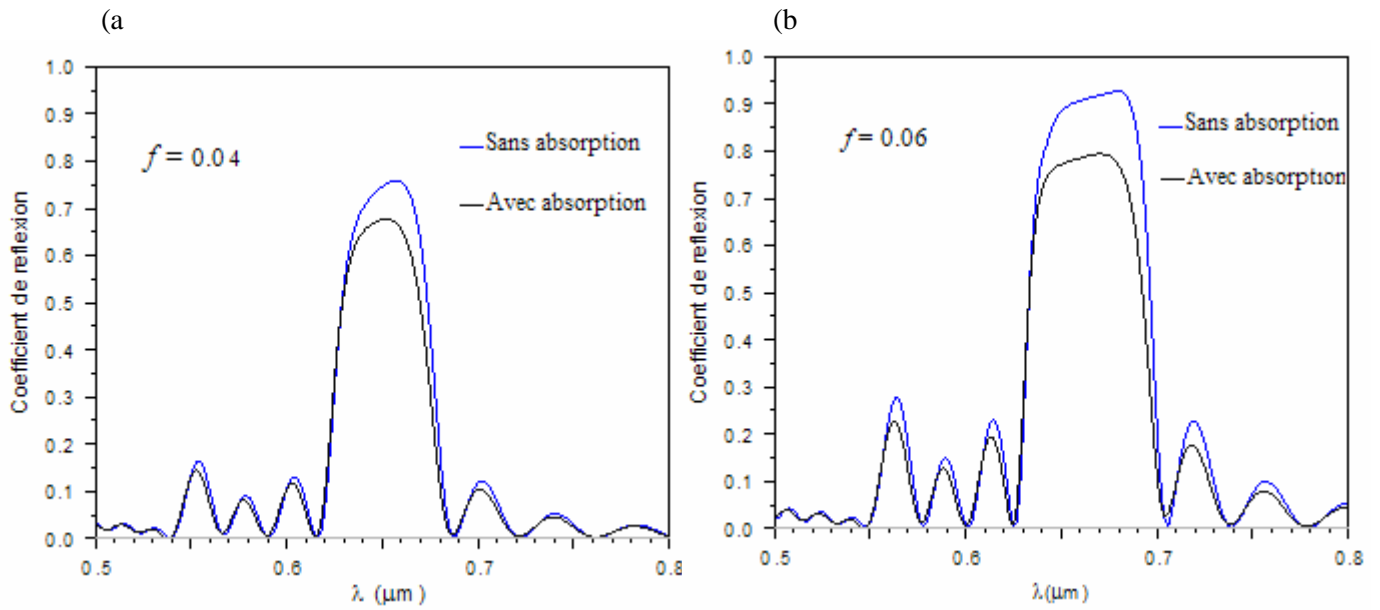


Figure 83: Comparaison entre la courbe de réflexion d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag+verre / verre) avec et sans absorption, pour 20 couches de (NP Ag+verre)
a) $f = 4\%$ b) $f = 6\%$

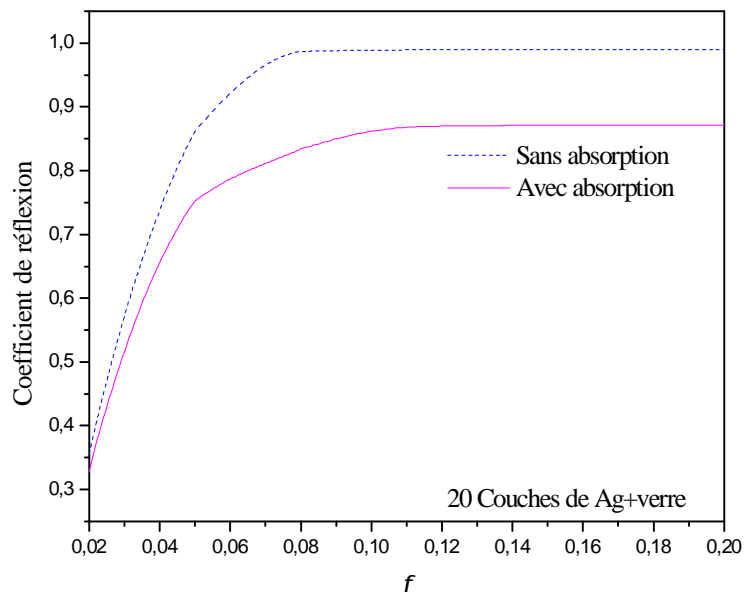


Figure 84 : Variation du coefficient de réflexion en fonction de f d'un miroir de Bragg formé de (NP Ag+verre / verre) avec et sans absorption, pour 20 couches de (NP Ag +verre)

La figure 84 permet de comparer les spectres de réflexion du miroir de Bragg pour 20 couches de (NP Ag +verre) en fonction de la concentration f des nanoparticules, pour les deux cas considérés avant.

Pour un faible dopage, l'écart entre les deux courbes avec et sans absorption du matériau composite est très faible. Il commence à s'élargir pour une concentration des nanoparticules d'argent dans le verre $f \geq 40\%$ et il atteint une valeur constante pour $f = 1\%$.

Les simulations réalisées nous ont permis de déduire qu'en négligeant la partie imaginaire de la permittivité du verre dopé avec les nanoparticules d'argent (structure idéale) a pour effet d'augmenter la valeur maximale du coefficient de réflexion, par contre les largeurs de bandes des diagrammes de dispersions restent inchangées.

5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que la taille et la concentration des nanoparticules d'argent dispersées dans une matrice de verre modifient sa permittivité diélectrique. En fait nous aboutissons à un nouveau matériau composite dont les propriétés optiques sont bien différentes de la matrice de départ. Les calculs ont été effectués pour des particules d'argent sphériques avec des tailles variant entre 1 et 10nm. La résonance plasmon est plus large pour les petites NP que pour les plus grosses.

Nous avons aussi présenté les simulations des diagrammes de bandes des cristaux photoniques 1D (miroir de Bragg) à base de nanoparticules d'argent dans un verre massif. Il est possible d'obtenir des bandes interdites larges en choisissant un facteur de remplissage volumiques f grand.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail de thèse, a été consacré à l'étude et à la modélisation 1D et 2D d'une nouvelle classe de matériaux à bandes interdites photoniques à base de nanoparticules métalliques et semi-conductrices par la méthode FDTD (Finite Domain Time Difference). L'intérêt et l'originalité de cette nouvelle classe de matériaux résident dans la possibilité d'obtenir des propriétés optiques accordables en plusieurs paramètres caractéristiques des particules : forme des nanoparticules, type, concentration, arrangement spatial, indice optique. Les nanomatériaux composites sur lesquels ont porté les simulations sont élaborés au Laboratoire Hubert Curien de Saint-Etienne dans des matrices vitreuses obtenues par voie de fusion. Une insolation laser et des traitements thermiques sont nécessaires pour faire croître les nanoparticules semi-conducteurs (NP ZnS) ou métalliques (NP Ag) dans la zone irradiée dans la matrice hôte initiale.

Des BIP sont obtenus avec ces matériaux composites si le contraste d'indice entre zone avec et sans NP est assez important. La modification de l'indice optique de la matrice vitreuse est ajustée en fonction du paramètre f qui représente la fraction volumique occupée par les nanoparticules. La théorie de Maxwell-Garnett a été utilisée pour déduire l'indice optique du matériau composite obtenu.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés aux propriétés optiques de BIP à base de nanoparticules de ZnS (NP ZnS) se trouvant dans une matrice de verre. Nous avons modélisé un miroir de Bragg 1D formé par des NP ZnS enterrés dans de la silice. Pour cela nous avons étudié la modification de la largeur de la bande interdite ($\Delta\omega$) ainsi que le domaine de réflectance, en fonction du facteur de remplissage f des (NP ZnS) dans la matrice vitreuse. L'augmentation de ($\Delta\omega$) est d'autant plus importante que f est grand et cela est dû à l'accroissement du contraste d'indice. Ce type de matériau composite permet de fabriquer un miroir de Bragg calé sur une bande en longueur d'onde très étroite. Cette étude a été poursuivie par la modélisation du coefficient de réflexion (R).

Pour une faible concentration $f= 40\%$, le coefficient de réflexion R est égale à 86% par contre pour un dopage fort des (NP ZnS) $f= 70\%$, $R= 94\%$, ces résultats sont obtenus pour 10 couches de NP ZnS + verre. On constate que le coefficient de réflexion R atteint un maximum ($R= 94\%$) pour 17 couches du matériau composite.

Pour le système 2D nous avons calculé les diagrammes de dispersion d'une structure hexagonale de rangée de NP ZnS dans une matrice de verre pour une période $a = 0.2 \mu\text{m}$, un rayon des particules $r = 0.06\mu\text{m}$ et des permittivités diélectriques $e_{\text{ZnS}} = 5.438$, $e_{\text{SiO}_2} = 2.117$.

On observe deux bandes interdites en polarisation TE, l'une se situe dans le visible et l'autre dans l'UV avec des largeurs respectives $(0.037)_{\omega a/2\pi c}$ et $(0.029)_{\omega a/2\pi c}$. On obtient une bande interdite relativement large avec un rapport r/a situé dans l'intervalle de 0.25 à 0.3. Aucune bande interdite n'a été décelée pour les deux modes de polarisation pour la structure carrée. La création de défaut dans la périodicité en enlevant la nanoparticule centrale de la structure, crée un niveau d'énergie permis dans la bande interdite. Ce niveau permis peut représenter une source ponctuelle émettrice de lumière.

La même démarche a été élargie à l'étude de quelques propriétés optiques d'un miroir de Bragg qui peut être élaboré avec des nanoparticules d'argent (NP Ag). Nous avons présenté l'évolution de la permittivité diélectrique du verre en présence des NP Ag en fonction du facteur de remplissage f et de la taille des nanoparticules. Les calculs des diagrammes de dispersion ainsi que de la réflectance du miroir de Bragg formé par des NP Ag dans du verre ont été menés en fonction de f et du nombre de couches.

Les simulations réalisées ont permis de déduire qu'en négligeant la partie imaginaire de la permittivité du verre dopé avec les nanoparticules d'argent a pour effet d'augmenter la valeur maximale du coefficient de réflexion du miroir, par contre les largeurs de bandes interdites restent inchangées.

Références

Références bibliographiques

- [1] E. Yalonovitch, “*Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics*”, Physical Review Letters, Vol. 58, n° 20, pp. 2059-2062, (1987).
- [2] S. John, “*Strong localisation of photons in certain disordered dielectric superlattices*”, Physical Review Letters, Vol. 58, n° 23, pp. 2486-2489, (1987).
- [3] P. Yeh, “*Optical Wave in Layered Media*”, Wiley, New York, (1988).
- [4] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter et K.M. Leung, “*Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing non-spherical atoms*”, Physical Review Letters, Vol.67, n° 17, pp. 2295-2298, (1991).
- [5] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe and J. D. Joannopoulos, “*Existence of a photonic band gap in two dimensions*”, Applied Physics Letters. Vol.61, pp.495, (1992).
- [6] T.F. Krauss, R.M. De la Rue et S. Brand, “*Two-dimensional photonic-bandgap structures operating at near-infrared wavelengths*”, Nature 383, pp. 699-702, (1996).
- [7] H. Miguez, C. Lopez, F. Meseguer, A. Blanco, L. Vazquez, R. Mayoral, M. Ocana, V. Fornes et A. Mifsud, “*Photonic crystal properties of packed submicrometric SiO₂ spheres*”, Applied Physics Letters, Vol.71, n° 9, pp. 1148-1150, (1997).
- [8] P. Ferrand, M. Egen, B. Griesebock, J. Ahopelto, M. Muller, R. Zentel, S. G. Romanov et C. M. Sotomayor Torres,” *Self-assembly of three-dimensional photonic crystals on structured silicon wafers*”. Applied Physics Letters, Vol.81, n° 15 pp. 2689, (2002).
- [9] S. Y. Lin et J. G. Fleming, “*a three-dimensional optical photonic crystal*”, IEEE Journal of Lightwave Technologie 17, pp. 1944 (1999).
- [10] A. Hynninen, H. J. Thijssen, C. M. Vermolen, M. Dijkstra and A. Blaaderen “*Self-assembly route for photonic crystals with a bandgap in the visible region*”, Nature Materals 6, pp. 202- 205, (2007)
- [11] S. E.Mekhlouf, A. Boukenter, M. Ferrari, F. Goutaland , N. Ollier and Ouerdane,”UV assisted Local crystallization in Er³⁺ doped oxy-fluoride glass”, J. Non- Cryst. Solids, Vol. 353, pp. 506 – 509, (2007).
- [12] S. David, “*Etude de composants à cristaux photoniques dans la filière silicium pour les longueurs d’ondes des télécommunications optiques*”, thèse de Doctorat, Univ. de Paris sud, Mars (2003).

- [13] A. Talneau, Ph. Lalanne, M. Agio, and C.M. Soukoulis, “*Low-reflection photonic-crystal taper for efficient coupling between guide sections of arbitrary widths*” *Optics Letters*, Vol. 27, pp 1522–1524 (2002).
- [14] M. Qiu, M. Mulot, M. Swillo, S. Anand, B. Jaskorzynak, A. Karlsson, M. Kamp, and A. Forchel, “*Photonic crystal optical filter based on contra-directional waveguide coupling*” *Applied Physics Letters* Vol. 83, pp. 5121–52123 (2003).
- [15] Y. Akahane, M. Mochizuki, T. Asano, Y. Tanaka, and S. Noda, “*Design of a channel drop filter by using a donor-type cavity with high-quality factor in a two-dimensional photonic crystal slab*” *Applied Physics Letters*, Vol. 82, pp.1341–1343 (2003).
- [16] J. C. Knight, J. Arriaga, T. A. Birks, Member, IEEE, A. Ortigosa-Blanch, W. J. Wadsworth, and P. St. J. Russell, “*Anomalous Dispersion in Photonic Crystal Fiber*”, IEEE, *Photonics Technology Letters*, Vol. 12, n° 7, pp.807-809, (2000).
- [17] A. Chutinan, M. Mochizuki, M. Imada and S. Noda, “*Surface-emitting channel drop filters using single defects in two-dimensional photonic crystal slabs*”. *Applied Physics Letters*, Vol. 79, n°17, pp.2690-2692, (2001).
- [18] A.S. Jugessur, P. Pottier, and R. M. De La Rue, “*Engineering the filter response of photonic crystal microcavity filters*,” *Optics Express*, Vol. 12, n°7, (2004).
- [19] J.D. Joannopoulos, S.G. Johnson, J.N. Winn, R.D. Meade, “*Photonic Crystals Molding the Flow of Light*” 2nd Edition (Princeton, NJ: Princeton University Press) (1995).
- [20] C. Kittel, “*Physique de L’état Solide*”, 7^{ème} edn. (Dunod), Paris, (2005).
- [21] K. Busch, “*Photonic band structure theory: assessment and perspectives*”, *C.R. Physique* 3, pp.53-66, (2002).
- [22] P.R. Villeneuve, M. Piche “*Photonic band gap in two-dimensional square lattices: Square and Circular rods*” *Physical Review B*, Vol. 46, pp. 4673, (1992).
- [23] D. Cassagne, C. Jouanin, D. Bertho “*Hexagonal photonic band gap structures*” *Physical Review B*, Vol. 53, pp. 7134-7141, (1996).
- [24] K. Sakoda, “*Optical properties of photonic crystals*”, Springer Series in Optical Sciences, Vol. 80, Springer-Verlag, Berlin, (2001).
- [25] J.M. Lourtioz, H. Benesty, V. Berger, J.M. Gérard, D. Maystre et A. Tchelnokov, “*Les cristaux photoniques ou la lumière en cage*”, Hermes Science, (2003).
- [26] D. Gerard, “*Etude en champ proche et en champ lointain de composants périodiquement nanostructurés : cristaux photoniques et tamis à photons*”. Thèse doctorat, Univ. de Bourgogne, (2004).

- [27] H. Roussel, V. Vigneras, W. Tabbara, J.P. Parneix “*Etude théorique et expérimentale de structures à Bande Photonique Interdite bidimensionnelle*” JNM 99, Arcachon, (1999).
- [28] G. Tayab, D. Maystre “*Rigorous theoretical study of finite size two dimensional photonic crystal doped by microcavities*” J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 14, pp.3323-3332, (1997).
- [29] B. Wild, “*Etude expérimentale des Propriétés Optiques des Cristaux Photoniques Bidimensionnels et de leur Accordabilité*”, thèse de doctorat, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, (2006).
- [30] K.M.Ho, C.T.Chan et C.M.Soukoulis, “*Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures*”, Physical Review Letters, Vol. 65, n°25, pp.3152-3155, (1990).
- [31] E. Yablonovitch et T. J. Gmitter “*Photonic band structure: The face-centered-cubic case*”, Physical Review Letter 63, pp. 1950 (1989).
- [32] Z.Zhang et S. Satpathy, “*Electromagnetic wave propagation in periodic structures: Bloch wave solution of Maxwell’s equation*”, Physical Review Letter, Vol. 65, pp. 2650 (1990).
- [33] T. Jaffre “*Caractérisation des matériaux à bande interdite électromagnétique multi périodiques et leurs applications aux antennes*”, Thèse doctorat, Univ. de Limoges, (2005).
- [34] D. R. Smith, S. Schultz, N. Kroll, M. Sigalas, K. M. Ho and C. M. Soukoulis, “*Experimental and theoretical results for a two-dimensional metal photonic band-gap cavity*”, Applied Physics Letters, Vol. 65, (1994).
- [35] F. Gadot, “*Modélisation et caractérisation expérimentale de matériaux à Bandes Interdites Photoniques (BIP) en Micro-Ondes*”, thèse de Doctorat, Univ. de Paris sud, (1999).
- [36] S. L. McCall, P. M. Platzman, R. Dalichaouch, D. Smith et S. Schultz, “*Microwave propagation in two-dimensional dielectric lattices*”, Physical Review Letters, Vol. 67, pp. 2017-2020, (1991).
- [37] Y. Merle, “*Etude de la dispersion électromagnétique dans les matériaux périodiques diélectriques bidimensionnels*”, thèse de Doctorat, Univ. de Limoges, (2003).
- [38] J. Livage, “*Les procédés sol-gel*”, Revue Verre, Vol .6 N° 5, (2000)
- [39] J. D. Mackenzie, “*Glasses from melts and glasses from gels, a comparison*” Journal of Non -Crystalline Solids, 48, pp 1-10, (1982).
- [40] L.L.Hench and J.K.West, “*The Sol-Gel Process*” Chem. Rev, pp. 33-72, (1990).
- [41] C.J. Brinker, A.J. Hurd and K.J.Ward Machenzie and Ulrich “*Fundamentals of Sol-gel thin films formation*”, Wiley, New York (1988).
- [42] C. J Brinker, GW Scherer, “*Sol-Gel Science : The Physics and Chemistry of Sol -gel Processing*, , Academic Press (1990).

- [43] C. Yu, and H. Chang, “*Applications of the finite difference mode solution method to photonic crystal structures*”, Optical and Quantum Electronics 36, pp. 145-163, (2004).
- [44] D. Hermann, M. Frank, K. Busch, and P. Wölfe, “*Photonic band structure computations*”, Optics Express, Vol. 8, n° 3, pp. 167-172, (2001).
- [45] S. Guo and S. Albin, “*Simple plane implementation for photonic crystal calculation*”, Optics Express, Vol. 11, n° 2, pp. 167-175, (2003).
- [46] S. Shi, C. Chen, and D.W. Prathe, “*Revised plane wave method for dispersive material and its application to band structure calculations of photonic crystal slabs*”, Applied physics letters. 86, pp. 043104, (2005).
- [47] C.S. Feng, L.M. Mei, L.Z. Cai, X.L. Yang, S.S. Wei, P. Li, “*A plane-wave-based approach for complex photonic band structure and its applications to semi-infinite and finite system*” Journal of physics. D. Vol. 39, pp. 4316-4323, (2006).
- [48] P. R. Villeneuve and M. Piche, “*Photonic band gap of transverse-electric modes in two dimensionally periodic media*”, Journal of optical society of America A, Vol. 8, pp. 1296-1305 (1991).
- [49] D. Neel “*Etude en champ proche optique de guide à cristaux photoniques sur SOP*” thèse de Doctorat, Univ. de Lyon, (2006).
- [50] S. K. Yee, “*Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media*”. IEEE Trans. Antennas and propagation, Vol. 14, pp 302-307, (1966).
- [51] M. Qiui, S. He, “*A nonorthogonal finite-difference time-domain method for computing the band structure of a two-dimensional photonic crystal with dielectric and metallic inclusion*” J. Appl. Phys. 87, pp. 8268-8275, (2000)
- [52] A. Lavrinenko, P.I. Borel, L.H. Frandsen, M. Thorhauge, A. Haroth, M. Kristensen, T. Niemi, “*Comprehensive FDTD modelling of photonic crystal waveguide components*”, Optic Express, Vol. 12, N°. 2. pp. 234-248, (2004).
- [53] A. Taflov and S. C. Hagness, “*Computational Electrodynamics the finite-difference time-domain Method*” 2 edition, Artech House Publishers, Boston, (2000).
- [54] C.T. Chan, Q.L. Yu et K.M. Ho, “*Order N spectral method for electromagnetic waves*”, Physical Review B, Vol. 51, pp. 16635-16642, (1995).
- [55] T. Briallat, “*Définition, réalisation et caractérisation de matériaux à Bandes photoniques Interdites reconfigurables en Micro-ondes*”, thèse de Doctorat, Univ. de Paris, (2000).

- [56] K.S.Yee, “*Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media*”, IEEE Trans. Antennas and propagation, Vol. 14, pp 302-307, (1966).
- [57] G. Mur, “*Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations*” IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility, Vol. 23, pp. 377-382, (1981).
- [58] B. Enquist, A. Majda, “*Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves mathematics of computation*”, Vol. 31, pp. 629-651, (1977).
- [59] J.P. Berenger, “*A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*” Journal of Computational physics, Vol. 114, pp. 185-200 (1994).
- [60] J. B. Pendry, “*Calculating photonic band structure*”, Journal of Physics: Condensed Matter 8, pp. 1085, (1996).
- [61] J. B. Pendry, “*Photonic band structures*”, Journal of Modern Optics 41, pp. 209, (1994)
- [62] D. Maystre, “*Electromagnetic study of photonic band gaps*”, Pure and Applied Optics 3, pp. 975-993, (1994).
- [63] Y. Qiu, K.M. Leung, L. Carin, and D. Kralj, “*Dispersion curves and transmission spectra of two-dimensional photonic band-gap crystal : Theory and experiment*”, J. Appl. Phys. 77, N°8, pp. 3631-3636 (1995).
- [64] C. Falcony, M. Garcia, A. Ortiz A and J. C. Alonso J C, “*Luminescent properties of ZnS:Mn films deposited by spray pyrolysis*”, J. Appl. Phys. 72, pp. 1525, (1992).
- [65] S. H. Sohn and J. Hamakawa, J. Appl. Phys. 72, pp. 2490,(1992).
- [66] S.Yanagida , H. Kawakami, Y. Midori , H. Kizumoto , C.J. Pac and Y.Wada, Bull. Chem. Soc. 68, pp. 1811, (1995).
- [67] J.C. Maxwell-Garnett, Philos. Trans. R. Soc. London, Serv. A, pp. 203-385, (1904).
- [68] A. Abdolvand, A. Podlipensky, G. Seifert, H. Graener, “*Electric field-assisted formation of Percolated silver nanolayers inside glass*” Optics Express, Vol. 13, N°4, pp. 1266-1273, (2005).
- [69] A. Labbani, R. Saoudi et A. Benghalia “*Etude de cristaux photoniques à base de nanoparticules de semi-conducteurs dans des verres*”. OHD 2007 19eme Colloque International « Optique Hertzienne et diélectrique » Valence – France (2007).
- [70] E. D. Palik, “*Handbook of Optical Constants of Solids*”, (New York: Academic) (1985).
- [71] A.Labbani, R.Saoudi et A.Benghalia_ “*Photonic band gaps in one-and two-dimensional photonic crystals based on a nanocomposite of ZnS and glass*. Journal of Optics A: Pure and Applied Optics Vol.11, 085103

- [72] I. Borgia, B. Brunetti, I. Mariani, A. Sgamellotti, F. Cariati, P. Fermo, M. Mellini, C. Viti, G. Padeletti, “*Nanoparticles in Lustre Reconstructions*”, Appl. Surf. Sci., pp. 206-216, (2002).
- [73] Shun-ichi Kobayashi, Toshihiro Takahashi and Wataru Sasaki “*Size Effect of Metallic Fine Particle of Cu*”, J. Phys. Soc. Japan, Vol 32, pp. 1234-1236, (1972).
- [74] R.T. Jensen, M.D.Malinsky, C.L. Haynes, and R.P. Van Duyne “*Nanosphere Lithographie: Tunable Localized Surface Plasmon Resonance Spectra of Silver Nanoparticles*” J. Phys.Chem.B, 104, pp. 10549-10556, (2000)
- [75] W. Cai, H. Hofmeister, and M. Dubiel, “Importance of lattice contraction in surface plasmon resonance shift for free and embedded silver particles” J. Phys. D, Vol. 13, pp. 245-253, (2000).
- [76] F. Meriaudeau, T. R. Downey, A.Passian, A. Wig, and T. L. Ferrell,” Environment Effects on Surface-Plasmon Spectra in Gold-Island Films Potential for Sensing Applications”, Applied Optics, Vol. 37, pp. 8030-8037, (1998).
- [77] C. Petit, A. Taleb, M. P. Pileni, “*Cobalt nanosized particles organized in a 2D superlattice: Synthesis, characterization, and magnetic properties*” J. Phys. Chem. B Vol. 103, pp 1805-1810, (1999).
- [78] Päivi Ahonen, “*Optical and electrical interactions in self-assembled metal nanoparticle superstructures*” Helsinki University of Technology, Finland (2008).
- [79] J. J. Xiao, J. P.Huang, and K.W. Yu,”*Optical response of strongly coupled metal nanoparticles in dimmer arrays*”, Phys. Rev. B 71, 045404, (2005).
- [80] C.F. Bohren, D. R. Huffman,” *Absorption and Scattering of light by Small Particles*” Berlin: Wiley-VCH, (2004).
- [81] B. Palpant, ”*Effets de taille dans la réponse optique d’agrégats de métaux nobles en matrice : étude expérimentale et interprétation théorique*”, thèse de doctorat, Univ. C. Bernard - Lyon 1, (1998)
- [82] U. Kreibig & M. Vollmer,”*Optical Properties of Metal Clusters*”, Springer, Berlin (1995)
- [83] Mang Hin Kok, Rui Ma, Jeffrey Chi Wai Lee,Wing Yim Tam, C.T. Chan, and Ping Sheng, Kok Wai Cheah “*Photonic band gap effect and structural color from silver nanoparticle gelatine emulsion*”, Physical Review. E 72, 047601, (2005).

Résumé

Dans ce travail, une contribution a été menée à la modélisation 1D et 2D d'une nouvelle classe de matériaux à bandes interdites photoniques, en utilisant la méthode FDTD (Finite Domain Time Difference). Ces matériaux sont obtenus en dopant du verre avec des nanoparticules semi-conductrices (NP ZnS) ou métalliques (NP Ag). La présence des nano-objets dans de la silice permet d'obtenir un nouveau matériau composite dont les propriétés optiques sont différentes de la matrice hôte initiale. L'originalité de cette nouvelle classe de matériaux réside dans la possibilité d'obtenir des propriétés optiques accordables en plusieurs paramètres caractéristiques des particules.

Les résultats de nos simulations montrent que les caractéristiques des diagrammes de bandes (nombre, largeur, longueur d'onde centrale) des miroirs de Bragg (ZnS+verre)/verre et (Ag+verre)/verre, sont ajustables en fonction de la polarisation, de la variation Δn , de la forme et de la concentration des nanoparticules (NP).

Aucune bande interdite n'a été décelée pour le système 2D constitué de NP ZnS placées périodiquement dans une matrice hôte selon une structure carrée pour les deux modes de polarisation TE et TM. Cependant, l'utilisation du mode TE dans le cas de la structure hexagonale donne des bandes interdites intéressantes.

L'exemple de la nanocavité présenté donne une idée des systèmes photoniques simples que nous pouvons attendre avec ces nouveaux matériaux.

L'étude a été élargie à la modélisation des miroirs composés des NP métalliques et semi-conductrices en tenant compte de l'absorption des NP noyées dans la matrice diélectrique.

ملخص

في هذا العمل، مساهمة قد أجريت لنمذجة 1D و 2D لصنف جديدة من مواد الأشرطة الممنوعة الضوئية الفجوة، مع استعمال FDTD . هذه المواد تم الحصول عليها بعد تطعيم الزجاج بالجزئيات الشبه ناقله أو المعدنية. وجود جزئيات في الزجاج يؤدي للحصول على مادة مركبة جديدة و التي تكون خصائصها البصرية مختلفة من المصنفة المبدئية.

الجديد في هذه الطريقة من الفئة الجديدة من المواد تكمن في إمكانية الحصول على خصائص ضوئية تتضبط لعدة عناصر مميزة الجسيمات.

نتائج المحاكاة تبين أن الميزات لمخططات الأشرطة الممنوعة (عدد، عرض و طول الموجة الوسطى) للمرأة Bragg (Zns + زجاج) / زجاج و (Ag + زجاج) / زجاج، قابلة للتعديل وفق الاستقطاب، التغيير بالنسبة في الفرق Δn وفي شكل و تركيز الجزئيات (NP).

لا يوجد أي أشرطة ممنوعة تم العثور عليها من طرف نظام 2D المتكون من Zns NP موضوعة دوريا في المصفوفة حسب هيكل مربع ذو استقطاب TE و TM مع ذلك فإن استخدام استقطاب TE في حالة الهيكل السداسي الشكل تعطي أشرطة ممنوعة مفيدة.

المثال للتجويف المتناهي الصغر المقدم يعطينا فكرة على الأنظمة الضوئية البسيطة التي نستطيع الوصول إليها مع هذه المواد الجديدة.

هذه الدراسة تم توسيعها إلى نمذجة المرايا المتكونة من NP المعدنية و شبه الناقله مع مراعاة امتصاص الجزئيات (NP) الغارقة في مصفوفة عازلة.

Summary

In this work, we report the investigation of 1D and 2D photonic band gaps of a new class of materials using FDTD (Finite Domain Time Difference) method. These materials are obtained by doping glass with semiconductor or metal nanoparticles. The presence of the nano-objects in the silica permits to obtain a new composite material from which the optical properties are different from the starting host matrix.

The originality of this new class of materials is in the possibility of obtaining tunable optical properties in several characteristic parameters of particles.

The results of our simulations show that the characteristics of the diagrams of bands (number, width, central wavelength) of mirrors of Bragg (ZnS+glass) /glass and (Ag+glass) /glass, are adjustable according to the polarization, variation Δn , the form and the concentration of NP.

No band gap was found for the 2D system constituted of ZnS particles disposed periodically in a host matrix with a square for TE and TM polarization modes. However in the case of hexagonal lattice, for the TE polarization mode, offer an interesting photonic band gaps. The example presented of the nanocavity gives us an idea of the photonic systems that we can obtain with these new materials.

The study was enlarged to the modeling mirrors composed with metallic and semiconductor nanoparticles (NP) embedded in the dielectric matrix with introducing absorption of NP