

Conditions aux limites absorbantes pour les développements en série de modes quasinormaux (QNM) dans les structures photoniques dispersives en milieux ouverts

Guillaume Demésy, André Nicolet, Frédéric Zolla

Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Med, Institut Fresnel, Marseille, France

Email : andre.nicolet@fresnel.fr

Résumé—Le développement en série de modes quasinormaux (QNM) (donc comme une superposition de résonances, y compris pour les systèmes dissipatifs et dispersifs) des solutions de problèmes électromagnétiques est une méthode prometteuse pour l'analyse et la conception des dispositifs nanophotoniques. Dans l'état actuel, la prise en compte du spectre continu dans les problèmes ouverts, comme le sont la plupart des cas pratiques, nécessite des techniques spéciales. Nous comparons ici les PML (Perfectly Matched Layers) et des conditions absorbantes. Les conditions de Bayliss-Turkel du second ordre se montrent particulièrement prometteuses.

Durant la dernière décennie, la méthode des éléments finis appliquée au développement en série de modes quasinormaux (QNM) des solutions de problèmes de diffraction des ondes électromagnétiques dans le cadre de l'étude de dispositifs de nanophotonique a fait de nombreux progrès depuis ses premiers pas [1], [2] en incluant l'étude des matériaux dispersifs et les géométries non bornées [3], [4], [5], [6]. Nous supposons ici que l'opérateur différentiel impliqué est discrétisé sous la forme d'une matrice T . Dans le cas dispersif, T est en fait une fonction $T(\lambda)$ à valeur matricielle où $\lambda = i\omega$ avec $\omega \in \mathbb{C}$, la pulsation qui peut être complexe. Soit \mathcal{C} un contour fermé du plan complexe, $n(\mathcal{C})$ est le nombre de valeurs propres de T dans \mathcal{C} , notées λ_k pour $k = 1, \dots, n(\mathcal{C})$ avec $\langle \mathbf{u}_{1k} |$ et $|\mathbf{u}_{rk}\rangle$ leurs vecteurs propres à gauche (bra=vecteur ligne) et à droite (ket=vecteur colonne), définis par $\langle \mathbf{u}_{1k} | T(\lambda_k) = 0$ et $T(\lambda_k) |\mathbf{u}_{rk}\rangle = 0$.

La résolvante $T(\lambda)^{-1}$ peut s'écrire [4]

$$T(\lambda)^{-1} = \sum_{k=1}^{n(\mathcal{C})} \frac{1}{z - \lambda_k} \frac{|\mathbf{u}_{rk}\rangle \langle \mathbf{u}_{1k}|}{\langle \mathbf{u}_{1k} | T'(\lambda_k) \mathbf{u}_{rk}\rangle} \quad (1)$$

où $T'(\lambda)$ est la dérivée complexe par rapport à λ .

Pour le cas de l'électrodynamique en régime harmonique, nous introduisons l'opérateur

$$\mathbb{T}_{\varepsilon, \mu}(\lambda_s) \mathbf{E}_s := \text{curl}(\mu(\lambda_s)^{-1} \text{curl} \mathbf{E}_s) + \lambda_s^2 \varepsilon(\lambda_s) \mathbf{E}_s$$

et l'équation de Helmholtz vectorielle :

$$\mathbb{T}_{\varepsilon, \mu}(\lambda_s) \mathbf{E}_s = -\lambda_s \mathbf{j}, \quad (2)$$

où $-\lambda_s \mathbf{j}$ représente les sources (équivalentes dans le cas d'un champ incident) et $\omega_s = -i\lambda_s$ est la pulsation réelle de ce problème direct. Les vecteurs propres de droite sont associés au problème propre $\mathbb{T}_{\varepsilon, \mu}(\lambda_k) \mathbf{E}_{rk} = 0$ et les vecteurs propres à gauche sont associés aux vecteurs propres à droite de la matrice transconjuguée $\mathbb{T}_{\varepsilon, \mu}^*(\lambda_k) \mathbf{E}_{1k} = 0$. Quand seule la permittivité est dispersive et que les conditions aux limites permettent d'écarter les contributions du bord du domaine,

un cas très courant, \mathbf{E}_{1k} est égal à $\overline{\mathbf{E}_{rk}}$. Dans le contexte des éléments finis, l'expression de (1) pour \mathbf{E}_s , solution de (2), s'écrit, en exprimant les produits bra-ket avec des intégrales sur les champs de vecteurs interpolés correspondants [4] :

$$\mathbf{E}_s = - \sum_{k=1}^n \frac{\lambda_s}{(\lambda_s - \lambda_k)} \frac{(\int_{\Omega} \mathbf{E}_{rk} \cdot \mathbf{j} d\Omega) \mathbf{E}_{rk}}{\int_{\Omega} \mathbf{E}_{rk} \cdot ((\lambda_k^2 \varepsilon(\lambda_k))' \mathbf{E}_{rk}) d\Omega}$$

Pour la prise en compte du caractère dispersif, la permittivité est représentée par une fonction rationnelle de la fréquence [7] : $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon_0(1 + \chi(\omega)) \mathbf{E} = (\varepsilon_0 + \frac{\sum_j (i\omega)^j a_j}{\sum_k (i\omega)^k b_k}) \mathbf{E}$, où les a_j et les b_k sont des constantes *a priori* complexes caractéristiques du matériau.

Dans nos premières études [5], les domaines non bornés étaient pris en compte avec des PML, mais cette méthode, très séduisante en théorie, n'a pas donné entière satisfaction dans la pratique en raison d'instabilités numériques dans la représentation du spectre continu. Nous explorons donc dans cet article d'autres méthodes correspondant à des conditions sur le bord d'un domaine borné entourant la géométrie du problème traité. La Fig. 1 montre la géométrie du cas 2D traité, en (a) avec les PML et en (b) avec les conditions absorbantes qui consistent en une approximation d'un opérateur Dirichlet-to-Neumann (DtN) \mathcal{D}_ω sur le bord Γ du domaine tel que $\mathbf{grad} e \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \mathcal{D}_\omega e$, avec e la composante longitudinale du champ électrique. Pour un domaine circulaire 2D de rayon R , la condition classique du second ordre de Bayliss-Turkel BT2 consiste en l'approximation locale suivante de \mathcal{D}_ω [8] :

$$\mathcal{D}_\omega e \approx \frac{i\omega}{c} e - \frac{1}{2R} e - \frac{1}{8R^2(i\omega/c - 1/R)} e + \frac{R}{2Ri\omega/c - 2} \mathbf{grad}_t^2 e = 0, \quad (3)$$

où \mathbf{grad}_t est le gradient tangentiel sur Γ . Cette approximation introduit des fonctions rationnelles en $i\omega$ dans la formulation, mais c'est tout-à-fait compatible avec les problèmes dispersifs qui sont envisagés et cela n'introduit donc aucune difficulté supplémentaire de ce point de vue. On peut ainsi mettre le problème sous la forme faible suivante :

Trouvez $(\omega, e) \in \mathbb{C} \times \mathcal{H}^1(\Omega, \mathbf{grad})$ tel que :

$$\begin{aligned} & \forall w \in \mathcal{H}^1(\Omega, \mathbf{grad}), \\ & - \int_{\Omega} \mathbf{grad} e \cdot \mathbf{grad} \bar{w} d\Omega + \mathcal{R}_1(\omega) \int_{\Omega} \varepsilon_r(\mathbf{x}) e \bar{w} d\Omega \\ & + \mathcal{R}_2(\omega) \int_{\Gamma} e \bar{w} d\Omega + \mathcal{R}_3(\omega) \int_{\Gamma} \mathbf{grad} e \cdot \mathbf{grad} \bar{w} d\Gamma = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

où les fonctions rationnelles sont : $\mathcal{R}_1(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2}$, $\mathcal{R}_2(\omega) = i\omega/c + \frac{3 - 4Ri\omega/c}{8R - 8R^2i\omega/c}$, $\mathcal{R}_3(\omega) = \frac{-R}{2Ri\omega/c - 2}$. Le cas des conditions absorbantes du premier ordre (ABC1) correspond quant à lui à : $\mathcal{R}_1(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2}$, $\mathcal{R}_2(\omega) = i\omega/c$, $\mathcal{R}_3(\omega) = 0$.

La Fig. 2 présente les différentes valeurs propres calculées. Nous distinguons les modes de la structure (QNM) des modes qui dépendent de la troncature (TDM). On voit que les valeurs propres associées au spectre continu des PML (TDM) sont très nombreuses, parfois en collision avec les QNM (basses fréquences) ou numériquement mal calculées (hautes fréquences), tandis que les conditions absorbantes séparent bien les QNM et les TDM. Sur la Fig. 3 qui montre une reconstruction modale, on voit que les conditions absorbantes sont plus précises en hautes fréquences et que BT2 est meilleur que ABC1 en basse fréquence. Il ressort clairement que BT2 est la meilleure méthode à tous points de vue pour le problème étudié.

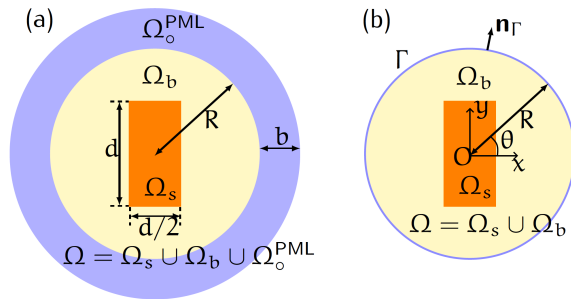


FIGURE 1. Géométrie du problème 2D : un rectangle Ω_s avec $\epsilon_r = 4$ dans de l'air borné par des PML (a) ou des conditions absorbantes (b) sur Γ .

Le principal défaut de BT2 est qu'elle est moins générale que les PML et moins aisée à mettre en œuvre. Son extension au 3D vectoriel n'est pas simple mais vaudra la peine d'être explorée.

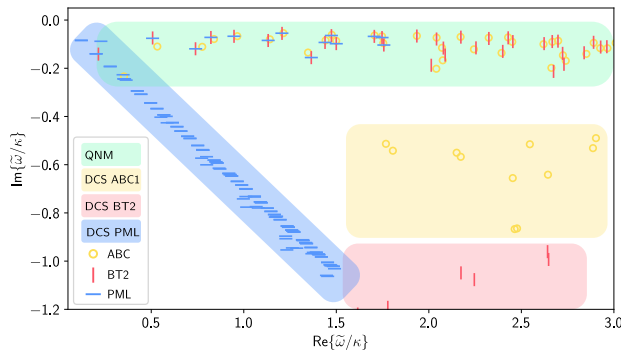


FIGURE 2. Spectre dans le plan complexe des fréquences propres (normalisées par $\kappa = \pi c/d$) calculées avec une condition limite ABC1 (cercles jaunes), une condition limite BT2 (tirets verticaux rouges) et des PML (tirets horizontaux bleus). Les régions ombrées en couleur mettent en évidence les QNM du diffuseur (zone verte), les TDM obtenus avec les PML (zone bleue), les TDM obtenus avec une condition ABC1 (zone jaune) et une condition BT2 (zone rouge).

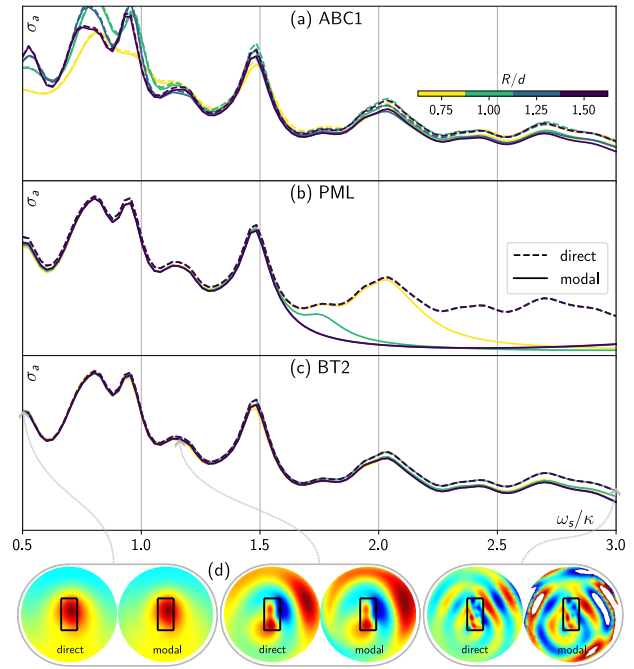


FIGURE 3. Spectre en section efficace d'absorption (pour une onde plane incidente) calculés en utilisant une approche directe (lignes pointillées) et modale (lignes pleines) avec (a) une condition limite ABC1, (b) des PML et (c) une condition limite BT2 pour différentes valeurs du rayon de troncature R donné par l'échelle de couleur. Les cartes couleur (d) montrent la partie réelle du champ diffusé pour des fréquences réelles sélectionnées ω_s/κ et pour les deux approches modales/directes utilisant une condition limite BT2.

RÉFÉRENCES

- [1] B. Vial, F. Zolla, A. Nicolet, and M. Commandré. Quasimodal expansion of electromagnetic fields in open two-dimensional structures. *Physical Review A*, 89(2) :023829, 2014.
- [2] B. Vial, G. Demésy, F. Zolla, A. Nicolet, M. Commandré, C. Hecquet, T. Begou, S. Tisserand, S. Gautier, and V. Saquet. Resonant metamaterial absorbers for infrared spectral filtering : quasimodal analysis, design, fabrication, and characterization. *J. Opt. Soc. Am. B*, 31(6) :1339–1346, Jun 2014.
- [3] P. Lalanne, W. Yan, A. Gras, C. Sauvan, J.-P. Hugonin, M. Besbes, G. Demésy, M. D. Truong, B. Gralak, F. Zolla, A. Nicolet, F. Binkowski, L. Zschiedrich, S. Burger, J. Zimmerling, R. Remis, P. Urbach, H. T. Liu, and T. Weiss. Quasinormal mode solvers for resonators with dispersive materials. *J. Opt. Soc. Am. A*, 36(4) :686–704, Apr 2019.
- [4] F. Zolla, A. Nicolet, and G. Demésy. Photonics in highly dispersive media : the exact modal expansion. *Optics letters*, 43(23) :5813–5816, 2018.
- [5] G. Demésy, A. Nicolet, B. Gralak, C. Geuzaine, C. Campos, and J. E. Roman. Non-linear eigenvalue problems with GetDP and SLEPC : Eigenmode computations of frequency-dispersive photonic open structures. *Computer Physics Communications*, 257 :107509, 2020.
- [6] A. Nicolet, G. Demésy, F. Zolla, C. Campos, J. E. Roman, and C. Geuzaine. Physically agnostic quasi normal mode expansion in time dispersive structures : From mechanical vibrations to nanophotonic resonances. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, page 104809, 2022.
- [7] M. Garcia-Vergara, G. Demésy, and F. Zolla. Extracting an accurate model for permittivity from experimental data : hunting complex poles from the real line. *Opt. Lett.*, 42(6) :1145–1148, Mar 2017.
- [8] X. Antoine, H. Barucq, and A. Bendali. Bayliss–Turkel-like radiation conditions on surfaces of arbitrary shape. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 229(1) :184–211, 1999.