

# THESE

Présentée par

**Adnane NOUAL**

Pour l'obtention du

**GRADE DE DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1**

Laboratoire d'accueil : Institut d'Electronique de Microélectronique et  
de Nanotechnologies

Ecole doctorale : Sciences pour l'ingénieur

**Modélisation des structures nano-plasmoniques et  
photoniques. Applications aux phénomènes de filtrage et à  
la conception de capteurs bioplasmoniques**

Soutenue publiquement le 23 juillet 2010

<b>Président et rapporteur</b>	Antoine Khater, Professeur à l'université du Mans.
<b>Rapporteur</b>	El Houssaine El Boudouti, Professeur à l'université d'Oujda (Maroc).
<b>Directeur de Thèse</b>	Bahram Djafari-Rouhani, Professeur à l'université de Lille 1.
<b>Co-directeur de Thèse</b>	Abdellatif Akjouj, Professeur à l'université de Lille 1.
<b>Membres invités</b>	Sabine Szunerits, Professeur à l'université de Lille 1. Yan Pennec, Maître de conférences à l'université de Lille 1.



## Remerciements

Je voudrais tout d'abord exprimer mes sincères remerciements à mes directeurs de thèses Mr le professeur Djafari-Rouhani Bahram et Mr le professeur Akjouj Abdellatif d'avoir accepté l'encadrement de mon travail de recherche, de m'avoir constamment appuyé par leurs conseils de qualité, leurs compétences, leur confiance et enfin pour leur grande patience durant toute la durée de ma thèse. Ceci a été essentiel pour la réalisation de cet ouvrage.

J'adresse un grand merci à Mr Yan Penec, Maître de conférences, d'avoir également contribué activement à l'encadrement de ce travail. En particulier pour m'avoir aidé à maîtriser les outils de la simulation numérique, pour sa rigueur dans le travail, son entière disponibilité et enfin pour la qualité de son relationnel.

Une partie des résultats présentés dans ce manuscrit a été obtenue en étroite collaboration avec l'équipe Bio-Interfaces de l'IRI (Lille 1), dirigée par Mme le professeur Sabine Szunerits, je voudrais alors lui exprimer ma profonde gratitude pour l'excellent échange qu'on a pu mener ensemble, ainsi que pour la très bonne ambiance dans laquelle celui-ci s'est toujours déroulé.

Je tiens aussi à remercier énormément messieurs les professeurs Antoine Khater et El Houssaine El Boudouti, de l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de participer au jury de cette thèse. Je n'oublie certainement pas de remercier vivement Mr Leonard Dobrzynski, directeur de recherche au CNRS, de m'avoir souvent donné de précieux conseils scientifiques tout au long de mon travail de recherche.

Qu'il me soit également permis d'adresser mes remerciements au directeur de l'Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologies de l'université de Lille 1 pour m'avoir accordé un financement de trois ans afin de mener à bien ma recherche ; et également aux personnels administratifs de l'UFR de Physique de Lille 1 pour leurs services et leur sympathie.

Enfin, à mes parents et amis proches dont le soutien fut constant et sans relâche ; merci du fond du cœur, ce travail vous est dédié.



# Table des matières



## TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION GÉNÉRALE :</b> .....	<b>1</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE:</b> .....	<b>6</b>
<b>CHAPITRE I : MÉTHODE DE MODÉLISATION FDTD</b> .....	<b>11</b>
<b>I-1) Introduction :</b> .....	<b>11</b>
<b>I-2) Illustration de la méthode :</b> .....	<b>12</b>
I-2.1) Equations de Maxwell : .....	12
I-2.2) Discrétisation des équations : .....	13
<b>I-3) Conditions aux limites :</b> .....	<b>16</b>
I-3.1) Méthode des PML (Perfect Matching Layer) .....	16
I-3.2) Equations d'évolution dans un milieu PML.....	18
<b>I-4-Intégration du modèle de Drude dans la méthode FDTD :</b> .....	<b>20</b>
I-4.1) Modèle de Drude : .....	20
I-4.2) Equation de Drude dans les équations de Maxwell : .....	24
I-4.3) Discrétisations des équations de Drude-Maxwell .....	25
<b>I-5) Intégration du modèle de Lorentz-Drude dans la méthode FDTD</b> .....	<b>26</b>
I-5.1) Modèle de Lorentz-Drude : .....	26
I-5.2) Discrétisations des équations de Maxwell-Lorentz-Drude : .....	29
<b>I-6) Conclusion</b> .....	<b>31</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE:</b> .....	<b>32</b>
<b>CHAPITRE II : MODÉLISATION D'UN MICRO-GUIDE PHOTONIQUE COUPLÉ À UN OU PLUSIEURS MICRO-RÉSONATEURS</b> .....	<b>35</b>
<b>II-1) Introduction :</b> .....	<b>35</b>
<b>II-2) Modélisation et Paramètres géométriques :</b> .....	<b>37</b>
<b>II-3) Etude du couplage du guide avec un 'stub' :</b> .....	<b>41</b>

## Table des matières

---

II-3.1) Effet des paramètres géométriques : .....	42
II-3.2) Facteur de qualité .....	47
II-3.3) signal incident symétrique .....	49
II-3.4) Structure à 3D .....	52
II-3.5) Application à la région du proche infrarouge: .....	54
<b>II-4) Interaction du guide avec plusieurs stubs identiques .....</b>	<b>55</b>
II-4.1) Filtrage sélectif accordable : .....	57
II-4.2) Filtre sélectif utilisant le phénomène de super-réseau .....	58
<b>II-5) Guide d'onde en forme d'Y .....</b>	<b>60</b>
II-5.1) Filtre réjectif en forme d'Y .....	63
II-5.2) Filtre sélectif en forme d'Y .....	65
<b>II-6) Etude du couplage d'un ensemble périodique de trous d'air avec un guide de silicium .....</b>	<b>66</b>
II-6.1) Transmission sélective .....	71
II-6.2) Démultiplexeur submicronique en forme de la lettre 'Y' .....	74
II-6.3) Conclusion: .....	75
<b>BIBLIOGRAPHIE: .....</b>	<b>78</b>
<b>CHAPITRE III : MODÉLISATION DE NANO-GUIDES PLASMONIQUES DANS LA GAMME DU VISIBLE ET DES TÉLÉCOMS .....</b>	<b>83</b>
<b>III-1) Introduction : .....</b>	<b>83</b>
<b>III-2) Modélisation d'un Nano-guide d'air de type MIM .....</b>	<b>86</b>
III.2.1) Modes plasmons-polaritons du système MIM: .....	87
III.2.2) Guidage sub-longueur d'onde : .....	91
III.2.3) Pertes dans le guide .....	94
III.2.4) Evaluation numérique de l'effet de dissipations dans le guide .....	98
<b>III-3) Pertes par injection du signal dans le guide .....</b>	<b>102</b>
<b>III-4) Etude du couplage du guide avec une nano-cavité rectangulaire d'air : .....</b>	<b>105</b>
III-4.1) Influence des paramètres géométriques .....	110
III-4.2) Facteur de qualité .....	113
III-4.3) Etude des différents modes de la cavité .....	117
<b>III-5) Etude d'un filtre sélectif .....</b>	<b>124</b>
<b>III-6) Modélisation d'un nano-guide de SiO<sub>2</sub> fonctionnant dans la gamme de fréquences télécoms.....</b>	<b>127</b>

III-6.1) Filtre réjectif et sélectif .....	128
III-6.2) Nano-démultiplexeur de SiO <sub>2</sub> en forme de Y .....	131
<b>III-7) Conclusion :</b> .....	<b>136</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE :</b> .....	<b>138</b>
<b>CHAPITRE IV : MODÉLISATIONS DES PROPRIÉTÉS OPTIQUES DE NANOPARTICULES MÉTALLIQUES: APPLICATION POUR LA CONCEPTION DE NANO-SONDES DÉDIÉES À LA BIO-DÉTECTION.....</b>	
<b>IV-1) Introduction :</b> .....	<b>143</b>
<b>IV-2) Modélisation de nanostructures plasmoniques .....</b>	<b>146</b>
<b>IV-3) Réalisation expérimentale des nanoparticules et caractérisation des paramètres géométriques .....</b>	<b>148</b>
<b>IV-4) Etude de la réponse plasmonique des particules métalliques en fonction des paramètres <math>l</math>, <math>a</math> et <math>h</math>.....</b>	<b>150</b>
<b>IV-5) Effet de couches diélectriques déposées sur les plots métalliques sur la réponse plasmonique.....</b>	<b>156</b>
IV-5.1) Effet de SiO <sub>x</sub> .....	156
IV-5.2) Effet de Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> .....	160
<b>IV-6) Effet des paramètres géométriques sur l'oscillation plasmonique observée dans le cas de SiO<sub>x</sub>.....</b>	<b>163</b>
<b>IV-7) Conclusion :</b> .....	<b>166</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE:</b> .....	<b>167</b>
<b>CONCLUSION GÉNÉRALE :</b> .....	<b>171</b>



# Introduction générale



## Introduction générale :

Le développement de la photonique a connu un essor considérable au cours des dernières décennies, tant sur le plan de la compréhension des phénomènes physiques liés à la propagation de la lumière, que sur le plan de réalisation technologique de nouvelles structures photoniques de dimensions de plus en plus réduites. On voudrait citer par exemple les cristaux photoniques [1, 2]. La réalisation de ces composants « à bandes interdites » repose sur une structuration périodique à une échelle submicronique de matériaux diélectriques. Ils ont rendu possible la manipulation de signaux lumineux à une échelle du même ordre de grandeur que leur longueur d'onde d'opération. En effet, des microcavités (voire des nano-cavités) à base de cristaux photoniques ont permis le confinement de la lumière dans des volumes de plus en plus petits [3]. Ce confinement a ouvert la voie à de nouvelles perspectives en électrodynamique quantique [4], en guidage et stockage de la lumière [5], ainsi qu'à la favorisation de phénomènes non linéaires (dus à l'interaction entre la lumière et la matière) [6]. En outre, le fort confinement de la lumière offert par les cristaux photoniques a été exploité pour augmenter l'absorption des rayons solaires dans des cellules photovoltaïques (films minces de Si) de silicium, ce qui a permis d'améliorer le rendement de production de courant électrique par ces structures (de 19%) [7, 8].

En somme, les propriétés optiques remarquables de ces structures ont conduit à la conception de nouveaux dispositifs photoniques qui ont mené à des applications dans divers secteurs de l'industrie et des hautes technologies, tel que les télécommunications, l'optoélectronique ou la bio-détection.

Néanmoins, un des objectifs ultimes de la communauté optique, à savoir la conception de dispositifs miniaturisés « tout-optique » permettant le transport et le traitement de l'information, exclusivement avec la lumière, se heurte à une limitation classiquement infranchissable qui est la limite de diffraction.

La réalisation de cet objectif est conditionnée par la réduction des composants photoniques à l'échelle nanométrique, à l'image des nanocircuits électroniques intégrés sur silicium, déjà d'usage dans les microprocesseurs actuels avec l'architecture à cœurs multiples, par exemple. S'affranchir de la limite de diffraction signifierait que des nanocircuits « tout-optique » pourraient

concurrencer les dispositifs électroniques actuels et ainsi être employés dans des systèmes de traitement de l'information à la vitesse de la lumière certainement bien plus performants.

En ce sens, la plasmonique [9-12], une nouvelle branche prometteuse de la nanophotonique a vu récemment le jour. Cette discipline consiste en l'étude du couplage lumière-gaz d'électrons dans des nanostructures métalliques ou mixtes, c'est-à-dire diélectriques-métalliques (DM). Le vif intérêt suscité par la plasmonique vient des propriétés remarquables de confinement des plasmons-polaritons de surface (SPP), qui permettent la propagation de la lumière non pas en volume mais le long d'une interface. Ces ondes évanescentes, qui se propagent le long d'interface entre un métal et un diélectrique, sont couplées aux électrons libres du métal dans sa bande de conduction. Dans le diélectrique, la longueur de propagation au bout de laquelle le champ électromagnétique est atténué est de l'ordre de quelques microns à plusieurs dizaines de microns. Dans le métal, la pénétration du champ (épaisseur de peau optique) dépend du type de métal. Pour l'argent, elle est de l'ordre de 20 nm dans la gamme de fréquence du visible.

Depuis leur mise en évidence, les SPP ont permis de proposer des solutions nouvelles pour la conception de nouveaux dispositifs photoniques. Par exemple, pour le guidage sub-longueur d'onde, plusieurs structures dont la dimension latérale est très en dessous de la longueur d'onde incidente ont été proposées [9, 13-16]. Le fait que les structures plasmoniques offrent de nouvelles voies de confinement extrême de la lumière, bien en-dessous de la limite classique de diffraction, constitue une révolution par rapport à des structures photoniques classiques (telles que les cristaux photoniques et les guides d'ondes à contraste d'indice). Néanmoins, un mode guidé SPP lors de sa propagation voit son énergie (dépendant de la fréquence et de la largeur du guide) dissipée par les électrons libres du métal. Cet effet impose une limite physique non pas à la réduction des composants mais à ce que ceux-ci soient employés pour guider la lumière sur de longues distances. Afin d'éliminer cette contrainte, plusieurs travaux de recherches ont été commencés par optimisation des structures plasmoniques pour limiter autant que possible les pertes d'énergie lors de la propagation [17-22].

D'autres phénomènes saisissants liés aux propriétés des SPP ont été récemment observés comme la transmission extraordinaire. A ce titre, on peut citer les travaux édifiants d'Ebessen et al [23]. Ceux-ci ont étudié la transmission de la lumière à travers un film métallique percé d'ouvertures sub-longueur d'onde disposées périodiquement. Les spectres de transmission montrent des

résonances exaltées autour de certaines longueurs d'ondes, pouvant être entre autres situées dans le visible. La transmission pouvait être exaltée de façon dramatique à ces longueurs d'ondes. Ces résonances sont attribuées d'une part à l'excitation de modes SPP à l'interface entre les ouvertures percées sur le métal et le diélectrique les remplissant (ou l'air). D'autre part, elles dépendent de résonances de type Pérot-Fabry confinées latéralement grâce aux modes SPP dans les ouvertures qui vibrent verticalement dans ceux-ci. Plusieurs études ont été entamées pour comprendre les mécanismes créant ce phénomène [24, 25]. Ainsi, une meilleure exploitation de celui-ci a été rendu possible dans des domaines tels que le traitement quantique de l'information [26], la conversion de longueur d'onde [27] et la nanolithographie [28].

Par ailleurs, les propriétés optiques des nanoparticules métalliques montrent une résonance SPP qui n'existe pas dans l'état massif [29, 30]. L'exaltation du champ électromagnétique, autour de particules, a aussi été exploitée dans divers domaines, tels que l'exaltation de la diffusion Raman par des molécules à proximité de ces particules [31-33], la génération de susceptibilité diélectrique d'ordre 2 (réponse non linéaire) [34-37], et dans la bio-détection [38-42].

Une partie des travaux réalisés dans le cadre de cette thèse s'inscrit dans le contexte de conception de fonctionnalités optiques nécessaires à l'élaboration de briques fondamentales de futurs nanocircuits optiques, pouvant traiter de l'information véhiculée exclusivement par la lumière. Plus précisément, il s'agit d'une contribution à l'étude des propriétés du guidage, filtrage et démultiplexage dans des gammes de fréquences situées dans les domaines du visible et des télécommunications optiques (infrarouge proche). D'une part, on a étudié ces phénomènes dans une structure photonique classique, c'est-à-dire un guide d'onde diélectrique à contraste d'indice, dont la dimension latérale (submicronique) est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde incidente. D'autre part, on a exploité les propriétés du SPP pour étudier ces phénomènes à une échelle sub-longueur d'onde à travers un guide d'onde plasmonique d'air, de type *Ag-Air-Ag* dans le visible. Ensuite, à travers un guide de  $SiO_2$ , du même type, c'est à dire *Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag* dans le domaine des télécoms.

Dans une autre partie de ce travail, on s'est intéressé aux propriétés optiques de nanoparticules métalliques d'or, disposées sur un substrat de verre ( $SiO_2$ ). La réponse plasmonique des particules montre un comportement oscillatoire en termes de fréquence de résonance, en fonction de

l'épaisseur de couches diélectriques déposées sur les particules. Notre étude du phénomène observé a consisté dans un premier temps, en une étude théorique systématique avec le modèle de Lorentz-Drude de la réponse plasmonique des particules, en fonction des divers paramètres mis en jeu. Ensuite, on a regardé le comportement de la résonance plasmonique, en fonction de l'épaisseur de couches de deux types de matériaux diélectriques, déposées sur les particules, et ainsi d'étudier les différentes possibilités d'optimisation de l'oscillation plasmonique. En effet, celle-ci est exploitée, pour la conception de nouvelles générations de nano-capteurs de molécules isolées biologiques ou chimiques, situées à courtes et à très longues distances par rapport aux nanoparticules métalliques. Nos travaux théoriques ont été confrontés aux travaux expérimentaux réalisés par l'équipe Bio-Interfaces de l'Institut de Recherche Interdisciplinaire (IRI) de l'université de Lille 1.

Dans cette thèse, toutes les études de modélisation ont été réalisées grâce à des codes de simulation numérique, basés sur la méthode FDTD, et développés au sein de notre équipe.

Dans le Chapitre 1, on présentera de façon détaillée la méthode des différences finies (FDTD), c'est-à-dire la discrétisation des équations de Maxwell, ainsi que les conditions aux limites utilisées. Ensuite, on présente le modèle de Drude et la façon dont les équations issues de celui-ci sont transformées dans le domaine temporel, et ainsi intégrées dans nos codes FDTD. De manière équivalente, on étudie le modèle de Lorentz-Drude pour lequel on montre comment les équations de celui-ci sont introduites dans les codes de simulation.

Dans le Chapitre 2, on présentera les résultats de simulation d'un guide d'onde photonique de semi-conducteur, entouré d'air ainsi, que son couplage à un système de cavités symétriques et identiques, disposées sur le côté du guide. Les phénomènes de filtrage, observés à travers cette structure, sont étudiés en fonction des différents paramètres géométriques. On montrera en termes d'applications, la possibilité de proposer une nouvelle structure, permettant de réaliser le démultiplexage dans le domaine des télécoms.

Le Chapitre 3 est consacré à l'étude des propriétés de guidage sub-longueur d'onde à travers un nano-guide d'air à 2D, pris en sandwich, entre deux plaques métalliques d'argent (Métal-diélectrique-Métal). On montrera également les résultats numériques du couplage de ce guide avec une nano-cavité rectangulaire, et ce dans le domaine du visible. Dans cette section, un autre

nano-guide de  $SiO_2$  à 2D, entouré de métal d'argent, est étudié dans le domaine des télécoms. En particulier un nouveau nano-démultiplexeur, opérant dans cette région de fréquence, et bien plus compact par rapport à ce qui existait dans la littérature, est proposé.

Dans le Chapitre 4, on présentera les résultats de modélisation de nanoparticules d'or, déposées sur un substrat de verre de  $SiO_2$ , et recouvertes de couches de deux types de matériaux diélectriques ( $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ ). En particulier, une étude en fonction des différents paramètres géométriques des particules, sur la réponse plasmonique de celle-ci, ainsi qu'en fonction des épaisseurs des diélectriques, déposés sur les particules, est rapportée. Les résultats théoriques seront comparés aux résultats expérimentaux effectués par l'équipe Bio-Interfaces de l'Institut de Recherche Interdisciplinaire de Lille 1. Enfin, on discutera des possibilités, pour l'optimisation de l'oscillation de la résonance plasmonique des particules, en vue d'améliorer la sensibilité des nano-capteurs, exploitant ce phénomène de détection de variation d'épaisseur de couches diélectriques (déposées sur les particules).

En conclusion générale de ce travail, l'ensemble des résultats obtenus sera résumé et quelques perspectives seront données.

## Bibliographie:

- [1] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2059 (1987).
- [2] J. Sajeev, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2486 (1987).
- [3] K.J. Vahala, *Nature.* 424, 839-846 (2003).
- [4] K. Hennessy et al, *Nature.* 445, 896 (2007).
- [5] T. Tanabe et al, *Nature Photonics.* 1, 49 (2007).
- [6] G.Vienne, Y.Li, L.Tong, and Ph.Grelu, *Opt. Lett.* 33, 1500-1502 (2008).
- [7] L. Zeng, Y. Yi, C. Hong, J. Liu, N. Feng, X. Duan, and L. C. Kimerling, *Appl. Phys. Lett.* 89, 111111 (2006).
- [8] Lirong Zeng, Peter Bermel, Yasha Yi, B.A. Alamariu, Kurt A. Broderick, J. Liu, C. Hong, Xiaoman Duan, John D. Joannopoulos, and Lionel C. Kimerling, *Appl. Phys. Lett.* 99, 221105 (2008).
- [9] W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, *Nature (London)* 424, 824–830 (2003).
- [10] H. Rigneault, J. Capoulade, J. Dinitnger, J. Wenger, N. Bonod, E. Popov, T. W. Ebbesen, and P. F. Lenne, *Phys. Rev. Lett.* 95, 117401 (2005).
- [11] W. Ding, S. R. Andrews, and S. A. Maier, *Phys. Rev. A.* 75, 063822 (2007).
- [12] A. Akbari, R. N. Tait, P. Berini, *Opt. Express.* 18, 8505-8514 (2010).
- [13] S. A. Maier and H. A. Atwater, *J. Appl. Phys.* 98, 011101 (2005).
- [14] S. Lal, S. Link, and N. J. Halas, *Nat. Photonics.* 1, 641–648 (2007).
- [15] E. Verhagen, A. Polman, and L. K. Kuipers, *Opt. Express.* 16, 45–57 (2008).
- [16] P. Berini, *Adv. Opt. Photonics.* 1, 484–588 (2009).
- [17] G. A. Plotz, H. J. Simon, J. M. Tucciarone, *J. Opt. Soc. Am.* 69, 419-421 (1979).
- [18] B. Ya. Kogan, V. M. Volkov and S. A. Lebedev, *JETP. Lett.* 16, 100 (1972).
- [19] A. N. Sudarkin and P. A. Demkovich, *Sov. Phys.Tech. Phys.* 34, 764-766 (1989).
- [20] S. A. Maier, *Opt. Comm.* 258, 295 (2006).
- [21] M. A. Noginov, V. A. Podolskiy, G. Zhu, M. Mayy, M. Bahoura, J. A. Adegoke, B. A. Ritzo, and K. Reynolds, *Opt. Express.* 16, 1385 (2008).
- [22] J. Grandidier, G. Colas des Francs, S. Massenot, A. Bouhelier, L. Markey, J. C. Weeber, C. Finot, and A. Dereux, *Nano. Lett.* 9, 2935 (2009).
- [23] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff, *Nature.* 391, 667 (1998).

- [24] F. I. Baida and D. Van Labeke, *Opt. Commun.* 209, 17, (2002).
- [25] F. I. Baida and D. Van Labeke, *Phys. Rev. B.* 67, 155314, (2003).
- [26] E. Altewischer, M. P. van Exter, J. P. Woerdman, *Nature.* 418, 304-306 (2002).
- [27] A. Nahata, R. A. LinkeT. , Ishi, K. Ohashi, *Opt. Lett.* 28, 423-425 (2003).
- [28] S. Shinada, J. Hashizume, F. Koyama, *Appl. Phys. Lett.* 83, 836-838 (2003).
- [29] V. D. Hulst, *Light Scattering by Small Particles* (John Wiley, New York, 1957).
- [30] C. Bohren and D. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Wiley-Interscience, New York, 1983).
- [31] S. Nie and S. R. Emory, *Science.* 275, 1102–1106 (1997).
- [32] F. J. Garcia-Vidal and J. B. Pendry, *Phys. Rev. Lett.* 77, 1163–1166 (1996).
- [33] F. J. Garcia-Vidal, J. M. Pitarke and J. B. Pendry, *Phys. Rev. B* 58,6783–6786 (1998).
- [34] J. E. Sipe and R. W. Boyd, *Phys. Rev. A* 46, 1614-1629 (1992).
- [35] M. I. Stockman, K. B. Kurlayev, and T. F. George, *Phys. Rev. B.* 60, 17071-17083 (1999).
- [36] D. D. Smith, G. Fischer, R. W. Boyd, and D. A. Gregory, *J. Opt. Soc. Am. B.* 14, 1625-1631 (1997).
- [37] A. E. Neeves and M. H. Birnboim, *J. Opt. Soc. Am. B* 6, 787-796 (1989).
- [38] T. Okamoto, I. Yamaguchi and T. Kobayashi, *Opt. Lett.* 25, 372 (2000).
- [39] A. D. McFarland and R. P. Van Duyne, *Nano Lett.* 3, 1057 (2003).
- [40] J. J. Mock, D. R. Smith, and S. Schultz, *Nano Lett.* 3, 485 (2003).
- [41] G. Raschke, S. Kowarik, T. Franzl, C. Sonnichsen, T. A. Klar, and J. Feldmann, *Nano Lett.* 3, 935 (2003).
- [42] S. Enoch, R. Quidant, and G. Badenes, *Opt. Express.* 12, 3422-3427 (2004).



# Chapitre I



# Chapitre I : Méthode de modélisation FDTD

## I-1) Introduction :

La modélisation des propriétés électromagnétiques de la matière est parfois un problème délicat quand il s'agit de structures complexes composées par exemple de plusieurs types de matériaux ayant des indices optiques différents. En effet dans ces cas de figure, la résolution des équations de Maxwell décrivant la dynamique des ondes électromagnétiques dans ces systèmes peut s'avérer extrêmement difficile voir impossible. Le recours à des méthodes de calcul numérique est alors nécessaire. Parmi les diverses méthodes existantes il y a la méthode des différences finies (FDTD) [1, 2] (acronyme de finite-difference time-domain). Il s'agit d'une méthode de résolution directe des équations de Maxwell dans le domaine temporel.

L'intérêt de la méthode réside dans la simplicité de son principe de fonctionnement ainsi que dans le nombre important d'informations électromagnétiques qu'on peut tirer du système modélisé. Le cœur de la méthode consiste dans un premier temps à discrétiser la géométrie de la structure étudiée via un maillage régulier et fin, et ensuite à approximer les équations aux dérivées partielles des champs par des différences finies. Les composantes des champs sont ainsi calculées en tout point de la structure et à tout instant. Ceci permet d'appréhender visuellement la propagation d'une onde électromagnétique dans le milieu étudié, et donc la possibilité d'une véritable expérimentation numérique ainsi qu'une compréhension intuitive du phénomène de propagation des ondes. Par ailleurs on peut également obtenir la réponse fréquentielle du système à un pulse se propageant dans celui-ci grâce à la méthode de la transformée de Fourier, et ce en tout point de la structure. On peut aussi tracer des cartographies de champs harmoniques. En opérant quelques modifications au niveau du cœur de l'algorithme il est possible de modéliser du gain, absorption, dispersion et effets non linéaires.

Il faut néanmoins noter que la méthode FDTD a quelques inconvénients, à savoir que lorsque l'on veut modéliser des structures trop complexes (3D par exemple), le calcul requiert d'importantes ressources informatiques. Ajouté à cela le temps de calcul qui devient assez grand pour de telles structures, de quelques jours à quelques semaines voire plus, selon la taille, la complexité des structures, et le degré de finesse du maillage appliqué. Sans oublier

que dans de tels cas de figure la convergence des calculs n'est pas toujours assurée à cause des erreurs numériques inhérentes à la méthode (voir la suite).

## I-2) Illustration de la méthode :

### I-2.1) Equations de Maxwell :

Les équations de Maxwell régissant la dynamique des ondes électromagnétiques dans un milieu matériel s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overrightarrow{rot}(\vec{E}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.1) \\ \overrightarrow{div}(\vec{E}) = \rho/\epsilon \quad (1.2) \\ \overrightarrow{rot}(\vec{B}) = \mu \vec{J} + \mu \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.3) \\ \overrightarrow{div}(\vec{B}) = 0 \quad (1.4) \end{array} \right.$$

Où  $\vec{E}$  est le champ électrique,  $\epsilon$  et  $\mu$  sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du milieu considéré,  $\rho$  la densité de charges électriques,  $\vec{J}$  la densité de courant, et  $\vec{B}$  est le champ d'induction magnétique.

Afin d'illustrer la méthode et par souci de simplicité on se limitera à un milieu linéaire, isotrope, sans charges ( $\rho = 0$ ), sans densité de courant ( $\vec{J} = 0$ ), non dispersif et transparent. On s'intéressera également uniquement à champ ayant la polarisation TM (la polarisation TE

donnant des résultats similaires), et à un milieu 2D. Dans ces conditions les équations des champs s'écrivent dans un repère cartésien  $(x, y, z)$  :

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (1.7)$$

L'évolution temporelle du champ magnétique est régie par la variation spatiale des composantes du champ électrique, et la variation temporelle de celles-ci est régie par la variation spatiale du champ magnétique.

### I-2.2) Discrétisation des équations :

La résolution de ces équations repose sur une discrétisation spatiale et temporelle aux différences finies. L'espace 2D modélisé est ainsi discrétisé par un maillage fin et régulier (dans la plupart des cas), de pas  $\Delta x = \Delta y$  (voir figure 1). L'espace temporel est aussi discrétisé avec un pas temporel  $\Delta t$ . Les valeurs des pas spatiaux dépendent évidemment des dimensions de la structure. La valeur du pas temporel, dépend quand à elle des échelles de temps des phénomènes physiques mises en jeu. Chaque dérivée partielle (spatiale où temporelle) des équations des champs est remplacée par un développement de Taylor au second ordre. Ainsi la dérivée temporelle du champ magnétique s'écrit au point  $M(x=i\Delta x, y=j\Delta x)$ , où  $i$  et  $j$  sont des entiers positifs) et à l'instant  $t=(n+1/2)\Delta t$  ( $n$  est un entier positif) :

$$\frac{\partial H_z(i, j, n + \frac{1}{2})}{\partial t} = \frac{H_z(i, j, n + 1) - H_z(i, j, n)}{\Delta t} + 0([\Delta t]^2) \quad (1.8)$$

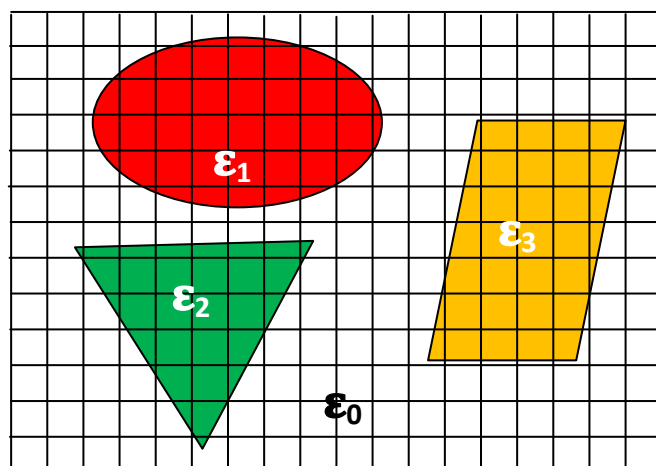


Figure 1 : Discrétisation de la structure à modéliser pour l'application de la méthode FDTD

A noter que si l'on fait le choix de calculer le champ magnétique sur un réseau entier de points  $(i,j)$  à des instants entiers  $(n)$ , les équations (1.6) et (1.7) nous imposent alors de calculer le champ  $E_x$  sur un réseau demi-entier suivant  $y$ , et entier suivant  $x$ , et le champ  $E_y$  sur un réseau demi-entier suivant  $x$ , et entier suivant  $y$  (Figure 2).

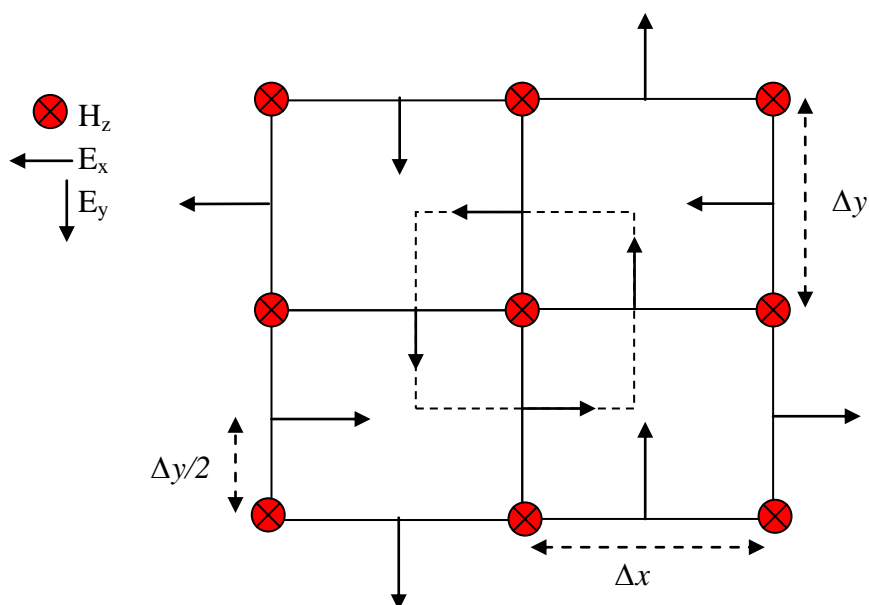


Figure 2 : Position des composantes de champs magnétiques et électriques dans l'espace 2D discrétisé.

Quand au niveau temporel les deux composantes du champ électrique, devront se calculer sur un réseau demi-entier. Les équations (1.6) et (1.7) discrétisées deviennent :

$$\frac{E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) - E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2}\right)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}\right)} \left( \frac{H_z(i, j + 1, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta y} \right) \quad (1.9)$$

$$\frac{E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) - E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n - \frac{1}{2}\right)}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon\left(i + \frac{1}{2}, j\right)} \left( \frac{H_z(i + 1, j, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta x} \right) \quad (1.10)$$

On voit en effet qu'à partir des équations (1.9) et (1.10), le fait que la variation temporelle du champ  $E_x$  soit régie par une variation spatiale du champ  $H_z$  suivant  $y$  et que celui-ci soit calculé sur des points  $(i, j, n)$ , impose alors que  $E_x$  varie entre les instants  $(n-1/2$  et  $n+1/2)$ , et qu'il soit évalué au point  $j+1/2$  suivant  $y$ . Le même raisonnement s'applique pour la composante  $E_y$  du champ électrique. Des équations (1.9) et (1.10), on tire l'évolution temporelle du champ électrique suivant les axes  $x$  et  $y$ , soit :

$$E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) = E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}\right)} \left( \frac{H_z(i, j + 1, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta y} \right) \quad (1.11)$$

$$E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) = E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n - \frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon\left(i + \frac{1}{2}, j\right)} \left( \frac{H_z(i + 1, j, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta x} \right) \quad (1.12)$$

Les équations (1.11) et (1.12), donnent les composantes du champ électrique à un instant donné en fonction de l'instant précédent. L'équation donnant le champ magnétique à un instant  $n+1$  en fonction de l'instant précédent déduite de la discrétisation de (1.5) est donnée par :

$$H_z(i, j, n + 1) = H_z(i, j, n) + \left[ \frac{\Delta t}{\mu(i, j)} \left( \frac{E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) - E_x\left(i, j - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)}{\Delta y} - \frac{E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) - E_y\left(i - \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right)}{\Delta x} \right) \right] \quad (1.13)$$

Ainsi sur une boucle temporelle on peut en utilisant les équations (1.11), (1.12) et (1.13) incrémenter alternativement les champs  $E$  et  $H$  sur tout le domaine de calcul. L'incrément étant bien entendu le pas temporel. La connaissance de la carte du champ magnétique à l'instant  $t=n\Delta t$ , permet de calculer les composantes du champ électrique en tout point  $(i, j)$  au temps  $t=(n+1/2)\Delta t$ . Cette nouvelle carte champ permet à son tour de calculer le champ  $H_z$  à

l'instant  $(n+1) \Delta t$ . L'évolution temporelle de ces cartes de champ décrit alors la propagation d'une onde électromagnétique dans le milieu modélisé.

Cette méthode de discrétisation, inspirée de l'algorithme de Yee [3], développée vers les années 70 est intrinsèquement stable à condition que le pas temporel  $\Delta t$  vérifie une relation mathématique le liant aux pas spatiaux [1]. Cette relation dite de stabilité numérique s'écrit :

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \left( \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} \right)}, \text{ où } c \text{ est la vitesse de la lumière dans le vide} \quad (1.14)$$

Cette relation se simplifie à (dans notre cas où  $\Delta x = \Delta y = \Delta$ ) :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{c\sqrt{2}} \quad (1.15)$$

L'équation (1.15) peut être comprise intuitivement dans la mesure où il faut que le pas temporel soit suffisamment fin, afin de pouvoir décrire la propagation de la lumière d'un point  $M(i, j)$  au point le plus proche (suivant  $x$  par exemple)  $M'(i+1, j)$ . Les points  $M$  et  $M'$  étant distants optiquement de  $\Delta$ .

### I-3) Conditions aux limites :

#### I-3.1) Méthode des PML (Perfect Matching Layer)

Il est évident que les domaines spatiaux de calculs numériques doivent être restreints à cause du fait que les ressources informatiques sont finies. De ce fait, il est primordial de mettre en place des conditions aux limites adaptées, afin d'éviter les réflexions parasites aux bords de la structure modélisée. En effet, celles-ci perturbent le système à tel point, que le signal physique réel devienne complètement pollué, c'est-à-dire qu'on ne sait plus séparer ce qui est physiquement réel et ce qui relève des phénomènes parasites, purement numériques. L'une des méthodes connue comme étant l'une des plus performantes est la méthode des PML (acronyme de Perfect Matching Layer) [4, 5]. Celle-ci consiste à entourer le système de couches parfaitement absorbantes du même matériau que celui de sortie du système modélisé. Ces couches ont donc le même indice optique que le matériau de sortie, mais néanmoins elles

présentent une conductivité électrique ( $\sigma \neq 0$ ) et magnétique non nulles ( $\sigma^* \neq 0$ ). De plus elle vérifie la condition d'adaptation d'impédance d'une onde à l'interface entre deux milieux ayant le même indice mais, dont l'un est absorbant. Cette condition se traduit mathématiquement par :

$$\frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\sigma^*}{\mu} \quad (1.16)$$

$\varepsilon$  et  $\mu$ , sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du matériau. Ainsi les couches PML permettent d'atténuer l'onde incidente et éviter les réflexions parasites. L'épaisseur d'absorption doit être choisie de manière à absorber totalement l'onde incidente afin d'éliminer des réflexions résiduelles aux bords des PML. Toutefois cette méthode d'adaptation d'impédance n'est valable qu'en incidence normale (puisque l'on définit des conductivités électriques et magnétiques uni-axiales), ce qui veut dire qu'en incidence oblique des réflexions apparaissent à l'interface entre les deux milieux. Afin de pallier ce problème on utilise l'astuce développée par Bérenger vers les années 90 [6]. La méthode de Bérenger consiste à rendre le milieu absorbant et artificiellement biaxes. L'absorption est non nulle en incidence normale à l'interface (Figure 3), et elle est nulle parallèlement à celle-ci, de plus l'onde transmise est fictivement décomposée en deux ondes :

- (i) Une onde en incidence normale qui voit son énergie absorbée à cause des conductivités électriques et magnétiques non nulles (vérifie la condition (1.16)).
- (ii) Une onde en incidence rasante à l'interface qui ne rencontre aucune absorption et qui voit le même indice. Cette onde ne subit de fait aucune réflexion.

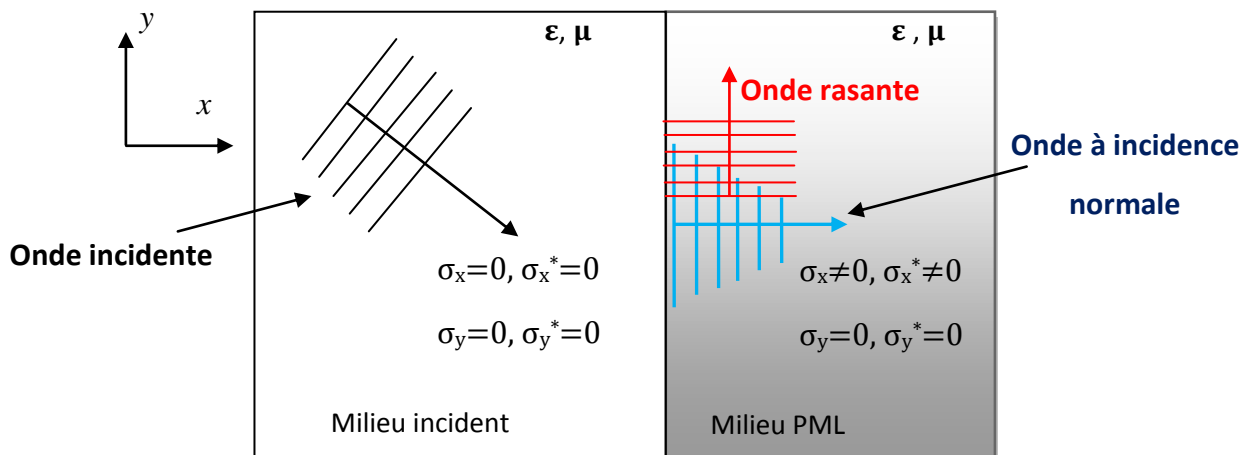


Figure 3 : Principe de fonctionnement d'une PML suivant la méthode de Bérenger.

### I-3.2) Equations d'évolution dans un milieu PML

L'application de la méthode de Bérenger dans notre cas (polarisation TM), se traduit mathématiquement par une séparation du champ magnétique en deux composantes  $H_{zx}$  et  $H_{zy}$  suivant respectivement l'axe des 'x' et l'axe des 'y'. En effet, l'équation donnant l'évolution temporelle du champ magnétique dépend des deux composantes du champ électrique à la fois ; d'où la possibilité de séparer l'équation (1.5) en deux équations décrivant l'évolution de  $H_{zx}$  suivant 'x' (onde à incidence normale) et  $H_{zy}$  suivant 'y' (onde rasante). Si l'on entoure toute la structure étudiée de couches PML (voir Fig. 4) (ce qui se traduit par  $\sigma_x \neq 0$ ,  $\sigma_y \neq 0$ ,  $\sigma_x^* \neq 0$ ,  $\sigma_y^* \neq 0$ ), les équations (1.5), (1.6) et (1.7) deviennent respectivement :

$$\mu \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x^* H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \quad , \quad \mu \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{zy} = \frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (1.17) \text{ et } (1.18) \text{ (resp)}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_x E_x = \frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial y} \quad (1.19)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_y E_y = -\frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial x} \quad (1.20)$$

La discrétisation de ces équations selon la méthode de Yee, explicitée plus haut permet d'obtenir l'évolution temporelle des champs en tenant compte des conditions d'absorption PML, ainsi et après calcul l'équation (1.19) devient :

$$\begin{aligned} E_x(i, j + 1/2, n + 1/2) = & E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n - 1/2\right) - \frac{\Delta t \sigma_x(i, j + \frac{1}{2})}{\varepsilon(i, j + 1/2)} E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) + \\ & \frac{\Delta t}{\Delta y \varepsilon(i, j + 1/2)} [ H_{zx}(i, j + 1, n) - H_{zx}(i, j, n) + \\ & H_{zy}(i, j + 1, n) - H_{zy}(i, j, n) ] \end{aligned} \quad (1.21)$$

On peut noter que le terme du champ  $E_x$  multiplié par le facteur  $\sigma_x$  est calculé à l'instant 'n' au lieu de 'n±1/2', ceci est dû au terme de la dérivée du champ  $E_x$  entre les instants n-1/2 et n+1/2. En faisant l'approximation que  $E_x(i, j+1/2, n-1/2) \approx E_x(i, j+1/2, n)$ , en tenant compte du fait que  $\Delta t \times \sigma_x(i, j) / \varepsilon(i, j) \ll 1$  (à cause de la très faible valeur de  $\Delta t$ ), et en utilisant le développement au premier ordre de l'exponentielle de  $-\sigma_x(i, j+1/2) \times \Delta t / \varepsilon(i, j+1/2)$ , à savoir que  $\exp(-\sigma_x(i, j+1/2) \times \Delta t / \varepsilon(i, j+1/2)) \approx 1 - \sigma_x(i, j+1/2) \times \Delta t / \varepsilon(i, j+1/2)$  on obtient :

$$E_x(i, j + 1/2, n + 1/2) = e^{-\frac{\Delta t \sigma_x(i, j + \frac{1}{2})}{\varepsilon(i, j + 1/2)}} E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n - 1/2\right) + \frac{\Delta t}{\Delta y \varepsilon(i, j + 1/2)} [H_{zx}(i, j + 1, n) - H_{zx}(i, j, n) + H_{zy}(i, j + 1, n) - H_{zy}(i, j, n)] \quad (1.22)$$

Le même raisonnement permet d'obtenir l'équation du champ  $E_y$ , soit :

$$E_y(i + 1/2, j, n + 1/2) = e^{-\frac{\Delta t \sigma_y(i + 1/2, j)}{\varepsilon(i + 1/2, j)}} E_y(i + 1/2, j, n - 1/2) + \frac{\Delta t}{\Delta x \varepsilon(i + 1/2, j)} [H_{zx}(i + 1, j, n) - H_{zx}(i, j, n) + H_{zy}(i + 1, j, n) - H_{zy}(i, j, n)] \quad (1.23)$$

Les équations des composantes du champ magnétique s'obtiennent également de la même manière soit après discrétisation de (1.17) et (1.18) :

$$H_{zy}(i, j, n + 1) = e^{-\frac{\Delta t \sigma_y^*(i, j)}{\mu(i, j)}} H_{zy}(i, j, n) + \frac{\Delta t}{\Delta y \mu(i, j)} [E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) - E_x\left(i, j - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)] \quad (1.24)$$

$$H_{zx}(i, j, n + 1) = e^{-\frac{\Delta t \sigma_x^*(i, j)}{\mu(i, j)}} H_{zx}(i, j, n) - \frac{\Delta t}{\Delta x \mu(i, j)} [E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) - E_y\left(i - \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right)] \quad (1.25)$$

Ces équations valables dans un milieu PML sont aussi valables dans un milieu sans absorption, il suffit en effet d'une part d'annuler les conductivités électriques et magnétiques et d'autre part d'ajouter  $H_{zx}$  et  $H_{zy}$  pour retrouver les équations (1.11), (1.12) et (1.13).

Lors du passage de l'onde du milieu modélisé à un milieu PML, il peut toutefois subsister un résidu de réflexion, causé par l'absorption brutale de l'onde. De ce fait il est usuel d'opérer à une absorption progressive de l'onde en loi de puissance, ce qui se traduit mathématiquement par l'équation suivante :

$$\sigma(\rho) = \sigma_{max} \left(\frac{\rho}{l}\right)^n$$

Où  $\sigma_{max}$  : est la conductivité maximale.

$\rho$  : La profondeur dans la couche PML.

$l$  : La profondeur totale de couche PML.

$n$  : Ordre de croissance de la conductivité.

Cet ordre est souvent choisi entre 2 et 5 (dans notre programme il est fixé à 3).

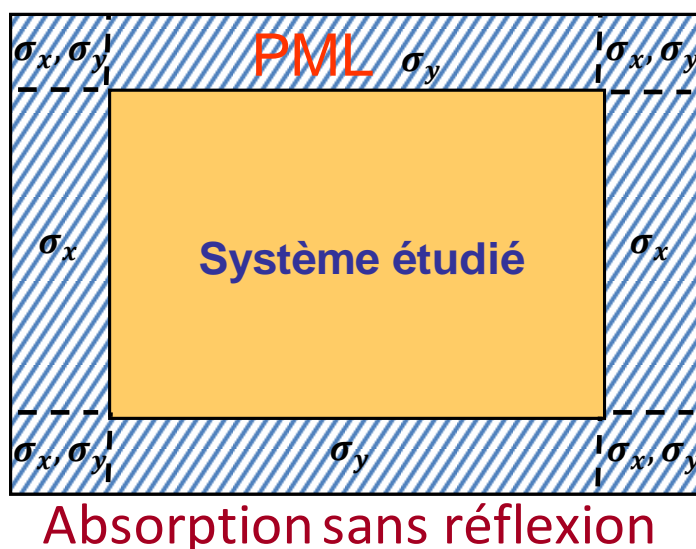


Figure 4 : illustration de l'utilisation des couches PML dans le cas 2D.

## I-4-Intégration du modèle de Drude dans la méthode FDTD :

### I-4.1) Modèle de Drude :

Le modèle de Drude a été introduit par le physicien Paul Drude en l'année 1900 afin de pouvoir interpréter les propriétés physiques (optiques, électriques et thermiques) des métaux [7, 8]. Ce modèle est une adaptation de la théorie cinétique des gaz aux électrons des métaux. Les électrons des couches externes des atomes (électrons de la bande de conduction) sont considérés comme des particules ayant une masse  $m$ , sans interaction entre eux et très faiblement liés aux atomes des matériaux. Ainsi le métal peut être décrit comme un réseau d'ions cristallin baignés d'un gaz d'électrons libres. Néanmoins du fait de leurs liaisons même faibles avec les ions du métal les électrons sont soumis à des chocs avec une certaine

fréquence  $1/\tau$ , où  $\tau$  est le temps moyen entre deux chocs successifs (temps de relaxation). Ces chocs sont dus aux phonons (vibrations collectives des ions quantifiées dépendant de la température) d'une part, et des défauts qui peuvent être présents dans la structure d'autre part (atomes étrangers, migrations d'atomes etc....).

Les électrons dans ce modèle sont dotés d'une masse ' $m^*$ ' effective, du fait des différentes forces présentes dans le métal (forces électromagnétiques exercées par les noyaux, centres diffusifs...), et d'une charge électrique  $-e$ . Etant donné que la masse effective des électrons tient compte des forces internes auxquelles ceux-ci sont soumis, on peut appliquer le principe fondamental de la dynamique dans un repère  $(x, y, z)$  lié au métal à un électron libre (animé d'une vitesse  $\vec{v}$ ) dans celui-ci, soit :

$$\vec{F} = m^* \frac{d\vec{r}^2}{dt^2}, \vec{r} \text{ la position de l'électron dans le repère lié au métal} \quad (1.26)$$

Si l'on soumet le métal à une excitation électromagnétique, les forces auxquelles sont soumis les électrons dans l'approximation de la masse effective sont :

$$\vec{F}_e = -e \times \vec{E}, \text{ la force due au champ électrique}$$

$$\vec{F}_m = -e \times (\vec{v} \wedge \vec{B}), \text{ la force due au champ magnétique}$$

$$\vec{F}_f = -m^* \times \Gamma \times \frac{d\vec{r}}{dt}, \text{ la force de frottement due aux chocs subis par l'électron}$$

L'équation du mouvement s'écrit donc:

$$m^* \frac{d\vec{r}^2}{dt^2} + m^* \Gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + e \times (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) = 0, \quad (1.27)$$

Où  $\Gamma = \frac{1}{\tau}$  est le terme d'amortissement. On peut simplifier cette équation, si l'on admet que la force magnétique est négligeable devant la force électrique, dans le cas où les électrons libres du métal sont non relativistes, c'est-à-dire quand  $v \ll c$ . En effet, le rapport de la force magnétique et la force électrique s'écrit :

$$\left| \frac{\vec{F}_m}{\vec{F}_e} \right| = \left| \frac{\vec{v} \wedge \vec{B}}{\vec{E}} \right|$$

Pour évaluer ce rapport, on considère une onde lumineuse incidente sur le métal suivant 'y', tel que le champ électrique associé à l'onde soit polarisé parallèlement à 'x', c'est-à-dire que  $\vec{E} = E_0 \cdot \exp[i(\omega t - ky)] \cdot \vec{u}_x$ , où  $\vec{k}$  (parallèle au vecteur unitaire suivant 'y',  $\vec{u}_y$ ) est le vecteur

d'onde,  $\omega$  la fréquence de l'onde et  $\vec{u}_x$  est le vecteur unitaire suivant 'x'. Dans ce cas, l'expression du champ d'induction magnétique se déduit de (1.1), soit  $\vec{B} = i \cdot \left(\frac{k}{\omega}\right) \cdot E_0 \cdot \exp[i(\omega t - ky)] \vec{u}_z$  (où  $\vec{u}_z$  est le vecteur unitaire suivant 'z'). D'autre part, si l'on suppose que le mouvement de l'électron est dirigé suivant 'y', sa vitesse est telle que  $\vec{v} = v_y \cdot \vec{u}_y$ . Ainsi, le rapport des forces (magnétiques et électriques) devient :

$$\left| \frac{\vec{F}_m}{\vec{F}_e} \right| = \left| \frac{v_y \cdot \vec{u}_y \wedge i \cdot \left(\frac{k}{\omega}\right) \cdot E_0 \cdot \exp[i(\omega t - ky)] \cdot \vec{u}_z}{E_0 \cdot \exp[i(\omega t - ky)] \cdot \vec{u}_x} \right| = \frac{v_y}{c}$$

Où  $c = \frac{\omega}{k}$  est la vitesse de phase de l'onde lumineuse dans le métal. Par conséquent, dans l'approximation non relativiste ( $v_y \ll c$ ), on peut négliger la force magnétique devant la force électrique. De ce fait, l'équation (1.27) se réduit à celle d'un oscillateur harmonique contenant un terme de forçage électrique. Ainsi, on peut chercher une solution harmonique de la forme :

$$\vec{x} = \vec{x}_0 \exp(i\omega t), \text{ le champ électrique étant dirigé suivant 'x'}$$

Tout calcul fait, on obtient pour  $x$  :

$$\vec{x}(\omega) = \frac{e}{m^*} \frac{\vec{E}}{\omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (1.28)$$

Par ailleurs si la densité volumique d'électrons libres est  $n_e$  et sachant que la polarisation s'écrit:

$$\vec{P} = n_e \vec{p}_0 \text{ où } \vec{p}_0 \text{ est le moment dipolaire de l'électron } (\vec{p}_0 = -e\vec{x})$$

On obtient pour  $\vec{P}$  :

$$\vec{P}(\omega) = -n_e \frac{e^2}{m^*} \frac{\vec{E}}{\omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (1.29)$$

D'un autre côté on a :

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E} \text{ (où } \chi \text{ est la susceptibilité électrique, et } \varepsilon_0 \text{ la permittivité du vide)} \quad (1.30)$$

Et la constante diélectrique du milieu est donnée par :

$$\varepsilon = 1 + \chi \quad (1.31)$$

Ainsi on aboutit à l'équation suivante pour  $\varepsilon$  :

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (1.32)$$

où  $\omega_p^2 = n_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 m^*}$  est la fréquence de plasma. Celle-ci correspond aux oscillations collectives libres du gaz d'électrons dans le métal. En réalité, la susceptibilité électrique du milieu se compose d'une contribution due aux transitions inter-bandes plus une contribution due aux transitions intra-bandes, soit :

$$\varepsilon = 1 + \chi_{intra-bande} + \chi_{inter-bandes} \quad (1.33)$$

Avec,  $1 + \chi_{intra-bandes} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma}$  (contribution des électrons intra-bande, qu'on vient de calculer), et  $\chi_{inter-bandes} = \varepsilon_{ib} - 1$  (contribution inter-bandes). On obtient finalement la formule finale pour la constante diélectrique issue du modèle de Drude, en tenant compte du fait que  $\varepsilon_{ib}$  est souvent introduite de manière phénoménologique (comparaison avec l'expérience), et qu'elle est confondue avec  $\varepsilon$  aux fréquences infinies ( $\varepsilon(\omega=\infty) = \varepsilon_\infty \equiv \varepsilon_{ib}$ ) soit :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (1.34)$$

Si l'on reprend l'équation (1.30), on obtient en utilisant la formule de Drude :

$$\vec{P}(\omega) = \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 + i\omega\Gamma} \vec{E}(\omega) \quad (1.35)$$

La transformée de Fourier appliquée à l'équation (1.35), permet alors d'obtenir une équation dynamique décrivant l'interaction photon-électrons en se basant sur le modèle de Drude soit :

$$\frac{d^2 \vec{P}(t)}{dt^2} + \Gamma \frac{d\vec{P}(t)}{dt} = \omega_p^2 \vec{E}(t) \quad (1.36)$$

Où  $\vec{P}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{P}(\omega) e^{+i\omega t} d\omega$ . Par ailleurs, en posant :

$$\vec{Q}(t) = \frac{d\vec{P}}{dt}$$

L'équation (1.36) devient :

$$\frac{d\vec{Q}(t)}{dt} + \Gamma \vec{Q}(t) = \omega_p^2 \vec{E}(t) \quad (1.37)$$

#### I.4.2) Equations de Drude dans les équations de Maxwell :

Dans ce paragraphe (ainsi que dans le suivant) on considère une densité de courant non nulle, ayant deux composantes suivant 'x' et 'y'. La raison en est que dans nos codes de simulations on utilise une source de courant fini dans l'espace et dans le temps comme source d'excitation de pulses électromagnétiques (voir chapitres suivants). L'équation (1.3) de Maxwell en utilisant le champ magnétique ( $\vec{H}$  au lieu de l'induction magnétique  $\vec{B} = \mu \vec{H}$ ) s'écrit alors :

$$\overrightarrow{rot}(\vec{H}) = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J} + \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \text{ avec } \vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 (1 + \chi) \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E} + \varepsilon_0 \vec{P}$$

Ainsi l'équation d'évolution du champ électrique s'écrit :

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \overrightarrow{rot}(\vec{H}) - \frac{1}{\varepsilon_\infty} \vec{Q}(t) - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \vec{J} \quad (1.38)$$

Soit pour les deux composantes du champ électrique :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\varepsilon_\infty} Q_x - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} J_x \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{1}{\varepsilon_\infty} Q_y - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} J_y \quad (1.40)$$

L'évolution temporelle des composantes de  $\vec{Q}(t)$  sont données à partir de (1.37) par :

$$\frac{\partial Q_x}{\partial t} = \omega_p^2 E_x - \Gamma Q_x \quad (1.41)$$

$$\frac{\partial Q_y}{\partial t} = \omega_p^2 E_y - \Gamma Q_y \quad (1.42)$$

### I-4.3) Discrétisations des équations de Drude-Maxwell

L'équation d'évolution du champ magnétique est bien entendue inchangée puisque  $Q(t)$  n'y intervient pas. Celle ci est donc donnée par l'équation (1.13) :

$$H_z(i, j, n + 1) = H_z(i, j, n) + \left[ \frac{\Delta t}{\mu(i, j)} \frac{E_x(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}) - E_x(i, j - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2})}{\Delta y} + \frac{E_y(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}) - E_y(i - \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2})}{\Delta x} \right] \quad (1.43) \equiv (1.13)$$

En utilisant les mêmes principes de discrétisation explicités plus haut les équations (1.39) et (1.40) deviennent respectivement :

$$E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) = E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i, j + \frac{1}{2})} \left[ \left( \frac{H_z(i, j + 1, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta y} \right) - j_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) - \varepsilon_0 Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) \right] \quad (1.44)$$

$$E_y\left(i + 1/2, j, n + \frac{1}{2}\right) = E_y\left(i + 1/2, j, n - \frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i + 1/2, j)} \left[ \left( \frac{H_z(i + 1, j, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta x} \right) - j_y(i + 1/2, j, n) - \varepsilon_0 Q_y(i + 1/2, j, n) \right] \quad (1.45)$$

Les équations d'évolutions du champ  $\vec{Q}(t)$  discrétisées sont obtenues en tenant compte du fait que les composantes du champ électrique sont calculées suivant le schéma de Yee à des instants demi-entiers, ce qui impose le calcul de  $Q_x$  et de  $Q_y$  à des instants entiers (à cause des équations (1.41) et (1.42)). Par ailleurs, ces mêmes équations imposent le calcul de  $Q_x$  en des points entiers suivant l'axe des 'x', et demi-entiers suivant l'axe des 'y', inversement  $Q_y$  est calculé sur des sites demi-entiers suivant 'x', et entiers suivant 'y'.

Ainsi on obtient pour  $Q_x$  :

$$Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + 1\right) = Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) - \Gamma\Delta t Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) + \Delta t \omega_p^2 E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)$$

En faisant l'approximation que  $Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) \approx Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)$  puisque  $(n+1/2)\Delta t - n\Delta t = \Delta t/2 \ll 1$  on obtient :

$$Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + 1\right) = Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) - \Gamma\Delta t Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) + \Delta t \omega_p^2 E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)$$

Par ailleurs du fait que  $\Gamma\Delta t \ll 1$ , on peut faire l'approximation suivante :

$$1 - \Gamma\Delta t \approx e^{-\Gamma\Delta t}$$

Ainsi l'équation finale s'écrit :

$$Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + 1\right) = e^{-\Gamma\Delta t} Q_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) + \Delta t \omega_p^2 E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) \quad (1.46)$$

Le même raisonnement permet d'obtenir l'équation dynamique discrétisée de  $Q_y$  :

$$Q_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n + 1\right) = e^{-\Gamma\Delta t} Q_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n\right) + \Delta t \omega_p^2 E_x\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) \quad (1.47)$$

Les équations (1.43), (1.44), (1.45), (1.46) et (1.47) permettent ainsi de décrire la dynamique d'une onde électromagnétique couplée à un gaz d'électrons dans un métal dans le cadre du modèle de Drude et en se basant sur la méthode FDTD.

## I-5) Intégration du modèle de Lorentz-Drude dans la méthode FDTD

### I.5.1) Modèle de Lorentz-Drude :

Le modèle de Drude explicité plus haut permet d'expliquer les propriétés optiques, thermiques, et électriques des métaux rencontrés par l'expérience, néanmoins ce modèle basé

essentiellement sur les électrons quasi libres d'un métal cesse d'être valable dans le domaine des hautes fréquences. En effet, lorsqu'on s'approche des fréquences de transitions inter-bandes, les électrons de cœur proches des noyaux atomiques transitent vers les bandes de conduction et contribuent ainsi à la réponse à une excitation électromagnétique extérieure. La prise en compte de la polarisabilité de ces électrons devient alors nécessaire afin de reproduire les données expérimentales. Le modèle le plus performant permettant de prendre en compte la contribution des électrons liés aux noyaux est celui de Lorentz-Drude [9, 10]. Celui-ci consiste à ajouter à la polarisation des électrons quasi-libres celle des électrons de cœur en approximant le mouvement de ceux-ci par rapport aux noyaux à un mouvement d'oscillateurs harmoniques. On peut montrer dans ce cas que la constante diélectrique comprenant les deux contributions s'écrit comme suit :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{m=0}^M \frac{G_m \Omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_m} \quad (1.48)$$

Où  $G_m$  est le poids (pondération) affecté à l'oscillateur 'm' dont la fréquence de transition inter-bande est  $\omega_m$ , et le coefficient de frottement est  $\Gamma_m$ . Le paramètre  $\Omega_m$  est égal à  $\sqrt{G_m}\omega_p$  et enfin le nombre entier  $M$  est le nombre total d'oscillateurs considéré. Dans le cadre de ce modèle, la relation entre le champ électrique et le champ de déplacement devient :

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E}(\omega) = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E}(\omega) + \varepsilon_0 \vec{P}_t(\omega) \text{ où } \vec{P}_t(\omega) = \sum_{m=0}^M \vec{P}_m(\omega) \quad (1.49)$$

$\vec{P}_t(\omega)$  est la polarisation totale, elle se compose de la polarisation due à la contribution des électrons de conduction et de la polarisation des électrons de cœur (dont le mouvement est approximé à celui d'oscillateurs harmoniques).

Nous allons expliciter l'équation dynamique reliant la polarisation d'un oscillateur 'm' et le champ électrique de l'onde interagissant avec le métal. En partant des relations (1.49) et (1.48), on trouve :

$$\vec{P}_m(\omega) = \frac{G_m \Omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_m} \vec{E}(\omega)$$

La transformée de Fourier de cette équation donne :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\omega_m^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_m) \vec{P}_m(\omega) e^{-i\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} G_m \Omega_m^2 \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

Soit en tenant compte du fait que  $\vec{P}_m(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{P}_m(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$  :

$$\omega_m^2 \vec{P}_m(t) + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{P}_m(t) + \Gamma_m \frac{\partial \vec{P}_m}{\partial t} = G_m \Omega_m^2 \vec{E}(t) \quad (1.50)$$

L'équation de Maxwell relative à l'évolution temporelle du champ électrique s'écrit dans le cadre du modèle de Lorentz-Drude :

$$\text{rot}(\vec{H}) = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \varepsilon_0 \sum_{m=0}^M \frac{\partial \vec{P}_m}{\partial t} + \vec{J} \quad (1.51)$$

Ainsi en posant :

$$\vec{Q}_m(t) = \frac{\partial \vec{P}_m}{\partial t}$$

On obtient les équations de champs de Maxwell-Drude, soit :

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (1.52)$$

Cette équation reste inchangée comme dans le cas du modèle de Lorentz-Drude puisque le champ de polarisation n'y intervient pas.

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\varepsilon_\infty} \sum_{m=0}^M Q_{mx} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} J_x \quad (1.53)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{1}{\varepsilon_\infty} \sum_{m=0}^M Q_{my} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} J_y \quad (1.54)$$

Ces deux équations d'évolution des deux composantes du champ électrique sont développées à partir de l'équation (1.51).

On obtient à partir de (1.50) les équations d'évolution des deux composantes du champ  $Q_m(t)$  pour un oscillateur 'm'.

$$\frac{\partial Q_{mx}}{\partial t} = G_m \Omega_m^2 E_x - \Gamma_m Q_{mx} - \omega_m^2 P_{mx} \quad (1.55)$$

$$\frac{\partial Q_{my}}{\partial t} = G_m \Omega_m^2 E_y - \Gamma_m Q_{my} - \omega_m^2 P_{my} \quad (1.56)$$

Avec :

$$Q_{mx} = \frac{\partial P_{mx}}{\partial t} \text{ et } Q_{my} = \frac{\partial P_{my}}{\partial t} \quad (1.57) \text{ resp } (1.58)$$

## I-5.2) Discrétisations des équations de Maxwell-Lorentz-Drude :

La discrétisation des équations (1.52), (1.53) et (1.54) se fait de la même manière que celle des équations (1.43), (1.44) et (1.45). Cependant pour les équations (1.55), (1.56), (1.57) et (1.58), on doit tenir compte du fait que les composantes  $Q_{mx}$  et  $Q_{my}$  doivent être calculées à des instants entiers puisque les composantes du champ électrique sont calculées à des instants demi-entiers. Au niveau spatial, celles-ci sont calculées suivant le même réseau que  $Q_x$  et  $Q_y$  du modèle de Drude, toujours à cause des équations d'évolutions (comme il a été expliqué dans le paragraphe I-4.3). Ainsi tout calcul fait on obtient pour (1.52), (1.53) et (1.54) respectivement :

$$H_z(i, j, n + 1) = H_z(i, j, n) + \left[ \frac{\Delta t}{\mu(i, j)} \left( \frac{E_x(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}) - E_x(i, j - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2})}{\Delta y} + \frac{E_y(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}) - E_y(i - \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2})}{\Delta x} \right) \right] \quad (1.59) \equiv (1.43)$$

$$E_x\left(i, j + 1/2, n + \frac{1}{2}\right) = E_x\left(i, j + 1/2, n - \frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i, j + 1/2)} \left[ \left( \frac{H_z(i, j + 1, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta y} \right) - j_x\left(i, j + 1/2, n\right) - \varepsilon_0 \sum_{m=0}^M Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) \right] \quad (1.60)$$

$$E_y\left(i + 1/2, j, n + \frac{1}{2}\right) = E_y\left(i + 1/2, j, n - \frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i + 1/2, j)} \left[ \left( \frac{H_z(i + 1, j, n) - H_z(i, j, n)}{\Delta x} \right) - j_y\left(i + 1/2, j, n\right) - \varepsilon_0 \sum_{m=0}^M Q_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n\right) \right] \quad (1.61)$$

Les équations de mouvement discrétisées de  $Q_{mx}$  et  $Q_{my}$  s'écrivent :

$$Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + 1\right) = Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) - \Gamma_m \Delta t Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1 - 1 + \Delta t \Gamma_m}{\Gamma_m} \Delta t [G_m \Omega_m^2 E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) - \omega_m^2 P_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)]$$

En faisant les approximations (faites plus haut) que  $Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) \approx Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)$  et que  $1 - \Gamma_m \Delta t \approx e^{-\Gamma_m \Delta t}$  on aboutit à :

$$Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + 1\right) = e^{-\Gamma_m \Delta t} Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) + \frac{1 - e^{-\Gamma_m \Delta t}}{\Gamma_m} [G_m \Omega_m^2 E_x\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) - \omega_m^2 P_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right)] \quad (1.62)$$

Le même raisonnement permet d'obtenir l'équation de  $Q_{my}$  :

$$Q_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n + 1\right) = e^{-\Gamma_m \Delta t} Q_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n\right) + \frac{1 - e^{-\Gamma_m \Delta t}}{\Gamma_m} [G_m \Omega_m^2 E_y\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) - \omega_m^2 P_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right)] \quad (1.63)$$

Enfin pour calculer l'évolution temporelle de  $Q_{mx}$  et  $Q_{my}$  on a besoin de calculer celles de  $P_{mx}$  et  $P_{my}$ . Celles-ci se calculent respectivement en des points M ( $i, j + 1/2$ ) et M' ( $i + 1/2, j$ ), compte tenu des équations les liant à  $Q_{mx}$  et  $Q_{my}$  soit :

$$P_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}\right) = P_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2}\right) + \Delta t Q_{mx}\left(i, j + \frac{1}{2}, n\right) \quad (1.64)$$

Et :

$$P_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}\right) = P_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n - \frac{1}{2}\right) + \Delta t Q_{my}\left(i + \frac{1}{2}, j, n\right) \quad (1.65)$$

Ainsi les équations (1.59),..., (1.65), provenant du modèle de Lorentz-Drude permettent de construire un algorithme de simulation numérique performant dans le cadre de la méthode FDTD basé sur l'algorithme de Yee.

## I-6) Conclusion

Les algorithmes mis en place dans ce chapitre vont pouvoir nous permettre de décrire la dynamique spatio-temporelle du couplage d'une onde électromagnétique à des structures diélectriques, métalliques ou mixtes. Par exemple, l'interaction d'une onde lumineuse avec les électrons libres d'un métal de Lorentz-Drude ou de Drude est décrite de façon assez précise comme on aura l'occasion de le voir par la suite. En particulier, grâce à ces algorithmes on pourra au delà du fait de décrire le couplage d'une excitation électromagnétique à des structures métalliques de Drude ou Lorentz-Drude (de type guide d'onde métallique où nanoparticules métalliques), déterminer la réponse optique en termes de réflexion, transmission et absorption d'ondes lumineuses interagissant avec ces structures. Ces méthodes permettent également de modéliser des structures très complexes (plusieurs diélectriques et/ou métaux différents), dont l'étude des propriétés optiques de manière analytique peut s'avérer très délicate voire même parfois impossible. Effectivement, les méthodes analytiques de modélisation électromagnétiques macroscopiques de type, théorie de Mie par exemple exigent souvent des géométries à hautes symétries (sphères, cylindres etc..). Ce qui n'est souvent pas le cas des structures réelles simulées pour certaines applications (comme les nano-bio-détecteurs par exemple), et qui ont des géométries très complexes. Par ailleurs, comme on le verra dans le chapitre 4, le modèle de Lorentz-Drude est indispensable pour l'étude de certains métaux dans certaines gammes de fréquences, particulièrement à l'approche de la

résonance plasmon de ces métaux, compte tenu des transitions inter-bandes qui deviennent de plus en plus importantes. En effet, dans le chapitre 4 on montrera que l'on reproduit avec une bonne précision les mesures expérimentales de la constante diélectrique du métal d'Or avec le modèle de Lorentz-Drude dans la gamme du visible, alors qu'avec le modèle de Drude les résultats ne concordent pas bien avec les données de l'expérience. Néanmoins ceci n'est pas vrai pour tous les métaux puisque le modèle de Drude est valable pour simuler le métal d'Argent (bon accord avec les données expérimentales) même dans la gamme de fréquences du visible.

## Bibliographie:

- [1] A. Taflove, Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method; Artech House: Norwood, MA, (1995).
- [2] T. Kashiwa, IEEJ- Transactions on Fundamentals and Materials. 129, 50-53, (2009).
- [3] K. S. Yee, IEEE Trans. Antennas Propagat. 14, 302-307, (1966).
- [4] S. D. Gedney, Antennas and Propagation. IEEE Transactions. 44, 1630–1639, (1996).
- [5] W. C. Chew and W. H. Weedon, Microwave Optical Tech. Letters. 7, 590–604, (1994).
- [6] Berenger, J. Comput. Phys. 114, 185-200, (1994).
- [8] G. Harbeke, “Optical properties of metals”, in Optical Properties of Solids, F. Abelès, ed. North-Holland, Amsterdam, Chap. 3, p. 103, 1972.
- [8] H. Y. Li, S. M. Zhou, J. Li, Y. L. Chen, S. Y. Wang, Z. C. Shen, L. Y. Chen, H. Liu, and X. X. Zhang , Applied Optics. Vol. 40, Issue 34, 6307-6311, 2001.
- [9] C. J. Powell, J. Opt. Soc. Am. 60, 78–93, 1970.
- [10] A. D. Rakic, A. B. Djuristic, J. M. Elazar, M. L. Majewski, J. Appl. Opt. 37, 5271-5283, (1998).

# Chapitre II



## Chapitre II : Modélisation d'un micro-guide photonique couplé à un ou plusieurs micro-résonateurs

### II-1) Introduction :

Les Micro-résonateurs ont récemment suscité un vif intérêt du fait des applications potentielles prometteuses dans le domaine de réalisation de circuits intégrés tout optique [1, 3]. Dans le domaine du traitement du signal, les résonateurs se sont avérés être l'un des moyens les plus polyvalents en vue d'obtenir des fonctions de transferts optiques telles que le filtrage par réjection ou par injection, et le démultiplexage. Dans plusieurs travaux précédents, le résonateur est typiquement constitué par un micro-disque couplé latéralement à deux guides d'onde linéaires et parallèles entre eux. Un large éventail de ces fonctions de transferts a été étudié, tant sur le plan expérimental que théorique, utilisant des dispositifs basés sur les micro-disques, pour la réalisation de futurs canaux incluant des filtres par sélection / par réjection et des démultiplexeurs [4-6] ou commutateurs optiques [7]. Dans la référence [4] par exemple, un micro-résonateur en forme de micro-disque ou micro-anneau, faiblement couplé à un guide droit d'un côté et à un guide courbé de l'autre a été proposé (figure 1). Le micro-disque ou micro-anneau présentant un fort confinement latéral de la lumière, a un diamètre de seulement  $10\mu\text{m}$  avec des pertes radiatives de courbure négligeables. Les applications de filtrage ont également été étudiées dans la littérature pour différents systèmes physiques tels que les fibres optiques à réseaux de Bragg [8], les réseaux résonnants à bande interdite photonique [9] et plus récemment des cristaux photoniques à deux dimensions [10]. Les petits dispositifs permettent l'intégration de ces résonateurs avec d'autres composants dans le but de fabriquer des circuits intégrés photoniques. L'un des enjeux fondamentaux est de réduire les dimensions de ces dispositifs à bases de micro-résonateurs à des échelles submicroniques, afin de réaliser des circuits tout optique hautement intégrés.

Le but de ce chapitre est de discuter, utilisant des simulations numériques, l'efficacité d'un nouveau dispositif de micro-résonateur, constitué par un guide d'onde droit couplé à une cavité rectangulaire disposée symétriquement de chaque côté du guide (figure 2). Une telle cavité s'appelle un 'stub'. En raison de la très petite taille de celui-ci, en comparaison avec les

micro-résonateurs des références données ci-haut, le nouveau dispositif proposé ici pourra ainsi former l'une des briques élémentaires nécessaires à la conception de structures complexes optiques, fortement intégrées. Ceci, aboutira en particulier dans un futur proche au transport de l'information grâce à la lumière au lieu des électrons.

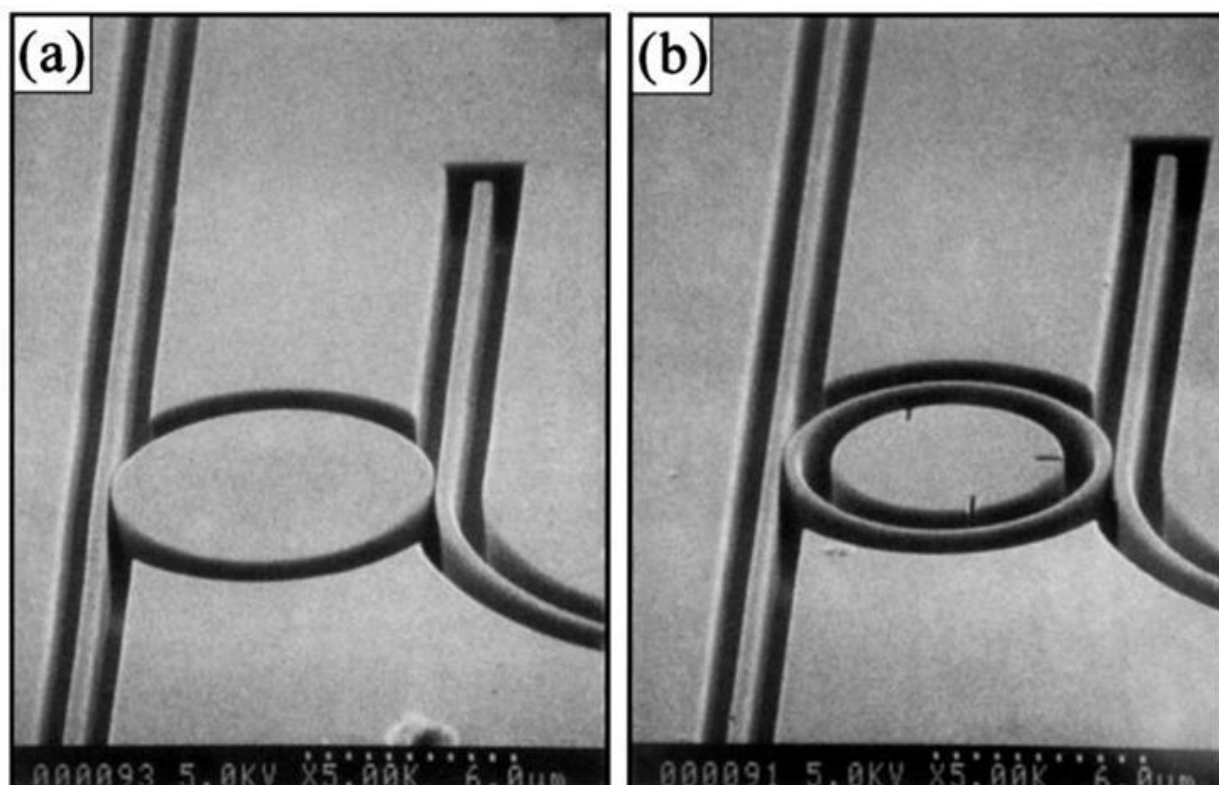


Figure 1 : (a) Image par le microscope électronique à balayage (SEM) d'un micro-disque couplé à un guide droit et un guide courbé. (b) Même structure incluant un micro-anneau au lieu d'un micro-disque.

Nous prouvons qu'en présence d'un stub, le spectre de transmission peut contenir plusieurs zéros de transmissions étroits à condition que le stub soit couvert d'une couche métallique mince évitant l'évasion de la lumière. Puis, on étudiera la possibilité de contrôler la réponse du stub en termes de fréquence en cherchant une formule analytique donnant la fréquence de résonance du stub en fonction de ses différents paramètres géométriques. Enfin on démontrera que la combinaison de plusieurs 'stubs' permettra d'une part, la création d'une bande interdite photonique, et d'autre part de sélectionner une fréquence parmi un signal large bande (filtrage sélectif).

## II-2) Modélisation et Paramètres géométriques :

La structure modélisée est un guide d'ondes bidimensionnel couplé latéralement à un couple de cavités, ayant une forme rectangulaire, identiques et disposées symétriquement de part et d'autre du guide. La géométrie d'une telle structure est montrée par la fig. 2, où  $w$  et  $l$  sont respectivement, la largeur et la longueur du stub. Le milieu dans lequel est baignée la structure est l'air. Le guide d'ondes et le stub sont faits du même matériau, dont l'indice de réfraction  $n=3.2429$  est proche de l'indice de matériaux semi-conducteurs, tels que : InP ou InGaAsP [11]. Le fort contraste d'indice optique entre le matériau constituant le guide d'ondes et le milieu environnant assure un bon confinement de la lumière dans le guide. L'onde incidente, créée à la gauche de la figure, est adaptée au guide d'ondes par un cône en forme d'entonnoir situé à l'entrée. Celui-ci permet de réduire les réflexions de l'onde incidente au niveau des recoins situés à l'entrée du guide.

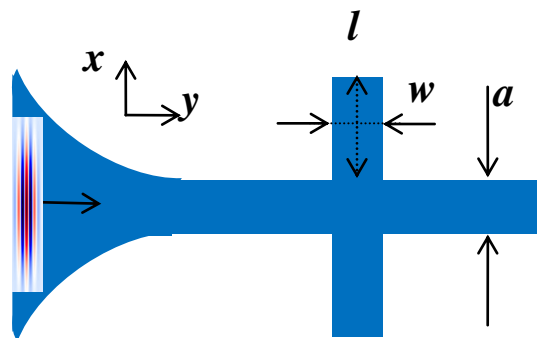


Figure 2 : Schéma d'un guide d'onde droit couplé à un couple identique de cavités rectangulaires placées symétriquement de chaque côté du guide.

Les calculs numériques sont réalisés grâce à la méthode FDTD (détaillée au chapitre 1) dans une boîte bidimensionnelle (2-D) (le long des axes 'x' et 'y'). Celle-ci est entourée par des couches PML, entourant la boîte. La structure est infinie le long de la direction 'z'. Les pas de discrétisation de l'espace suivant les deux directions 'x' et 'y' sont égaux à  $\Delta x = a/30 = \Delta y$ , où  $a$  est la largeur du guide d'ondes. La largeur et la longueur de la boîte sont respectivement  $w=7a$  et  $l=25a$ . Les équations du mouvement sont résolues avec un pas temporel égal à  $\Delta t = \Delta x/4$  et un nombre total de pas égal à  $2^{19}$  ou  $2^{20}$ , selon la taille de la structure, qui est nécessaire pour une bonne convergence du calcul numérique.

L'impulsion incidente ayant la polarisation TM est produite à l'extrémité gauche du guide d'ondes, à l'intérieur de la région du cône, par une source de courant parallèle ( $J_x$ ) à l'axe des

' $x$ '. Celle-ci présente un profil gaussien au niveau spatial le long de la direction des ' $x$ '. Le courant est produit au cours d'une courte période de temps de façon à exciter des ondes électromagnétiques dans le domaine de fréquence d'intérêt. La formule mathématique de la source de courant excitatrice est donnée par :

$J_x(x, t) = \cos(\Omega t - Kx) e^{-(\kappa(x-x_0))^2} e^{-(\gamma t)^2}$ , où  $\kappa$  et  $\gamma$  sont des coefficients qui caractérisent respectivement l'extension spatiale et la durée du pulse de courant.  $\Omega$  et  $K$  sont (respectivement) la fréquence temporelle et spatiale de la source de courant.  $x_0$  est la coordonnée suivant l'axe des ' $x$ ' du milieu du guide.

Le signal transmis, recueilli à l'extrémité du guide d'onde, est enregistré en fonction du temps, intégré le long de la section transversale du guide d'ondes et finalement la transformée de Fourier est appliquée pour obtenir le coefficient de transmission en fonction de la fréquence. Tous les spectres de transmission sont normalisés par rapport à celui correspondant au guide d'onde sans stub. Les courbes de transmission seront présentées dans tout ce qui suit en décibels en fonction de la fréquence sans dimension  $\Omega = \omega a / (2 \pi c) = a / \lambda_0$ , où  $\lambda_0$  est la longueur d'onde de l'onde lumineuse considérée dans le vide,  $\omega$  sa fréquence (en  $s^{-1}$ ), et  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide. La fig. 3 montre le profil temporel (3a), spatial (3b) et la transformée de Fourier du signal excité par une telle source (3c), calculés numériquement avec notre code de calcul numérique. Le spectre de Fourier du signal incident permet, par comparaison au spectre de transmission mesuré à la sortie de la structure, d'identifier les phénomènes physiques qui ont eu lieu lors de l'interaction des modes du guide et ceux du stub. Suivant la symétrie du guide d'onde parfait (sans stub), les ondes propagatives dans la structure peuvent être distinguées entre modes symétriques et antisymétriques. Dans la fig. 4a, on montre l'orientation de la source de courant excitatrice, du champ électrique et du champ magnétique dans chacune des deux configurations de symétrie du guide. On peut démontrer en écrivant les équations de Maxwell dans les trois milieux du guide d'onde ainsi que les conditions de passage, que les relations de dispersion des solutions propagatives s'écrivent :

$$\cotan\left(\frac{\beta a}{2}\right) - \frac{n^2 \alpha}{\beta} = 0, \quad \text{Modes antisymétriques (2.1)}$$

$$\tan\left(\frac{\beta a}{2}\right) + \frac{n^2 \alpha}{\beta} = 0, \quad \text{Modes symétriques (2.2)}$$

$$\text{où } \alpha^2 = k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \text{ et } \beta^2 = \frac{n^2 \omega^2}{c^2} - k^2$$

Dans ces équations, ' $k$ ' est le vecteur d'onde du pulse incident, qui est parallèle à ' $y$ ' dans le cas présent, et  $n$  est l'indice du guide (les autres paramètres étant définis plus haut). La fig. 4b représente les relations de dispersion des deux modes soit  $\Omega = \omega a / (2 \pi c) = a / \lambda_0$  en fonction du vecteur d'onde ' $k$ '.

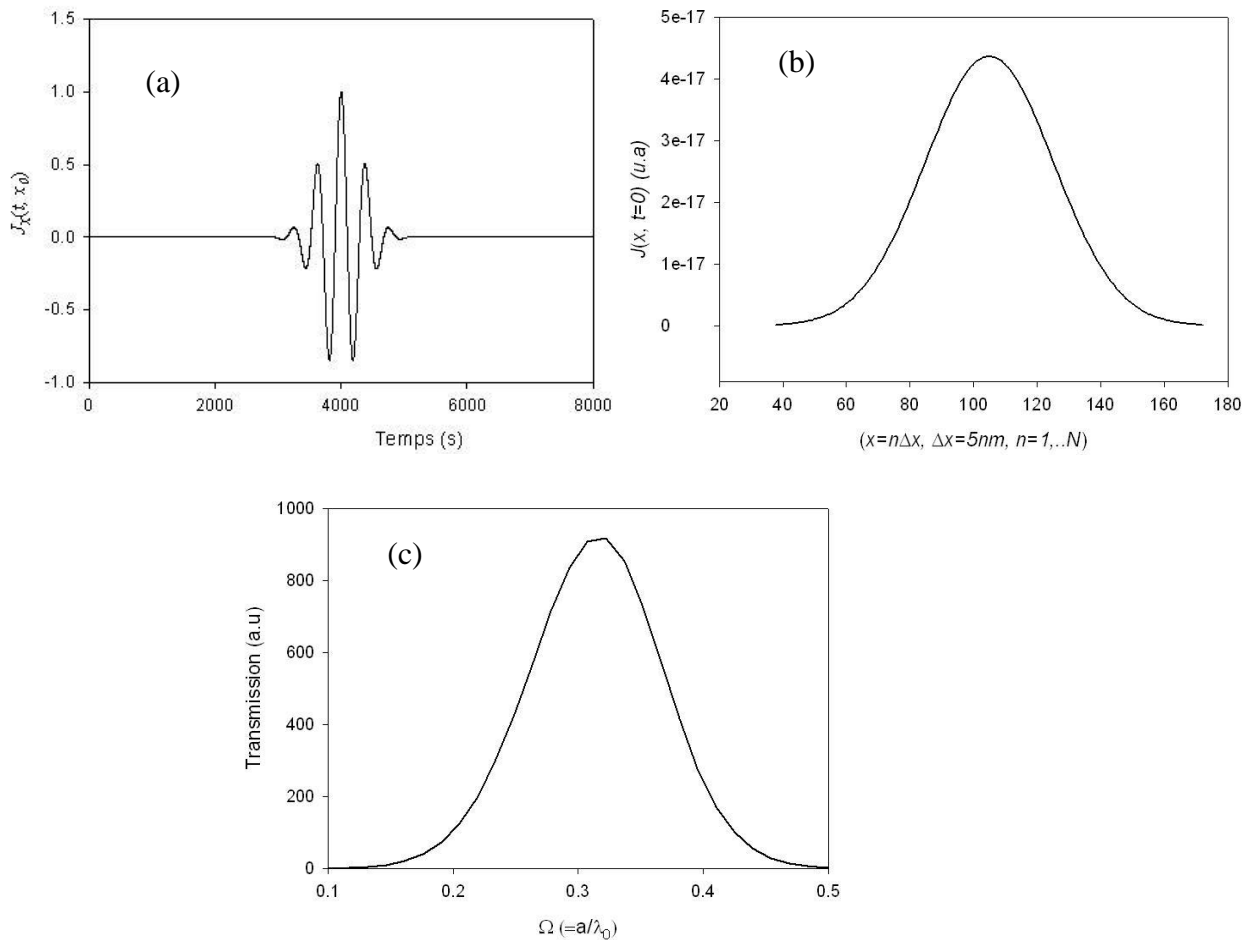


Figure 3 : (a) Profil gaussien temporel de la source de courant à l'extrémité gauche du guide au niveau du taper. (b) Profil gaussien spatial de la source de courant, centré au milieu du guide ( $x=x_0$ ). (c) Transformée de Fourier du signal incident excité par la source de courant.

Au-dessous de la ligne de lumière  $\omega=ck$  dans le vide, nous constatons que les branches de dispersion sont alternativement antisymétriques et symétriques. De ce fait, le guide d'onde sera monomode dans la gamme de fréquence  $[0; 0.32]$  pour le mode antisymétrique et dans  $[0.16 ; 0.48]$  pour le mode symétrique. Afin d'illustrer la différence entre les deux modes,

nous présentons dans la fig. 4c la cartographie du champ magnétique, obtenue à partir de la méthode FDTD, d'une onde monochromatique incidente à la fréquence  $\Omega = 0.25$  pour chaque type de symétrie.

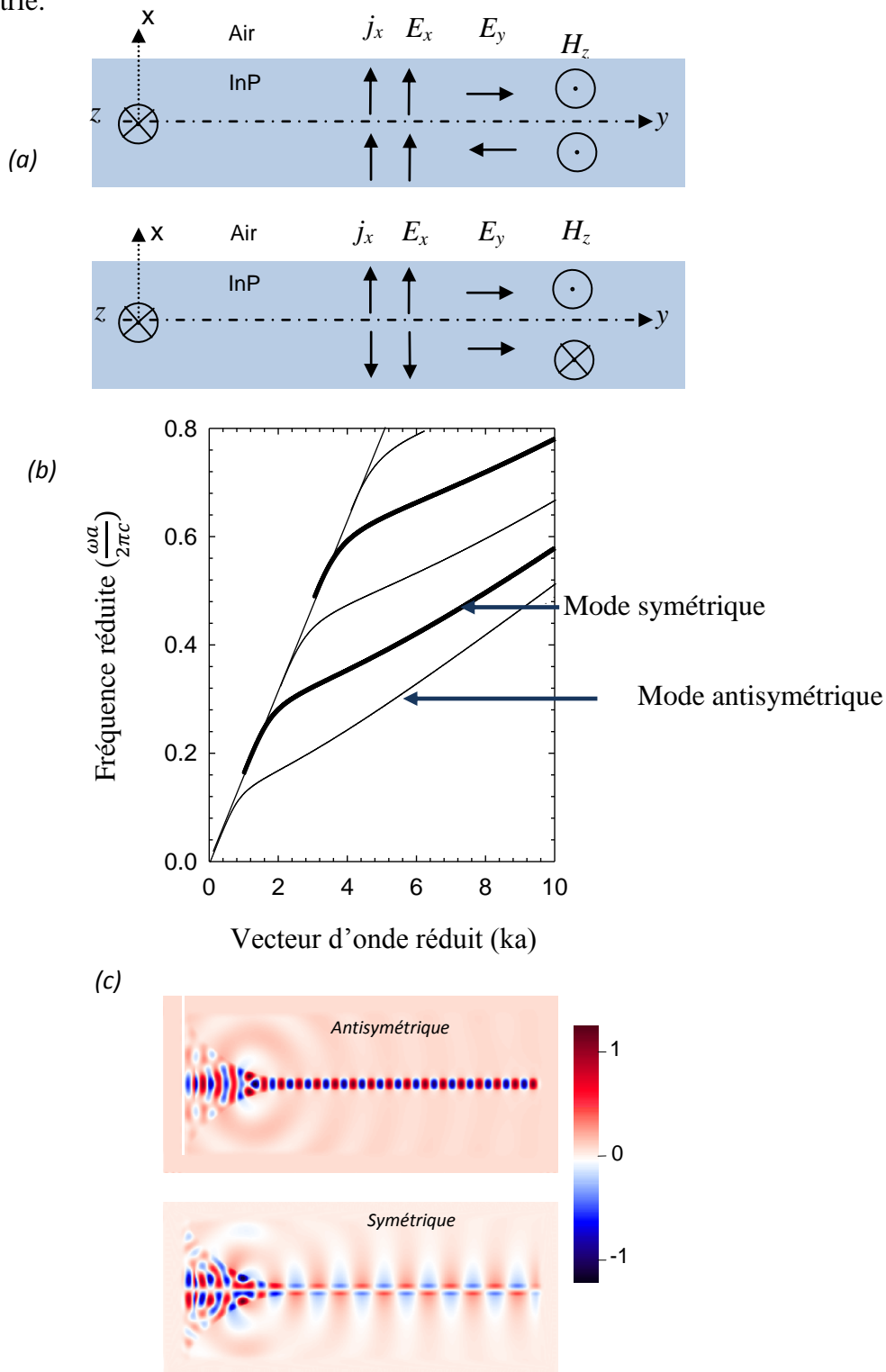


Figure 4: (a) Représentation schématique de la source de courant et des champs électromagnétiques associés pour les deux types de symétrie d'une onde incidente. (b) Relation de dispersion d'un guide parfait (sans stub) de InP dans l'air  $\Omega = \omega a / (2 \pi c) = a / \lambda_0$  en fonction du vecteur d'onde réduit 'ka.' (c) Cartographie du champ magnétique associé à une onde incidente monochromatique à la fréquence  $\Omega = 0.25$  pour les deux types de symétrie.

### II-3) Etude du couplage du guide avec un 'stub' :

Dans cette partie on souhaite étudier l'effet physique produit par le couplage des modes du guide avec ceux du stub greffé sur le guide principal (fig. 2). La fig. 5 montre, pour un signal incident antisymétrique, la courbe de transmission théorique mesurée à la sortie du guide pour un stub greffé sur le guide d'ondes ayant les paramètres suivants :  $w=a$  et  $l=1.7a$ . Les résultats sont présentés en fonction de  $\Omega$  dans la gamme [0.2, 0.5]. Nous avons étudié deux types de conditions aux limites au niveau des extrémités du stub en contact avec l'air. Dans le premier cas le stub qui est du même matériau que le guide est en contact direct avec l'air, alors que dans le deuxième cas le stub est couvert d'une couche mince de métal dit parfait (parfaitement réfléchissant) qui empêche le rayonnement de s'échapper en dehors des frontières du stub. Dans le premier cas, la courbe de transmission représentée par des traits discontinus dans la fig. 5, contient des zéros de transmission traduisant un couplage du signal incident avec le stub. Cependant ceux ci montrent un facteur d'atténuation inférieur à 10dB aux fréquences  $\Omega = 0.243$ ,  $\Omega = 0.318$  et  $\Omega = 0.417$ . Dans le deuxième cas, la courbe est tracée en traits pleins dans la fig. 5, et montre une augmentation du nombre de zéros de transmission dans la même gamme de fréquence. De plus, les zéros de transmission ont une forme plus nette, deviennent beaucoup plus étroits et atteignent des coefficients d'atténuation nettement plus grands que dans le premier cas. L'atténuation atteint dans ce cas de figure des valeurs un peu plus au dessus de 20dB pour plusieurs zéros de transmission et atteint même 57dB à la fréquence  $\Omega = 0.317$ .

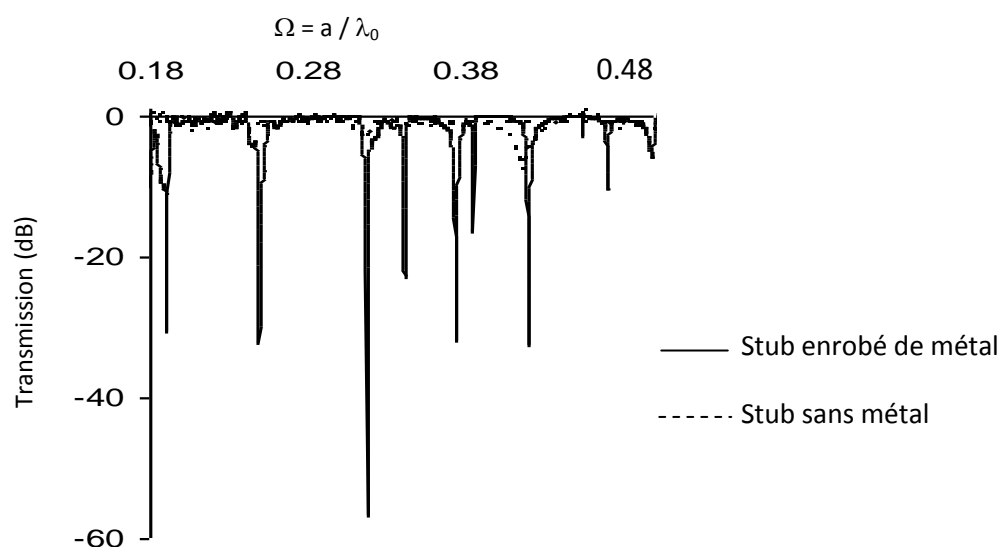


Figure 5 : Spectre de transmission calculé pour un guide d'onde couplé à un stub dans deux cas de figure. Dans l'un le stub est en contact direct avec l'air (traits discontinus), et dans l'autre le stub est enrobé par une couche de métal parfait (traits pleins).

Ceci démontre que la présence du métal a nettement renforcé l'interaction entre le guide et le stub. Ce qui a conduit à un couplage plus intense entre les modes propres de résonances du stub et ceux du guide, menant ainsi à l'excitation de plus de modes du stub, soit plus de zéros de transmission dans le spectre de transmission. De surcroît les zéros de transmissions dans le spectre de transmission à ces fréquences sont nettement plus étroits et bien définis.

Le métal parfait dans notre programme de simulation est modélisé en forçant l'annulation totale du champ électromagnétique dans le métal soit :

$$E_{\text{métal}} = H_{\text{métal}} = 0$$

Plus explicitement, si on reprend l'équation d'évolution temporelle du champ magnétique (1.13) du chapitre 1 on introduit une constante  $Cst(i, j)$  dans le programme qui prend la valeur de 1 à l'extérieur du métal et 0 dans le métal parfait soit :

$$H_z(i, j, n + 1) = H_z(i, j, n) + Cst(i, j) * \left[ \frac{\Delta t}{\mu(i, j)} \frac{E_x(i, j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}) - E_x(i, j - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2})}{\Delta y} + \frac{E_y(i + \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2}) - E_y(i - \frac{1}{2}, j, n + \frac{1}{2})}{\Delta x} \right]$$

Soit si on est dans le métal :

$$H_z(i, j, n + 1) = H_z(i, j, n) = H_z(i, j, 0) = 0$$

Par ailleurs, l'évolution des composantes du champ électrique sera également nulle puisque celles-ci évoluent temporellement grâce à l'évolution spatiale du champ magnétique (équations (1.11) et (1.12) du chapitre 1).

### II-3.1) Effet des paramètres géométriques :

Nous regardons à présent comment les zéros de transmission dans le spectre de transmission évoluent en fonction des dimensions du stub, à savoir  $l$  (la longueur) et  $w$  (la largeur). La tendance générale est que les fréquences de ces modes diminuent en augmentant  $l$  ou  $w$ . Ceci en effet, peut être clairement vu dans la fig. 6, où les spectres de transmission sont donnés pour deux longueurs différentes du stub  $l=1.7a$  et  $l=1.9a$ , pour une valeur constante de  $w$ . A noter que l'on obtient la même tendance en fonction de  $w$  à  $l=cste$ . Cependant, on peut noter que l'évolution de la fréquence et plus particulièrement celle du facteur d'atténuation des zéros est différente d'une fréquence à une autre, ce qui laisse entendre que l'intensité du couplage entre le guide et les modes du stub dépend de la fréquence de ceux ci. La tendance observée

dans la fig. 6, peut être appréhendée dans le cadre d'un modèle analytique simple basé sur la détermination des modes propres électromagnétiques d'une cavité rectangulaire finie. L'intérêt de cette comparaison est de regarder la possibilité de prédire au moins qualitativement, le nombre de modes filtrés, leurs fréquences associées ainsi que les nombres quantiques les caractérisant afin de pouvoir les répertorier sans avoir recours au calcul numérique.

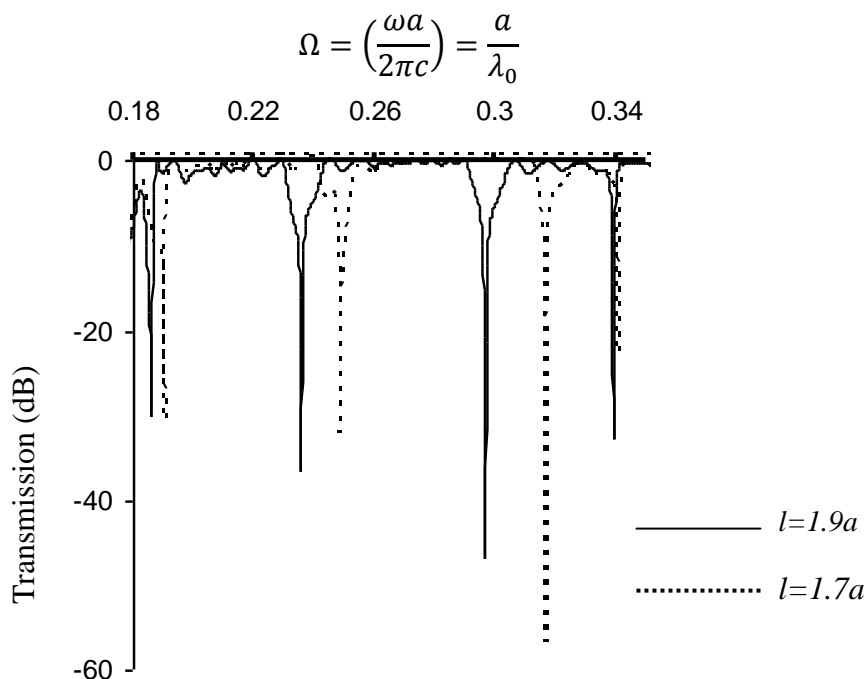


Figure 6 : Spectre de transmission calculés pour deux valeurs de longueurs du stub  $l=1.7a$  et  $l=1.9a$ , avec une largeur du stub  $w=a$ , gardée constante.

Dans la référence [12], il est démontré par un modèle simple que la transmission d'une onde à travers un guide d'onde linéaire et infini couplé à un fil fini du même matériau greffé sur le guide (le tout baignant dans le vide, fig. 7), s'annule pour des fréquences coïncidant avec les fréquences des modes propres du fil greffé (le résonateur).

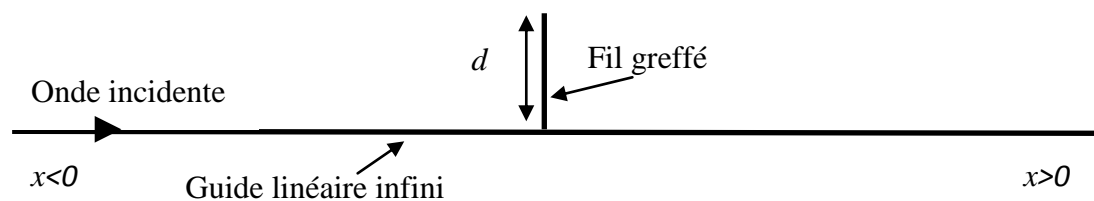


Figure 7 : Schéma d'un guide diélectrique linéaire infini couplé à un fil linéaire fini du même matériau, greffé sur le côté du guide.

Par ailleurs, lorsque le pulse incident est antisymétrique, on constate que la structure du champ magnétique confiné dans le stub, associé aux ondes monochromatiques incidentes aux fréquences de résonances du stub (zéros de transmission), a systématiquement des ventres en haut et en bas du stub, ainsi qu'au niveau des parois gauches et droites de celui-ci (maximas ou minimas aux parois du stub, // à  $x$  ou  $y$ ). Cette constatation est vraie pour tous les modes (voir la fig. 8c dont le contenu sera discuté ci-dessous). Notons qu'en observant les cartes de champ magnétiques de cette figure, on a tenu compte du fait que le bas du stub n'est pas bien défini, et peut s'étendre jusqu'au milieu du guide à cause de la largeur de celui-ci. Or selon l'équation (1.3), ceci signifie :

$$\frac{\partial H_z(x = x_{bas \text{ du stub}}, y)}{\partial x} = \frac{\partial H_z(x = l, y)}{\partial x} = 0 \text{ et } \frac{\partial H_z(x, y = 0)}{\partial y} = \frac{\partial H_z(x, y = w)}{\partial y} = 0$$

Soit encore :

$$E_x(x = x_{bas \text{ du stub}}, y) = E_x(x = l, y) = -\frac{1}{i\omega\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y} = 0$$

$$E_y(x, y = 0) = E_y(x, y = w) = \frac{1}{i\omega\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x} = 0$$

C'est-à-dire en définitif que les modes du stub dans le cas d'une onde incidente antisymétrique, s'obtiennent en annulant le champ électrique  $E$  ( $E=0, H \neq 0$ ). Or, avec ce type de conditions aux limites, les calculs analytiques de la référence [12], indiquent que les modes du stub linéaire de la fig. 7 sont donnés par  $\omega_m = m \frac{\pi c}{dn}$ ,  $m = 0, 1 \dots N$ . Ainsi, par analogie en remplaçant dans ce modèle le guide et le stub sans dimensions transverse par un guide d'onde de largeur  $a$ , et un stub (enrobé d'un métal parfait) de largeur  $w'$  et de longueur  $l'$ ; on aboutit à une formule analytique comprenant les termes de fréquences de résonances suivant les deux dimensions du stub, soit en tenant compte de  $\Omega = \frac{\omega a}{2\pi c}$  :

$$\Omega = \frac{1}{2n} \sqrt{m_1^2 \left(\frac{a}{w'}\right)^2 + m_2^2 \left(\frac{a}{l'}\right)^2}, \quad (m_1; m_2) = (0, 1..N; 0, 1..N). \quad (2.3)$$

Dans le but de corroborer ce modèle simple on a effectué une comparaison entre les modes propres de la cavité prédits analytiquement et les modes calculés numériquement avec la méthode FDTD (les zéros de transmission obtenus dans le spectre de transmission). Cependant comme mentionné ci-dessus, pour avoir une concordance satisfaisante il faut

prendre en compte le fait que la largeur du guide ' $a$ ', introduit une erreur sur la définition exacte de la longueur du stub, et que celle-ci peut être en effet définie au bord du guide comme elle peut s'étendre jusqu'au milieu de celui-ci. Tandis que les dimensions du stub dans le modèle analytique développé dans [12] sont définies de manière exacte, le guide et le stub, étant considérés comme des fils sans dimensions transverses. Donc si l'on note  $l'$  la longueur du stub dans le modèle analytique (Eq. 2.3), alors celle-ci peut varier entre  $l' = l$  et  $l' = l + 0.5a$  (où  $l$  est la longueur du stub dans le modèle numérique), on peut choisir par exemple de prendre  $l' = l + 0.2a$  et  $w' = w$ . Dans les figures 8a et 8b, nous comparons les fréquences des zéros de transmission obtenus à partir des calculs numériques aux modes propres donnés par l'équation analytique (Eq. (2.3)) en fonction de la longueur et de la largeur du stub. On remarque que, notre choix de prendre  $l' = l + 0.2a$ , permet de reproduire analytiquement les résultats des calculs numériques pour le mode fondamental ( $m_1 = m_2 = 1$ ) ainsi que pour les modes d'ordres supérieurs ( $m_1$  où  $m_2 > 1$ ). Afin de rendre cette comparaison plus plausible, nous avons procédé au calcul numérique avec la méthode FDTD des cartographies de champ magnétique associées à plusieurs ondes incidentes monochromatiques aux fréquences des zéros de transmission obtenus dans le spectre de transmission (fig. 8c).

Dans ces calculs numériques, les paramètres géométriques choisis pour les dimensions du stub sont  $w = a$  et  $l = 1.7a$ . Le nombre d'oscillation sur les cartes de champ magnétique nous permet d'attribuer un ordre  $(m_1, m_2)$  à chaque mode, en relation avec le résultat analytique de l'équation (2.3). C'est également intéressant de noter que, pour les fréquences choisies, le champ incident dans le guide d'onde magnétique interagit fortement avec le stub et entre en résonance avec celui-ci, ce qui conduit au piégeage du champ dans le stub et ainsi à sa réflexion vers l'entrée du guide.

A partir de tous ces résultats, on peut affirmer qu'on vient de démontrer la possibilité de réaliser une nouvelle structure submicronique permettant de réaliser du filtrage optique par réjection. Nos calculs numériques montrent également qu'il est possible d'accorder les fréquences filtrées, en ajustant les dimensions du stub. De surcroît, le modèle analytique simple proposé ci-haut (Eq. 2.3) nous permet de décider des modes que l'on veut filtrer dans une gamme de fréquence voulue pour des applications spécifiques en contrôlant les paramètres géométriques du micro-résonateur (le stub). Enfin, l'un des points les plus intéressants de ce système est ses dimensions bien plus compactes en comparaison avec les micro-résonateurs usuels (par exemple en comparaison avec les micro-disques de  $10\mu\text{m}$  de

diamètres de la référence [4]). Dans notre travail, la surface typique du résonateur est de l'ordre de :

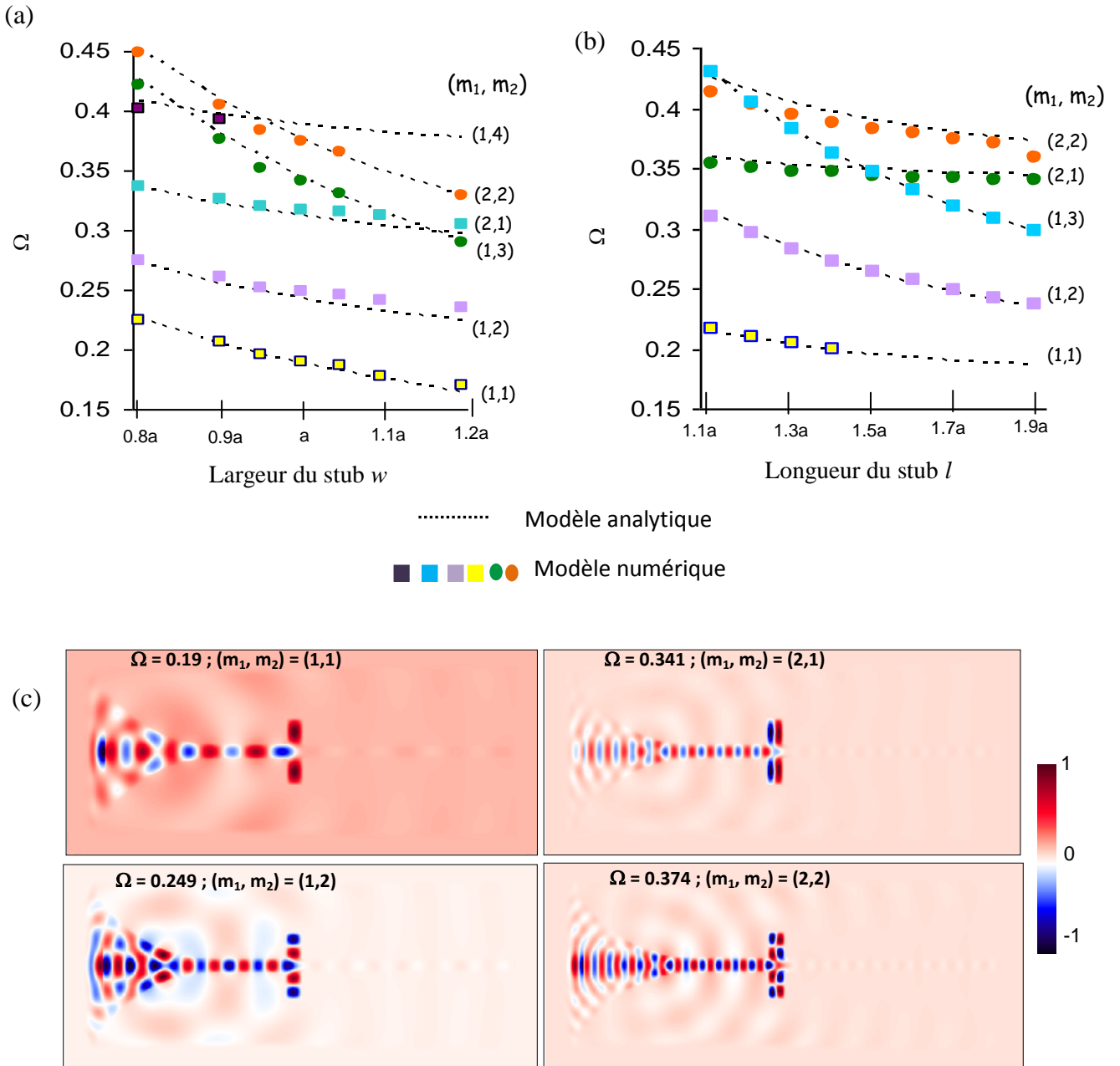


Figure 8 : (a) Comparaison de l'évolution des fréquences des zéros de transmission obtenus numériquement grâce à la méthode FDTD en fonction de la largeur du stub  $w$ , avec l'évolution des fréquences des modes propres du stub prédits analytiquement par l'équation (2.3) en fonction de  $w' = w$ . (b) Même chose qu'en (a), mais en fonction de la longueur du stub  $l$ , comparé au modèle analytique pour lequel  $l' = l + 0.2a$ . (c) Cartes de champ magnétique pour différentes radiations monochromatiques incidentes aux fréquences des zéros de transmission. Les paramètres géométriques du stub sont  $l = 1.7a$  et  $w = a$ . Le nombre d'oscillations du champ magnétique observées dans le stub permet d'affecter un ordre  $(m_1, m_2)$  à chaque mode calculé numériquement en relation avec l'équation analytique (2.3).

$$S = l \times w = 1.5a \times a = 0.375\mu\text{m}^2 \text{ jusqu'à } 1.7a^2 = 0.425\mu\text{m}^2, \text{ où } a = 0.5\mu\text{m}$$

Tandis que dans la référence [4] la taille des résonateurs est égal à  $\pi r^2 \simeq 79\mu\text{m}^2$  avec  $r = \frac{d}{2}$  et  $d=10\mu\text{m}$ , soit un rapport de  $\approx 211$  à peu près. Or ce gain en réduction de taille du résonateur est l'un des points cruciaux pour la conception de nouveaux circuits intégrés tout-optiques.

### II-3.2) Facteur de qualité

Dans les micro-dispositifs destinés à l'intégration optique et réalisant des fonctions optiques tels que le filtrage, il est également un point d'une importance majeure à savoir qu'on souhaite concevoir des résonateurs optiques d'une finesse la plus haute possible. Ceci se traduit par un facteur de qualité aussi grand que possible. On rappelle que le facteur de qualité est défini comme étant le rapport de la longueur d'onde de résonance sur la largeur à mi-hauteur du zéro de transmission, soit :

$$Q = \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda}$$

Dans le système étudié plus haut on a un couplage direct entre le guide et le stub, ce qui se traduit par une forte interaction conduisant à une largeur à mi-hauteur des zéros de transmission ( $\Delta\lambda$ ) maximale. Par ailleurs, il est courant dans la littérature concernant l'étude des micro-résonateurs ([4] par exemple) que le couplage entre le guide d'onde et le stub se fasse par évanescente. En d'autres termes, on introduit un gap d'air entre le guide et le stub. La figure 9a, illustre une telle configuration. On a donc étudié l'influence du gap d'air sur le facteur de qualité des modes du résonateur. Le gap d'air ( $g$ ) a été modifié de 5% à 25% de la largeur du guide ' $a$ '. La fig.9b représente le spectre de transmission pour trois valeurs de  $g$  égales à 0, 0.1a et 0.2a. On constate que le coefficient d'atténuation associé aux zéros de transmission diminue quand  $g$  augmente, ce qui peut être expliqué par un plus faible couplage entre le guide d'onde et le stub. Néanmoins, les zéros de transmission deviennent nettement plus étroits, ce qui veut dire un facteur de qualité plus grand. Dans la figure 9c, on montre l'évolution du facteur de qualité en fonction du gap d'air ' $g$ '.

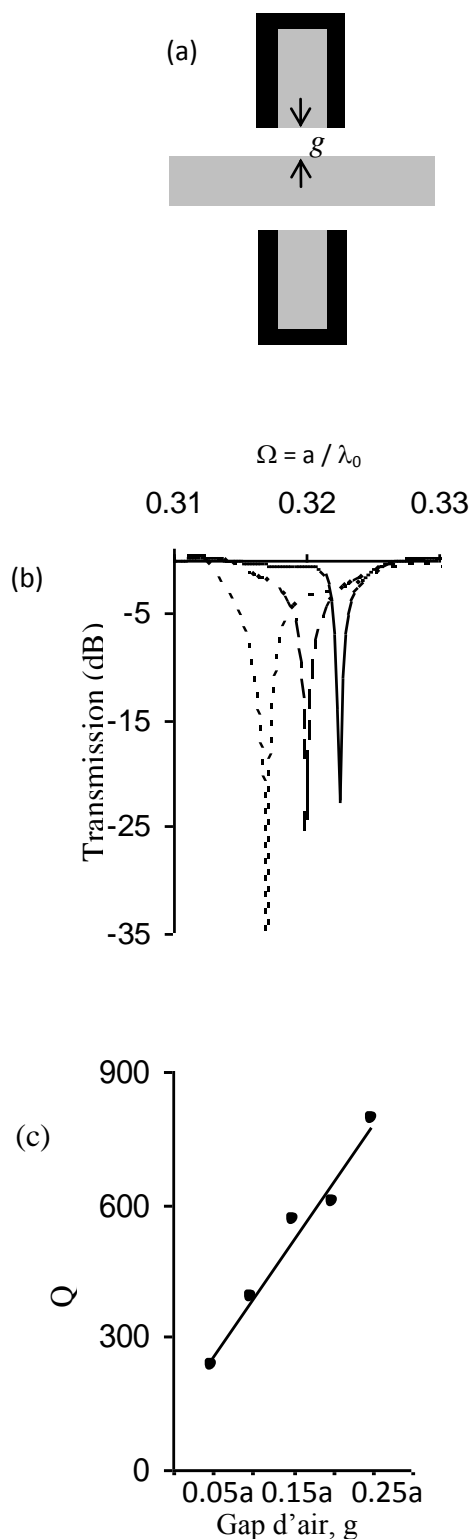


Figure 9 : (a) Schéma d'un guide d'onde couplé par évanescente à un stub via un gap d'air 'g'. (b) Spectre de transmission correspondant pour trois valeurs du gap d'air  $g = 0, 0.1a$  et  $0.2a$ . (c) Evolution du facteur de qualité de la structure représentée par le schéma de la fig. 9a en fonction du gap 'g'.

### II-3.3) signal incident symétrique

Dans le paragraphe précédent on a étudié le couplage d'un guide avec un stub, où le guide était excité par un signal antisymétrique. Afin d'investiguer l'effet de la symétrie du signal incident, sur l'interaction entre le guide et le stub (concernant les modes filtrés par exemple), on étudie dans cette section le couplage d'une onde incidente symétrique avec le stub. Dans la fig. 10a, on compare les spectres de transmission obtenus numériquement pour les deux types de symétries d'un signal incident. On note, effectivement une différence entre les deux cas en termes de nombre de modes excités. Dans le cas symétrique, on a 7 zéros de transmissions et seulement 5 dans le cas antisymétrique. Néanmoins, les zéros de transmission symétriques situés aux fréquences  $\Omega=0.45$  et  $\Omega=0.56$ , ont un coefficient d'atténuation qui est de l'ordre de -10dB seulement. C'est-à-dire, un coefficient assez faible en comparaison avec les autres zéros de transmission, nettement plus profonds pour les deux types de symétries de l'onde incidente ( $\approx$  de -20dB à -40dB). D'autre part, la différence la plus notable entre les modes filtrés dans les deux cas, est la position en fréquences puisque ceux-ci dans la configuration symétrique sont nettement décalés vers les hautes fréquences par rapport aux modes antisymétriques.

De surcroît on a calculé les cartes de champ magnétiques pour deux ondes symétrique incidentes monochromatiques dans le but d'observer directement la symétrie des modes confinés dans le stub (fig. 10b et 10.c), et de procéder à la comparaison au cas précédent. Au préalable, notons que dans celui-ci, les modes filtrés sont antisymétriques par rapport au plan de symétrie du guide (plan médian du guide, contenant 'z'). En effet, dans la fig. 8c on constate que le champ magnétique dans le mode  $(m_1, m_2) = (2,1)$  par exemple, est orienté dans le même sens parallèlement et antiparallèlement au plan de symétrie du guide, de part et d'autre de celui-ci. Or ceci indique que le champ magnétique est antisymétrique pour ce mode (selon les règles de symétrie du champ magnétique), on peut vérifier qu'il en est de même pour tous les autres modes. Dans le cas présent (symétrique), les cartes de champ magnétique sont calculées pour les fréquences  $\Omega_{\text{sym}}=0.286$  et  $\Omega_{\text{sym}}=0.324$ . D'après les cartes de champ, à chacune de ces fréquences de résonances, un ordre de mode leurs est attribué  $(m_1, m_2)$ . Ces numéros correspondent au nombre de demi-oscillations observées dans les deux directions de l'espace dans le stub. Concernant la symétrie des modes, on remarque pour le mode  $(m_1=2, m_2=1)$  par exemple, que le champ magnétique est antiparallèle (orienté parallèlement au  $z<0$ ) au plan de symétrie du guide du côté supérieur du stub et parallèle de l'autre côté (orienté

parallèlement au  $z > 0$ ). Ce qui prouve que le champ magnétique est effectivement symétrique pour ce mode par rapport au plan de symétrie du guide. On peut vérifier que l'on obtient la même symétrie pour l'autre mode ( $m_1=1, m_2=2$ ). Par ailleurs, de façon équivalente au cas précédent (antisymétrique), on a comparé les résultats numériques à ceux d'un modèle analytique simple, inspiré de la référence [12]. Notons au préalable que le champ magnétique confiné dans le stub (à la résonance), a selon la direction vertical ( $//$  à  $x$ ), un ventre (maximum) en haut du stub et un nœud (champ nul) en bas du stub (voir les figs. 10b et 10c). Notons que le nœud du champ magnétique peut être observé à cause de la mauvaise définition du bas du stub, entre  $l$  et  $l+0.5a$  (milieu du guide). D'ailleurs on peut remarquer dans les figures 10b et 10c, que le champ magnétique a effectivement un nœud vers le milieu du guide. Tout ceci signifie que, suivant 'x', les conditions aux limites sont telles que :  $\frac{\partial H_z(x=l,y)}{\partial x} = 0$  et  $H(x = x_{bas\ du\ stub}) = 0$ . Suivant 'y', le champ magnétique a une configuration similaire au cas d'un signal incident antisymétrique (des ventres sur les parois gauches et droites du stub), c'est-à-dire que le champ électrique s'annule aux parois du stub qui le délimitent parallèlement à 'y'. Avec ces conditions aux limites, les calculs effectués dans la référence [12], conduisent à l'expression suivante pour les fréquences de résonances sans dimensions du stub (en tenant compte de  $\Omega = \frac{\omega a}{2\pi c}$ ) :

$$\Omega_{sym} = \frac{1}{2n} \sqrt{m_1^2 \left(\frac{a}{w'}\right)^2 + \left(m_2 + \frac{1}{2}\right)^2 \left(\frac{a}{l'}\right)^2} , \quad (2.4)$$

De la même manière que précédemment, pour avoir une comparaison satisfaisante entre le modèle numérique et le modèle théorique, la longueur  $l'$  (longueur du stub prise dans l'équation analytique (2.4)) du stub peut varier entre  $l' = 1.4a + 0.5a$  et  $l' = 1.4a$ . Une bonne concordance est observée entre les fréquences des modes filtrés obtenus numériques et celles du modèle simple analytique (voir le tableau 1) en choisissant  $l'=1.8a$ .

$\Omega_{sym}$ (méthode FDTD Fig.7a)	0.286	0.324	0.444	0.449	0.469	0.505	0.514	0.523
$\Omega_{sym}$ (Equation. (2.4))	0.274	0.337	0.436	0.442	0.481	0.511	0.514	0.521
$(m_1, m_2)$	(1, 2)	(2, 1)	(1, 4)	(2, 3)	(3, 1)	(2, 4)	(3, 2)	(1, 5)

*Tableau 1: Comparaison entre les fréquences réduites des modes de résonance du stub obtenues par la simulation de FDTD et les fréquences d'une cavité rectangulaire finie calculées à partir de l'Eq. (2.4). Les nombres entiers positifs ( $m_1, m_2$ ) donnent l'ordre des modes.*

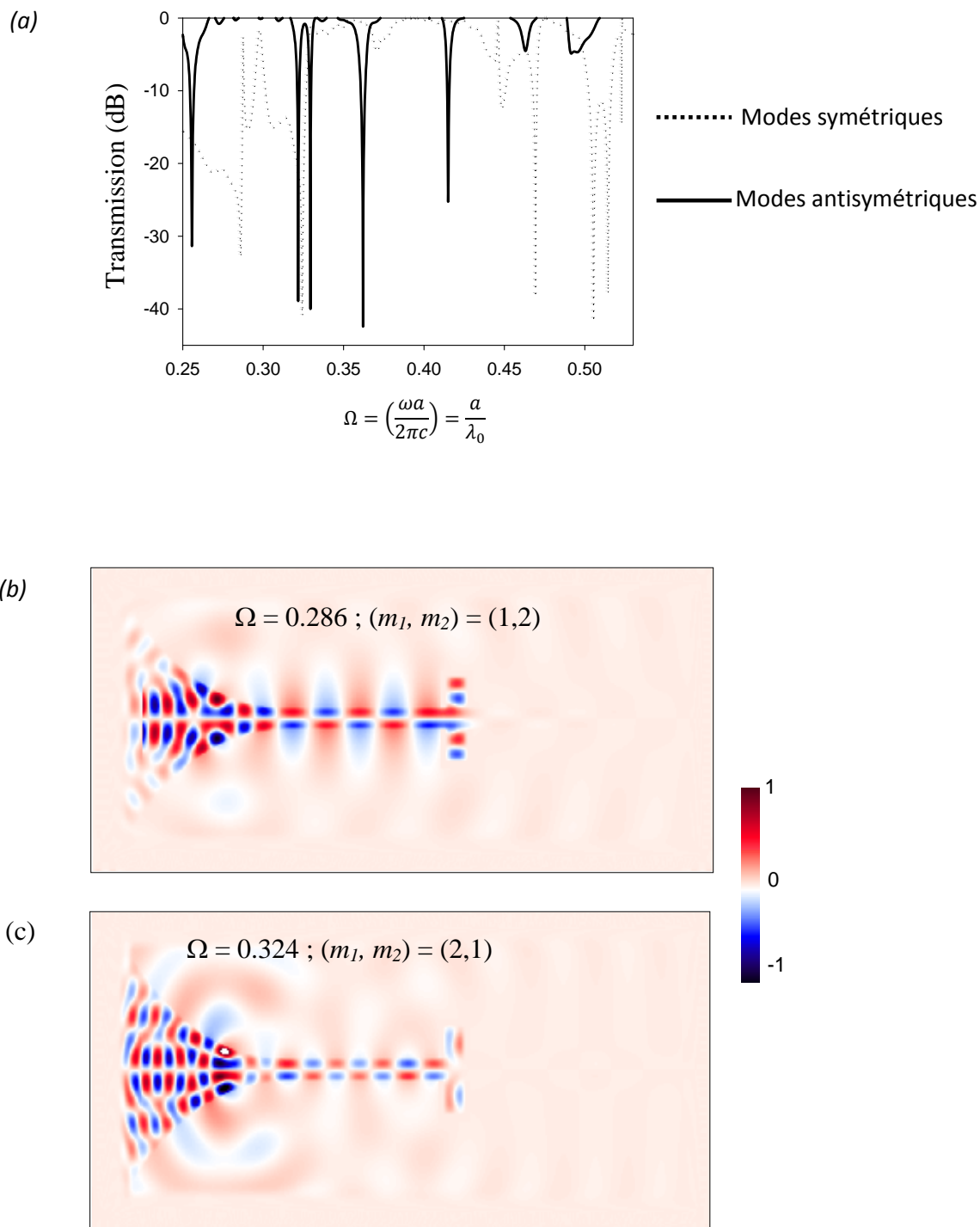


Figure 10 : (a) Spectres de transmission d'un guide couplé à un stub avec des parois métallisées pour une onde incidente symétrique (traits en pointillées) ou une onde incidente antisymétrique (traits pleins). (b) Carte de champ magnétique pour une onde incidente symétrique monochromatique à la fréquence réduite  $\Omega=0.286$ . (c) Même chose qu'en (b), mais pour la fréquence  $\Omega=0.324$ .

En conclusion, on peut affirmer que la symétrie du signal incident, affecte fortement le couplage entre le guide et le stub, concernant d'une part la symétrie des modes filtrés, ceux-ci ont en effet la même symétrie du signal incident par rapport au plan de symétrie du guide. Et d'autre part, le type de symétrie du pulse incident, détermine la gamme de fréquence des modes filtrés, ainsi que leur nombre. Enfin, ceci laisse entrevoir en termes d'applications liées au phénomène du filtrage par réjection, la possibilité d'accorder la gamme de fréquences où l'on veut filtrer des fréquences spécifiques, en modifiant simplement la symétrie du signal incident, au lieu de changer les dimensions du stub (ce qui est bien plus délicat technologiquement).

### II-3.4) Structure à 3D

Dans cette partie le but est de montrer que l'on peut étendre le concept développé dans le cadre d'une structure à 2D à une structure à 3D. Celle-ci est maintenant constituée d'une hétérostructure d'InP/InGaAsP/InP où chaque couche est représentée par une tige carrée de côté ' $a$ ', la hauteur de la structure étant égale à ' $3a$ ' (voir le schéma de la fig. 11a). Le stub est constitué par le même matériau que le guide d'onde (InGaAsP) avec les paramètres géométriques suivants :  $l=1.7a$  est la longueur du stub,  $w=a$  est sa largeur et  $h=3a$  est la hauteur du stub. Les indices de réfraction de 'InP' et de 'InGaAsP' sont respectivement 3.1647 et 3.41. A cause du contraste d'indice entre les matériaux InP et InGaAsP, l'onde guidée est préférentiellement confinée dans la couche d'InGaAsP puisque celle-ci a l'indice optique le plus grand. Une onde électromagnétique incidente est créée par une source de courant finie dans le temps (comme dans le cas 2D), située à l'entrée gauche du guide d'onde et adaptée à celui-ci avec un cône en forme de taper.

Ici, nous considérons le cas d'une onde incidente antisymétrique, qui est la plupart du temps utilisée dans des excitations de source laser. Le spectre de transmission présenté dans la fig. 11b, est calculé en supposant que le stub est couvert ou pas avec une couche métallique mince de métal parfait. On peut noter que dans le cas où le stub est non métallisé, les coefficients d'atténuation associés aux zéros de transmission sont seulement de l'ordre de quelques dB. Cependant, quand le stub est couvert d'une couche métallique parfaite mince, il y a une augmentation très nette du nombre de modes du stub excités (nombre de zéros de transmission). On observe aussi une augmentation significative des coefficients d'atténuation des zéros de transmission, qui sont beaucoup plus prononcés que dans le cas du stub non

métallisé. En fait, le stub non métallisé se comporte comme une micro-antenne dont les rayonnements s'échappent à travers les parois ouvertes (non métallisés). Au contraire, ajouter une couche métallique sur la surface du stub empêche les ondes de s'échapper hors des parois de celui-ci, ce qui renforce l'interaction entre le stub et le guide d'ondes, menant ainsi à un filtrage de plus de fréquences et nettement plus étroites dans le spectre de transmission.

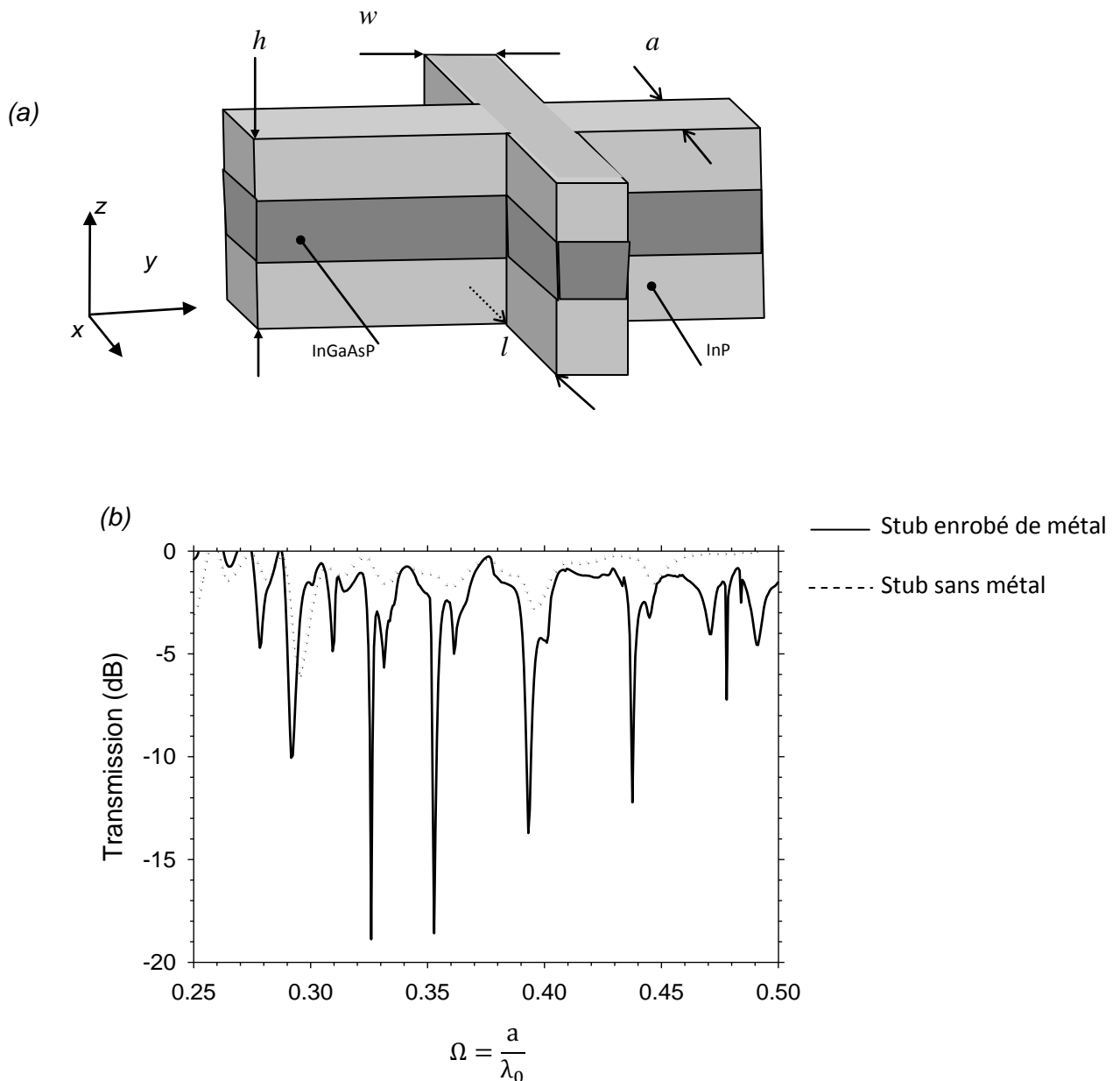


Figure 11 : (a) Schéma d'un guide d'onde à 3D d'InGaAsP' ( $n=3.41$ ), déposé sur un substrat d'InP' ( $n=3.1647$ ) et recouvert par celui ci, couplé à un stub rectangulaire de section carrée, constitué par le même matériau que le guide (InGaAsP). Les dimensions du stub sont :  $l$  pour la longueur,  $a$  pour la largeur (côté de la section) et  $h$  pour la hauteur. (b) Spectre de transmission mesuré à la sortie du guide du schéma de (a), d'une onde incidente antisymétrique.

### II-3.5) Application à la région du proche infrarouge:

Les applications ci-dessus ont été discutées en supposant que les stubs sont couverts d'une couche de métal parfait. L'hypothèse d'un métal parfait est bien adaptée au domaine de l'infrarouge lointain, mais pas aux fréquences de la gamme du proche infrarouge où le comportement réel du métal ne peut être omis. Néanmoins, cette hypothèse a l'avantage de réduire considérablement le temps de simulation, puisqu'aucune discrétisation particulière n'est exigée dans la partie métallique de la structure. Dans le cas d'un métal réel, la discrétisation devrait être suffisante afin de prendre en compte l'épaisseur de peau du métal en question, ce qui signifie un maillage beaucoup plus fin que celui effectué dans le cas de la structure 2D étudiée plus haut. Pour prouver que les applications ci-dessus sont également réalisables aux fréquences des télécommunications ; nous avons étudié la transmission d'un guide d'onde couplé à un stub dont les parois sont recouvertes d'une couche mince de métal réel et dont la fonction diélectrique est décrite par le modèle de Drude (équation (1.34)) soit :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma}$$

La signification physique des différents paramètres intervenant dans cette équation a été discutée en détail dans le chapitre 1. Pour nos simulations, on a pris les valeurs données par la référence [13] pour le métal d'Ag, dans la gamme du proche infrarouge :

$\omega_p = 1.36 \cdot 10^{16} \text{ rad. s}^{-1}$ , fréquence propre du gaz quasi-libre d'électrons du métal d'Ag.  
 $\Gamma = 10^{14} \text{ Hz}$ , fréquence des chocs subis par les électrons. Enfin la valeur de la constante diélectrique aux fréquences infinies et  $\varepsilon_{\infty} = 4.2$  (modélise la contribution à la polarisation du métal, due aux transitions inter-bandes).

Dans la fig. 12a, nous montrons avec la courbe en traits continus le spectre de transmission d'un guide d'onde couplé à un stub avec les paramètres géométriques  $(w, l) = (a, a)$ . Le spectre de transmission indique quatre zéros de transmission avec des coefficients d'atténuation, qui varient de 20dB à un peu plus de 30dB. Ceci montre un fort couplage entre les modes du guide d'onde avec les résonances propres de la cavité. Le facteur de qualité des zéros obtenus peut atteindre des valeurs de l'ordre de 100. On a également calculé les cartes de champ magnétiques associées à des ondes incidentes monochromatiques aux fréquences des zéros de transmission, à savoir  $\Omega = 0.2052$ ,  $\Omega = 0.2338$  et  $\Omega = 0.3357$  (fig. 12b, 12c et 12d). On peut noter que le champ incident dans le guide d'onde se couple fortement au stub, ce qui conduit à

la résonance de celui-ci, et ainsi l'onde incidente est totalement réfléchi vers l'entrée du guide. L'onde transmise devenant effectivement extrêmement faible. Selon la fréquence, on peut observer à l'intérieur du stub un certain nombre de demi-oscillations en relation avec la taille de la cavité. Dans la fig. 12a (traits discontinus), nous avons également étudié l'effet des pertes, dues à l'absorption de l'onde dans le métal sur le spectre de transmission en changeant le paramètre  $\Gamma$  entre  $10^{14}$  et  $10^{15}$ Hz. Nous constatons que pour  $\Gamma$  de l'ordre de  $10^{15}$ Hz, les zéros de transmission s'élargissent et deviennent nettement moins profonds. Ceci signifie que sur une gamme raisonnable du coefficient d'absorption ( $\Gamma \sim 10^{14}$ Hz), l'effet du métal de confiner les ondes incidentes dans le stub peut principalement être attribué à la valeur négative de la partie réelle de la constante diélectrique du métal. Cependant à partir de  $\Gamma \sim 10^{15}$ Hz, le métal devient fortement absorbant à cause de la partie imaginaire devenant non négligeable, ce qui conduit à l'évanescence des modes du stub, se traduisant par un fort élargissement et une forte atténuation des zéros de transmission.

### II-4) Interaction du guide avec plusieurs stubs identiques

Dans les paragraphes précédents, on a étudié la possibilité de réaliser la fonction optique de filtrage réjectif, nécessaire pour la conception de dispositifs optiques intégrés dédiés au transport de l'information par la lumière. Cependant, d'autres fonctions optiques sont tout aussi nécessaires. Parmi celles-ci, il y a le filtrage sélectif, à savoir que l'on souhaite sélectionner parmi un signal large bande incident une seule fréquence via un procédé physique. Par ailleurs, en physique du solide on sait qu'un solide dont les atomes ou molécules sont arrangées dans l'espace suivant une structure périodique, présente une structure énergétique en bandes d'énergie séparées par un gap que les électrons ne peuvent occuper. L'insertion d'un défaut sous forme d'un atome étranger par exemple, introduit un mode de défaut au niveau du gap que les électrons peuvent occuper. Le mode de défaut est fortement localisé autour de celui-ci et évanescence quand on s'y éloigne. Les modes de défauts permettent alors de modifier radicalement les propriétés électroniques et optiques du solide en question. Par analogie, Dans cette section nous étudions les propriétés physiques liées au couplage d'un signal incident antisymétrique et un ensemble de stubs disposés périodiquement le long du guide d'onde comme illustré dans la fig. 13a.

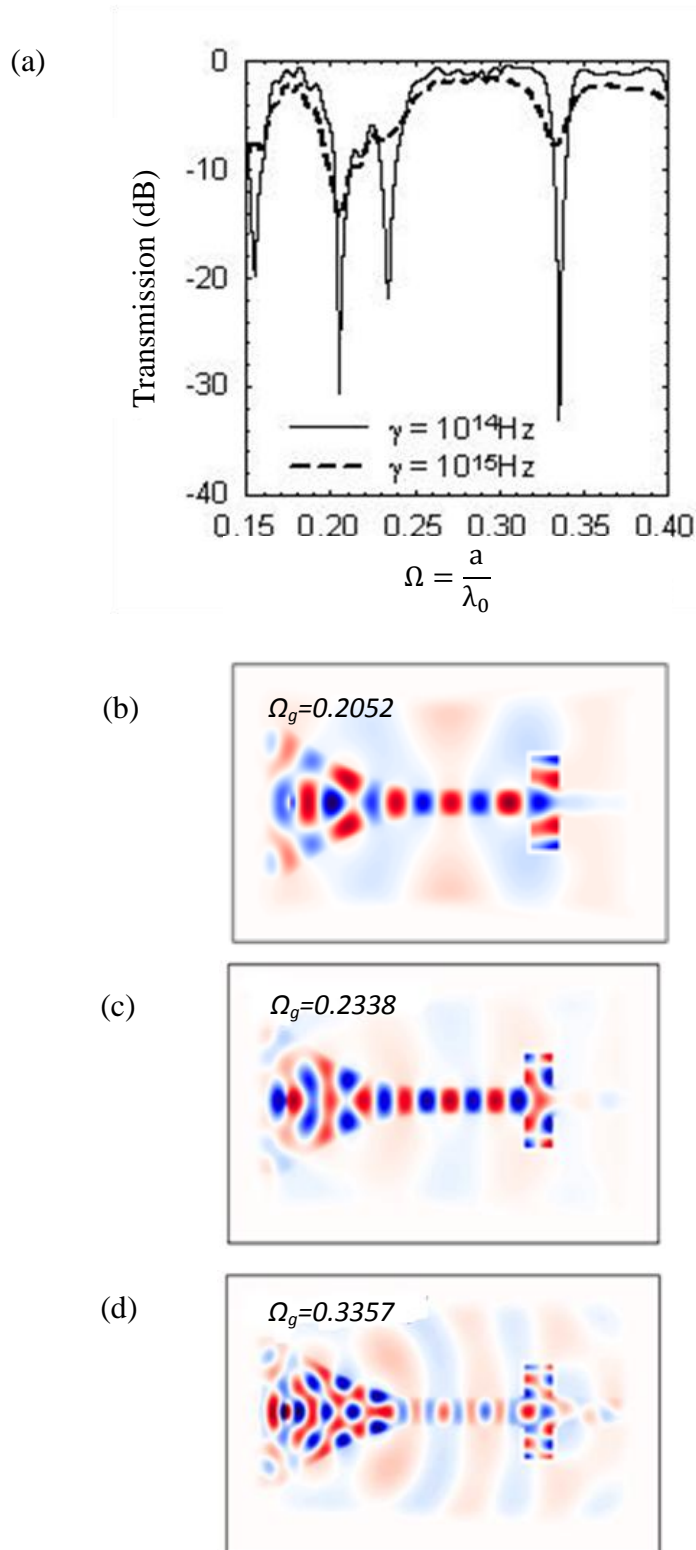


Figure 12 : (a) Spectre de transmission d'un guide d'onde couplé à un stub métallisé par un métal réel (métal d'Ag), modélisé par le modèle de Drude, pour deux valeurs du taux de relaxation du métal  $\Gamma=10^{14}\text{s}^{-1}$  et  $\Gamma=10^{15}\text{s}^{-1}$ . (b) Carte de champ magnétique pour le mode filtré par le stub à la fréquence  $\Omega_g=0.2052$ . (c) Même chose qu'en (b) à la fréquence  $\Omega_g=0.2338$ . (d) Même chose qu'en (b) à  $\Omega_g=0.3357$ .

Les dimensions des stubs sont  $w=a$  pour la largeur et  $l=1.4a$  pour la longueur, et sont séparées entre eux par une distance  $\delta =2a$  régulière. Dans la fig. 5, on a vu qu'un stub couplé au guide présente plusieurs zéros de transmission dans la courbe de transmission dans la gamme de fréquence sans dimensions  $[0.18, 0.48]$ . Dans le reste de la section, nous nous concentrerons sur la transmission autour du zéro ayant pour fréquence réduite  $\Omega =0.256$ . Le spectre de transmission correspondant à la structure de la fig. 13a est présenté par la fig. 13b. Quand nous augmentons le nombre de stub (traits continus) à cinq, nous constatons qu'en comparaison avec le cas d'un seul stub (traits discontinus) une large bande interdite s'ouvre dans la gamme de fréquence  $[0.250, 0.257]$  avec une atténuation de la transmission dépassant 20dB. Dans cette bande de fréquence aucun photon ne peut se propager avec analogie aux électrons dans un solide cristallin, qui ne peuvent se propager dans le gap séparant la bande de valence et la bande de conduction. Une explication qualitative est que l'onde incidente dans le guide, se couplant aux cinq stubs à la fois, ceux-ci interagissent entre eux via le signal incident causant ainsi un élargissement du mode de résonance identique des stubs à la fréquence  $\Omega =0.256$ , ce qui crée un domaine de fréquences où les photons ne peuvent se propager (gap de photons). Un photon, ayant une fréquence dans cette gamme est totalement réfléchi, la structure agit ainsi comme un miroir parfait.

### II-4.1) Filtrage sélectif accordable :

Toujours par analogie aux solides cristallins, on souhaite actuellement étudier l'effet physique due à l'insertion d'un défaut dans la structure périodique de stubs. Parmi les différents types de défauts qui peuvent être envisagés, à savoir un stub constitué d'un matériau différent des autres stubs, géométrie non rectangulaire etc. On a choisi de modifier l'une des deux dimensions du stub soit sa longueur, qui est prise égale à  $l=1.5a$  (fig. 13c), ceci assure en effet que la fréquence de résonance du stub soit abaissée par rapport à celle des autres stubs (Equation (2.3)) et de ce fait qu'elle coïncide avec le milieu du gap. Le mode de résonance du défaut tombant au milieu du gap, permet d'éviter que celui-ci interagisse avec les bords du gap, ce qui conduit à l'élargissement de celui et ainsi à diminuer le facteur de qualité. D'autre part pour des raisons de symétrie, un mode de défaut au milieu du gap aura pour effet une excitation de celui-ci avec une intensité maximale. La fig. 13d présente le spectre de transmission de la structure illustrée par la fig. 13c. On observe l'excitation d'un pic de transmission dans le gap à la fréquence du mode de résonance du défaut  $\Omega =0.2527$  (traits

continus), introduit dans la structure des stubs périodiques. La carte de champ magnétique d'une onde monochromatique à la fréquence du pic de transmission présenté par la fig. 13e, démontre que celui-ci correspond à une excitation fortement localisée autour du défaut et des stubs proches voisins et évanescence en s'éloignant de ceux-ci. Ceci veut dire que le mode du défaut est excité par effet tunnel. La fig. 13d, montre également qu'en variant la longueur du stub défectueux on peut choisir la fréquence du pic transmis, en effet pour  $l=1.54a$  et  $l=1.46a$ , la fréquence du pic de transmission correspondant est respectivement  $\Omega=0.2538$  et  $\Omega=0.2518$  (traits discontinus et en pointillés). Les fréquences des pics de transmission correspondant aux modes de résonances du stub défectueux, peuvent être prédites en utilisant l'équation analytique (2.3), ce qui peut être intéressant avant de procéder à des réalisations technologiques. Dans la figure. 13d, on peut également constater que comme mentionné un peu plus haut, si le mode de défaut s'approche des bords du gap le pic transmis s'élargit légèrement à cause de son interaction avec les fréquences se situant sur les bords du gap ( $l=1.54a$ ), d'autre part il peut perdre en intensité ( $l=1.46a$ ). Cependant, ces effets ne sont pas néfastes tant qu'on ne s'éloigne pas trop du milieu du gap. Pour remédier à ce problème, il faudrait simplement augmenter le nombre de stubs, de façon à élargir le gap et de ce fait d'avoir une gamme plus large où on peut ajuster la fréquence sélectionnée. Néanmoins, au bout d'un certain nombre de stubs  $N$  ajoutés, le gap ne s'élargit plus, mais le mode de défaut reste mieux localisé autour du défaut.

### II-4.2) Filtre sélectif utilisant le phénomène de super-réseau

L'augmentation du nombre  $N$  de stubs a un autre effet dans le spectre de transmission, à savoir l'apparition de nouveaux gaps (indépendamment des zéros de transmissions), dus à la périodicité de la structure, cet effet est dit de super-réseau [12]. Les positions de ces nouveaux gaps sont sensibles à la période de la structure  $\delta$ , c'est-à-dire la distance séparant les stubs voisins. Cet effet est montré dans la fig. 14a, pour  $N=5$ , où nous avons varié la période de la structure de  $\delta = 2.4a$  à  $\delta = 2.6a$ , gardant tous les autres paramètres les mêmes par ailleurs, à savoir les dimensions géométriques du stub ( $w=a$ ,  $l=1.4a$ ). Dans cette figure, on peut noter que la fréquence du zéro de transmission élargi (gap), liée à un résonateur simple (un seul stub) ( $\Omega = 0.256$ ) demeure pratiquement inchangée, tandis que le deuxième gap moins profond au voisinage de  $\Omega = 0.29$ , se décale vers les basses fréquences au fur et à mesure que  $\delta$  augmente.

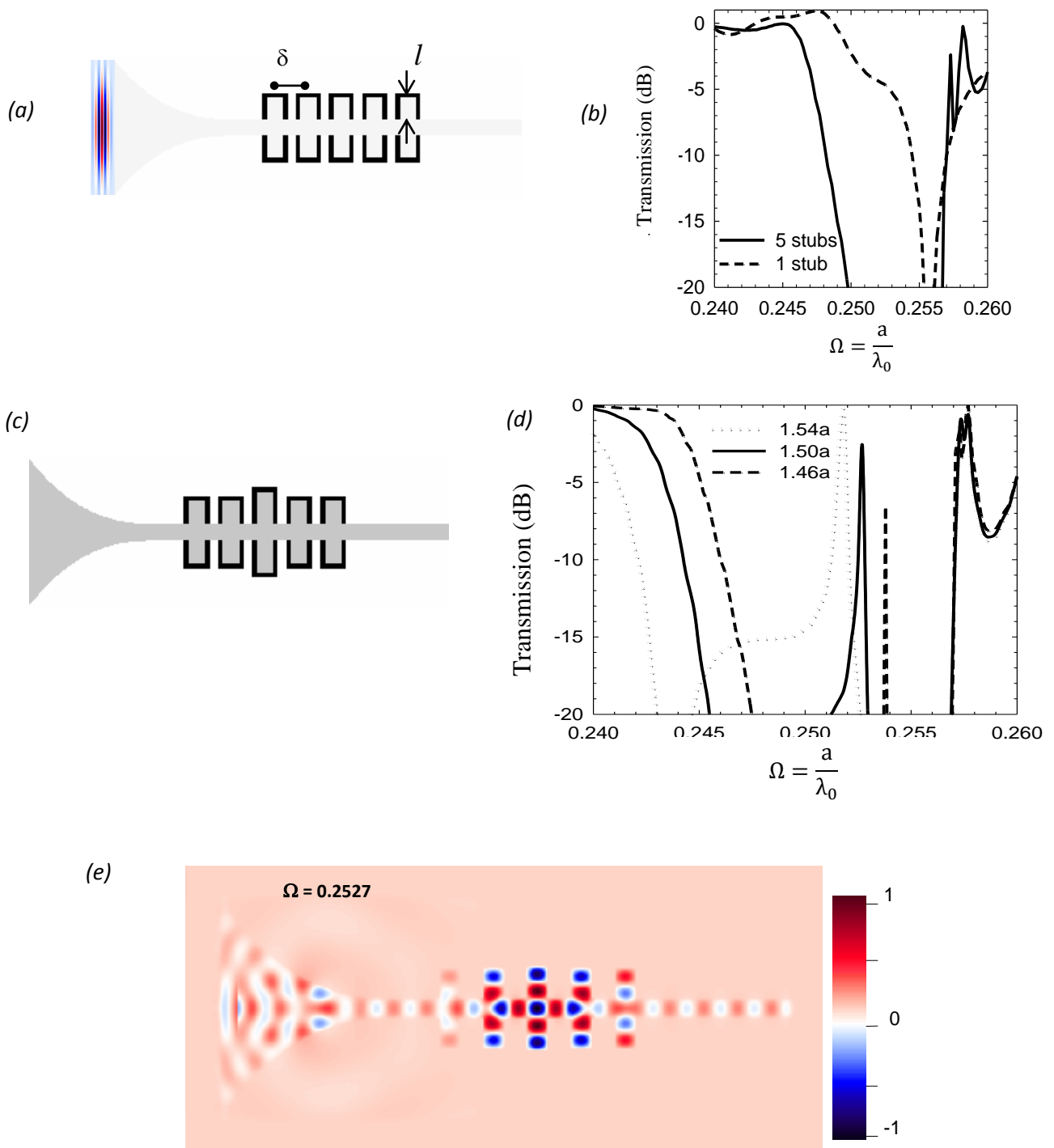


Figure 13 : (a) Schéma d'un guide d'onde couplé à un ensemble de 5 stubs disposés périodiquement. (b) Spectre de transmission correspondant pour un stub (traits discontinus) et pour cinq stubs (traits continus). (c) Schéma d'un guide d'onde couplé à un ensemble de 5 stubs disposés périodiquement, contenant un stub défectueux ayant une longueur différente des autres stubs, situé au milieu de ceux-ci. (d) Spectre de transmission de la structure présentée par la figure 13c pour trois longueurs du stub défectueux  $l=1.46a$ ,  $l=1.5a$  et  $l=1.54a$ . (e) Carte de champ magnétique d'une onde monochromatique incidente à la fréquence du pic de transmission ( $\Omega = 0.2527$ ) relatif à la longueur du stub défectueux  $l=1.5a$ .

Maintenant, nous étudions la possibilité de recouvrement des deux types de gaps, associés respectivement à un zéro de la transmission du stub et à la périodicité, en changeant la longueur des cinq stubs tout en gardant constant la distance de séparation inter-stubs ( $\delta = 2a$ ). Les spectres de transmission sont présentés dans la fig. 14b pour quatre valeurs de  $l$  (longueur des stubs). Dans la courbe de transmission pour  $l=1.3a$ , nous observons la présence de deux gaps, séparés par une petite bande passante. Comme démontré auparavant, la partie inférieure du gap (plus profond, -20dB) est dû au zéro de transmission liée à la géométrie du stub, tandis que la partie supérieure (moins prononcée), résulte de l'effet du super-réseau (périodicité de la structure). Quand la longueur des stubs devient  $l=1.2a$ , le gap résultant du zéro de transmission se déplace vers une plus haute fréquence, au dessus du gap lié à la périodicité. Pour des valeurs intermédiaires de  $l$  telles que  $l=1.27a$  et  $l=1.23a$ , la structure de bande se comporte de telle manière qu'une bande passante très étroite (un pic de transmission) apparaisse à l'intérieur d'un gap plus large. Ainsi, la superposition des deux types de gaps a l'effet de créer un filtre sélectif ajustable, à l'aide d'une structure constituée par un ensemble périodique fini de stubs sans y incorporer un stub défectueux.

La carte de champ magnétique, présentée dans fig. 14c, montre la transmission d'une onde monochromatique à la fréquence du pic de transmission  $\Omega=0.2639$ . Nous notons que contrairement à la transmission sélective par effet tunnel, le champ est localisé dans chaque résonateur et est reconstitué à la sortie de la structure identiquement au signal incident (le mode transmis est une bande passante très étroite).

### II-5) Guide d'onde en forme d'Y

Dans cette section, nous discuterons les propriétés de transmission d'un guide d'onde en forme de la lettre "Y", présenté dans la fig. 15a. Les résultats peuvent être prolongés à un dispositif multi-canal. Pour le signal d'entrée au port  $T_0$ , les spectres de transmission (fig. 15b) sont calculés aux sorties des deux branches du dispositif à savoir  $T_1$  et  $T_2$ . Les signaux mesurés à la sortie de ceux-ci, gardent la forme gaussienne du signal d'entrée, qui est également divisé entre les deux branches bien qu'une perte d'environ de 20% soit observée au niveau de l'intensité totale sortante par rapport au signal d'entrée. Cette perte est probablement due aux réflexions et diffractions du signal pendant que celui-ci parcourt les courbures des deux branches du guide 'Y'.

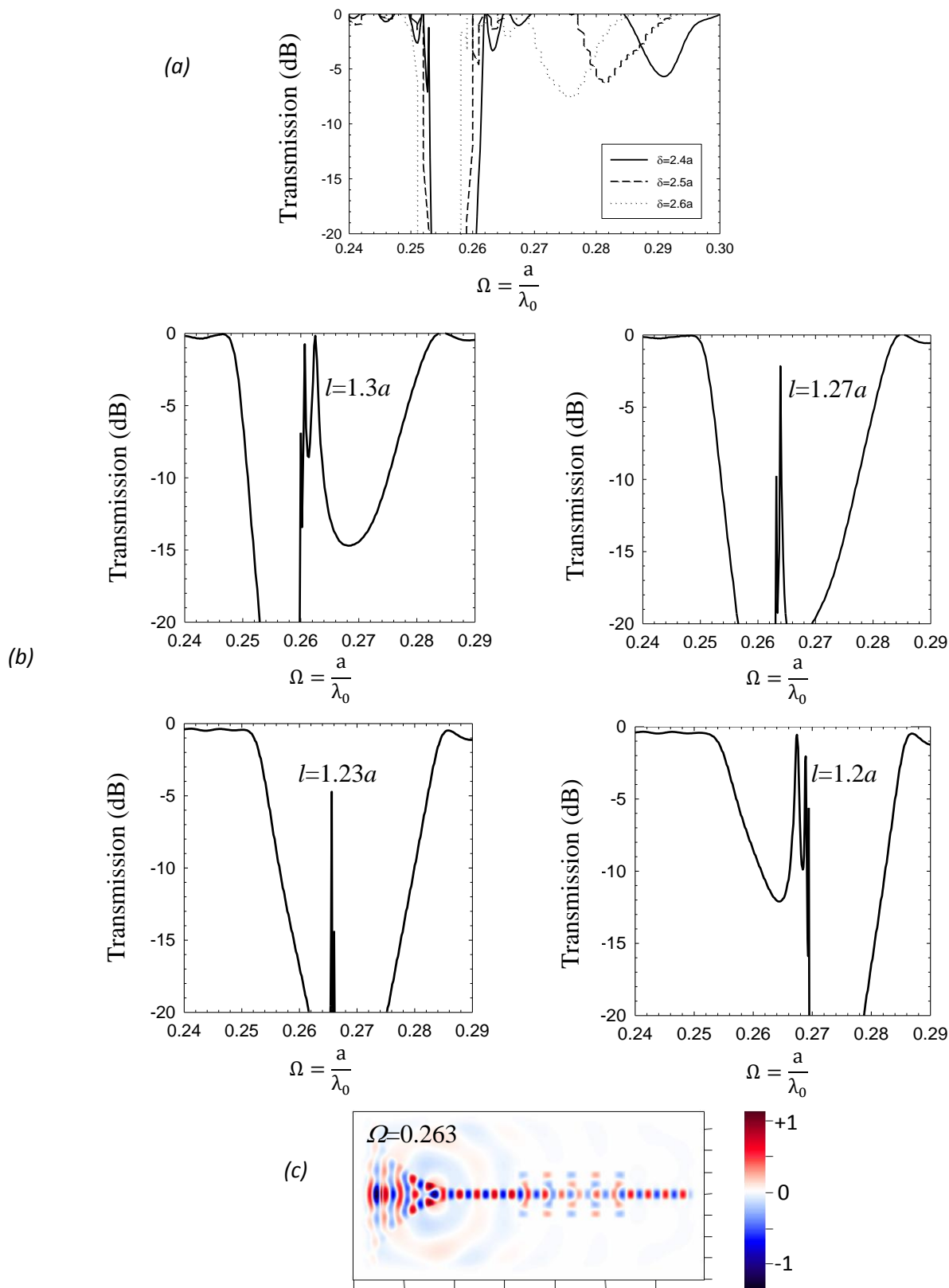


Figure 14 : (a) Evolution du gap due à un zéro de transmission du stub et du gap de périodicité (effet de super-réseau) en fonction de la distance inter-stubs, en gardant constant tous les autres paramètres. (b) Mêmes chose que (a), mais en fonction de la longueur des stubs, (c) Carte de champ magnétique à la fréquence  $\Omega=0.2639$ , d'un pic de transmission, pour  $l=1.27a$ , formé au milieu du gap due à la superposition des deux types de gaps de (a).

La carte de champ magnétique à la fréquence réduite  $\Omega=0.24$  (figure 15c), montre un fort confinement de l'onde à l'intérieur du guide d'onde avec une bonne séparation du signal d'entrée entre les deux branches du dispositif-Y.

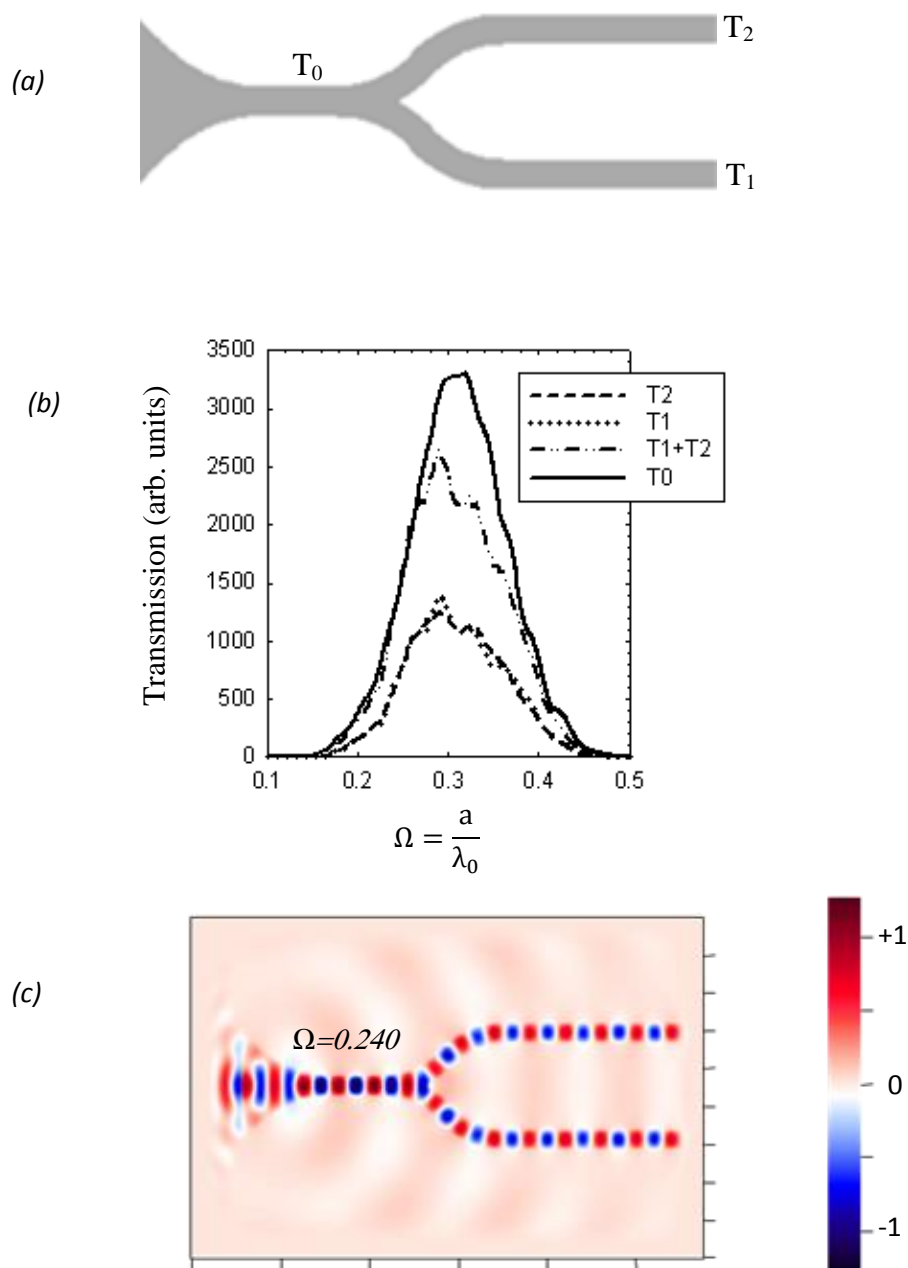


Figure 15 : (a) Schéma d'un guide d'onde en forme de la lettre 'Y', constitué du même matériau de la fig. 2, baigné dans l'air. (b) Spectres de transmission recueillis au niveau des deux ports du guide  $T_1$  et  $T_2$  (pointillés et traits discontinus resp) ; comparaison de la somme des deux spectres ( $T_1+ T_2$ ) avec le signal d'entrée  $T_0$ . (c) Carte de champ magnétique d'une onde monochromatique à une des fréquences du signal soit  $\Omega=0.24$ .

## II-5.1) Filtre réjectif en forme d'Y

Comme illustré sur le schéma de la fig. 16a, nous insérons maintenant deux stubs avec des tailles différentes respectivement sur les deux branches de la structure-Y, T<sub>1</sub> et T<sub>2</sub>. Le stub inséré sur la branche T<sub>1</sub> a pour largeur  $w=a$  et  $l=1.4a$  pour la longueur. Pour la branche-T<sub>2</sub>, les paramètres sont  $(w, l) = (a, 1.5a)$ . Les spectres de transmission correspondants à T<sub>1</sub> et T<sub>2</sub> sont présentés dans la fig. 16b dans la gamme de fréquence réduite  $[0.22, 0.27]$ . Nous notons la présence de deux zéros de transmission avec un coefficient d'atténuation assez grand (zéros assez profonds), aux fréquences réduites  $\Omega=0.2465$  et  $\Omega =0.2557$ . Les fréquences des zéros de transmission sont exactement identiques à celles calculées dans le cas de stubs couplés à un guide d'onde droit (fig. 8b).

La structure-Y rejette donc indépendamment la fréquence de chaque stub résonateur, ainsi nous pouvons conclure qu'il y a absence de perturbations venant de la séparation du guide d'onde, des courbures des branches du guide ou d'une interaction entre les deux stubs. Les ondes réfléchies produites par les stubs sont ainsi orientées vers l'entrée de la structure. Un tel dispositif peut rejeter sélectivement des fréquences d'un signal large bande, selon la géométrie de la cavité constituant le stub et le choix du port de sortie.

Nous présentons dans la figure 16c la carte de champ magnétique obtenue à partir du calcul FDTD pour deux ondes incidentes monochromatiques correspondant aux fréquences de résonance des stubs (des deux zéros de la fig. 16b). A la fréquence réduite  $\Omega=0.2557$ , le champ incident dans le guide d'onde interagit fortement avec le stub localisé sur la branche T<sub>1</sub>, excite le mode de résonance de celui-ci et puis est totalement réfléchi vers l'entrée du guide. A la même fréquence, le stub dans la branche T<sub>2</sub> n'est pas excité et ne perturbe donc pas la propagation de la lumière vers la sortie de T<sub>2</sub>. Le nombre d'oscillations sur la carte du champ magnétique à l'intérieur du stub nous permet d'attribuer un ordre  $(m_1, m_2) = (1, 2)$  au mode résonnant, en relation avec le résultat analytique de l'Eq. (2.3). Une conclusion similaire peut être obtenue à la fréquence  $\Omega =0.2465$  de l'autre zéro de transmission, lié au stub situé sur la branche T<sub>2</sub> du guide.

Ainsi, nous démontrons l'efficacité du filtrage par réjection via la structure-Y d'un signal large bande incident, et particulièrement l'indépendance des deux branches quand nous insérons des défauts tels que des cavités sur chaque branche du guide.

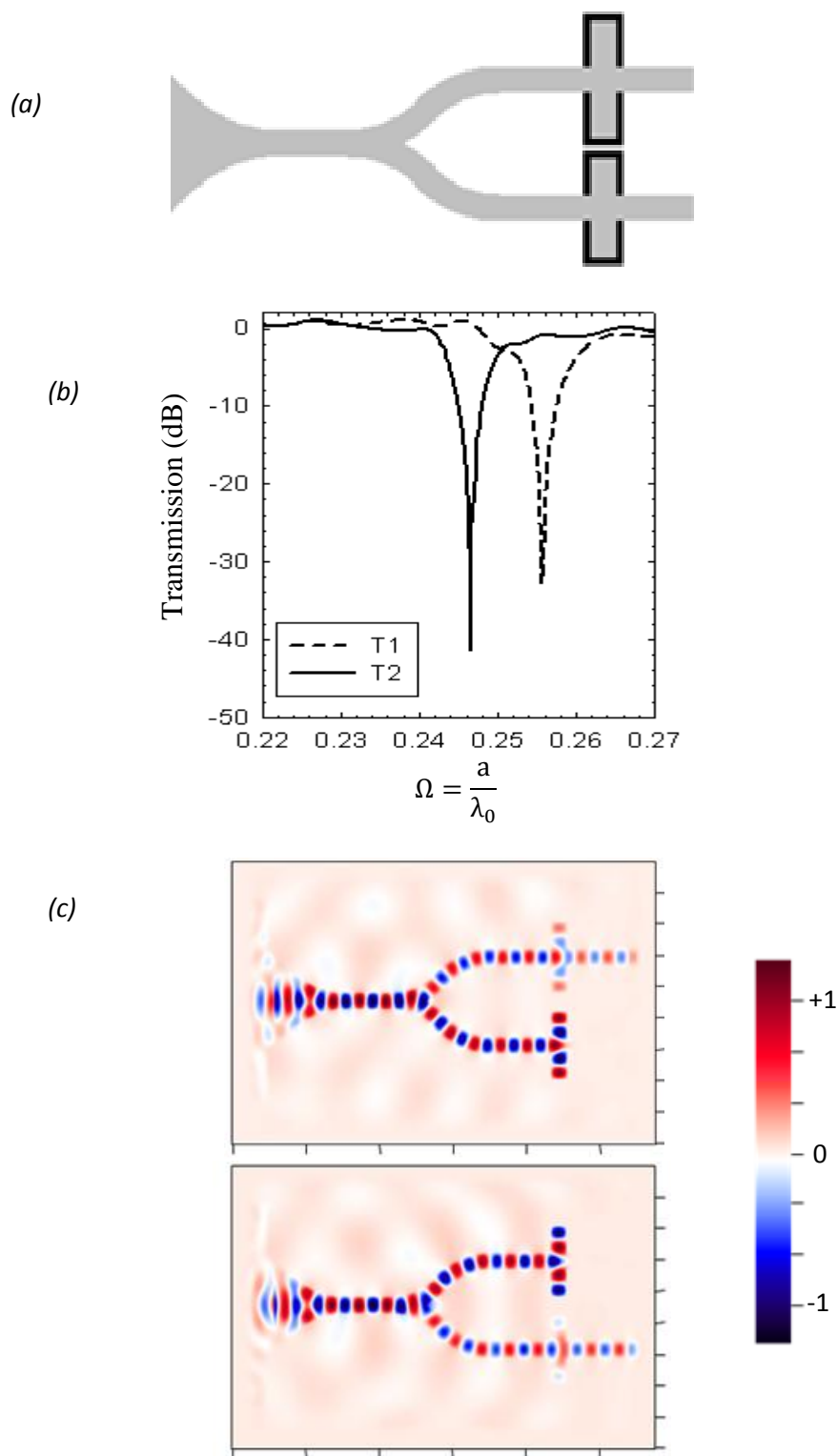


Figure 16 : (a) Schéma d'un guide d'onde en forme d'-Y, couplé à deux stubs résonateurs de tailles différentes, situés sur chaque branche du guide. (b) Spectre de transmission de la structure (a), mesuré à la sortie de chaque branche du guide  $T_1$  et  $T_2$ . (c) Cartes de champ magnétique de deux ondes monochromatiques aux fréquences ( $\Omega=0.2557$  et  $\Omega=0.2465$ ) des deux zéros de transmission, réfléchis par chacun des deux stubs placés sur les branches du guide.

## II-5.2) Filtre sélectif en forme d'Y

A partir des considérations ci-dessus, le but est maintenant de proposer un démultiplexeur en "Y" basé sur des microstubs résonateurs. L'objectif principal est de choisir différentes fréquences sur chaque branche de la structure-Y à partir d'un signal large bande incident. Comme expliqué ci-dessus, la première étape dans la constitution d'un filtre sélectif est d'associer des microstubs dans une structure périodique. La périodicité des stubs mène à la formation d'un gap de photons (bande interdite photonique). La figure 17b prouve que nous pouvons obtenir la même bande de fréquence interdite sur chaque branche  $T_1$  et  $T_2$  du 'Y', quand nous y plaçons cinq stubs semblables avec les dimensions  $(l, w) = (a, 1.4a)$  dans une disposition périodique. Ce gap est comparativement identique à celui déjà observé dans le cas d'un guide d'onde droit (figure 13b).

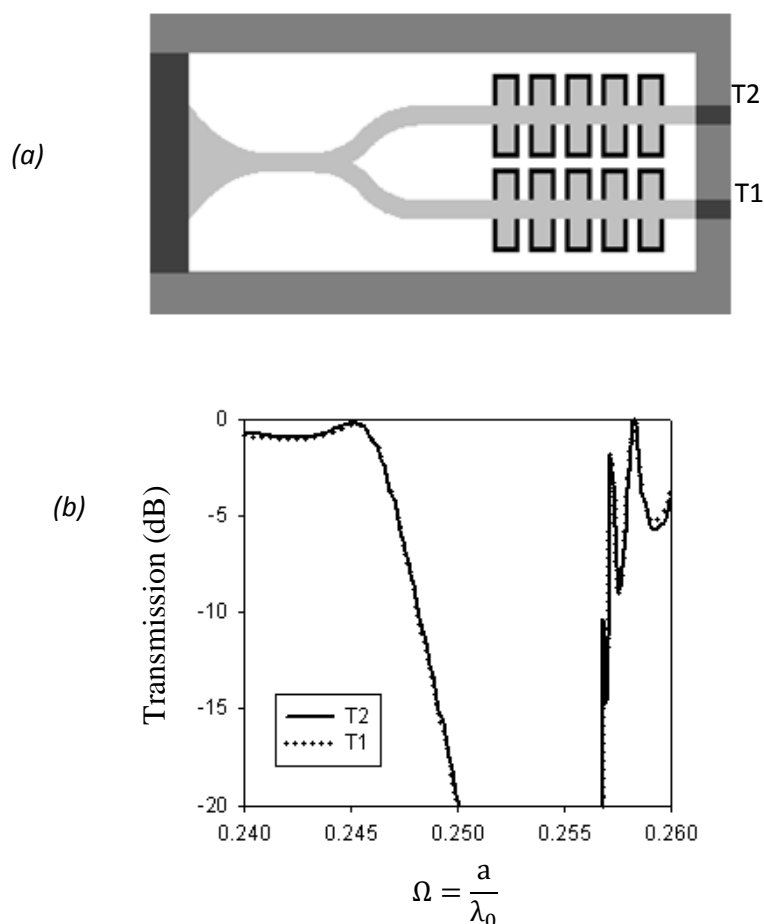


Figure 17 : (a) Schéma d'un guide d'onde en forme d'Y, couplé à un ensemble de 5 stubs résonateurs, disposés périodiquement sur chacune de ces branches. (b) Spectre de transmission correspondant à (a), mesuré aux extrémités des deux branches de la structure Y ( $T_1$  et  $T_2$ ).

La deuxième étape du filtrage sélectif est de placer, sur chaque branche, un stub déficient au milieu de l'arrangement périodique comme illustré dans la fig. 18a. Dans ce modèle, nous remplaçons sur la branche  $T_1$  (resp.  $T_2$ ) du guide le troisième stub par un nouveau stub avec les paramètres géométriques  $(l, w) = (a, 1.5a)$  (resp.  $(l, w) = (a, 1.54a)$ ). Les spectres de transmission calculés aux sorties des deux branches sont montrés dans la fig. 18b. On peut identifier deux pics de transmission assez étroits que nous avons déjà observés dans la configuration du filtre sélectif droit de la fig. 13d. L'intensité, la forme et les fréquences réduites des pics sont également identiques dans les deux figures (fig. 13d et 18b), confirmant encore une fois les comportements indépendants des deux branches de la structure-Y. Le démultiplexeur-Y peut ainsi séparer deux pics de transmission assez étroits et proches, venant d'un signal gaussien large bande incident. Chaque fréquence choisie ( $\Omega = 0.2518$  dans la branche  $T_1$  et  $\Omega = 0.2527$  dans  $T_2$ ) est disponible à l'extrémité du port correspondant. Les cartes de champ magnétique calculées pour deux ondes incidentes monochromatiques à ces fréquences, montrent une transmission par effet tunnel de chacune des deux fréquences vers la sortie du port correspondant, avec une forte localisation sur le stub déficient et ses voisins (fig. 18c). Sur l'autre branche, chacune des fréquences est totalement réfléchi et n'est donc pas transmise. En conséquence, la figure 18 prouve clairement que le signal gaussien  $T_0$  (figure 15b) a été séparé et orienté vers les deux branches de la jonction Y et que chaque branche de celle-ci a sélectionné sa propre bande passante bien étroite (pic de transmission).

### II-6) Etude du couplage d'un ensemble périodique de trous d'air avec un guide de silicium

Les matériaux photoniques présentant une bande-photonique-interdite sont conçus pour contrôler l'émission et la propagation de la lumière, et pour être intégrés dans des dispositifs électro-optiques et de télécommunications. Rappelons qu'un cristal photonique est constitué de deux matériaux diélectriques, ayant un large contraste d'indice, ceux-ci formant un réseau périodique dans l'espace réel. Des cavités résonnantes peuvent être créées dans de telles structures, par l'introduction d'un défaut local de périodicité par exemple. La densité des états optiques sera modifiée et quantifiée par une telle cavité. Celles-ci présentant des résonances avec de hauts facteurs de qualités, plusieurs applications sont possibles, à savoir le confinement ou l'arrêt de la lumière [14], et pour l'émission laser [15].

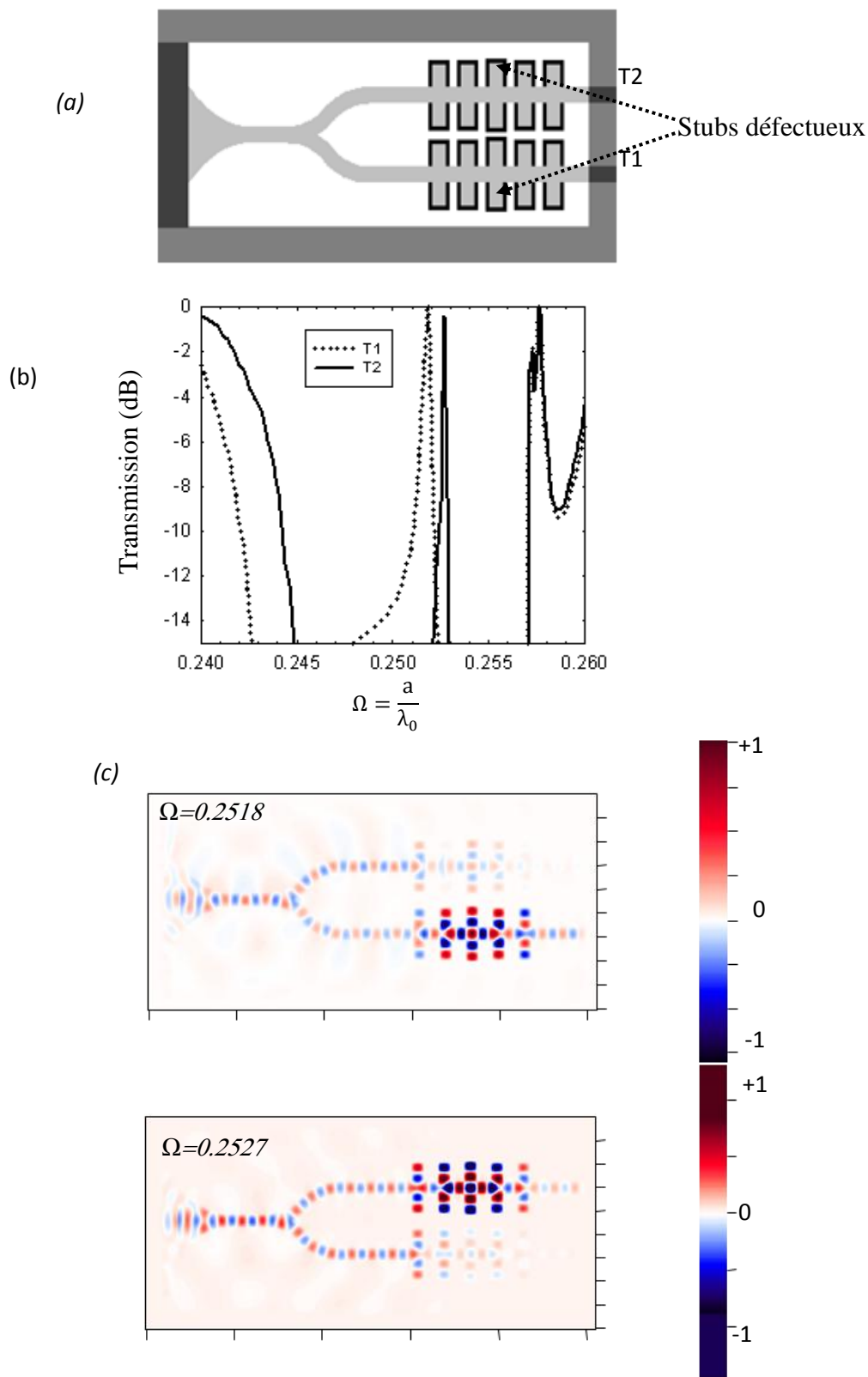


Figure 18 : (a) Schéma d'un guide d'onde en forme d'-Y, couplé à un ensemble de 5 stubs arrangés périodiquement et contenant un stub défectueux (au niveau de la longueur) au milieu, sur chacune des branches du guide. (b) Spectre de transmission de (a), recueilli à la sortie de chaque branche du guide. (c) Cartes de champ magnétique de deux ondes monochromatiques incidentes, aux fréquences des pics de transmission obtenus dans le spectre de transmission de (b).

Dans ce paragraphe on se propose, d'étudier le couplage d'un guide d'onde de silicium, plongé dans l'air, avec un cristal photonique à une dimension, placé au milieu du guide. Celui-ci est formé d'un ensemble de trous d'air circulaires insérés dans le guide de silicium et régulièrement espacés, formant ainsi un réseau périodique à une dimension. La figure 19a présente le schéma d'une telle structure, où  $w$  est la largeur du guide,  $a$  est le pas du réseau des trous et  $d$  est le diamètre des trous. L'indice du silicium est  $n=3.47$ , ce qui assure un large contraste d'indice avec l'air ( $n=1$ ) et donc un bon confinement de la lumière. Le but de cette étude est de démontrer quelques concepts étudiés plus haut avec un système plus compact, conduisant donc à mieux réduire la taille des dispositifs optiques dont on a parlé plus haut. Néanmoins ce système ne permet pas de réaliser toutes les fonctions optiques produites par le micro-résonateur précédent.

Notons auparavant que ces cavités submicroniques unidimensionnelles, présentant des gaps photoniques ont été étudiées précédemment [16-18] et on a observé des facteurs de qualité de l'ordre de  $\approx 330$  pour un volume modal à peu près égale à  $\approx 0.03\mu\text{m}^3$  aux longueurs d'onde des télécommunications. D'autres travaux ont été consacrés à l'étude de ces mêmes structures théoriquement et expérimentalement, utilisant un microscope optique à balayage à champ-proche (SNOM). Lalouat et al [19] ont réalisé expérimentalement des images de haute résolution de la lumière confinée à l'intérieur d'une microcavité montrant un facteur de qualité de 41.000 (124 fois plus grand que celui de la Réf [18]). Ce résultat spectaculaire a été obtenu, en créant une cavité (un défaut de périodicité) dans la structure périodique des trous, couplée au guide, en enlevant simplement le trou qui se situe au milieu de la structure. En outre, un certain nombre de trous proches voisins de la cavité défectueuse, ont été réalisés de sorte que leur diamètre diminue progressivement en s'approchant de la cavité, de part et d'autre. La structure des trous autour du défaut, ressemble à une structure en entonnoir de part et d'autre de la cavité défectueuse (schéma de la figure 19b).

Un pulse de courant gaussien antisymétrique est généré à l'entrée du guide au niveau du taper, donnant naissance à un signal électromagnétique (excitation analogue à celle du guide précédent), qui rentre dans le guide en s'y adaptant via le taper à l'entrée du système. Le signal excité, couvre la gamme de fréquences des télécommunications et est antisymétrique étant donné l'antisymétrie de la source de courant. La largeur du guide est  $w=470\text{nm}$ , le diamètre des trous est égale à  $d=210\text{nm}$  et le pas du réseau est donnée par  $a=350\text{nm}$ , de telles dimensions permettent d'être dans un régime submicronique.

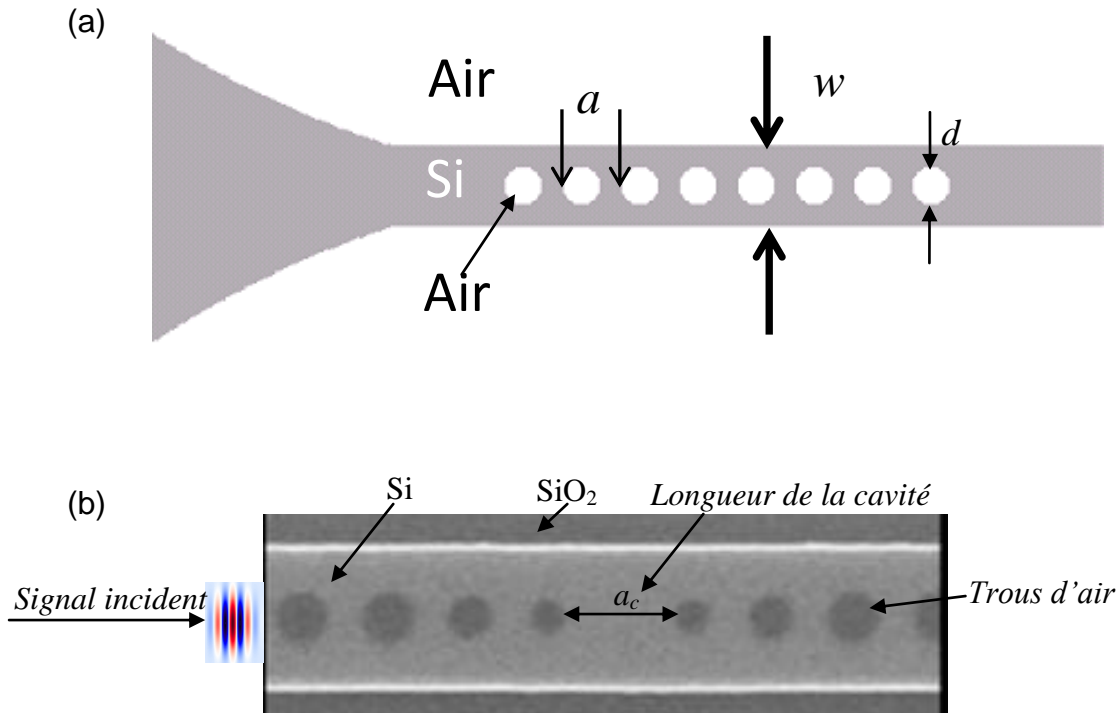


Figure 19 : (a) Schéma d'un guide d'onde de silicium baigné dans l'air, couplé à un réseau périodique de trous d'air, situé au milieu du guide. (b) Même chose que (a), mais le réseau de trous contient une cavité défaut, formée en enlevant le trou du milieu de la structure, et de telle sorte que le diamètre des trois trous entourant la cavité, de part et d'autre de celle-ci, diminue progressivement en s'y rapprochant.

La figure 20 présente la transmission du pulse incident, calculée grâce à la méthode FDTD. On constate la formation d'une large bande interdite de fréquences (gap de photons), centrée sur la longueur d'onde des télécommunications  $1.55\mu\text{m}$ . Par ailleurs, en procédant à un test numérique concernant le couplage d'un guide de silicium et un trou d'air, mis symétriquement au milieu du guide, on a constaté un très faible couplage, traduit par une atténuation du coefficient de transmission autour de  $1,3\mu\text{m}$  de  $-3\text{dB}$  seulement. Ce qui signifie que le large gap apparu est dû à l'effet de périodicité, il s'agit du même type de bande interdite avec un faible coefficient d'atténuation de la fig. 14a, observée dans la structure périodique des stubs couplés à un guide d'InGaAs. Le gap formé est ainsi dû aux réflexions de Bragg, c'est-à-dire que l'onde incidente étant en incidence normale, les réflexions successives de l'onde sur les trous d'air conduisent à des interférences destructives des ondes réfléchies sur un domaine de fréquence donné, ce qui se traduit par l'apparition d'un gap de photons sur le spectre de transmission dans ce même domaine. Tous les spectres de

transmission présentés dans ce qui suit sont normalisés par rapport au cas d'un guide de 'Si' dans l'air, en l'absence de trous.

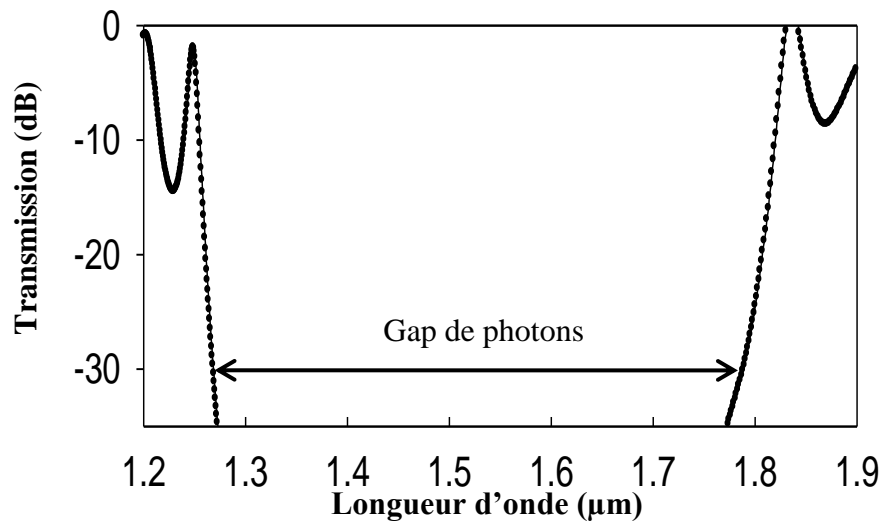


Figure 20 : Spectre de transmission d'un guide d'onde de silicium plongé dans l'air, couplé à un réseau périodique de trous d'air, placé au milieu du guide.

Le gap apparue, s'étend dans une large gamme de fréquence entre  $\lambda=1.27$  et  $\lambda=1.8\mu\text{m}$ , cette largeur importante est reliée au contraste d'indice entre le silicium et l'air. En effet, les réflexions successives de l'onde incidente sur les trous d'air sont d'autant plus importantes en termes de coefficient de réflexion, quand la différence d'indice optique entre les matériaux constituant le guide et les trous est grande. Dans ce cas, les interférences constructives des ondes réfléchies se fait sur un large domaine de fréquence.

Nous allons étudier, actuellement, l'effet des paramètres géométriques sur le gap, à savoir le paramètre du réseau et le diamètre des trous. Dans la figure 21a, on étudie l'évolution du gap de photon en fonction du paramètre de réseau  $a$  pour un diamètre des trous fixé à  $d=210\text{nm}$ . On constate que le gap (partie colorée en bleu de la courbe) est déplacé vers les grandes longueurs d'ondes au fur et à mesure que ' $a$ ' augmente, ce qui peut s'expliquer par le fait que dans les réflexions de Bragg, le pas du réseau est proportionnel aux longueurs d'ondes réfléchies, c'est à dire le gap, et ainsi augmenter  $a$  c'est décaler le gap vers les hautes longueurs d'ondes. En fixant le pas du réseau à  $a=350\text{nm}$  et en faisant varier cette fois-ci le diamètre des trous, on remarque à l'inverse que le gap est décalé vers les basses longueurs d'ondes (partie colorée en rouge de la figure 21b). L'explication de ce dernier comportement est à relier avec le fait que diminuer la taille des trous, revient à augmenter la part du silicium

dans le réseau, qui a l'indice optique le plus grand. Ce qui conduit à l'augmentation des longueurs d'ondes réfléchies.

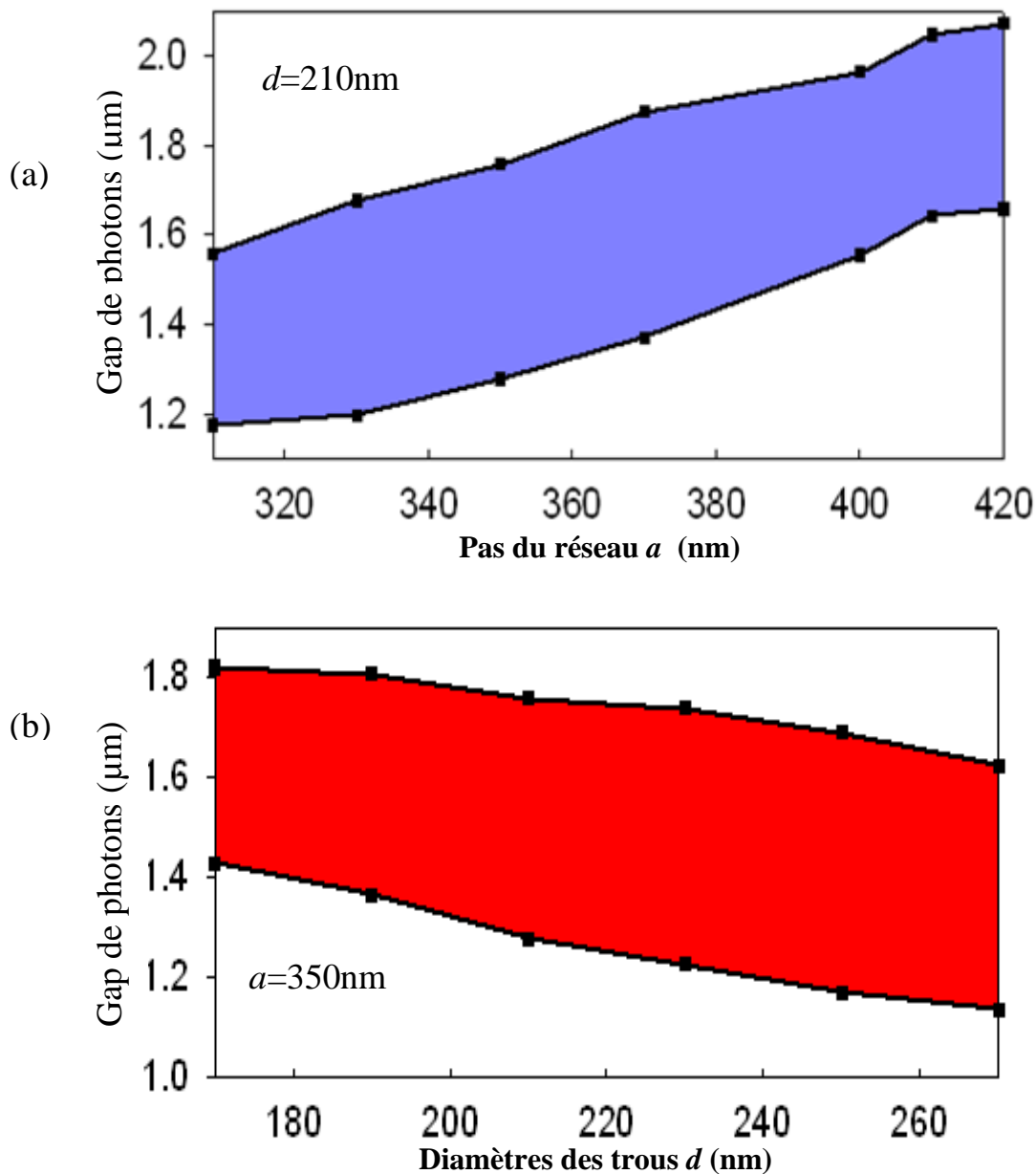


Figure 21 : (a) Evolution du gap photonique obtenu dans le spectre de transmission du guide de silicium dans l'air, couplé à un réseau périodique de trous d'air, en fonction du pas de réseau avec un diamètre des trous fixe égale à  $d=210\text{nm}$ . (b) Même chose qu'en (a), mais en fonction du diamètre des trous  $d$  en gardant le pas du réseau fixé à la valeur  $a=350\text{nm}$ .

### II-6.1) Transmission sélective

La transmission sélective est l'une des fonctions optiques fondamentales étudiée plus haut que l'on souhaite reproduire avec ce système. La création d'un défaut de périodicité, revient à créer localement un pas défectueux ' $a_c$ ', différent donc du pas de réseau, au milieu des trous

(figure 22a). Les trous distants de ' $a_c$ ' (distance entre les centres de deux trous d'air voisins), forment alors une cavité résonante submicronique, dont les modes correspondent à des modes de défauts et peuvent être localisés dans le gap. La figure 22b, présente le spectre de transmission de la structure en y incorporant un paramètre de réseau défectueux  $a_c$  au milieu des trous. On constate effectivement l'apparition d'un pic de transmission très étroit correspondant à un mode fortement localisé quasiment au milieu du gap de photons, sa longueur d'onde étant égale à  $\lambda=1.58\mu\text{m}$  (longueur d'onde des télécoms). Ce mode de défaut est associé à un effet tunnel, c'est-à-dire un mode très localisé au niveau de la cavité submicronique et évanescent en s'éloignant de celle-ci. L'insertion de ce défaut nous permet ainsi de créer une transmission sélective par effet tunnel.

Comme cité plus haut, des travaux antérieurs démontrent que l'on peut améliorer encore le facteur de qualité du pic de transmission obtenu, ce qui est nécessaire pour des applications en télécommunications (schéma de la fig. 18b) [19, 20]. De plus dans la figure 22c, on démontre la possibilité d'accorder la fréquence sélectionnée, en ajustant le paramètre de réseau défectueux  $a_c$ , cette figure montre l'évolution de la longueur d'onde du pic de transmission obtenu en fonction de  $a_c$ , avec  $d=210\text{nm}$  et  $a=370\text{nm}$ .

On note une relation linéaire entre la longueur d'onde de résonance du mode de défaut et le paramètre défectueux  $a_c$ , ce qui indique que l'on peut faire l'analogie entre la cavité associée au défaut et une cavité Pérot-Fabry. Les longueurs d'ondes des modes de résonances d'un Pérot-Fabry sont données par :  $\frac{\lambda_m}{2n} \times m = a_c$ , où ' $m$ ' est un entier positif numérotant les différents modes,  $a_c$  est la longueur de la cavité Pérot-Fabry (pas défectueux),  $\lambda_m$  la longueur d'onde de résonance associée au mode  $m$ , et  $n$  est l'indice de la cavité. Cette relation peut s'écrire aussi  $\lambda = \frac{2n}{m} \times a_c$ , par ailleurs nous trouvons numériquement  $\lambda = 2.37 \times a_c$ . Ce qui signifie que le facteur de proportionnalité  $\frac{2n}{m}$  entre la longueur d'onde de résonance du Pérot-Fabry et le pas défectueux est égal à 2.37. En plus, il est raisonnable de penser que l'indice de la cavité associée au défaut est proche de l'indice du silicium, auquel cas le paramètre  $m$  est proche de 3. Dans ce cas, le mode confiné dans la cavité correspond à trois demi-oscillations suivant 'y'. En effet, on peut noter sur la carte de champ magnétique d'un tel mode sur la figure 23c (dont on discutera le contenu ci-dessous), qu'il correspond à quasiment 3 demi-oscillations suivant la direction 'y', si l'on tient compte du fait que la localisation du mode autour du défaut (suivant 'y') n'est pas très bien défini.

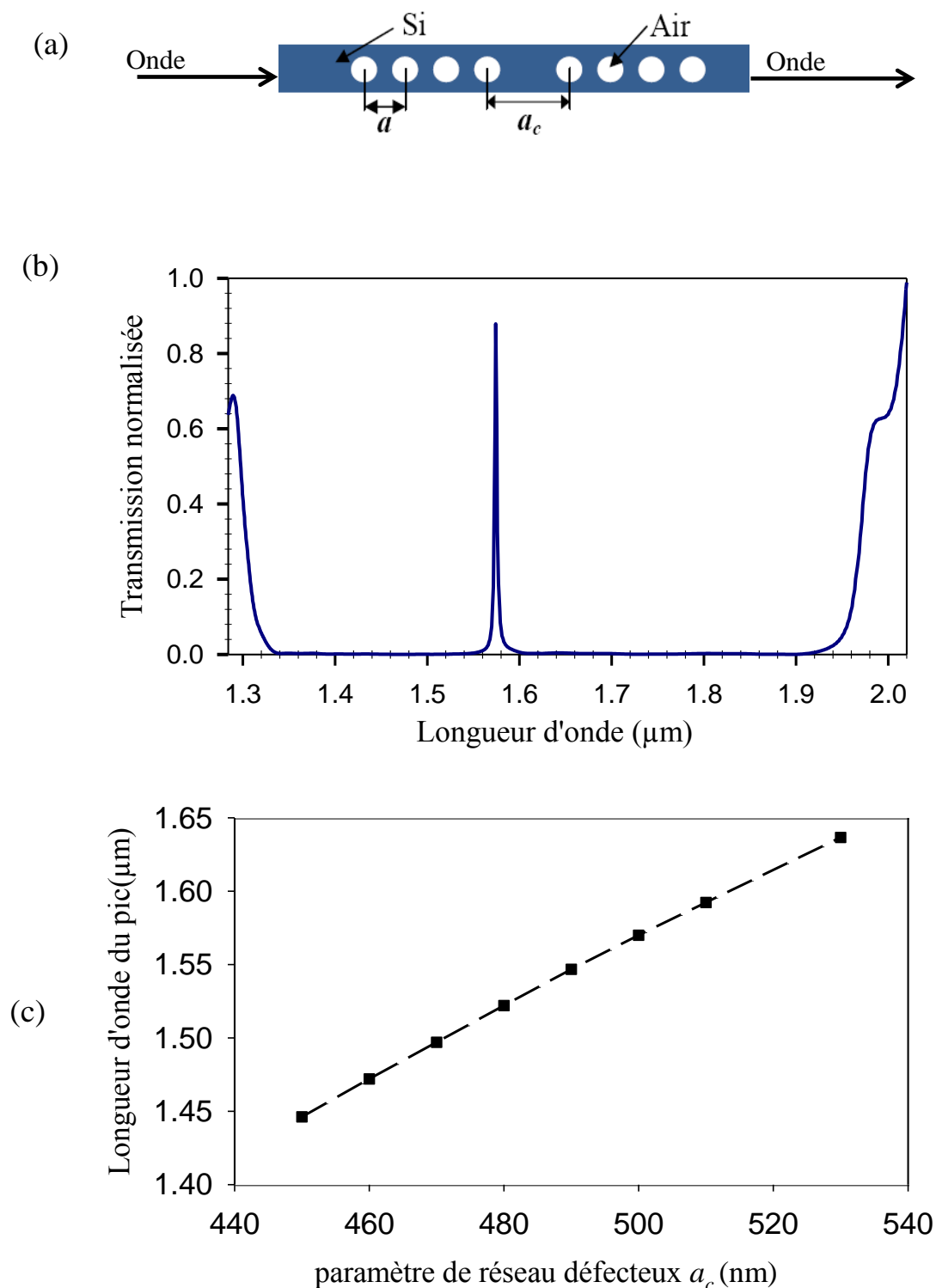


Figure 22 : (a) Schéma d'un guide de silicium, couplé à un réseau périodique de trous contenant un défaut de périodicité au milieu de ceux-ci. (b) Spectre de transmission de la structure de (a). (c) Evolution de la fréquence du pic de transmission obtenu en fonction du paramètre de réseau défectueux  $a_c$ .

## II-6.2) Démultiplexeur submicronique en forme de la lettre 'Y'

Dans ce paragraphe on souhaite démontrer la possibilité de réaliser un démultiplexeur optique submicronique dans le domaine des télécommunications, et plus compact que celui étudié plus haut. Néanmoins, ce démultiplexeur ne fonctionne qu'en sélection c'est-à-dire il peut seulement sélectionner deux fréquences distinctes et ne peut filtrer (réfléchir) ces deux même fréquences comme le système précédent. Notant cependant que conformément à l'étude faite au paragraphe II-6 (figures 21a et 21b), même si on ne peut avec ce système filtrer par réjection deux fréquences spécifiques, on peut par contre choisir deux gaps différents en jouant sur le diamètre des trous ou le pas du réseau de ceux-ci.

La première étape pour ce système est d'insérer dans chacune des branches du guide de silicium en forme d'Y, un réseau périodique de trous d'air. La seconde étape est d'insérer au milieu des deux réseaux de trous, un pas défectueux soit  $a_{c1}$  sur la branche inférieure du guide (branche 1) et  $a_{c2}$  sur la branche supérieure (branche 2) (figure 23a). Evidemment en se basant sur la figure 22c et la relation qui en résulte, donnant la longueur d'onde de résonance du mode de défaut, on peut choisir les valeurs de  $a_{c1}$  et de  $a_{c2}$  de sorte à sélectionner deux fréquences spécifiques pour des applications données. La figure 23b présente le spectre de transmission correspondant à la structure de la figure 23a, mesuré à la sortie des deux branches du guide Y, les valeurs des paramètres de réseau défectueux étant pris égaux à  $a_{c1}=490\text{nm}$  sur la branche 1 et à  $a_{c2}=510\text{nm}$  sur la branche 2. On y remarque l'apparition de deux pics de transmission associés aux modes de défauts, situés presque au milieu du gap et avec des taux de transmission élevés de l'ordre de 92% sur la branche 1 et 96% sur la branche 2. Les valeurs des longueurs d'ondes de résonances associées aux pics de transmission sont égaux à  $\lambda=1.57\mu\text{m}$  sur la branche 1 et à  $\lambda=1.62\mu\text{m}$  sur la branche 2 (gamme des télécoms). Les facteurs de qualité des pics peuvent être améliorés en modifiant le diamètre des trous d'air entourant le défaut comme expliqué dans le paragraphe II-6. Comme signalé plus haut le spectre de transmission présenté ici est également normalisé, et ce par rapport à un guide Y de silicium dans l'air en l'absence des trous.

De surcroît on a calculé les cartes de champ magnétique associées à deux ondes incidentes monochromatiques (fig. 23c), dont les longueurs d'ondes sont égales à celles des pics de transmission observés dans la fig. 23b. On voit clairement pour chacune des ondes l'excitation du mode de défaut fortement localisé autour de la cavité associée à celui-ci et un transfert résonant par effet tunnel vers la sortie de la branche du guide en question, tandis

qu'on remarque une réflexion totale de l'onde vers l'entrée de la jonction Y sur l'autre branche du guide. Notons enfin la bonne performance de la structure Y dans la mesure où les deux branches ne sont quasiment pas couplées, ce qui dans le cas contraire pourrait empêcher de sélectionner deux pics de transmission assez étroits et découplés en induisant un couplage entre ceux-ci et donc des perturbations non négligeable du phénomène de démultiplexage.

### II-6.3) Conclusion:

Dans ce chapitre nous avons étudié un micro-guide, constitué du matériau InGaAsP baigné dans l'air, l'indice optique d'InGaAsP étant égal à  $n=3,4$ , ceci permet un bon confinement de la lumière dans le guide, et empêche un effet de rayonnement extra-guide trop important. On a démontré que le couplage du guide avec une cavité rectangulaire, disposée symétriquement de part et d'autre du guide conduit à la possibilité de réaliser la fonction de filtrage par rejection. De plus, il est possible d'une part d'accorder les fréquences filtrées en ajustant les dimensions de la cavité et d'autre part de contrôler les fréquences que l'on veut filtrer pour des applications spécifiques grâce à un modèle analytique simple. Par ailleurs on démontre également, qu'en couplant un ensemble de cavités identiques, disposées périodiquement le long du guide on obtient un gap de photons à l'image des gaps électroniques dans les solides. L'insertion d'une cavité défectueuse, c'est-à-dire ayant une de ses deux dimensions légèrement différentes de celles des autres cavités, au milieu de l'ensemble de celles-ci conduit à un filtrage sélectif également accordable par l'ajustement d'une des deux dimensions de la cavité défectueuse. L'ensemble de ces phénomènes a été obtenu à condition que les extrémités des cavités soient métallisées afin d'éviter que la lumière s'échappe en dehors du guide. Afin de montrer que ces phénomènes obtenus avec l'hypothèse d'un métal parfait (adapté pour les fréquences de l'infrarouge lointain) restent valables dans le domaine du proche infrarouge valable pour les télécommunications, nous avons effectué des simulations en traitant le métal avec un modèle de Drude. Enfin, nous avons montré que les calculs effectués à 2D restent également valables dans des structures expérimentales à 3D. On a utilisé l'ensemble de ces phénomènes pour proposer un nouveau démultiplexeur en forme de la lettre Y, permettant de sélectionner deux fréquences spécifiques d'un signal large bande incident pour des applications données dans le domaine des télécoms.

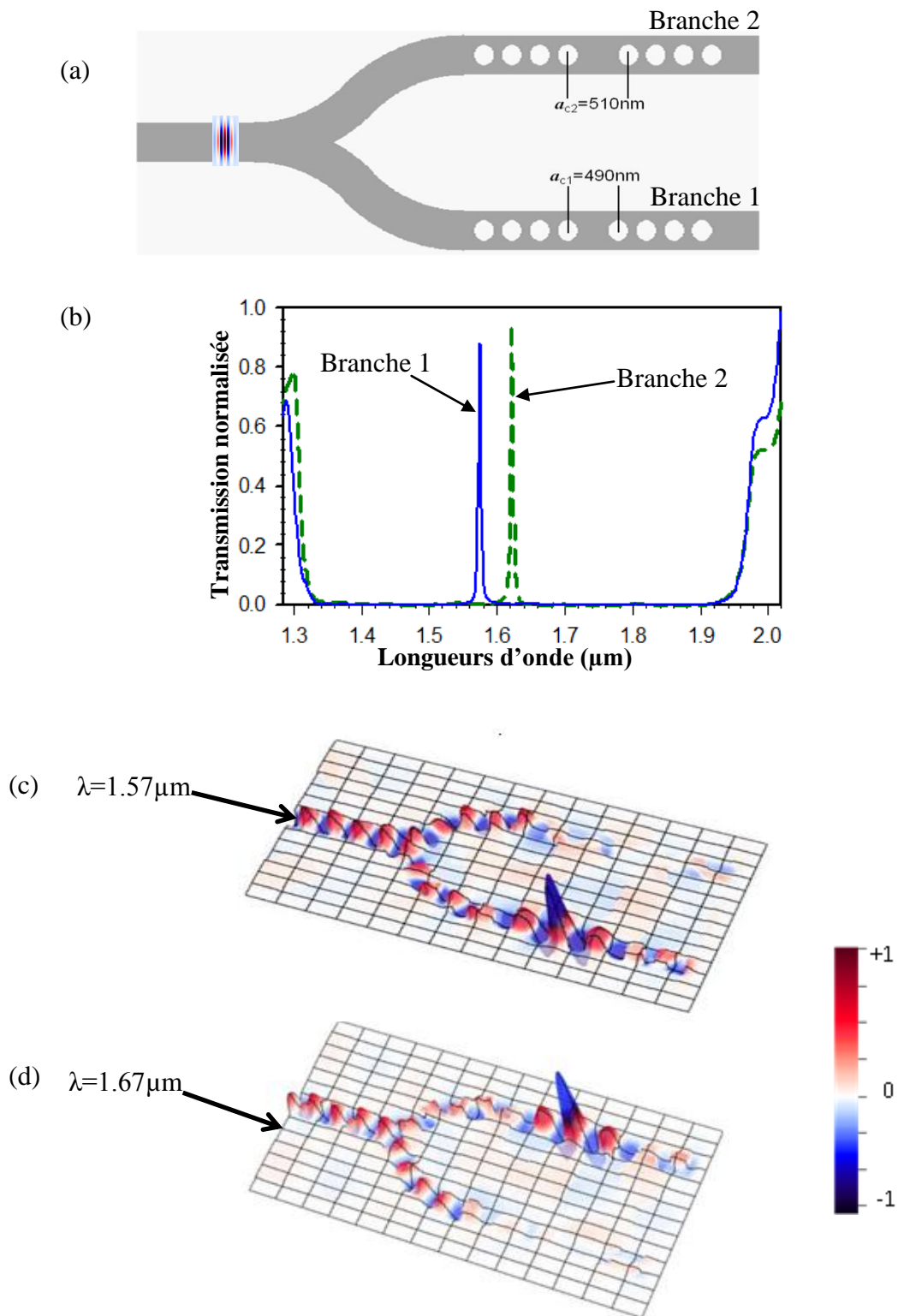


Figure 23: (a) Schéma d'un guide d'onde de silicium en forme d'Y, baigné dans l'air et couplé à un réseau périodique de trous contenant un paramètre de réseau défectueux dans chacune de ces deux branches :  $a_{c1}=490\text{nm}$  sur la branche inférieure (branche 1) du guide et  $a_{c2}=510\text{nm}$  sur la branche supérieure (branche 2). (b) Spectre de transmission correspondant à la structure de (a), mesuré à la sortie de chacune des deux branches du guide. (c) Carte de champ magnétique pour une onde incidente monochromatique à la longueur d'onde de résonance  $1.57\mu\text{m}$  du pic de transmission, transférée par la branche 1 du guide. (d) Même chose qu'en (c) mais à la longueur d'onde  $1.67\mu\text{m}$ , transférée par la branche 2.

Enfin, on a aussi reproduit l'ensemble de ces concepts à l'exception du filtrage réjectif avec un système plus compact, constitué d'un guide de silicium entouré d'air, couplé à un réseau périodique de trous d'air insérés au milieu du guide. L'avantage de ce système par rapport au précédent est la possibilité de réaliser un démultiplexeur optique accordable, fonctionnant dans la gamme des télécoms et nettement plus compact. De plus, on atteint avec ce système de grands facteurs de qualité (plus importants que ceux obtenus avec le système précédent), ce qui est crucial pour la conception de circuits optiques intégrés.

## Bibliographie:

- [1] R. Grover, T.A. Ibrahim, T.N. Ding, Y. Leng, L.-C. Kuo, S. Kanakaraju, K. Amarnath, L.C. Calhoun, and P.-T. Ho, IEEE photonics Tech. Lett. vol. 15, No. 8 (2003)
- [2] R. Quidant, J.-C. Weeber, A. Dereux, G. Lévêque, J. Weiner, C. Girard, Phys. Rev. B 69, 081402(R) (2004).
- [3] T.J. Johnson, M. Borselli, and O. Painter, Opt. Express. vol.14, No 2, 817-831 (2006).
- [4] D. Rafizadeh, J.P. Zhang, S.C. Hagness, A. Taflove, K.A. Stair, and S.T. Ho, Opt. Lett. 22, 1244 (1997).
- [5] B.E. Little, J.S. Foresi, G. Steinmeyer, E.R. Thoen, S.T. Chu, H.A. Haus, E.P. Ippen, L.C. Kimerling, and W. Green, IEEE Photonics Technol. Lett. 10, 549 (1998).
- [6] R. Grover, P.P. Absil, V. Van, J.V. Hryniewicz, B.E. Little, O. King, L.C. Calhoun, F.C. Johnson, and P.-T. Ho, Opt. Lett. 26, 506 (2001).
- [7] B.E. Little, H.A. Haus, J.S. Foresi, L.C. Kimerling, E.P. Ippen, D.J. Ripin, IEEE Photonics Tech. Lett. 10, 816 - 818 (1998).
- [8] G.P. Agrawal, S. Radic, IEEE Photon. Technol. Lett. 6, 995 (1994).
- [9] J.C. Chen, H.A. Haus, S. Fan, P.R. Villeneuve and J.D. Joannopoulos, J. Lightwave Technol. 14, 2575 (1996).
- [10] K. Ogusu and K. Takayama, Opt. Lett. 32, 2185 (2007).
- [11] A. Beaurain, S. Dupont, H.-W. Li, J.-P. Vilcot, C. Legrand, J. Harari, M. Constant, and D. Decoster, Microwave Opt. Technol. Lett. 40, 216218 (2004).
- [12] J.O. Vasseur, A. Akjouj, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti, Surface Science Report. 54, 1-156 (2004).
- [13] H. Gao, H. Shi, C. Wang, C. Du, X. Luo, Q. Deng, Y. Lv, X. Lin and H. Yao, Optics Express. 13, p 10795 (2005).
- [14] T. Tanabe, M. Notomi, E. Kuramochi, A. Shinyal, and H. Taniyama, Nat. Photonics. 1, 49 (2007).
- [15] M. Soljagic and J. D. Joannopoulos, Nat. Mater. 3, 211 (2004).

- [16] J.P. Zhang, D.Y. Chu, S.L. Wu, W.G. Bi, R.C. Tiberio, R.M. Joseph, A. Tafave, C.W. Tu, S.T. Ho, *IEEE Photon. Technol. Lett.* 8, 491 (1996).
- [17] J.S. Foresi, P.R. Villeneuve, J. Ferrera, E.R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J.D. Joannopoulos, L.C. Kimerling, H.I. Smith and E.P. Ippen, *Nature*. 390, 143 (1997).
- [18] D.J. Ripin, K.Y. Lim, G.S. Petrich, P.R. Villeneuve, S. Fan, E.R. Thoen, J.D. Joannopoulos, E.P. Ippen and L.A. Kolodziejski, *J. Appl. Phys.* 87, 1578-80 (2000).
- [19] L. Lalouat, B. Cluzel, F. de Fornel, P. Velha, P. Lalanne, D. Peyrade, E. Picard, T. Charvelin, and E. Hadji, *Appl. Phys. Lett.* 92, 111111 (2008)
- [20] P. Velha, E. Picard, T. Charvolin, E. Hadji, J.C. Rodier, P. Lalanne, and D. Peyrade, *Optics Express* .15, 16090 (2007).



# Chapitre III



## Chapitre III : Modélisation de nano-guides plasmoniques dans la gamme du visible et des télécoms

### III-1) Introduction :

La réalisation de structures photoniques permettant la propagation de faisceaux lumineux fortement confinés latéralement, à l'échelle du nanomètre, avec des pertes de propagation suffisamment basses pour des applications spécifiques est d'une importance centrale dans le domaine de la conception de nanocircuits optiques intégrés. Les structures photoniques ont permis jusqu'alors le contrôle de propagation de la lumière à une échelle du même ordre de grandeur que la longueur d'onde guidée. Cependant, les circuits électroniques actuels sont réalisés à des dimensions nanométriques, et donc bien inférieures. Par ailleurs, l'un des objectifs ultimes de la photonique est de pouvoir concevoir des nanocircuits optiques à l'image des nanocircuits électroniques, pouvant traiter l'information sous formes de signaux optiques et ce dans un avenir proche. Néanmoins, la réduction des dimensions des composants optiques se heurte à un problème majeur à savoir la diffraction de la lumière. En effet, une onde lumineuse confinée dans un guide photonique peut se propager à condition que la dimension de la section transversale du guide soit au moins égale à la moitié de la longueur d'onde guidée divisée par l'indice optique du guide. Ceci impose une limite physique donc à la conception de nanocircuits photoniques. Une nouvelle discipline prometteuse pour pallier cette limite a vu le jour cette dernière décennie, il s'agit de la plasmonique qui est une dérivée de la nanophotonique. Cette discipline est basée sur l'exploitation des propriétés physiques remarquables d'un mode électromagnétique de surface dit plasmon-polariton de surface. Le plasmon de surface est une onde de surface, due au couplage d'une onde électromagnétique à une oscillation des électrons libres d'un métal au niveau de l'interface métal-diélectrique, il en résulte la propagation de l'onde lumineuse le long de la surface du métal grâce à l'onde de densité des électrons. L'onde de surface étant évanescence en dehors de l'interface métal-diélectrique, le signal optique couplé aux électrons du métal est alors fortement confiné au niveau de l'interface, ce qui permet le contournement de la limite de diffraction et l'accès aux structures photoniques à l'échelle nanométrique du même coup [1]. La figure 1, illustre les lignes de champ électrique et une vue schématique de l'amplitude du plasmon de surface de l'interface d'un métal avec un diélectrique [2].

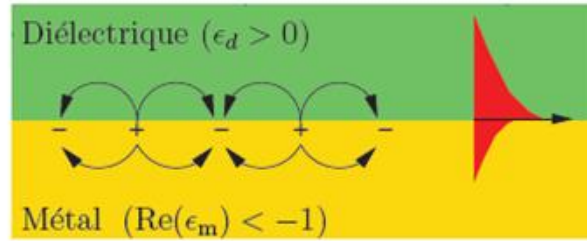


Figure 1 : Schéma illustrant les lignes de champ électrique et une vue schématique de l'amplitude du plasmon de surface de l'interface d'un métal avec un diélectrique) [Ref.2].

Les propriétés physiques du plasmon de surface ont suscité un intérêt considérable au sein de la communauté des opticiens et plusieurs travaux de recherche ont été entrepris dans le but de construire des structures originales de guide d'ondes avec des sections transversales nanométriques. Plusieurs structures de guide d'onde désormais dites plasmoniques ont été proposées, comme les nano-fils métalliques [3-5], les chaînes de nanoparticules métalliques [6-10] et des structures guidantes en forme de la lettre V creusées sur un substrat métallique [3, 11-14]. Certaines de ces structures focalisent la lumière dans un guide diélectrique pris en sandwich entre deux métaux, il s'agit de guides plasmoniques du type métal-isolant-métal (MIM  $\equiv$  Metal-insulator-Metal) [15-19]. Toutes ces structures permettent la manipulation et la transmission de lumière à l'échelle nanométrique (sub-longueur d'onde). La figure 2 montre un schéma d'un nano-guide plasmonique en forme de V sur un substrat métallique, le canal V creusé sur le substrat métallique est un diélectrique [11]. Ce guide présente une courbure d'un angle de  $90^\circ$  et l'on démontre une transmission avec quasiment zéro pertes malgré l'importante courbure, et ce grâce au fort confinement de la lumière dans le canal, qui lui permet d'effectuer des virages aussi aigus. L'autre type de guides canalise la lumière au niveau d'un guide métallique entouré d'un diélectrique, diélectrique-métal-diélectrique (Insulator-Metal-Insulator  $\equiv$  IMI) [20-22].

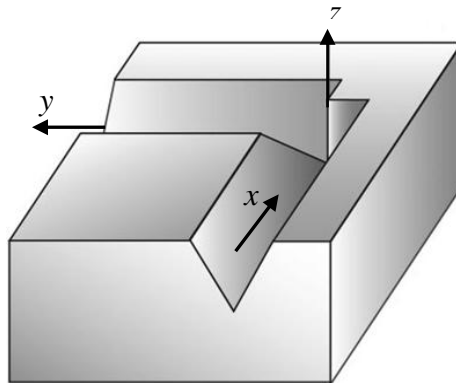


Figure 2 : Schéma d'un nano-guide plasmonique en forme de V sur un substrat métallique, présentant une courbure d'un angle de  $90^\circ$  [Ref.11].

Il a été démontré que les guides d'ondes de type MIM, fournissent la possibilité de propager la lumière sur des distances suffisamment longues avec un confinement spatial sub-longueur d'onde de celle-ci [23, 24]. Miyazaki et Kurokawa ont proposé une cavité plasmonique opérant dans le visible, constituée d'une couche mince diélectrique de 3nm de largeur seulement, prise en sandwich entre deux plaques de métal d'Or (voir la fig. 3) [25]. Ces deux chercheurs japonais ont démontré des résonances d'ondes stationnaires de la cavité accordables, confinées dans un volume modal de l'ordre de  $0.00095\mu\text{m}^3$  grâce au plasmon de surface. Des applications d'une telle nano-cavité sont envisagées dans le domaine de détection de molécules adsorbées sur la cavité et dans le domaine de la spectroscopie Raman. Les investigations numériques et expérimentales des guides d'ondes plasmoniques du type MIM, montrent une forte localisation de l'énergie électromagnétique guidée, des pertes quasi nulles sur des courbures très aiguës ( $\approx 90^\circ$ ) et une fabrication expérimentale relativement simple [26-29].

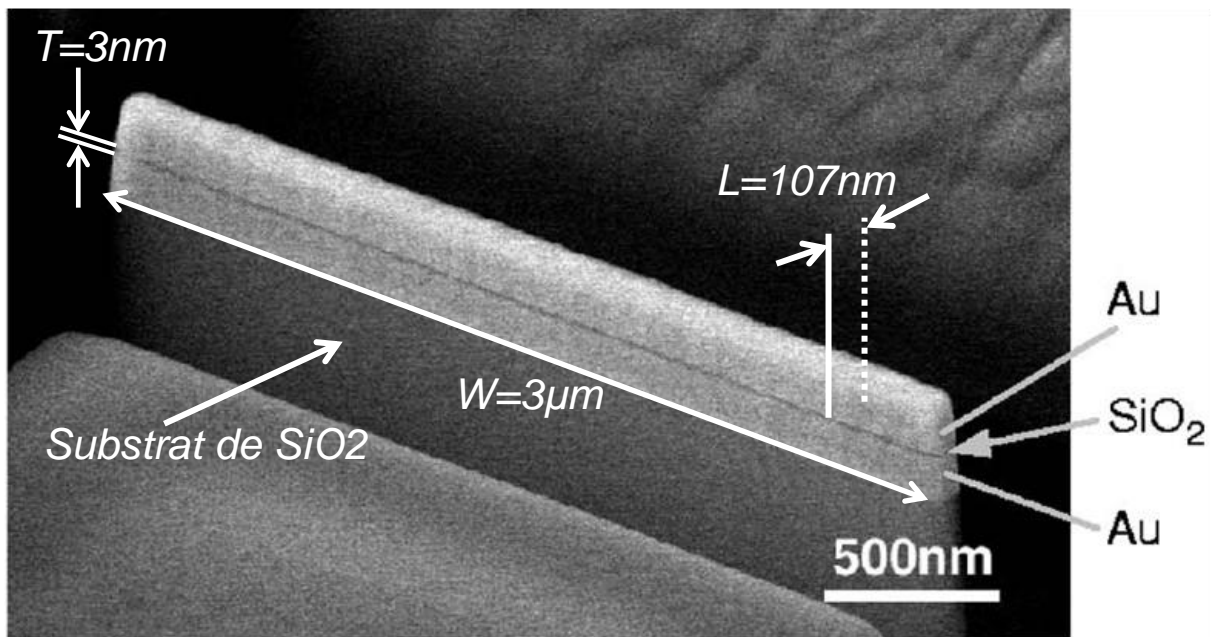


Figure 3 : Image par le microscope électronique à transmission (TEM) d'une nano-cavité plasmonique, constituée d'une couche de silice ( $\text{SiO}_2$ ) de seulement 3nm de largeur, prise en sandwich entre deux plaques de métal d'Or. L'ensemble est déposé sur un substrat de silice fondu [Réf. 25].

Ce chapitre est consacré à la modélisation du guidage sub-longueur d'onde dans la gamme de fréquences du visible, à travers un nano-guide d'air à 2D, pris en sandwich entre deux plaques métalliques d'argent (guide de type MIM). On montrera que le couplage de ce guide avec un

couple de nano-cavités identiques d'air de forme rectangulaire, situées symétriquement de part et d'autre du guide, permet de produire à la fois les fonctions optiques de filtrage réjectif et sélectif, selon la disposition de la cavité par rapport au guide. Les faibles dimensions de ce nouveau nano-résonateur et la valeur du facteur de qualité atteinte par celui-ci, apportent une amélioration significative par rapport aux travaux antérieurs. Dans cette section, un autre nano-guide de SiO<sub>2</sub> à 2D, entouré de métal d'argent est étudié dans le domaine de fréquences des télécoms. Avec cette structure, on démontre également la possibilité de filtrer sélectivement ou par réjection une fréquence spécifique parmi le signal large bande incident. Enfin un nouveau nano-démultiplexeur, opérant dans cette région de fréquence, et bien plus compacte à ce qui existe dans la littérature, est proposé.

## III-2) Modélisation d'un Nano-guide d'air de type MIM

Dans ce chapitre on souhaite modéliser la propagation de la lumière dans un nano-guide d'air à 2D, pris en sandwich entre deux plaques métalliques d'argent (guide du type MIM). La fig. 4 montre un schéma représentatif du guide, celui-ci est orienté de sorte que la direction de propagation soit suivant 'y', la dimension transversale est suivant 'x' et suivant la dimension 'z' le guide soit infini. La largeur du guide suivant 'x' est  $d'=50\text{nm}$ , par ailleurs le signal optique incident est excité autour de  $\lambda_0=500\text{nm}$ , ceci a pour conséquence que le régime du guidage de la lumière soit sub-longueur d'onde ( $d' \ll \lambda_0$ ). En effet, un guidage classique basé sur la réflexion totale sur les parois métalliques du guide ne peut avoir lieu dans ces conditions puisque la largeur du guide  $d'$  est très largement inférieure à la limite de diffraction  $\lambda_0/2n_{\text{air}}=250\text{nm}$ , auquel cas l'onde incidente se voit rapidement évanouie et donc non propagative. Le guidage ne peut avoir lieu qu'en induisant un couplage entre l'onde électromagnétique incidente aux électrons libres sur les surfaces des deux plaques métalliques du guide, soit encore en excitant les modes plasmons-polaritons de chaque interface métal-air du guide. Le calcul de ces modes où plus précisément la relation de dispersion du guide, conduit alors à la détermination des conditions d'excitation des modes propagatifs dans le guide dans le régime sub-longueur d'onde. Bien entendu, puisque les modes plasmoniques du guide résultent du couplage du mode plasmon de surface de chaque interface, et que ceux-ci sont identiques, ceci produit le dédoublement de leur mode identique (dégénéré) en un mode symétrique et un mode antisymétrique.

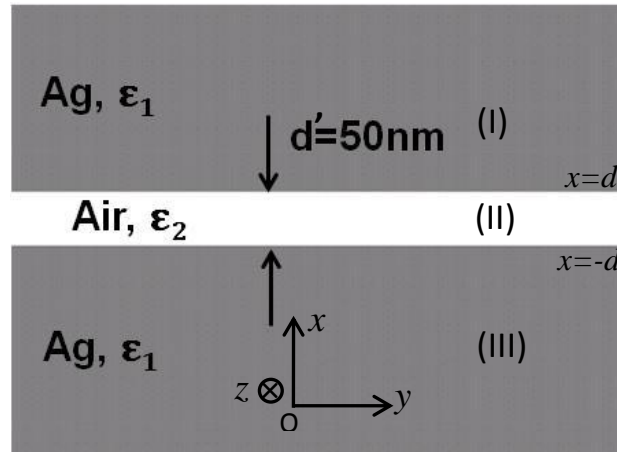


Figure 4 : Schéma d'un nano-guide plasmonique d'air de 50nm de largeur, pris en sandwich entre deux plaques de métal d'argent.

De ce fait, le calcul des modes du guide se fera en écrivant les équations de Maxwell dans chaque région du guide, en raccordant celle-ci avec les conditions aux limites et en cherchant des solutions propagatives symétriques et antisymétriques.

### III.2.1) Modes plasmons-polaritons du système MIM:

Pour déterminer les modes plasmons-polaritons du système MIM, nous reprenons l'équation de propagation des ondes électromagnétiques à partir des équations de Maxwell projetées dans le plan, puisque l'on considère une polarisation TM de l'onde incidente. En effet, il est bien connu que le couplage d'une onde électromagnétique avec une oscillation des électrons libres au niveau de la surface d'un métal est conditionné entre autres par le fait que l'onde incidente ait une polarisation transverse magnétique. Dans cette configuration, le champ électrique a deux composantes suivant 'x' et 'y' et le champ magnétique une composante suivant l'axe 'z', dans ces conditions l'équation d'onde appliquée au champ magnétique s'écrit:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) H_z - \frac{\epsilon_j}{c^2} \frac{\partial^2 H_z}{\partial t^2} = 0 \quad (3.1)$$

Où  $c$  est la célérité de la lumière et  $\epsilon_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) est la constante diélectrique du milieu 'j' considéré. Nous cherchons des solutions propagatives vers les 'y' positives ayant des profils

transverses suivant 'x' soit :  $H_z(x, y) = H_0(x)e^{i\omega t}e^{ik_y y}$  où  $k_y$  est le vecteur d'onde suivant la direction 'y'. L'injection de cette forme de  $H_z$  conduit à l'équation suivante :

$$\frac{\partial^2 H_0(x)}{\partial x^2} = (k_y^2 - \frac{\epsilon_j \omega^2}{c^2})H_0(x) \quad (3.2)$$

Puisque on cherche des solutions ayant un profil suivant l'axe des 'x' décrivant des champs localisés au niveau des interfaces et évanescents en s'éloignant de celles-ci, alors la quantité  $\alpha_j^2 = k_y^2 - \frac{\epsilon_j \omega^2}{c^2}$ , ( $j = 1, 2, 3$ ) doit être positive dans les trois régions ( $\alpha_j$ , réelle positive). Ainsi on peut exprimer les formes des solutions de l'équation (3.1) dans les trois régions comme suite :

$$H_1(x) = H_{01}e^{\alpha_1 x}, \text{ où } \alpha_1^2 = k_y^2 - \frac{\epsilon_1 \omega^2}{c^2} \text{ et } x < -d \text{ (région 1)} \quad (3.3)$$

$$H_2(x) = H_{02}(e^{\alpha_2 x} \pm e^{-\alpha_2 x}), \text{ où } \alpha_2^2 = k_y^2 - \frac{\epsilon_2 \omega^2}{c^2} \text{ et } -d < x < d \text{ (région 2)} \quad (3.4)$$

$$H_3(x) = H_{03}e^{-\alpha_3 x}, \text{ où } \alpha_3^2 = k_y^2 - \frac{\epsilon_3 \omega^2}{c^2} \text{ et } x > d \text{ (région 3)} \quad (3.5)$$

Etant donné la symétrie de la structure (les régions 1 et 3 sont identiques et  $\epsilon_1 = \epsilon_3$ ) qui est définie par rapport au plan médian du guide  $Ozy$ , coupant celui-ci au milieu et parallèlement à  $Oy$  en deux parties identiques, les deux interfaces du guide sont équivalentes et de ce fait dans l'équation (3.4) (région 2), le champ magnétique a la même amplitude (au signe près) au niveau de ces deux interfaces soit encore le même facteur multiplicatif des fonctions exponentielles.

Dans la configuration d'un mode antisymétrique du guide, le champ électrique est antiparallèle de part et d'autre par rapport à  $Ozy$  tandis que le champ magnétique est parallèle, étant donné la définition de symétrie de ces deux champs. Le mode symétrique représente la configuration inverse du mode antisymétrique. En partant de ces définitions, l'expression du champ magnétique dans la région 2, vérifie pour le mode symétrique  $H_2(-x) = -H_2(x)$  soit :

$$H_2(x) = H_{02}(e^{\alpha_2 x} - e^{-\alpha_2 x}) = 2H_{02} \sinh(\alpha_2 x) \quad (\text{région 2})$$

A partir des équations (3.1)... (3.5), on détermine la composante tangentielle du champ électrique  $E_y$  dans les trois régions du guide avec l'équation de Maxwell suivante :

$$E_{yj}(x) = -\frac{i}{\varepsilon_j \omega} \frac{\partial H_j}{\partial x}, \quad j = 1, 2 \text{ et } 3$$

Tout calcul fait on obtient :

$$E_{y1}(x) = -\frac{i\alpha_1}{\varepsilon_1 \omega} H_{01} e^{\alpha_1 x} \quad (3.6)$$

$$E_{y2}(x) = -\frac{i\alpha_2}{\varepsilon_2 \omega} 2H_{02} \cosh(\alpha_2 x) \quad (3.7)$$

$$E_{y3}(x) = \frac{i\alpha_1}{\varepsilon_1 \omega} H_{03} e^{-\alpha_1 x} \quad (3.8)$$

Ainsi en utilisant les conditions aux limites, c'est à dire la continuité de la composante tangentielle du champ magnétique et la continuité de la composante tangentielle du champ électrique au niveau des deux interfaces ( $x=-d$  et  $x=d$ ), on obtient :

$$H_{01} e^{-\alpha_1 d} = -2H_{02} \sinh(\alpha_2 d) \quad (3.9)$$

$$\frac{i\alpha_1}{\varepsilon_1 \omega} H_{01} e^{-\alpha_1 d} = \frac{i\alpha_2}{\varepsilon_2 \omega} 2H_{02} \cosh(\alpha_2 d) \quad (3.10)$$

En divisant l'équation (3.9) par (3.10), on obtient la relation de dispersion du mode symétrique :

$$\tanh(\alpha_2 d) = -\frac{\varepsilon_1 \alpha_2}{\varepsilon_2 \alpha_1} \quad (3.11)$$

Dans le cadre du guide étudié ici,  $\varepsilon_2 = 1$  (*air*) et la constante diélectrique du métal d'argent est donnée par le modèle de Drude (détaillé au chapitre 1) :

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma}$$

De même, si au lieu de choisir la fonction sinus hyperbolique dans l'équation (3.4), on choisit la fonction cosinus hyperbolique pour le champ magnétique dans la région (2) soit :

$$H_2(x) = H_{02}(e^{\alpha_2 x} + e^{-\alpha_2 x}) = 2H_{02} \cosh(\alpha_2 x)$$

Celle ci vérifie l'égalité  $H_2(-x) = H_2(x)$ , le champ magnétique  $y$  est antisymétrique et en répétant les mêmes étapes de calculs on aboutit à la relation de dispersion du mode antisymétrique:

$$\coth(\alpha_2 d) = -\frac{\varepsilon_1 \alpha_2}{\varepsilon_2 \alpha_1} \quad (3.12)$$

Ainsi à partir des équations (3.11) et (3.12), on peut tracer la courbe de dispersion du guide représentant l'évolution des modes plasmons-polaritons de surface du guide. On a choisi pour le modèle de Drude les paramètres suivant  $\varepsilon_\infty = 12.5$ ,  $\omega_p = 2.05 \times 10^{16} \text{ rad s}^{-1}$  et  $\Gamma = 1.0 \times 10^{14} \text{ rad s}^{-1}$ , qui permettent de reproduire les données expérimentales concernant l'évolution des parties réelle et imaginaire de la constante diélectrique du métal d'argent en fonction de la fréquence dans la gamme du visible [30]. Néanmoins, pour tracer les équations (3.11) et (3.12), on néglige raisonnablement le taux de relaxation du métal  $\Gamma$  devant la fréquence du signal incident dans la gamme du visible ( $\Gamma \ll \omega \sim 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$ ), c'est-à-dire que  $\varepsilon_1$  devient :

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2(1 - \frac{i\Gamma}{\omega})} \approx \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

La figure 5, montre le graphe correspondant aux deux modes avec la ligne de lumière dans le vide, on constate en particulier que les deux modes sont au dessous de la ligne de lumière. Par ailleurs, on peut remarquer que le mode symétrique est un mode à haute énergie par rapport au mode antisymétrique qui se trouve énergétiquement en dessous du mode symétrique. Le mode symétrique est quasi-plat et donc n'est pas très pratique pour des applications de guidage puisqu'on ne peut exciter des signaux large bande. A l'inverse du mode symétrique, le mode antisymétrique permet d'accéder à une large gamme de fréquence qui s'étend de l'ultra-violet jusqu'à des fréquences quasi-nulles (très grandes longueurs d'ondes), on peut exciter donc des signaux très larges bandes.

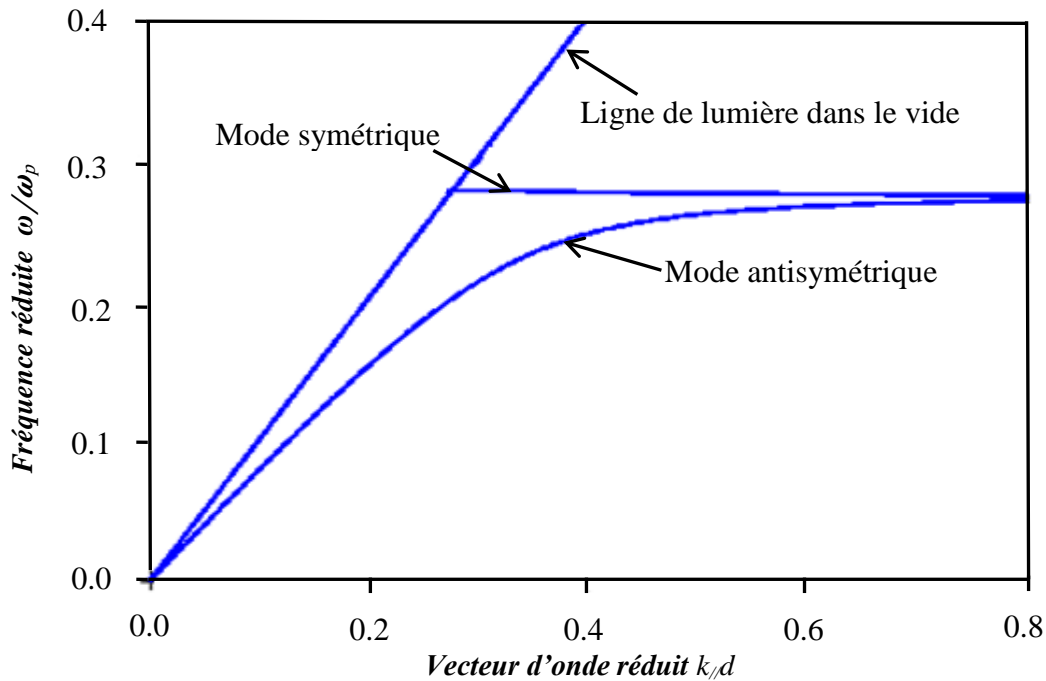


Figure 5 : Courbe de dispersion d'un nano-guide d'air pris en sandwich entre deux plaques métalliques d'argent, la largeur du guide étant  $d'=50\text{nm}$  (structure de la fig. 4).

### III-2.2) Guidage sub-longueur d'onde :

En se basant sur la discussion relative à la relation de dispersion du guide, on souhaite dans ce paragraphe investiguer les propriétés de guidage dans une telle structure. Pour ce faire, on crée une impulsion antisymétrique avec la polarisation TM de sorte à exciter le mode antisymétrique, puisque celui-ci permet de propager des signaux large bande. Le pulse est excité à l'extrémité gauche du guide d'onde, à l'intérieur de la région du cône du taper (fig. 6a), par une source de courant ( $J_x$ ) parallèle à l'axe des abscisses 'x'. Le taper introduit à l'entrée de la structure, permet au signal incident de s'adapter progressivement au guide. La source de courant, présente un profil gaussien au niveau spatial le long de la direction des 'x' (fig. 3b du chapitre II). Le courant est produit au cours d'une courte période de temps de façon à exciter des ondes électromagnétiques dans le domaine de fréquence d'intérêt, en l'occurrence ici le signal est défini dans le domaine [400nm, 1000nm] (la forme temporelle de  $J_x$  est identique à celle de la fig. 3a du chapitre II). Le signal transmis, recueilli à l'extrémité du guide d'onde, est enregistré en fonction du temps, intégré sur la section transversale du guide d'ondes et finalement la transformée de Fourier est appliquée pour obtenir le coefficient de transmission en fonction de la fréquence. De façon analogue au guide photonique étudié au chapitre-II, les calculs numériques avec la méthode FDTD dans l'étude

actuelle, sont réalisés dans une boîte bidimensionnelle (2D) (le long des axes 'x' et 'y'). Celle-ci est entourée par des couches PML appliquées aux frontières de la boîte. La structure est infinie le long de la direction 'z'. Les pas de discrétisation de l'espace suivant les deux directions 'x' et 'y' sont égaux à  $\Delta x = \Delta y = 2d'/30 = 3.33nm$ ,  $d'$  étant la largeur du guide d'ondes. La largeur et la longueur de la boîte sont respectivement  $10d'$  et  $25d'$ . Les équations du mouvement sont résolues avec un pas temporel égal à  $\Delta t = 3.10^{-3}$  fs et avec un nombre total de pas de  $2^{20}$ , qui est nécessaire pour une bonne convergence du calcul numérique. Néanmoins, ce nombre de pas temporel peut évidemment changer selon la taille de la structure, et donc des tests de convergence avec différents nombres de pas sont indispensables. Dans la fig. 6b, on montre la forme du signal incident en fonction de la fréquence dans un espace libre d'air, celui-ci présente une forme lorentzienne. Le signal transmis, recueilli via un détecteur à la sortie du guide, est donné par la fig. 6c. On remarque que la forme de celui-ci, reste quasi-identique à celle du signal incident, par ailleurs on peut noter que l'intensité du signal transmis (rapportée en unités arbitraires) est multipliée par un facteur presque égal à 1,6 par comparaison au signal incident. Ceci s'explique simplement par le fort confinement de la densité d'énergie lumineuse par unité de surface (réduction du côté parallèle à l'axe des 'x' de la surface perpendiculaire à la direction de propagation) dans le guide d'onde, en effet ce que l'on mesure via le détecteur est le module du vecteur de Poyting, et celui ci donne la densité d'énergie par unité de surface et par unité de temps, véhiculée par l'onde. De plus, on a calculé la cartographie du champ magnétique d'une onde monochromatique incidente à la longueur d'onde sur laquelle est centré le signal, soit  $0.5\mu m$  (fig. 6d). On peut noter le fort confinement du champ incident dans le guide. Sur la figure 6e, on présente également une coupe du champ magnétique perpendiculairement à la direction de propagation de l'onde (l'axe des 'y'), cette coupe présente donc le profil spatial du champ suivant l'axe des 'x' à  $y = constante$ . On constate d'un côté, la forte localisation du champ magnétique aux niveaux des deux interfaces 'air-métal' du guide, et d'autre part l'antisymétrie du champ par rapport au plan médian du guide 'Ozx' (plan de symétrie du guide); du fait que le profil spatial du champ magnétique vérifie  $H_2(-x) = H_2(x)$ , dans le plan 'Ozx'. On en déduit que le signal incident se propage effectivement grâce au mode plasmon-polariton antisymétrique du guide. Notons enfin que dans notre configuration le couplage de l'onde incidente aux électrons libres des deux plaques métalliques du guide, se fait simplement grâce aux composantes évanescentes du signal incident suivant l'axe des 'x'. L'énergie du signal évanescent suivant l'axe des 'x' est suffisante pour se coupler aux électrons libres de surface des plaques métalliques du guide; en effet le signal incident étant excité dans un domaine sub-longueur

d'onde parallèlement à 'x' (c'est-à-dire que  $d' < \lambda_0/2n_{air}$ ) l'essentiel de l'énergie du signal s'évanouit dans le métal suivant cet axe. Bien entendu, la condition d'antisymétrie du signal incident est également indispensable pour se coupler au mode plasmon-polariton antisymétrique du guide, et y est vérifiée.

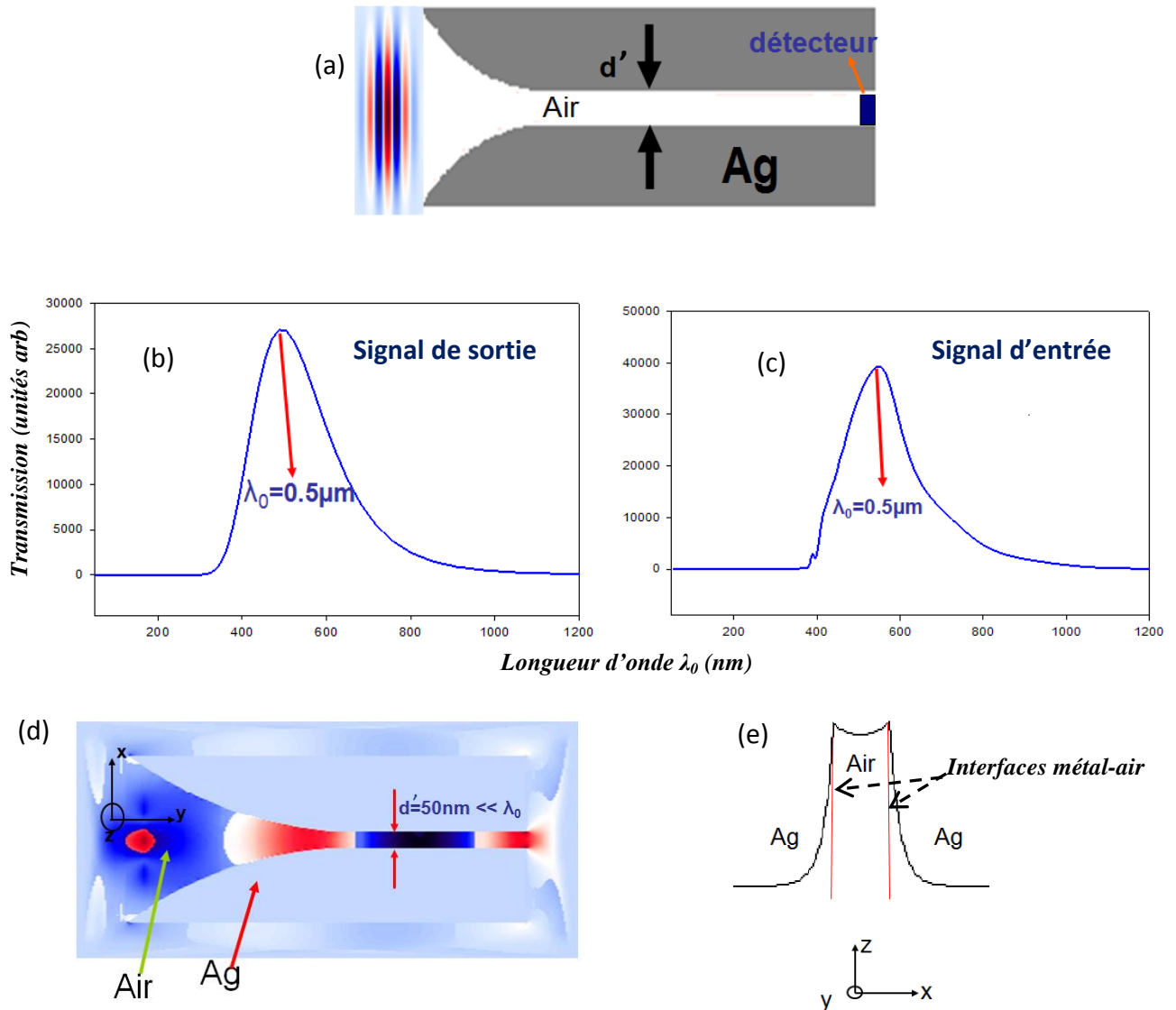


Figure 6 : (a) Schéma d'excitation d'un nano-guide de type MIM de 50nm de largeur, constitué de deux plaques métalliques d'argent parallèle séparées par l'air. Le guide a une forme en taper à l'entrée de sorte à adapter le signal incident à la partie linéaire du guide. (b) Spectre de transmission du signal utilisé pour exciter le guide en fonction de la longueur d'onde dans un espace libre d'air. (c) Spectre de transmission du même signal en fonction de la longueur d'onde dans le vide, mesuré à la sortie du guide (a). (d) Carte de champ magnétique d'une onde incidente monochromatique à la longueur d'onde centrale du signal incident, calculée dans la structure de (a). (e) Profil du champ magnétique le long de l'axe des abscisses 'x', dans un plan perpendiculaire à la direction de propagation défini par y=constante.

### III-2.3) Pertes dans le guide

L'effet de diffusion des électrons libres par des centres diffuseurs présents dans un métal (défauts, phonons, etc.), se répercute sur la propagation d'un mode plasmon-polariton dans un guide plasmonique. Effectivement, un signal lumineux se propageant dans un guide d'onde plasmonique, perd de l'énergie au fur et à mesure de sa propagation à cause de son couplage aux électrons libres du métal. Dans le but d'estimer l'effet de ces pertes sur la propagation d'un signal plasmonique antisymétrique, on reprend la forme du champ magnétique donnée dans le paragraphe précédent ( $H_z(x, y) = H_0(x)e^{i\omega t}e^{ik_y y}$ ). Dans cette formule, on voit que l'on peut relier le vecteur d'onde  $k_y$  parallèle à la direction de propagation à l'indice effectif vu par le mode plasmonique antisymétrique, qui nous intéresse ici (et dans tout ce qui suit). L'indice effectif est défini tel que  $k_y = n_{eff} k_0$  ( $k_0$  étant le vecteur d'onde dans le vide), ainsi la relation de dispersion du guide en considérant celui-ci comme un milieu effectif, s'écrit  $\omega^2 = \frac{c^2 k_y^2}{\varepsilon_{eff}}$ , avec  $\varepsilon_{eff} = n_{eff}^2$ . La constante de propagation de l'onde suivant l'axe des 'x' dans la région 2 (l'air) du guide devient :

$$\alpha_2 = \frac{2\pi}{\lambda_0} (\varepsilon_{eff} - 1)^{1/2}$$

La relation de dispersion du mode plasmon-polariton antisymétrique devient alors :

$$\coth\left[\frac{2\pi}{\lambda_0} (\varepsilon_{eff} - 1)^{1/2} d\right] = -\frac{\varepsilon_1 (\varepsilon_{eff} - 1)^{1/2}}{\varepsilon_2 (\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1)^{1/2}}$$

On note que l'indice effectif vu par le mode guidé est évidemment complexe à cause des effets de dissipation dans le métal. Par ailleurs, dans le cadre de notre étude la largeur du guide  $d'$  est prise assez petite devant la longueur d'onde du signal incident dans le vide  $\lambda_0$  ( $\lambda_0 = 10d'$ , régime sub-longueur d'onde), pour qu'on puisse se permettre de faire un développement limité au deuxième ordre de la fonction cotangente hyperbolique intervenant dans la relation de dispersion en fonction de  $H = \frac{2\pi}{\lambda_0} d$ , considérée avec une approximation raisonnable assez petite devant 1, soit :

$$\frac{1}{H(\varepsilon_{eff} - 1)^{1/2}} + \frac{H(\varepsilon_{eff} - 1)^{1/2}}{3} + o(2) = -\frac{\varepsilon_1 (\varepsilon_{eff} - 1)^{1/2}}{\varepsilon_2 (\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1)^{1/2}} \quad (3.13)$$

La résolution de cette équation se fait numériquement et ainsi pour une longueur d'onde  $\lambda_0$  incidente donnée, on peut regarder en programmant l'équation (3.13) comment varie l'indice effectif vu par le mode plasmon en fonction de la largeur du guide. L'indice effectif étant complexe, on peut l'écrire sous la forme  $n_{eff} = n'_{eff} + in_{eff}''$ , où  $n'_{eff}$  est sa partie réelle et  $n_{eff}''$  sa partie imaginaire. La partie réelle de  $n_{eff}$  nous renseigne sur la vitesse de propagation du mode dans le guide via la relation :

$$v_{spp} = \frac{c}{n'_{eff}} \quad (3.14)$$

La partie imaginaire est d'une importance capitale puisqu'elle nous permet d'estimer la longueur de propagation du signal plasmon, définie comme étant la longueur au bout de laquelle la puissance par unité de surface (intensité de l'onde), véhiculée par le signal est atténuée d'un facteur 1/e [31], soit :

$$L_{spp} = \frac{\lambda_0}{4\pi n_{eff}''} \quad (3.15)$$

Grâce à (3.15), on peut quantifier l'impact de dissipation d'énergie par effet joule dans le métal, sur la propagation du plasmon.

Dans la fig. 7a, on rapporte la variation de la partie réelle de l'indice effectif en fonction de la largeur du guide pour trois longueurs d'ondes différentes, contenues dans le signal large bande incident,  $\lambda_0 = 500nm, 600nm$  et  $700nm$ . On peut noter une variation non linéaire hyperbolique en  $1/d'$ , de la partie réelle de  $n_{eff}$  en fonction de  $d'=2d$ , et ce identiquement pour les trois longueurs d'ondes. Cependant, l'augmentation progressive de  $\lambda_0$  de  $500$  à  $700nm$  conduit à l'abaissement des courbes  $n'_{eff} = f(d')$  dans le sens des faibles valeurs de  $n'_{eff}$ . Toutefois, le décalage entre les trois courbes pour chaque valeur de  $\lambda_0$  n'est pas très grand. Le comportement de la partie réelle de  $n_{eff}$  en fonction de  $d'$ , montre d'une part que pour une longueur d'onde incidente donnée, et pour des valeurs de  $d' < 20nm$  on a un ralentissement quasi-brutal de la vitesse de propagation du mode. Pour  $d' > 20nm$ , on note une augmentation progressive mais faible de cette vitesse jusqu'à une limite asymptotique pour  $d' > 100nm$ . D'autre part, l'augmentation de la longueur d'onde incidente pour  $d' = cste$ , entraîne une augmentation de la vitesse du mode ( $n'_{eff} = 1.33$  à  $\lambda_0=500nm$ ,  $n'_{eff} = 1.30$  à  $\lambda_0=600nm$  et  $n'_{eff} = 1.29$  à  $\lambda_0=700nm$ , pour  $d' = 50nm$ ) qui est néanmoins pas très significative sauf pour des valeurs de la largeur du guide inférieures à  $20nm$ , où on voit en effet un plus grand

décalage entre la courbe pour  $\lambda_0 = 500nm$  et les deux autres courbes pour  $\lambda_0 = 600nm, 700nm$ , qui sont très proches (quasiment superposables). Cette dernière remarque, laisse entendre que l'augmentation de la longueur d'onde incidente n'a presque plus d'effet sur la partie réelle de l'indice effectif (donc sur la vitesse du mode), à partir d'une certaine valeur supérieure où égale à 600nm.

La figure. 7b, montre la variation de la partie imaginaire de l'indice effectif en fonction de la largeur du guide pour les mêmes valeurs de longueurs d'ondes incidentes que dans la figure. 7a. On observe, le même type de variation de la partie imaginaire en fonction de  $d$ , que celui de la partie réelle de  $n_{eff}$ , avec néanmoins une nette différence d'ordre de grandeur des valeurs prises par celles-ci. Les valeurs prises par la partie imaginaire sont bien plus faibles, et sont comprises entre  $4.10^{-3}$  et  $4.10^{-2}$ . On a également la même dépendance des courbes  $n_{eff}'' = f(d')$  en fonction de la longueur d'onde incidente. Ce résultat, montre que le confinement de la lumière dans un guide plasmonique ne peut augmenter indéfiniment, même si en théorie il n'y a pas de limite infranchissable comme celle de la diffraction dans les guides photoniques. En effet, pour  $d' < 20$  on note une nette augmentation de  $n_{eff}''$  et donc des pertes par effet joule dans le métal. Néanmoins, pour des applications ne nécessitant pas de longues distances de propagation, comme par exemple la conception de cavités filtrantes telles que celle conçue par Miyazaki et Kurokawa [25] (voir la figure 3), on peut augmenter le confinement sans limite, ce qui constitue un résultat inégalable par les guides photoniques classiques.

Pour une meilleure illustration du comportement de la partie imaginaire de  $n_{eff}$ , on donne dans la fig. 7c la longueur de propagation du plasmon ( $L_{spp}$ ) en fonction de  $d'$  pour les longueurs d'ondes incidentes 500nm, 600nm et 700nm. On peut remarquer une augmentation quasi-linéaire de  $L_{spp}$  en fonction de  $d'$ , traduisant de fortes pertes dans le métal avec un fort confinement du mode (forte diminution de  $d'$ ). L'augmentation de  $\lambda_0$  à  $d'=50nm$ , entraîne l'augmentation de  $L_{spp}$  de  $4.5\mu m$  pour  $\lambda_0 = 500nm$  à pratiquement  $7\mu m$  pour  $\lambda_0 = 600nm$ , et jusqu'à  $8.2\mu m$  pour  $\lambda_0 = 700nm$ . Ce résultat peut s'expliquer par le fait que la constante de propagation  $\alpha_1 = (k_y^2 - \frac{\epsilon_1 \omega^2}{c^2})^{1/2}$  du pulse incident suivant 'x' dans le métal, diminue avec l'augmentation de la fréquence (diminution de  $\lambda_0$ ). En effet, à l'approche des hautes fréquences, on peut négliger le taux de relaxation  $\Gamma$  dans le métal devant la fréquence du pulse

incident ( $\Gamma = 10^{14} rad s^{-1} \ll \omega \sim 10^{15} rad. s^{-1}$ ), c'est-à-dire que  $\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2(1 - \frac{i\omega\Gamma}{\omega^2})} \approx \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$ . La constante de propagation devient alors  $\alpha_1 = (k_y^2 - \frac{(\epsilon_\infty \omega^2 - \omega_p^2)}{c^2})^{1/2}$ . De ce fait,

et puisque  $\alpha_1 > 0$ , alors l'augmentation de  $\omega$  revient à diminuer  $\alpha_1$ . Or les modes propagatifs dans le guide ont un profil suivant 'x' dans le métal de la forme  $e^{\pm\alpha_j x}$  ( $j=1$  ou  $3$ ), où  $x < 0$  ou  $x > 0$  (selon la région du guide, 1 ou 3), c'est-à-dire que l'onde incidente pénètre plus dans le métal avec la diminution de  $\alpha_1$  (augmentation de  $\omega$ ). Ceci, conduit à plus d'absorption d'énergie du signal incident, et en définitif à la diminution de  $L_{spp}$ . Ce modèle analytique simple a le mérite de nous permettre, de fixer d'une part une certaine vitesse de propagation du mode plasmon dans le guide, et d'autre part la longueur de propagation du plasmon souhaitée en fonction des applications envisagées ; et ce par un choix judicieux de la largeur du guide, basé sur les résultats de la figure 7.

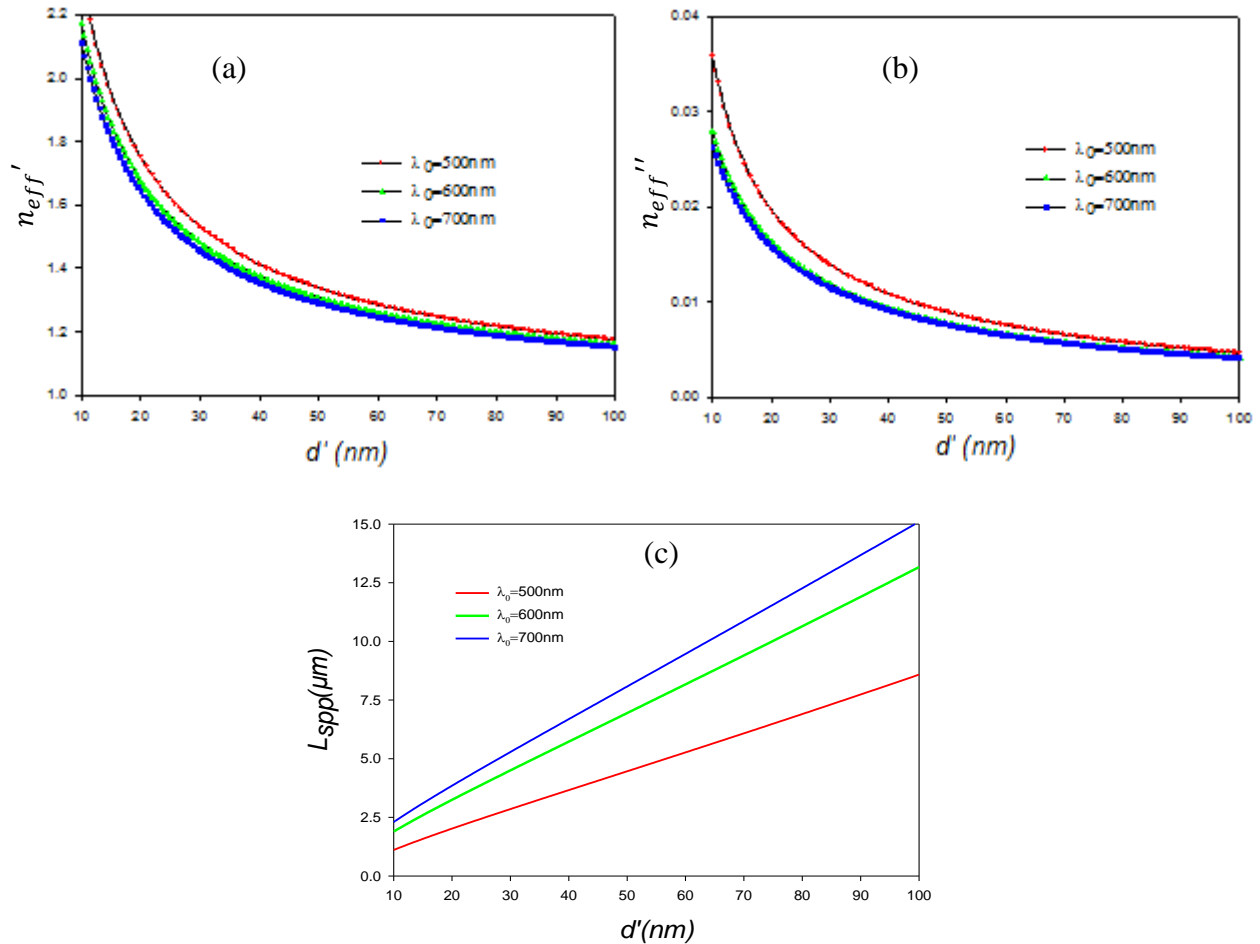


Figure 7 : (a) Variation de la partie réelle de l'indice effectif en fonction de la largeur du guide  $d'$ , pour trois valeurs fixes de longueurs d'ondes incidentes  $\lambda_0=500$ nm, 600nm et 700nm. (b) Variation de la partie imaginaire de l'indice effectif en fonction de la largeur du guide pour les mêmes valeurs de longueurs d'ondes incidentes fixes que dans (a). (c) Variation de la longueur de propagation du signal plasmonique dans le guide (distance au bout de laquelle l'intensité du signal est divisée par e) pour  $\lambda_0=500$ nm, 600nm et 700nm.

### III-2.4) Evaluation numérique de l'effet de dissipations dans le guide

La validité du modèle analytique simple exposé dans le paragraphe précédent est conditionnée par la validité de l'approximation de la fonction cotangente hyperbolique au second ordre en fonction de  $H = \frac{2\pi}{\lambda_0}d$ , intervenant dans la relation de dispersion du guide. Dans le but de s'assurer du bien fondé de cette approximation, on a tenté d'évaluer l'effet de dissipation sur la propagation du plasmon avec la méthode FDTD. Ceci, consiste simplement à placer divers détecteurs de la puissance véhiculée par le mode plasmon (vecteur de Poyting), à divers endroits du guide. Plus précisément, on a placé 10 détecteurs dans le guide à partir de l'entrée du guide, séparés par une distance régulière de  $\delta = 227nm$ . Ceci permet de mesurer la dégradation progressive de l'énergie du mode, et de mesurer le paramètre  $L_{spp}$ ; et ce pour les mêmes longueurs d'ondes que celles traitées analytiquement puisque numériquement on excite un signal plasmon large bande contenant celles-ci. Ainsi en comparant les résultats numériques aux résultats analytiques, on peut estimer la validité du modèle analytique.

La figure 8a, montre le signal recueilli sur les dix endroits du guide où sont placés les 10 détecteurs ; le premier détecteur mit juste à l'entrée du guide est pris comme référence en terme de puissance incidente et comme origine de la distance parcourue par le mode. On peut remarquer la dégradation progressive de la puissance véhiculée par l'onde au fur et à mesure de sa propagation dans le guide. Pour mieux caractériser cette dégradation d'énergie, on a tracé dans la fig. 8b, le logarithme de l'intensité de l'onde rapporté à l'intensité de référence en fonction de la distance parcourue pour trois longueurs d'ondes incidentes ( $\ln \frac{I_y}{I_0} = f(y)$ ), à savoir  $\lambda_0 = 500nm, 600nm$  et  $700nm$ . On observe alors en effet une décroissance quasi-linéaire de  $f(y)$ , ce qui veut dire que l'on a :

$$\ln \frac{I_y}{I_0} = -\alpha.y$$

Soit encore :

$$I_y = I_0 e^{-\alpha.y}$$

On trouve les valeurs suivantes pour le coefficient directeur de  $f(y) = \ln \frac{I_y}{I_0}$  pour chaque valeur de  $\lambda_0$  :

$$\alpha = 1.960.10^{-4}, \text{ pour } \lambda_0 = 500nm$$

$$\alpha = 1.298.10^{-4}, \text{ pour } \lambda_0 = 600nm$$

$$\alpha = 1.111.10^{-4}, \text{ pour } \lambda_0 = 700nm$$

L'inverse du coefficient  $\alpha$  correspond à  $L_{spp}$ , puisque  $\alpha^{-1}$  coïncide avec la distance au bout de laquelle, la puissance du mode plasmon est divisée par e, ainsi on obtient les valeurs de  $L_{spp}$  pour chaque valeur de  $\lambda_0$  :

$$L_{spp} \approx 5.1\mu m, \text{ pour } \lambda_0 = 500nm$$

$$L_{spp} \approx 7.7\mu m, \text{ pour } \lambda_0 = 600nm$$

$$L_{spp} \approx 9.0\mu m, \text{ pour } \lambda_0 = 700nm$$

Les valeurs analytiques de  $L_{spp}$  pour ces valeurs de longueurs d'ondes incidentes, et pour  $d'=50nm$ , obtenues dans le paragraphe précédent sont :

$$L_{spp} = 4.5\mu m, \text{ pour } \lambda_0 = 500nm$$

$$L_{spp} \approx 7.0\mu m, \text{ pour } \lambda_0 = 600nm$$

$$L_{spp} \approx 8.2\mu m, \text{ pour } \lambda_0 = 700nm$$

On observe un décalage entre les valeurs théoriques et numériques de  $L_{spp}$  qui est de l'ordre de 11% pour  $\lambda_0 = 500nm$ , 9% pour  $\lambda_0 = 600nm$  et de 8.8% pour  $\lambda_0 = 700nm$ . Cet écart relatif diminue avec l'augmentation de la longueur d'onde incidente, ce qui s'explique par le fait que le développement limité (voir l'Eq. 3.13) est d'autant plus bon que le rapport  $\frac{d}{\lambda_0}$  diminue, or c'est le cas avec l'augmentation de  $\lambda_0$ . On peut néanmoins, compte tenu des écarts relatifs constatés qui ne sont pas très élevés, juger le modèle analytique assez fiable dans la mesure où celui ci nous permet de faire des estimations assez bonnes de  $L_{spp}$  pour une largeur donnée du guide, ainsi que la vitesse de déplacement du mode plasmon dans le guide. Ceci peut être crucial avant de faire des réalisations expérimentales ou technologiques de telles structures. Notons par ailleurs, que l'équivalent de la fig. 7c donnant la variation de  $L_{spp}$  en fonction de  $d'$ , peut être complètement reconstituée en faisant simplement varier dans le

modèle numérique la largeur du guide ; de sorte à refaire pour chaque valeur de  $d'$  la mesure de la dégradation de la puissance de l'onde par les dix détecteurs placés dans le guide.

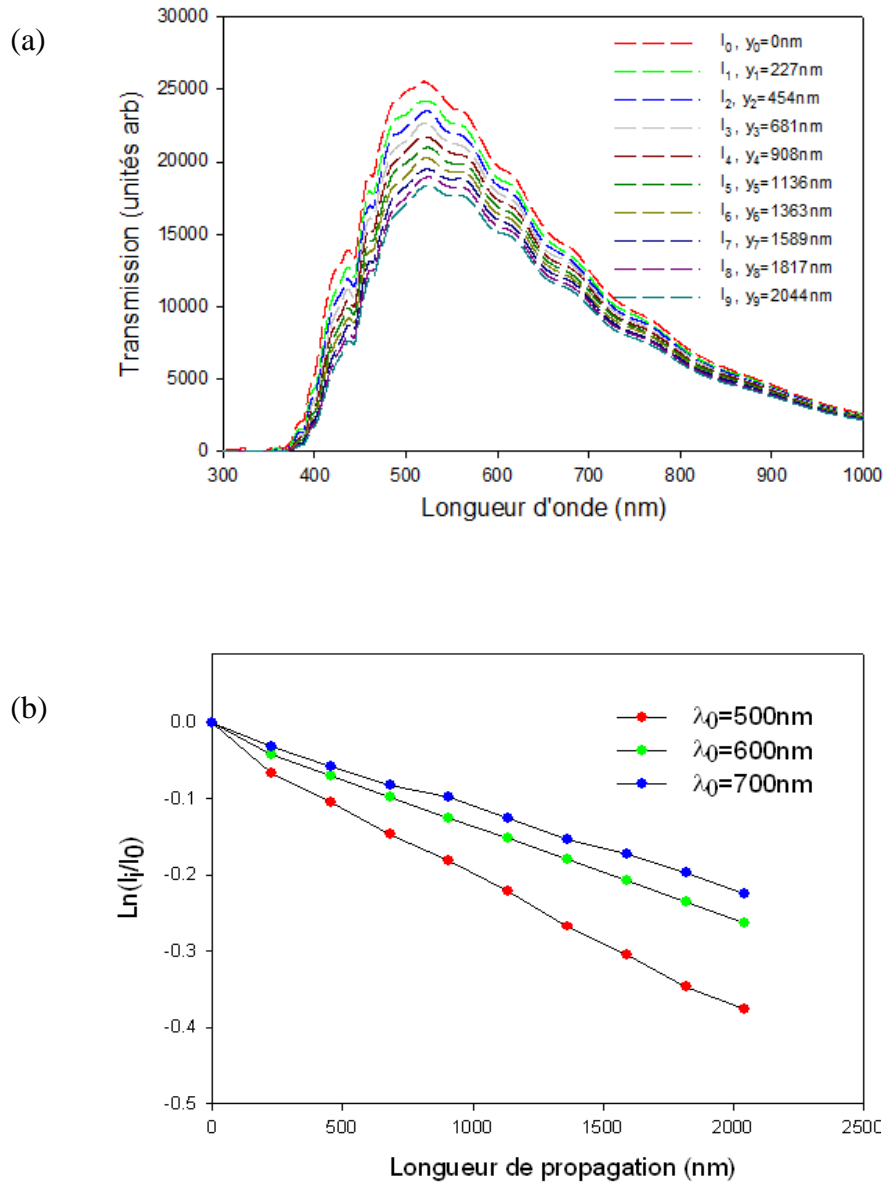


Figure 8 : (a) Transmission d'un signal plasmon-polariton large bande, mesurée à dix endroits régulièrement espacés de 227nm du guide, où sont placés des détecteurs de la puissance véhiculée par l'onde (vecteur de Poyting). (b) Evolution du logarithme népérien de la puissance de l'onde rapporté à la puissance incidente (juste à l'entrée du guide), prise comme référence en fonction de la distance parcourue par le signal pour trois valeurs de longueurs d'ondes incidentes  $\lambda_0=500$ nm, 600nm et 700nm.

Un autre paramètre important lié au processus du guidage sub-longueur d'onde par des guides plasmoniques est le facteur qui permet de comparer le gain en termes de confinement d'un mode plasmon donné, rapporté aux pertes qui accompagne ce confinement [32]. Ce paramètre (sans dimension) inspiré du rapport qualité-prix de la théorie économique de marché, permet de caractériser les bons guides d'ondes des mauvais ; selon cette définition on peut l'écrire comme suite :

$$M = \frac{\text{confinement}}{\text{pertes}}$$

Le confinement du mode plasmon est défini comme l'inverse de l'extension spatiale de celui-ci perpendiculairement à la direction de propagation, c'est-à-dire deux fois la distance de pénétration du mode dans le métal + la largeur du guide ( $d' = 50nm$ ). Or en se rappelant que le champ magnétique dans le métal parallèlement à 'x', s'écrit  $H_1(x) = H_{01}e^{\alpha_1 x}$  ( $x < 0$ ), où  $\alpha_1 > 0$  est la constante de propagation du mode dans le métal, on peut déterminer la taille du mode par :

$$\delta = \frac{2}{\alpha_1} + d'$$

Les pertes sont données par l'atténuation du mode lors de sa propagation, c'est-à-dire par :

$$\text{Pertes} = \text{Im}(k_y)$$

Ainsi le rapport confinement-pertes s'écrit :

$$M = \frac{\frac{1}{\delta}}{\text{Im}(k_y)} = \frac{1}{\delta \text{Im}(k_y)}$$

Par ailleurs dans le paragraphe III-2.3, on a vu qu'on pouvait approcher le paramètre  $\alpha_1$  par  $(k_y^2 - \frac{(\epsilon_\infty \omega^2 - \omega_p^2)}{c^2})^{1/2}$  quand  $\Gamma = 10^{14} \text{rad s}^{-1} \ll \omega \sim 10^{15} \text{rad. s}^{-1}$ , ce qui est vraie pour  $\lambda_0 = 500nm, 600nm$  et  $700nm$ . Avec cette approximation on obtient  $\frac{1}{\alpha_1} \approx 18nm$  pour  $\lambda_0 = 500nm$ ,  $\frac{1}{\alpha_1} \approx 17nm$  pour  $\lambda_0 = 600nm$  et  $\frac{1}{\alpha_1} \approx 16nm$  pour  $\lambda_0 = 700nm$ . Ainsi, l'évaluation de  $M$  pour ces mêmes longueurs d'ondes donne les valeurs suivantes :

$$M = 97 \text{ pour } \lambda_0 = 500nm$$

$$M = 170 \text{ pour } \lambda_0 = 600nm$$

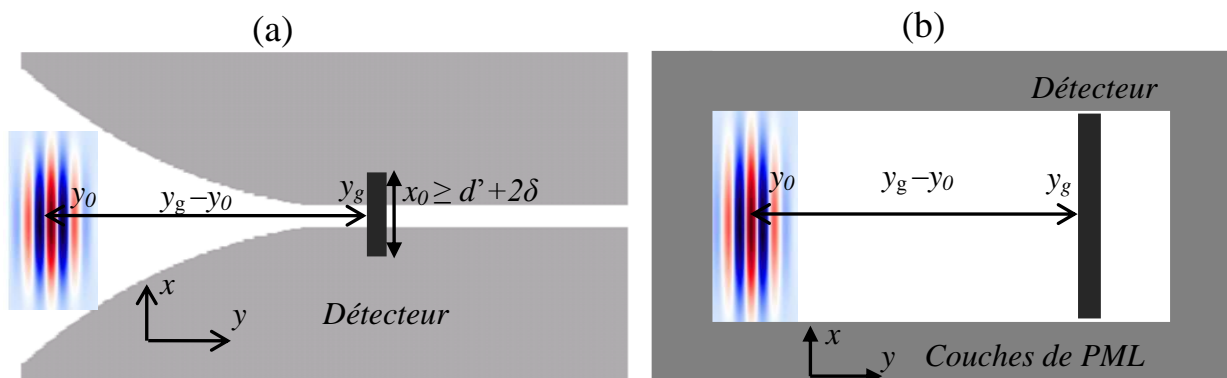
$$M = 203 \text{ pour } \lambda_0 = 700nm$$

On note une augmentation assez importante du rapport confinement-pertes en augmentant la longueur d'onde incidente, ce qui est à relier avec ce qui a été discuté auparavant à savoir qu'en augmentant  $\lambda_0$ , l'onde incidente pénètre moins dans le métal et ainsi on diminue l'effet des dissipations par effet joule, ce qui conduit à l'augmentation de  $M$ . Cependant ce paramètre de rapport confinement-pertes pour un mode plasmon donné, prend tout son sens en le comparant pour une fréquence donnée pour des structures différentes servant comme guides de modes plasmons-polaritons ; afin de distinguer parmi ces guides ceux qui sont de bonne qualité de ceux qui sont de mauvaise qualité en évaluant la grandeur ' $M$ '. Il est néanmoins intéressant de constater que pour le guide étudié ici, le paramètre  $M$  est d'autant plus grand que  $\lambda_0$  est grand ; c'est-à-dire plus le rapport  $\frac{d'}{\lambda_0}$  est petit, plus le rapport confinement-pertes est grand. Ce qui constitue un résultat sans équivoque en comparaison avec les guides photoniques dans lesquels plus on confine une longueur d'onde donnée (réduction de la largeur du guide) plus les pertes radiatives augmentent.

### III-3) Pertes par injection du signal dans le guide

On se propose dans ce paragraphe d'évaluer numériquement les pertes d'énergies qui accompagnent inéluctablement le processus d'insertion d'un signal plasmon dans le guide à partir de la région où se situe le taper, là où le signal est créé. Il est un fait bien connu dans la communauté des opticiens, concernant le problème de couplage de la lumière avec un guide d'onde dans lequel on souhaite y insérer celle-ci. Généralement, la lumière qu'on souhaite injecter dans un guide d'onde est récupérée à la sortie d'une fibre optique, et les pertes dans ce cas varient de quelques dB jusqu'à plusieurs dB parfois [33]. Ces pertes par couplage dépendent entre autres de la longueur d'onde du signal qu'on veut transférer de la fibre à un guide d'onde. Généralement, les pertes augmentent avec la longueur d'onde et également avec la réduction des dimensions du guide. Dans le cadre de notre étude ici, il n'est pas question d'injecter une onde électromagnétique à partir de l'extrémité d'une fibre optique ; néanmoins il est intéressant d'estimer le degré de couplage de l'onde incidente avec le guide, puisque celle-ci est créée dans une région en forme de taper et est ensuite couplée au guide. Le signal

incident n'est en effet pas excité directement dans le guide, et ceci est fait dans le but d'adapter la lumière incidente progressivement au guide afin de conserver la forme du signal incident. Numériquement, on a procédé dans un premier temps à la mesure de la puissance véhiculée par l'onde incidente (vecteur de Poyting) au niveau de l'entrée du guide. La position de l'entrée du guide ( $y_g$ ) est choisie de façon à laisser assez d'espace pour que le signal puisse s'établir dans le guide. Rappelons que cette distance est suivant l'axe des 'y' (l'axe de propagation du signal). Au niveau transversal (// à l'axe des 'x'), la puissance de l'onde incidente est mesurée sur une distance de telle sorte que celle-ci englobe la section du guide mais également de part et d'autre du guide une distance suffisante ( $\geq \delta$  où  $\delta$  est l'épaisseur de peau dans le métal d'argent) pour récolter toute l'énergie du signal. Effectivement, ceci est nécessaire puisque l'essentielle de l'énergie est confinée dans le guide, mais également de part et d'autre dans le métal à cause de la pénétration du mode dans celui-ci. A l'issue de ceci on compare l'énergie mesurée à l'énergie de référence, qui est associée au même signal sur une même distance de propagation (// à y) dans un espace libre d'air où il n'y a aucune perte, mais sur une distance transversale (// à x) qui prend en compte l'étalement du signal dans le vide, c'est-à-dire toute la largeur de la boîte entourée de couches PML dans laquelle on effectue la mesure. Dans la fig. 9a, on montre le schéma de mesure de la puissance du signal couplé au guide, et dans la fig. 9b le schéma de mesure dans le vide.



*Figure 9 : (a) Schéma de mesure de la puissance du signal incident, couplée au guide au bout d'une distance de propagation comprenant l'endroit où le signal est excité (région du taper) et la position où celui-ci est suffisamment établi dans le guide ( $y_g - y_0$ ). La puissance est mesurée au niveau transversal sur une distance  $x_0 \geq d' + 2\delta$ , où  $\delta$  est l'épaisseur de peau dans le métal d'argent et  $d'$  la largeur du guide. (b) Schéma de mesure de la puissance véhiculée par le même signal dans un espace libre d'air entouré de couches de PML, sur une même distance de propagation  $y_g - y_0$ , et transversalement sur toute la largeur de la boîte (prise en compte de l'étalement de l'onde).*

Dans la fig. 10a, on montre le spectre de transmission contenant les résultats de mesure des deux schémas précédents, où on peut comparer la puissance des deux signaux. On note en effet, une nette différence en termes de puissance recueilli par les détecteurs des deux configurations ; ce qui traduit bien évidemment que le couplage du signal incident crée dans la région du taper avec le guide s'accompagne par des pertes non négligeables. On peut dire ainsi que le couplage entre l'onde incidente et le guide ne se fait qu'à un certain pourcentage et qu'il ne se fait pas à 100%. Dans ce but, c'est-à-dire la quantification de ces pertes, on a représenté dans la fig. 10b, le rapport des deux puissances mesurées en dB en fonction de la longueur d'onde en nm. On observe alors, au niveau de la tendance globale un faible couplage pour les faibles longueurs d'ondes avec le guide traduit par des fortes pertes jusqu'à 10dB pour  $\lambda_0=400nm$ , et un plus fort couplage au fur et à mesure que  $\lambda$  augmente ; on atteint en effet 1dB à 900nm. Pour la longueur centrale du signal qui nous intéresse plus particulièrement ici,  $\lambda_0=500nm$ , on a environ 5dB de pertes soit un couplage de 53% (47 % de pertes), ce qui constitue un bon résultat au vue de l'état de l'art. En effet, les guides photoniques classiques (basé sur le contraste d'indice), avec un degré de couplage de l'ordre de 35% (9dB) [33], constituent des candidats potentiels pour être intégrés dans des dispositifs optiques complexes tels que les circuits optiques.

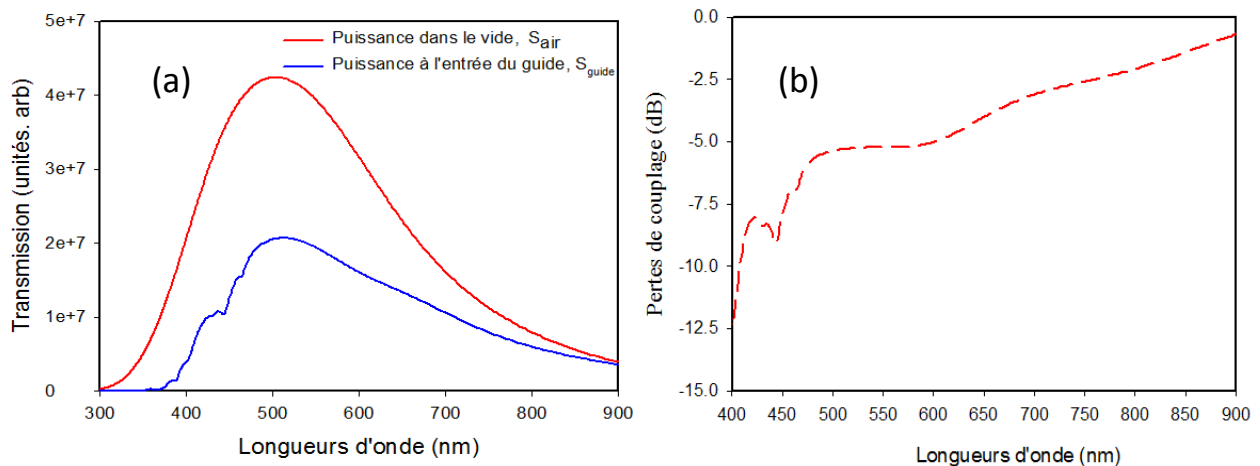


Figure 10 : (a) Spectre de transmission, mesurant la puissance du signal incident au niveau de l'entrée du guide (courbe bleu), correspondant au schéma de la fig. 9a ; dans le même spectre est présenté la transmission du même signal dans le vide (courbe rouge), qui correspond au schéma de la fig. 9b. (b) Rapport de la puissance mesurée à l'entrée du guide et celle mesurée dans le vide sur une même distance de propagation en dB en fonction de la longueur d'onde en nm.

### III-4) Etude du couplage du guide avec une nano-cavité rectangulaire d'air :

Dans le chapitre-II, on a étudié différents types de fonctionnalités optiques telles que, le filtrage par réjection, filtrage sélectif et démultiplexage. On a montré la possibilité de réaliser de tels phénomènes, nécessaires pour la conception de circuits tout-optique, par des structures photoniques dont les dimensions latérales sont néanmoins limitées par la limite de diffraction. Autrement dit, ces structures ne peuvent pas être réalisées à l'échelle du nanomètre, ce qui empêche la possibilité de concevoir des nano-dispositifs optiques traitant de l'information, à l'image des nanocircuits électroniques. Dans ce contexte, on veut dans ce chapitre démontrer la possibilité de réaliser des fonctions de filtrage, avec des structures permettant l'accès à l'échelle nanométrique grâce au plasmon-polariton de surface.

Dans cet état d'esprit, on souhaite étudier le couplage du guide de plasmons-polaritons modélisé au paragraphe III-2.2, avec deux cavités rectangulaires de dimensions nanométriques également, disposées symétriquement sur le côté du guide de part et d'autre de celui-ci. On se réfère aux dimensions de la cavité par le couple  $(l, w)$ , où  $l$  est le plus grand côté de la cavité (la longueur de la cavité) et  $w$  le plus petit côté (la largeur de la cavité). La fig. 11, montre une telle structure.

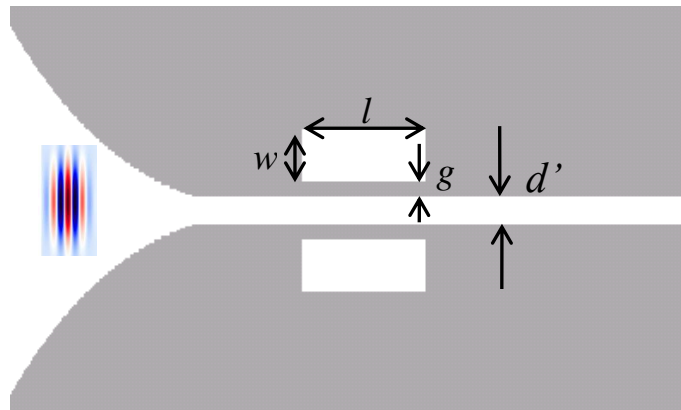


Figure 11 : Schéma d'un nano-guide de plasmons-polaritons, couplé à une nano-cavité rectangulaire, disposée sur le côté du guide, symétriquement de part et d'autre du guide. La cavité est constituée du même diélectrique que le guide à savoir l'air.

Le couplage du guide à la cavité dépend du paramètre  $g$ , qui correspond à l'épaisseur de la tranche métallique séparant le guide de la cavité, on l'appellera dans tout ce qui suit le gap

métallique. A travers ce gap, on peut dire que l'interaction du guide avec la cavité se fait par évanescente, ce qui veut dire que  $g$  permet de commander l'intensité de couplage, guide-cavité. L'excitation du mode plasmon-polariton antisymétrique du guide se fait dans les mêmes conditions qu'auparavant, à savoir un pulse antisymétrique est créé à l'extrémité gauche du guide (au niveau du taper) avec un pulse de courant gaussien, spatialement centré sur le milieu du guide et parallèle à l'axe des ' $x$ '. Le pulse est aussi gaussien dans le temps, sa durée finie  $\Delta t$  est réglée de sorte à ce que le domaine de fréquence du pulse électromagnétique via la transformée de Fourier soit dans la gamme [400nm, 900nm].

Dans tout ce qui suit, les spectres de transmission sont normalisés par rapport à un guide dit parfait ; c'est-à-dire en absence de cavité et sont rapportés en décibel en fonction de la longueur d'onde du signal incident dans le vide en nanomètre. Dans un premier temps, nous fixons les dimensions de la cavité et regardons l'effet physique produit par le couplage du guide avec celle-ci. Les dimensions choisies au départ sont  $240nm$  pour la longueur  $l$  et  $100nm$  pour la largeur  $w$ , on peut noter que celles-ci sont assez petites en comparaison avec la longueur d'onde centrale du signal incident ( $\lambda_0=500nm$ ). Avant de discuter les phénomènes physiques qui résultent du couplage du guide avec la cavité, notons que la transmission est enregistrée à la partie droite de la structure (sortie du guide), tandis que la réflexion est mesurée à quelques centaines de nanomètres de l'entrée du guide de sorte à éviter le couplage du signal établi dans le guide avec la région du taper. La réflexion n'est pas mesurée automatiquement comme la transmission, mais l'on procède comme suit :

- a) On place un détecteur à un endroit de quelques centaines de nanomètres de l'entrée du guide qu'on repère par  $y_{ref}$  suivant ' $y$ ' et par  $x_{ref}$  suivant ' $x$ '; de sorte à visualiser le champ magnétique de l'onde incidente dans le temps, dans le but d'identifier les instants ( $t_1, t_2$ ) qui correspondent respectivement aux passages du signal incident et du signal réfléchi par  $y_{ref}$ .
- b) On fait un calcul de transmission test sur un temps relativement court mais néanmoins suffisant afin d'ajuster la position de la cavité, de sorte à ce que la durée  $\Delta t = t_2 - t_1$  soit la plus grande possible ; généralement en éloignant la cavité de  $y_{ref}$ , ce qui exige d'allonger le guide d'avantage afin d'éviter le couplage de la cavité avec la sortie du guide sans pour autant trop allonger le guide, auquel cas on augmente de trop la taille de la structure et ainsi le temps de calcul.
- c) Enfin une fois que la durée temporelle  $\Delta t$  est suffisamment grande pour que le signal incident à  $y_{ref}$  soit complètement découplé du signal réfléchi ; on place au même

endroit un détecteur et on enregistre le spectre de réflexion à partir d'un instant  $t_e$  assez grand devant  $t_l$  afin d'éliminer le signal incident dans le spectre ainsi mesuré.

La fig. 12 permet d'illustrer le procédé de mesure du spectre de réflexion, il s'agit du profil du champ magnétique relevé au point de coordonnées  $(x_{ref}, y_{ref})$ , dans les deux configurations du guide couplé à la cavité et le guide en absence de cavité. On note alors la séparation assez importante dans le temps entre le signal incident et le signal réfléchi, ce qui nous permet de relever l'instant  $t_e \approx 6500fs$  à partir duquel le signal est totalement découplé du signal réfléchi, et ainsi commencer l'enregistrement de la puissance véhiculée par celui-ci.

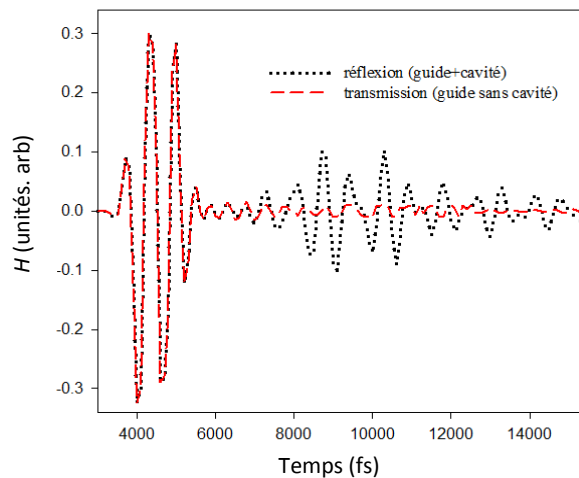


Figure 12 : Profil temporelle du champ magnétique à quelques centaines de nanomètre de l'entrée du guide ( $y_{ref}$ ), dans le cas du guide couplé à une cavité et en absence de cavité.

Dans la figure 13a, on rapporte les spectres de transmission et de réflexion correspondant à l'interaction du guide avec la cavité (schéma de la fig. 11), on observe que toutes les longueurs d'ondes sont transmises à la sortie du guide, mise à part la longueur d'onde  $\lambda=646nm$  où l'on voit une chute d'intensité de quasiment  $-30dB$  (courbes bleues en traits discontinus pointillés). Le spectre de réflexion à l'inverse, montre qu'à l'exception de la longueur d'onde  $\lambda=646nm$ , toutes les autres longueurs d'onde ne sont pas réfléchies puisque celles-ci sont enregistrées avec une chute d'énergie supérieure ou égale à  $-30dB$ . La longueur d'onde réfléchie l'étant avec des pertes de  $-6dB$ . Ceci indique un fort couplage entre le guide et la cavité à  $\lambda=646nm$ , autrement dit il y a résonance à cette longueur d'onde, ce qui conduit au piégeage de celle-ci dans la cavité, et après un certain temps de résonance à la réflexion de cette fréquence vers l'entrée du guide, ce qui est confirmé par le spectre de réflexion. Notons néanmoins que la largeur du zéro de transmission centré sur cette fréquence indique, d'une part un fort couplage entre le guide et la cavité et d'autre part des pertes d'énergie dues à

l'absorption du métal via les relaxations des électrons libres de celui-ci à cause des diffusions par les divers potentiels diffuseurs tels que les phonons, défauts de structures, impuretés, etc. Par ailleurs, le pic de réflexion indique des dissipations d'énergie de 40%, c'est-à-dire que 60% d'énergie à la fréquence de résonance est réfléchi vers l'entrée du guide. Or on peut évaluer les pertes dues à la propagation du signal réfléchi jusqu'à l'entrée du guide (à  $y_{ref}$ ), celui-ci étant séparé de la cavité par 250nm soit en comptant un aller-retour de 500nm. Ainsi d'après la figure 8b, ces pertes sont estimées par :

$$I_0 - I_{ref} = I_0 - I_0 e^{-\ln\left(\frac{I(y=500nm)}{I_0}\right)} \approx I_0 - 0,9I_0 = 0,1.I_0$$

$I_{ref}$  étant l'intensité du signal réfléchi et  $I_0$  l'intensité du signal incident à  $\lambda=500nm$ . Notons, que dans cette formule on ne comptabilise que les pertes dues au parcours du signal incident c'est-à-dire un aller-retour de l'entrée du guide à la cavité. Le résultat estimé, signifie que les pertes par propagation sont de l'ordre de 10% ; de ce fait, on peut en définitif affirmer que 30% d'énergie est absorbée dans la cavité. Les pertes dans la cavité peuvent être attribuées essentiellement à l'absorption d'énergie transportée par l'onde lumineuse à cause de la pénétration de celle-ci dans le métal. On a de surcroît, calculé la cartographie du champ magnétique pour une onde monochromatique incidente à la fréquence de résonance de la cavité (figure 13b). On voit une forte interaction entre le guide et la cavité, ce qui conduit à l'excitation d'un mode propre de la cavité, dont la caractéristique principale est que l'énergie associée à ce mode est essentiellement confinée aux niveaux des interfaces métal-air de la cavité avec une annulation de celle-ci au centre de la cavité. La configuration spatiale du mode ressemble à une onde stationnaire, oscillant suivant l'axe des 'y' et qui correspond à une demi-oscillation parallèlement à celui-ci. Néanmoins, la différence nette entre ce mode et un mode propre d'une cavité optique classique est le fort confinement observé aux niveaux des interfaces. Pour s'en assurer, on a tracé le profil du champ magnétique résonant dans la cavité en fonction de l'axe des 'y' (parallèlement à la longueur de la cavité) pour différentes positions fixes suivant l'axe des 'x' parallèle à la largeur de la cavité. Ce profil est représenté dans la figure 13c ; où on constate effectivement le fort confinement du champ magnétique sur les faces parallèles à la largeur (l'axe des 'x') de la cavité, une évanescence progressive du champ en s'éloignant des interfaces air-métal (essentiellement ceux // à x) et l'invariance du profil du champ pour les quatre positions relevées suivant la largeur de la cavité. Ainsi, on peut affirmer que ce mode piégé par la cavité est un mode de couplage de la lumière incidente à  $\lambda=646nm$  avec essentiellement les électrons libres des surfaces métalliques parallèles à l'axe

des 'x' en contact avec la cavité. En effet, un confinement du champ moins intense est également observé sur les faces du métal // à 'y' dans la fig. 13b (sauf à l'approche du milieu de ces faces où le champ s'annule). Tout ceci indique qu'il s'agit d'un mode plasmon-polariton de surface de la cavité. La symétrie d'un tel mode en suivant les règles de symétrie du champ magnétique peut être regardée par rapport aux deux axes de symétrie de la cavité à savoir l'axe  $C_x$  parallèle à l'axe des 'x' et l'axe  $C_y$  parallèle à 'y' (voir la figure 13b). Par rapport à  $C_x$ , le champ est symétrique puisque celui-ci est antiparallèle de part et d'autre de cet axe; et est antisymétrique par rapport à  $C_y$  du fait qu'il y soit parallèle des deux côtés.

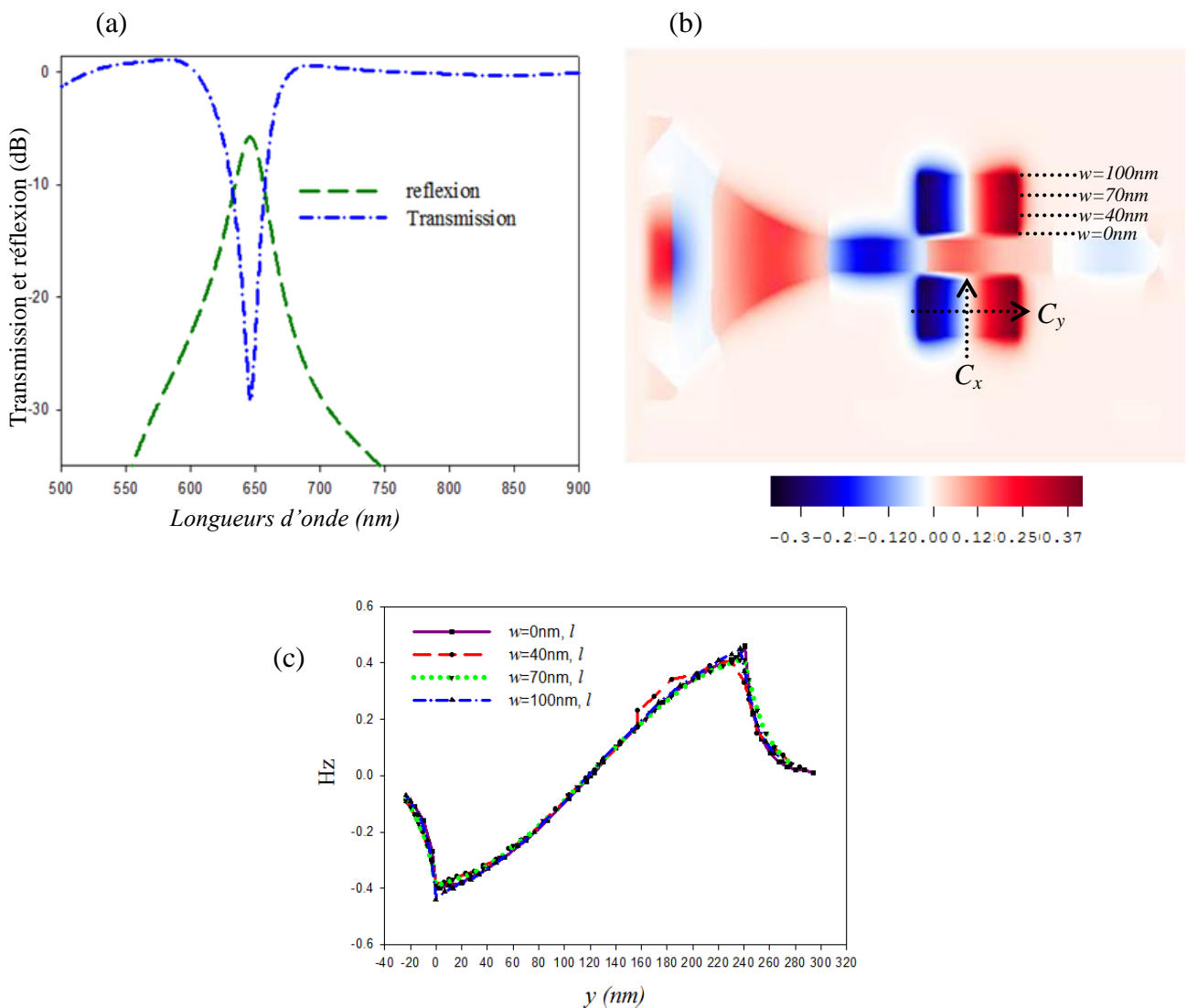


Figure 13 : (a) Spectres de transmission et de réflexion de la structure représentée par le schéma de la fig. 11. (b) Carte de champ magnétique d'une onde incidente monochromatique à  $\lambda_0=646nm$ , longueur d'onde de résonance de la cavité. (c) Profil du champ magnétique le long de l'axe parallèle à la longueur de la cavité pour différents hauteurs fixes, repérées suivant l'axe parallèle à la largeur de la cavité (axe des 'x').

En définitif, on peut dire que la cavité modélisée ici se comporte comme un filtre réjectif, puisque en effet l'énergie électromagnétique associée à une fréquence incidente, qui coïncide avec celle d'un mode plasmon-polariton de la cavité est piégée, confinée et ensuite réfléchi vers l'entrée du guide. Notons qu'un tel phénomène de filtrage a déjà été observé ; en utilisant des dispositifs jouant le rôle de résonateurs ayant des géométries en forme de micro-anneau ou de micro-disque [34, 35]. Dans ces deux références, la surface de la cavité résonnante varie entre 0.5 et 3  $\mu\text{m}^2$ . Or, le défi actuel est de concevoir des cavités résonantes à l'échelle nanométrique, pouvant s'intégrer dans des futurs nanocircuits optiques complexes. Les dimensions de notre cavité ( $l=240\text{nm}$ ,  $w=100\text{nm}$ ) sont telles que la surface de celle-ci soit de l'ordre de 0.024 $\mu\text{m}^2$ , ce qui signifie un gain de taille dont l'ordre de grandeur varie entre 21 et 125 fois. La géométrie étudiée ici apporte donc en ce sens une amélioration significative aux travaux antérieurs.

Le mode plasmon-polariton de surface de la cavité peut être évalué numériquement indépendamment du couplage de celle-ci avec le guide. Le procédé de calcul numérique, se fait de la façon suivante :

- 1) Une impulsion temporelle est créée dans une cavité isolée de tout environnement extérieur par des couches de métal épais de toute part.
- 2) La variation en fonction du temps des champs électrique et magnétique est enregistrée à différentes positions dans la cavité via un détecteur, durant le temps de simulation.
- 3) Une transformée de Fourier de la réponse temporelle est appliquée pour obtenir la réponse fréquentielle.

#### III-4.1) Influence des paramètres géométriques

Dans cette partie on regarde, comment évolue le mode plasmon de surface de la cavité ainsi que sa fréquence en fonction des différents paramètres géométriques mis en jeu à savoir la longueur  $l$  et la largeur  $w$  de la cavité. L'influence de ceux-ci est étudiée séparément, c'est-à-dire que dans un premier temps on laisse la longueur de la cavité  $l=240\text{nm}$  inchangée et on fait varier la largeur  $w$ , et ensuite on fixe celle-ci à  $w=100\text{nm}$  et on fait varier  $l$ . Ce procédé d'étude de l'effet de  $l$  et  $w$  n'est pas trivial dans le sens où la variation simultanée de ces deux paramètres peut donner des résultats différents. Dans la figure 14a, on calcule la transmission pour  $w= 60, 80, 100, 140$  et  $180\text{nm}$ . On observe un décalage de la longueur d'onde de

résonance du mode propre de la cavité vers les courtes longueurs d'ondes (hautes fréquences) avec l'augmentation de  $w$ . La fig. 14b donne l'évolution de la longueur d'onde de résonance pour  $l = 160, 180, 200, 240, 260nm$  ; cette fois ci le décalage de la longueur d'onde de résonance se fait vers les hautes longueurs d'onde (basses fréquences) et augmente avec l'augmentation de  $l$ . Les figures 14c et 14d, permettent de mieux visualiser de telles variations ; en effet, on note dans la fig. 14c une augmentation quasi-linéaire de la longueur d'onde de résonance avec l'augmentation de  $l$ , ce qui rappelle le comportement d'un mode propre d'une cavité optique classique dont la longueur d'onde augmente avec les dimensions de celle-ci. A l'inverse dans la figure 14d, on observe une diminution non linéaire de la longueur d'onde de résonance avec l'augmentation de  $w$ . Ce dernier comportement est original en comparaison avec celui des modes propres d'une cavité optique ordinaire.

Dans la référence [36], un comportement similaire à été observé dans un guide similaire à celui que nous proposons, couplé à une cavité dont les dimensions typiques sont ( $l=500nm$ ,  $w=50-100nm$ , une surface deux fois plus grande que la nôtre). Dans ce travail, les auteurs considèrent la cavité comme un guide de plasmons-polaritons tronqué ; ce qui leur permet d'assimiler les modes de résonances de la cavité à de simples ondes stationnaires qui peuvent se former sous certaines conditions de déphasages appropriés. Le raisonnement des auteurs est le suivant : le pulse optique incident se couple à la cavité via le gap 'g', effectue un aller-retour dans celle-ci et ainsi le déphasage résultant comprend un retard de phase dû au parcours de l'onde dans la cavité plus celui introduit par la réflexion de l'onde sur les faces métalliques de la cavité parallèle à sa largeur  $w$ . Ainsi, on peut écrire :

$$\Delta\varphi_{tot} = k_y \times 2l + 2\varphi_{ref-met}$$

Le déphasage  $2\varphi_{ref-met}$ , dû à la pénétration de l'onde dans le métal peut être raisonnablement négligé devant celui dû au parcours de l'onde dans la cavité. On rappelle que  $k_y$  est le vecteur d'onde du pulse parallèle à la direction de propagation et qu'il est lié à l'indice effectif vu par le mode plasmon par :

$$k_y = k_0 n_{eff} = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_{eff}.$$

En négligeant la phase due à la réflexion sur les interfaces métal-air, on obtient simplement :

$$\Delta\varphi_{tot} = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_{eff} \times 2l$$

Enfin la condition de résonance est vérifiée pour  $\Delta\varphi_{tot} = m \times 2\pi$ , où  $m$  est un entier positif, ce qui permet d'obtenir la longueur d'onde de résonance de la cavité comme suit :

$$\lambda_r = \frac{2l \times n_{eff}}{m}, \quad (3.15)$$

A partir de l'équation (3.15), on voit que la longueur d'onde de résonance augmente effectivement de façon linéaire avec la longueur de la cavité. Par ailleurs, d'après l'étude réalisée sur les pertes dans le guide (paragraphe III-2.3), on a vu dans les figures 7a et 7b, que l'indice effectif  $n_{eff}$  varie comme l'inverse de la largeur du guide ( $n_{eff} \propto 1/d'$ ). De ce fait, en considérant la cavité comme un guide de plasmons-polaritons tronqué dont la largeur ici est  $w$  et dont l'indice est  $n_{eff}$ , alors la longueur d'onde de résonance donnée par l'équation (3.15) diminue comme  $1/w$ , puisque on a  $\lambda_r \propto n_{eff} \propto 1/w$ . Ce raisonnement simple qui a le mérite de pouvoir prédire les fréquences de résonances d'une telle cavité, peut s'avérer nécessaire pour des applications liées à des réalisations expérimentales exigeant le confinement d'une fréquence spécifique dans la cavité. Néanmoins, ce modèle simple présente des limites liées au fait qu'il faut considérer la cavité comme un guide tronqué, c'est-à-dire que  $l$  doit être assez grand devant  $w$ . En effet une telle situation est réductrice, et ne permet pas d'explorer les différents modes possibles de la cavité. De surcroît, on a vu que le mode propre de notre cavité présente une localisation particulièrement forte sur les interfaces parallèles à  $w$  (fig. 13b et 13c), ce qui ne peut être expliqué que par de simples ondes stationnaires à l'image des modes d'une cavité optique ordinaire (sans couplage lumière-gaz d'électrons). D'autre part, on verra par la suite qu'en faisant une investigation plus approfondie, explorant différentes gammes de dimensions pour  $l$  et  $w$ , de sorte à chercher les différents modes possibles de la cavité et leurs configurations spatiales associées ; que ceux-ci en fonction des dimensions de la cavité ont un comportement assez différent de celui de modes optiques ordinaires. En définitif, ce modèle peut être considéré comme une bonne approximation dans une situation particulière où l'un des deux côtés de la cavité est assez grand devant l'autre. Notons par ailleurs, qu'au vu des résultats obtenus jusqu'alors, on est en mesure d'affirmer que la structure proposée ici, permet de réaliser un filtre réjectif accordable

en fréquence aux dimensions nanométriques, ce qui rend possible l'intégration d'un tel composant dans des futurs dispositifs nano-optiques.

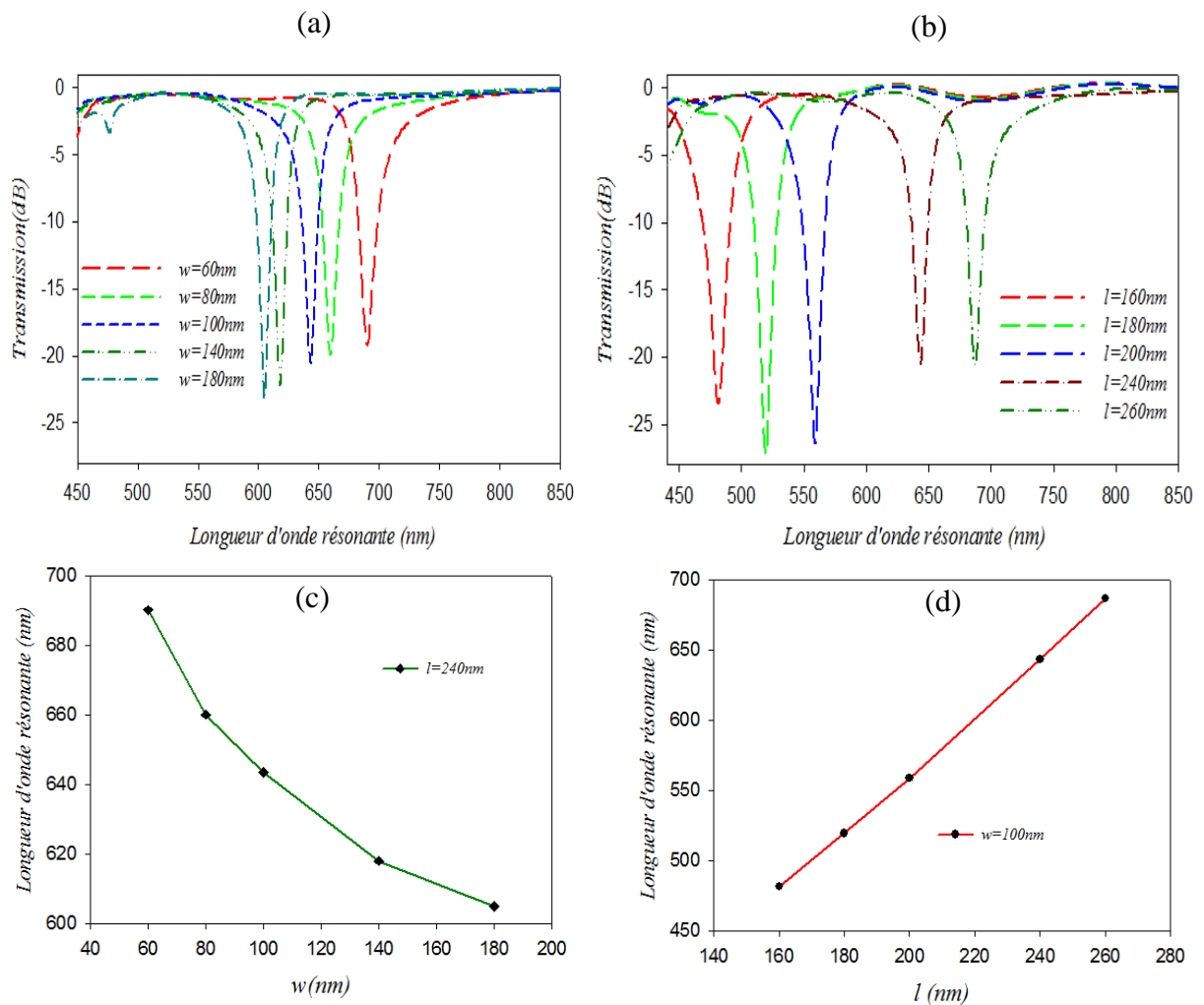


Figure 14 : (a) Evolution du zéro de transmission apparu dans le spectre de transmission de la structure de la fig. 11 en fonction de la largeur de la cavité  $w$  pour  $l=240$  nm (longueur de la cavité), gardée fixe. (b) Même chose qu'en (a) mais en fonction de la longueur de la cavité  $l$  cette fois, en gardant fixe sa largeur à  $w=100$  nm. (c) Evolution de  $\lambda_r$  (longueur d'onde de résonance dans la cavité) en fonction de  $l$  pour  $w=100$  nm. (d) Même chose qu'en (c) mais en fonction de  $w$  pour  $l=240$  nm.

### III-4.2) Facteur de qualité

On a discuté dans le paragraphe III-3.2 que l'un des défis rencontrés par la nanophotonique moderne, était le fait de concevoir des composants optiques qui puissent s'intégrer dans des

circuits optiques ayant des dimensions nanométriques ; à l'image des nanocircuits électroniques moderne. On vient de voir dans ce qui a été présenté jusqu' alors que l'exploitation des propriétés des modes plasmons-polaritons est une voie prometteuse en ce sens qu'ils permettent de s'affranchir de la limite de diffraction rencontrée dans les structures photoniques classiques (cristaux photoniques, guides d'ondes diélectriques à contraste d'indice, etc..).

Un autre défi important est que les composants optiques exploitant les plasmons de surface, et qui produisent des fonctions de filtrage puissent opérer avec la plus haute finesse possible ; autrement dit des hauts facteurs de qualité. Or en général l'un des inconvénients de ces structures prometteuses, est le taux assez important de pertes dans les métaux, qui se répercute sur la longueur de propagation d'un mode plasmon d'une part et d'autre part sur le facteur de qualité des filtres plasmoniques proposés. Le tout donc est de déterminer les paramètres permettant d'améliorer le facteur de qualité.

Dans la structure qu'on propose ici, les dimensions de la cavité sont des paramètres susceptibles d'influencer le facteur de qualité ; et à côté de ceux-ci le gap métallique  $g$  est un paramètre déterminant dans la mesure où celui-ci permet d'ajuster l'intensité du couplage entre le guide et la cavité qui entre autre détermine la largeur des zéros de transmission observés plus haut. De ce fait, on a étudié le facteur de qualité défini comme le rapport  $\frac{\lambda_r}{\Delta\lambda}$ , où  $\Delta\lambda$  est la largeur à mi-hauteur ( $\lambda_r$ , longueur d'onde de résonance), en fonction des différents paramètres évoqués ici. La fig. 15a montre l'évolution du facteur de qualité en fonction de la longueur de la cavité  $l$ , tout en gardant les autres paramètres constants ( $w=100nm$ ,  $g=17nm$ ). On observe, une nette augmentation du facteur de qualité ( $Q$ ) avec  $l$ , on passe d'une valeur de 25 pour  $l=160nm$  à 50 pour  $l=260nm$ . Le même comportement est noté dans la fig. 15b où est rapporté la variation de  $Q$  en fonction de la largeur de la cavité  $w$  ( $l=240nm$ ,  $g=17nm$ ) ; en effet, on constate une augmentation quasi-linéaire avec  $w$ . Néanmoins, on passe d'une valeur de  $Q=43$  pour  $w=60nm$  à  $Q=62$  pour  $w=180nm$ , on atteint donc des valeurs supérieures en comparaison avec l'effet de la longueur de la cavité. Ces tendances remarquées peuvent être expliquées par une meilleure répartition de l'énergie électromagnétique du mode en augmentant les dimensions de la cavité, ce qui conduit à mieux définir le mode, donc une plus grande finesse, et ainsi un plus grand facteur de qualité.

Notons ici que la largeur et la longueur de la cavité ont des impacts un peu différents sur le facteur de qualité ; en effet l'augmentation de  $w$  conduit à un plus grand  $Q$ , ce qui peut être

relié au fait qu'augmenter  $w$  revient à augmenter les faces sur lesquelles on observe le fort confinement du mode. Donc, en plus d'une meilleure répartition du mode, l'augmentation de  $w$  a pour conséquence d'augmenter le confinement du mode sur ces faces et donc à une meilleure finesse de celui-ci. A l'inverse, l'augmentation de  $l$  permet au mode de mieux se répartir mais n'a aucun effet sur son confinement comme on peut le constater sur la carte de champ magnétique présentée par la figure 13b. Dans la figure 15c, on donne l'évolution du facteur de qualité en fonction de  $g$ , on remarque que, comme prévu,  $Q$  augmente avec  $g$  ; on passe de  $Q=40$  pour  $g=13nm$  à  $Q=72$  pour  $g=27nm$ . On obtient donc des valeurs encore meilleures que celles atteintes par l'augmentation de  $l$  et  $w$ . Comme expliqué plus haut, ceci est à relier au fait qu'augmenter  $g$ , revient à diminuer l'intensité de couplage guide-cavité ; or celui-ci est l'un des facteurs prépondérants d'élargissement des zéros de transmissions à côté des pertes dans le métal (diminution de  $Q$ ). Ajoutons que dans l'esprit de réduction de la taille des composants optiques, augmenter  $Q$  en diminuant  $g$  est meilleur que d'augmenter ( $l, w$ ).

Néanmoins, l'augmentation de  $g$  se heurte à la contrainte qui est qu'au delà d'une certaine valeur de  $g \geq \delta$ , où  $\delta$  est l'épaisseur de peau dans le métal, le couplage entre le guide et la cavité s'affaiblit fortement, et ainsi il n'y a presque plus d'excitation du mode de la cavité. Il y a donc un compromis à respecter entre ces différents paramètres.

En comparaison, avec la référence évoquée plus haut [36], où les auteurs atteignent une valeur de  $Q=12$  (à une fréquence proche de la notre) pour  $g=17nm$ ,  $w=50nm$  et  $l=500nm$ , et  $Q=23$  pour  $w=100nm$  ( $l=500nm$  et  $g=17nm$ ) ; on peut affirmer que le filtre qu'on propose, compte tenu de ces dimensions et du fait qu'il fournit une valeur de  $Q=50$  pour  $g=17nm$ ,  $l=240nm$  apporte une amélioration significative par rapport aux travaux antérieurs. D'autres références indiquent des valeurs similaires que celles de la référence [36]. En fait les faibles valeurs de facteur de qualité à cause des phénomènes de pertes dans le métal, constituent l'une des contraintes majeures dans ce domaine émergent de la plasmonique.

Un travail récent [37], propose un filtre plasmonique réjectif à 3D, qui atteint des valeurs de facteurs de qualité spectaculaires, mais à très basse température, c'est-à-dire en diminuant significativement les pertes dans le métal qui sont la principale cause des faibles valeurs de  $Q$ . Pour une température de 20K, les auteurs montrent un facteur de qualité supérieur à 36000. Néanmoins pour de potentielles applications technologiques en terme d'intégration optique, la réalisation de telles structures ne peut être envisagée à une échelle industrielle dans un futur proche.

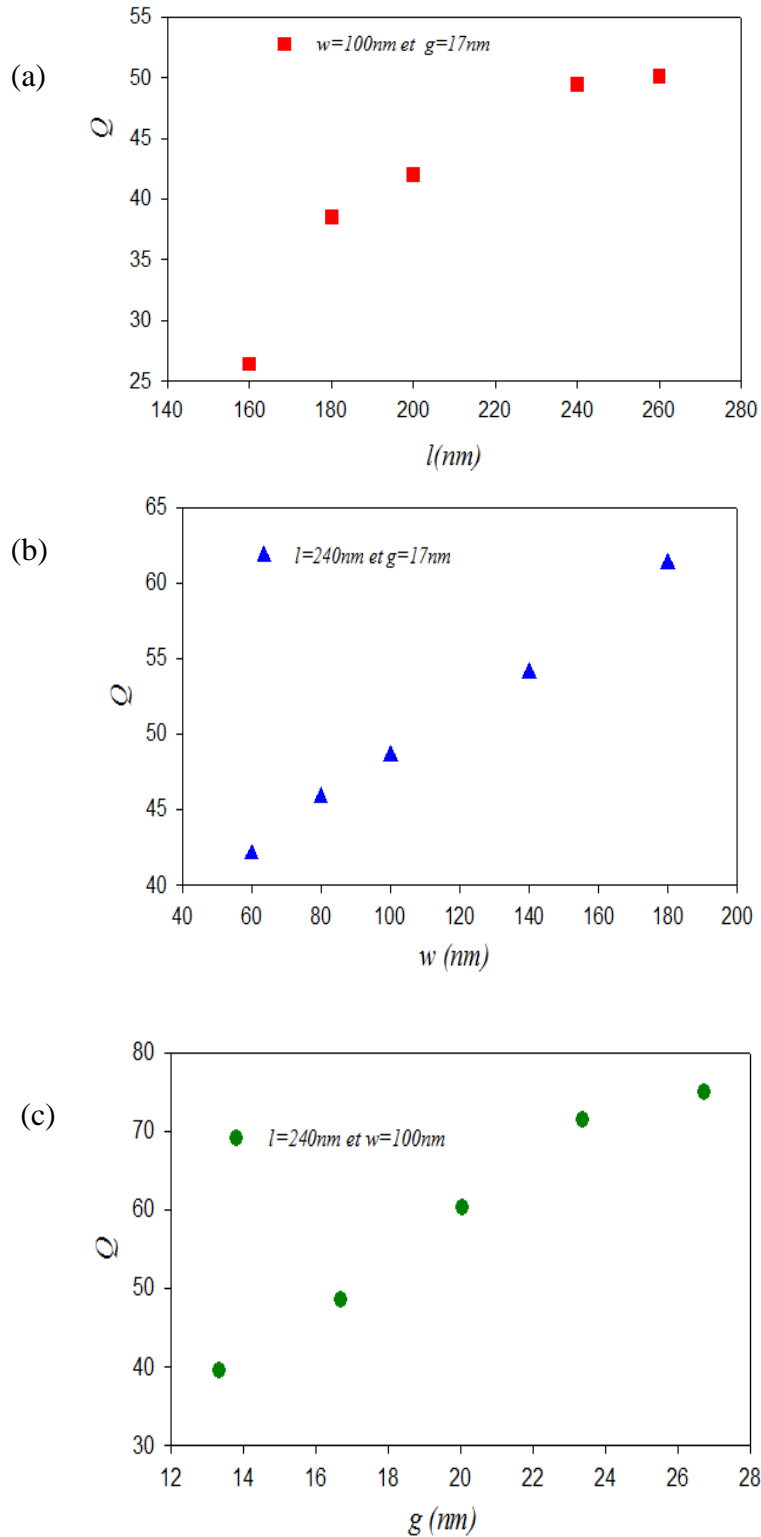


Figure 15 : (a) Evolution du facteur de qualité en fonction de la longueur de la cavité  $l$ , en gardant  $w=100\text{nm}$  et  $g=17\text{nm}$ . (b) Même chose qu'en (a) mais en fonction de  $w$ , avec  $l=240\text{nm}$  et  $g=17\text{nm}$ . (c) Evolution de  $Q$  en fonction de  $g$ , avec  $l=240\text{nm}$  et  $w=100\text{nm}$ .

### III-4.3) Etude des différents modes de la cavité

Le mode plasmon-polariton de la cavité étudié jusqu'alors, a été obtenu dans le cas particulier d'une cavité rectangulaire, c'est-à-dire quand l'un des deux côtés de la cavité est assez grand devant l'autre ( $l$  grand devant  $w$ ) ; en ce sens un modèle analytique a été développé dans la référence [36]. Les discussions plus haut basées sur les résultats des figures 13b et 13c, indiquent néanmoins que le mécanisme explicatif exposé dans cette référence est incomplet et doit prendre en compte le fort confinement de l'énergie du mode résonant au niveau des interfaces parallèles à  $w$ , qui traduit un couplage du mode résonant dans la cavité avec des oscillations des électrons libres du métal. En effet, un autre argument omis jusqu'ici, est si l'on considère l'expression qualitative de l'énergie électromagnétique confinée dans la partie de la cavité constituée du vide, soit simplement :

$$W_{vide} = \mu_0 H_{vide}^2$$

En effet d'après les fig. 13b et 13c,  $W_{vide}$  doit être maximale aux niveaux des interfaces air-métal de la cavité, en particulier sur les faces parallèles à  $w$  ; ceci démontre clairement un couplage lumière-gaz d'électrons libres du métal dans la cavité. Ainsi une description complète, doit consister en un mécanisme plus complexe qui comprend cet aspect plus le mécanisme de formation d'ondes stationnaires dans la cavité ; celui-ci seul étant réducteur de ce qui est observé, mais qui est une bonne approximation pour expliquer le comportement des modes de la cavité quand  $l \gg w$ . Ajoutons enfin, que ce que montrent les fig. 13b et 13c, permet d'interpréter le mode observé comme étant, le résultat du couplage des modes de surface confinés sur les quatre faces métalliques de la cavité, auquel cas le mécanisme d'onde stationnaire n'est plus adapté. Néanmoins, un tel raisonnement nécessite des investigations théoriques poussées en plus des résultats numériques rapportés dans cette thèse. Un modèle analytique exacte, doit être basé sur le développement des champs électromagnétiques dans une base de fonctions spéciales appropriées à la symétrie rectangulaire (fonctions hypergéométriques). Ensuite, il faut considérer les conditions aux limites correspondantes d'une part à un confinement des champs  $\vec{E}_y$  et  $\vec{H}$  (composantes continues) sur les interfaces air-métal de la cavité, et d'autre part à l'évanescence de ceux-ci en s'éloignant de ces interfaces (ce qui est d'ailleurs noté dans les fig. 13b et 13c).

Dans le but d'explorer les différents modes possibles de la cavité, on a donné à  $l$  est  $w$  différentes valeurs et dans le cas où  $l \sim w$  ; on démontre l'existence de deux modes. Ceux-ci

apparaissent de part et d'autre d'une situation où la cavité est carrée, tel que le côté de celle-ci est  $l=w=180nm$ . Le spectre de transmission du guide couplé à une telle cavité, dans le cas où la longueur de la cavité et sa largeur sont égales respectivement à  $180nm$  et  $220nm$ , est donné par la fig. 16a. On observe, l'apparition d'un deuxième mode vers les basses longueurs d'ondes (hautes fréquences) dont la longueur d'onde de résonance est  $\lambda_{r1}=485nm$ , l'autre mode étant situé dans une gamme proche de celui étudié plus haut (la longueur d'onde de résonance de celui-ci est donnée par  $\lambda_{r2}=585nm$ ). La profondeur de la résonance  $\lambda_{r1}$  est de -27dB, tandis que celle correspondant à  $\lambda_{r2}$  est de -24dB ; ces valeurs indiquent un fort couplage entre le guide et la cavité à ces longueurs d'ondes. Notons, une plus forte largeur du zéro de transmission à basses longueur d'onde par rapport au zéro situé à  $\lambda_{r2}$ , ce qui est à relier avec une plus forte absorption dans le métal à l'approche des hautes fréquences.

La fig. 16b, donne la carte de champ magnétique associée à ces deux modes. On note que le mode à basse longueur d'onde est fortement localisé sur les longues faces de la cavité tandis que le mode situé à  $\lambda_{r2}$  est localisé de façon analogue au mode étudié plus haut sur les petites faces de la cavité. Un mode propre d'une cavité étant une propriété intrinsèque à celle-ci, on adopte la définition qui consiste à appeler le mode 1 celui confiné sur les longues faces de la cavité et le mode 2 celui qui est localisé sur les petites faces de la cavité (fig. 16b). Le mode 1 est symétrique par rapport à l'axe de symétrie  $C_x$  de la cavité et antisymétrique par rapport à  $C_y$  (voir figure 16b). A l'inverse, le mode 2 est antisymétrique par rapport à  $C_x$  et est symétrique par rapport à  $C_y$ . On peut noter une analogie en termes de symétrie, entre les modes 1 et 2 et un système quantique ayant deux modes propres qui résultent de la levée de dégénérescence d'une situation physique particulière où ceux-ci fusionnent en un mode dégénéré. Par ailleurs, dans la figure 17a donnant le spectre de transmission du cas où  $l=w=180nm$ , on note l'apparition d'un seul zéro de transmission (un seul mode) dans le spectre de transmission. La cartographie du champ magnétique correspondante (figure 17b), montre une configuration spatiale de celui-ci intermédiaire des modes 1 et 2 avec une localisation du champ cette fois-ci sur essentiellement deux des quatre coins de la cavité. Ainsi, en se basant sur l'analogie avec un système quantique, on peut donc dire que les modes 1 et 2 de la cavité, correspondent à une levée de dégénérescence du cas  $l=w=180nm$ , où on a un seul mode dégénéré. Notons que ce cas de figure ( $l=w=180nm$ ), qui est certes un cas particulier, ne peut néanmoins pas être expliqué par le modèle de la référence [36], dans la mesure où d'une part la localisation observée ici sur des coins spécifiques de la cavité ne peut être ramenée à uniquement un mécanisme de formation d'onde stationnaire, et d'autre part

une telle cavité carrée ne peut être assimilée à un guide d'onde tronqué (caractérisé par  $l \gg w$ ). La figure 17c donne l'évolution de la longueur d'onde de résonance associée aux modes 1 et 2 en fonction de  $w$ , tout en gardant  $l=180nm$ . On constate une augmentation quasi-linéaire de la longueur d'onde de résonance du mode 1 quand  $w$  ( $w < l$ ) augmente de  $140nm$  à  $180nm$ , et une légère décroissance de celle-ci quand  $w$  passe de  $180nm$  à  $240nm$ . A l'inverse,  $\lambda_{r2}$  diminue légèrement quand  $w$  passe de  $140nm$  à  $180nm$  ( $w < l$ ), et une augmentation quasi-linéaire de  $\lambda_{r2}$  est observée avec l'augmentation de  $w$  à partir de  $180nm$  à  $240nm$ . La variation de  $w$  de  $140nm$  à  $240nm$  en passant par  $w=180nm$ , c'est-à-dire une configuration où la cavité est carrée revient à inverser celle-ci ; or en opérant ainsi d'après la fig. 17c, ceci conduit à l'interchangeabilité du comportement des modes 1 et 2.

En complément à cette étude, on a étudié d'autres dimensions possibles de la cavité toujours dans le cas où  $l \sim w$ , et en respectant également la condition que celles-ci restent bien inférieures à la longueur d'onde du signal incident (domaine sub-longueur d'onde). Cette fois ci on fixe  $l$  à  $240nm$  et on fait varier  $w$  de  $200nm$  à  $240nm$ . La figure 18a montre le spectre de transmission correspondant à  $l=240$  et  $w=200nm$ , on constate l'existence de trois modes cette fois ci, situés à  $423nm$  (mode a),  $500nm$  (mode b) et  $602nm$  (mode c) ; avec des intensités de couplage guide-cavité qui sont assez différentes. En effet, on observe que le zéro de transmission de longueur d'onde résonante  $423nm$  indique une chute de puissance de  $-37dB$  soit un très fort couplage guide-cavité. Le deuxième zéro à  $500nm$  montre un faible couplage avec seulement  $-7dB$  ; et enfin  $-24dB$  pour le dernier zéro ( $\lambda = 602nm$ ) soit un fort couplage entre le guide et la cavité. Les cartes de champ magnétiques associées aux modes a et c, sont données par la figure 18b, le mode b n'y est pas représenté du fait que dans la cartographie associée, la configuration du champ n'est pas explicite (très faible confinement du champ dans la cavité) à cause du très faible couplage guide-cavité. Ces cartes de champs montrent une forte localisation du mode a sur les quatre coins de la cavité, et une forte localisation du mode c sur deux des 4 coins de la cavité. On peut constater la ressemblance de ce dernier avec la configuration du champ dans le mode dégénéré du cas où  $l=w=180nm$ .

Enfin l'évolution des modes de résonances des trois modes est reportée sur les figures 19a, 19b et 19c, où l'on remarque une augmentation quasi-linéaire des modes a et b avec  $w$ , à l'inverse une diminution quasi-linéaire du mode c est observée avec  $w$  ; ce qui est à comparer avec la faible diminution non linéaire ( $\sim 1/w$ ) de la longueur d'onde de résonance du mode 1 ou 2 observée dans la fig. 17c. De cette comparaison, on peut dire que le comportement du

mode c ne peut pas être expliqué dans le cadre du modèle explicité plus haut dans lequel  $\lambda_r$  (longueur d'onde de résonance) varie comme  $\sim 1/w$ .

En conclusion, ces résultats montrent qu'en fonction de ses dimensions, la cavité exhibe une diversité de modes possibles, se comportant différemment les uns par rapport aux autres en fonction de  $l$  ou  $w$  ; mais également une nette différence de comportement est observée en les comparant avec les modes d'une cavité optique classique. D'autre part, le point commun entre tous ces modes est la forte localisation remarquée systématiquement au niveau des petites faces, grandes faces, deux des coins ou les quatre coins de la cavité. Tous ceci, indique que ces modes sont des modes plasmons-polaritons de surface de la cavité.

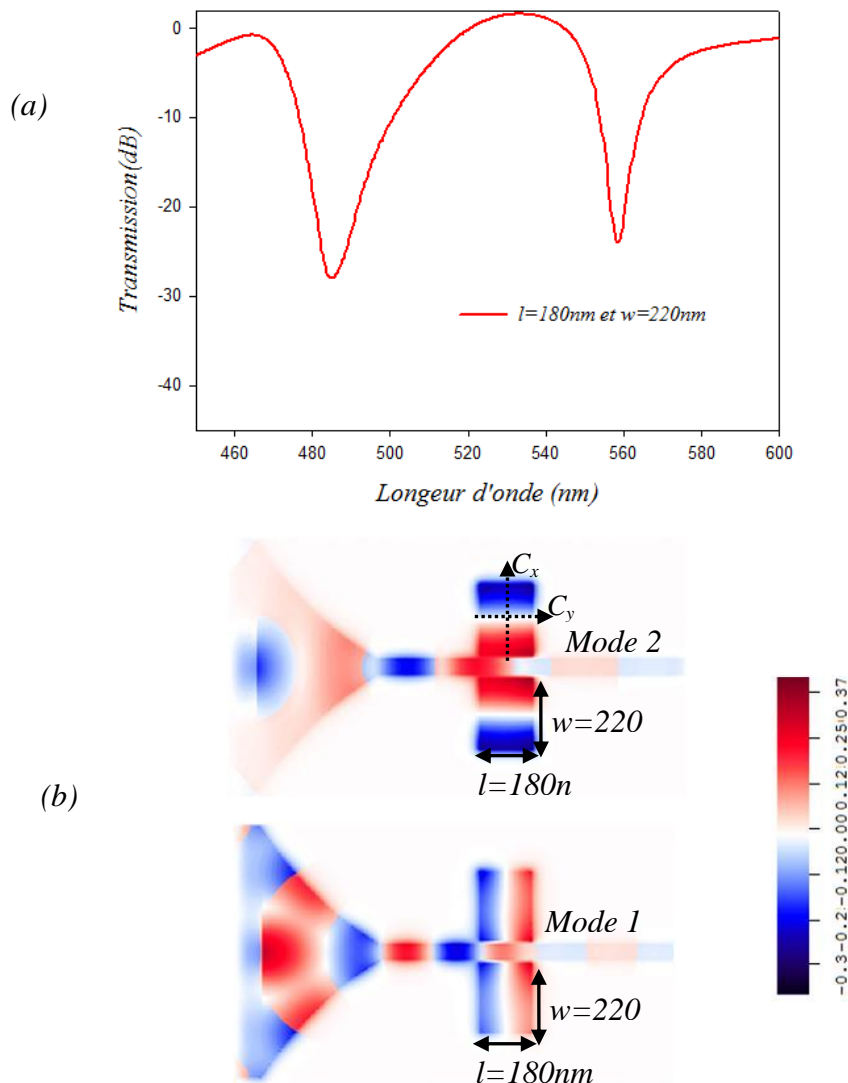


Figure 16 : (a) Spectre de transmission du guide couplé à une cavité, de dimension  $l=180\text{nm}$  et  $w=220\text{nm}$ . (b) Cartes de champ magnétiques associées aux fréquences des zéros de transmission apparus dans le spectre donné en (a)

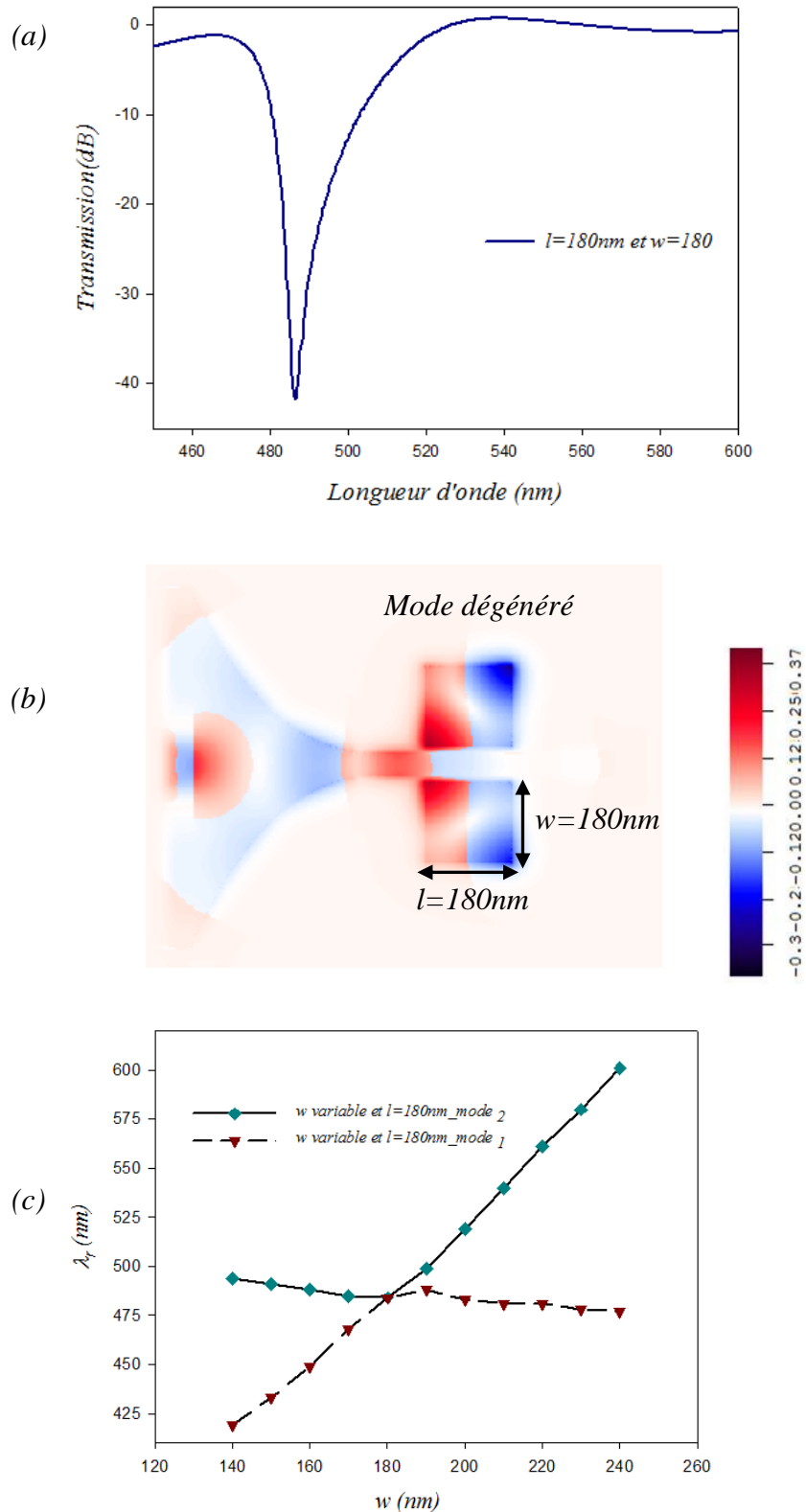


Figure 17 : (a) Spectre de transmission du guide couplé à une cavité carrée de côté 180nm. (b) Carte de champ magnétique associée au zéro de transmission dans le spectre de (a). (c) Evolution de la longueur d'onde de résonance des modes dans le spectre donné par (a) en fonction de  $w$ , pour  $l=180\text{nm}$ .

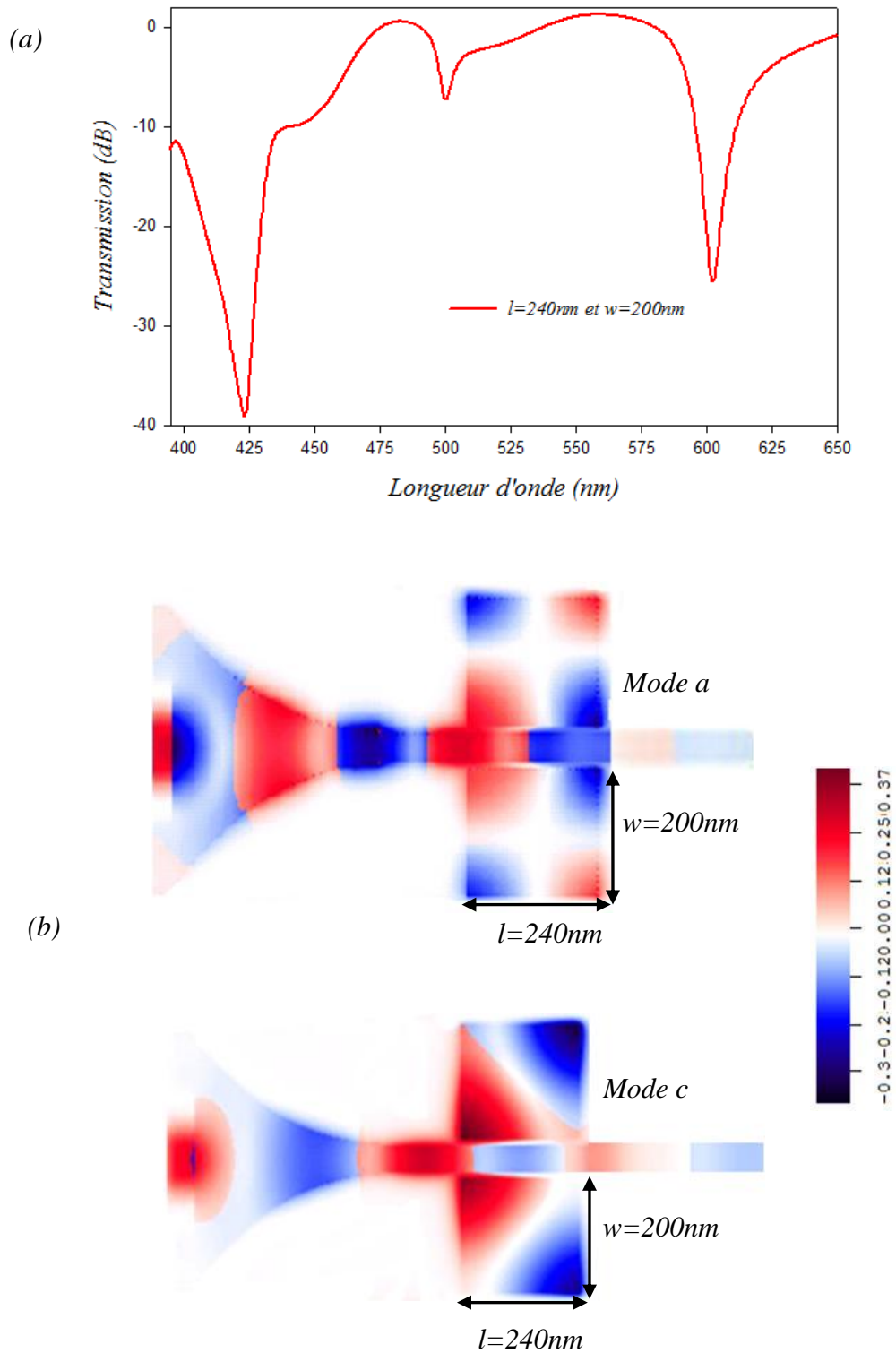


Figure 18 : (a) Spectre de transmission de la même structure que (a), tel que les dimensions de la cavité soient  $l=240nm$  et  $w=200nm$ . (b) Cartes de champ magnétiques associées aux fréquences des zéros de transmission les plus profonds dans le spectre de (a).

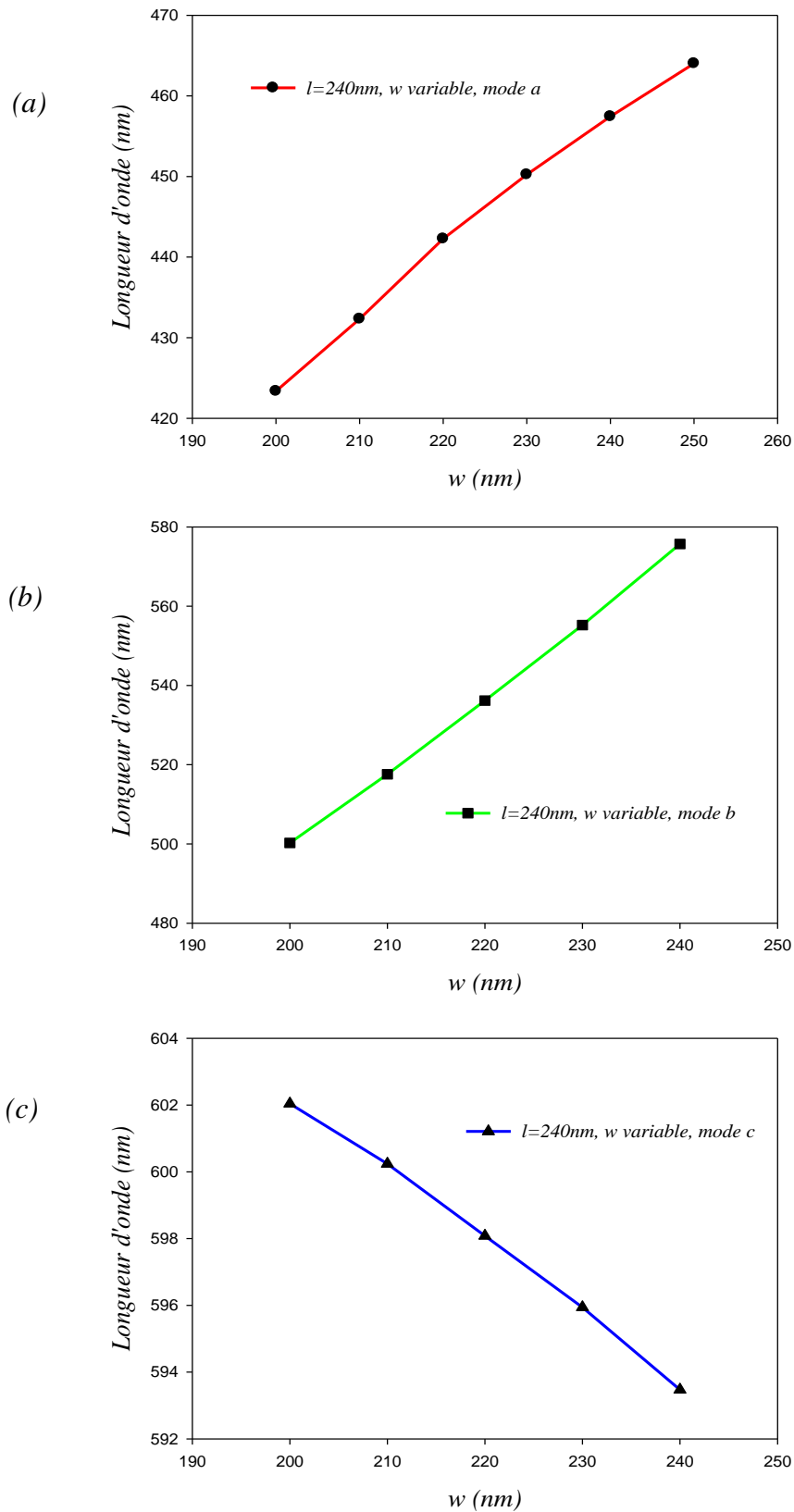


Figure 19 : (a) Evolution de la longueur d'onde de résonance du mode apparu dans le spectre de transmission de la fig. 18a, situé à 425nm. (b)Même chose qu'en (a), mais pour le mode situé à 500nm. (c) Même chose qu'en (a), mais pour le mode situé à 600nm

### III-5) Etude d'un filtre sélectif

Dans le paragraphe ci-dessus, on a proposé une nouvelle nanostructure permettant de réaliser la fonction de filtrage réjectif. Dans ce paragraphe, on souhaite montrer la possibilité de produire avec le même dispositif une autre fonction optique tout aussi importante pour l'intégration optique à savoir le filtrage sélectif.

Le filtrage réjectif à été obtenu en couplant le guide de plasmons avec une nano-cavité située sur le côté du guide, ici nous investiguons l'effet physique du couplage du guide avec une cavité disposée à l'intérieur du guide. Celle-ci est constituée d'un espace d'air délimité par deux couches minces de métal d'argent (perpendiculaires au guide). On se réfère aux dimensions de la cavité ainsi formée par les mêmes paramètres du paragraphe précédent à savoir ;  $l$  pour sa longueur,  $w$  pour sa largeur et  $g$  l'épaisseur des couches métalliques dit gap métallique. Afin de comparer les résultats obtenus ici au cas précédent d'une cavité située à l'extérieur du guide, on prend les valeurs suivantes pour les dimensions de la cavité soit  $l=240nm$ ,  $w=100nm$  et  $g=17nm$ . Notons que de ce fait, la largeur du guide ici est  $d'=w=100nm$ , ceci respecte la condition que l'on se fixe dans cette étude à savoir des dimensions latérales des structures modélisées largement sub-longueur d'onde, puisque en effet  $d' < \frac{\lambda_0}{2n_{air}} = \frac{500nm}{2} = 250nm$ .

La figure 20a montre la configuration de la structure et la fig. 20b donne les spectres de transmission et de réflexion correspondants. On observe l'apparition d'un pic de transmission centré sur une seule longueur d'onde, avec une certaine largeur. Les autres longueurs d'onde étant toutes réfléchies, ce que d'ailleurs confirme le spectre de réflexion. En effet, on note un seul zéro de transmission dans celui-ci centré sur la même longueur d'onde que le pic transmis. Le pic de transmission transporte 40% d'énergie (-8dB), tandis que le zéro de transmission indique que 15% d'énergie incidente est réfléchi à la fréquence filtrée ( $\lambda_r$ ). On a estimé plus haut les pertes par propagation accumulées par le signal réfléchi durant un aller-retour de l'entrée du guide à la cavité à 10%, ce qui montre qu'au final 45% d'énergie à  $\lambda_r$  est absorbée dans la cavité. En comparaison avec le cas d'une cavité située à l'extérieur du guide, on remarque un taux de pertes plus élevés. Or celui-ci dans le métal étant indépendant de la position de la cavité, les pertes supérieures observées ici peuvent être reliées au plus fort couplage entre le guide et la cavité. D'autre part, le spectre de transmission-réflexion indique clairement un phénomène de résonance entre le signal guidé et la cavité à la longueur d'onde

résonante  $\lambda_r=645nm$ . Ceci montre qu'à cette longueur d'onde il y a excitation du même mode plasmon-polariton que celui observé précédemment, et qu'après un certain temps caractéristique de la résonance de ce mode, celui-ci est transmis vers la sortie du guide. Ce phénomène peut être expliqué par analogie aux puits quantiques rencontrés dans le domaine de l'électronique quantique [38]. En effet, la cavité insérée dans le guide ressemble à un puit quantique à double barrières dans lequel on a une structure énergétique discrétisée. Ainsi, si un paquet d'onde électronique traverse le puit quantique, alors les modes du paquet dont l'énergie coïncide avec un des modes discrets du puit sont transmis par effet tunnel à travers celui-ci, les autres sont réfléchies. La cavité ici n'ayant qu'un seul mode discret autour de  $\lambda_r$  dans la gamme d'intérêt, alors le mode incident à cette fréquence résonne avec la cavité et est transmis par effet tunnel vers la sortie du guide. Dans la configuration précédente (cavité à l'extérieur), le mode confiné dans la cavité est réfléchi vers l'entrée du guide. La figure 20c montre la configuration spatiale du champ magnétique confiné dans la cavité associé à une onde incidente monochromatique à la longueur d'onde de résonance  $\lambda_r$ . On peut constater que la structure du mode excité est exactement la même que celle observée dans le cas précédent. En particulier, en termes de forte localisation sur les interfaces air-métal parallèle à l'axe des 'x' ( $//$  à  $w$ ), et concernant la symétrie du mode qui est identique.

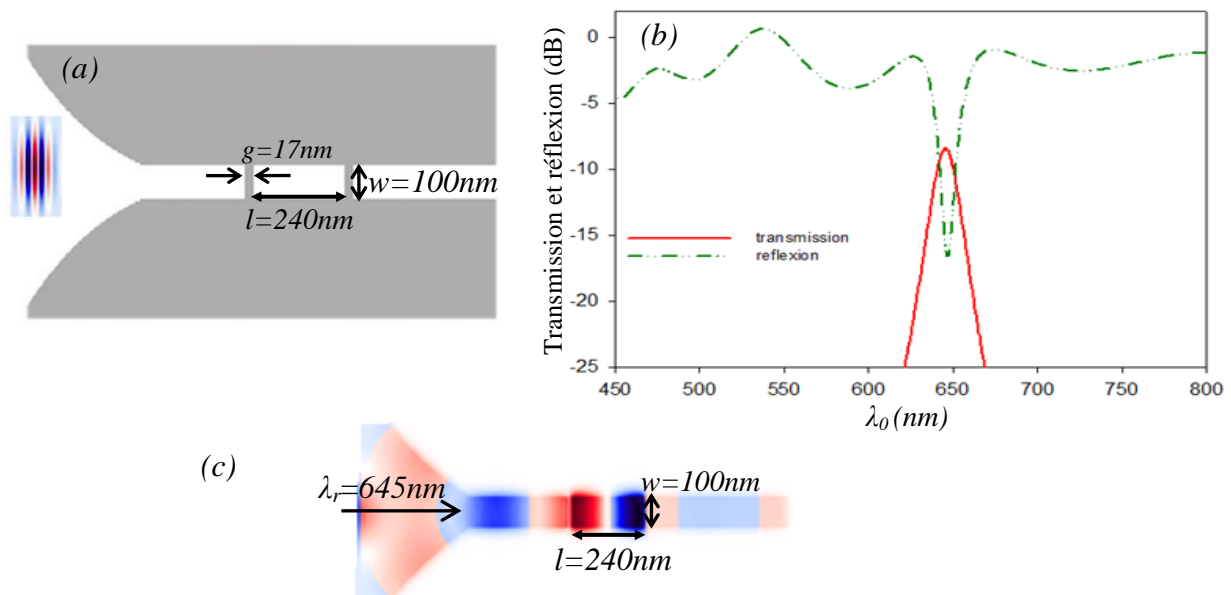


Figure 20 : (a) Schéma du guide couplé à une cavité identique à celle de la fig. 11, placée à l'intérieur du guide. La cavité est constituée d'un espace d'air, délimité par deux couches minces de métal d'argent parallèles à l'axe des 'x', et d'épaisseur  $g=17nm$ . Les dimensions de la cavité étant  $l=240nm$  et  $w=100nm$ . (b) Spectre de transmission et réflexion correspondant à la structure de (a). (c) Carte de champ magnétique d'une onde monochromatique incidente à la longueur d'onde de résonance  $\lambda_r=645nm$ .

Dans la figure 21a, on étudie l'évolution du pic de transmission en fonction de la longueur de la cavité  $l$ , en gardant fixe sa largeur telle que  $w=100nm$ . On remarque un shift de la longueur d'onde de résonance vers les hautes longueurs d'onde. A l'inverse, en fixant la longueur  $l$  à  $240nm$  et en variant  $w$ , on note un shift vers les courtes longueurs d'ondes de  $\lambda_r$  (figure 21b). Les variations observées ici sont parfaitement identiques à celles observées dans le cas précédent, c'est-à-dire une augmentation linéaire de  $\lambda_r$  avec  $l$ , et une diminution en  $l/w$  de  $\lambda_r$  avec  $w$ . Notons que le facteur de qualité ici peut être amélioré de la même manière que précédemment, à savoir en augmentant les paramètres géométriques :  $l$ ,  $w$  ou  $g$ . Enfin, ces résultats montrent la possibilité de réaliser un filtre sélectif, en couplant le guide avec une cavité insérée à l'intérieur de celui-ci à travers deux tranches de métal dont l'épaisseur permet d'ajuster l'intensité du couplage guide-cavité ainsi que le facteur de qualité. L'originalité de cette nouvelle structure proposée ici, repose sur le fait qu'en jouant sur la position d'une même et une seule cavité par rapport au guide, on est en mesure de réaliser à la fois une fonction de filtrage réjectif ou sélectif. Les dimensions nanométriques de ce système en font un composant potentiel pour de futures interconnexions nano-optiques.

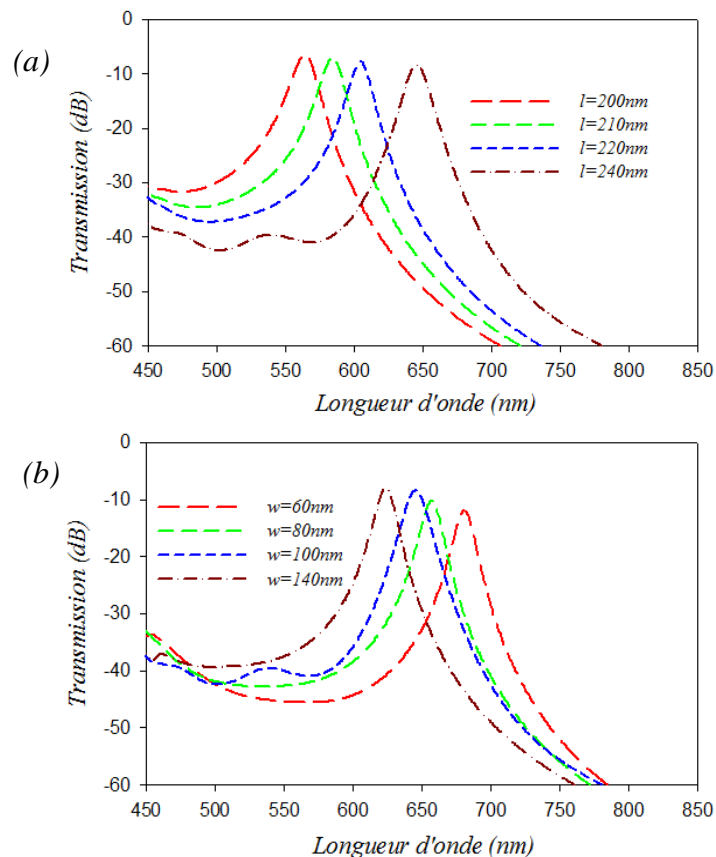


Figure 21 : (a) Evolution du pic de transmission dans le spectre de transmission de la structure de la fig. 20a en fonction de  $l$ , avec  $w=100nm$ . (b)Même chose qu'en (a) mais en fonction de  $w$  où  $l=240nm$ .

### III-6) Modélisation d'un nano-guide de SiO<sub>2</sub> fonctionnant dans la gamme de fréquences télécoms.

Les nouvelles structures proposées plus haut fonctionnent dans la gamme de fréquences du visible, or le transfert d'informations se fait actuellement essentiellement dans la gamme 1.3 $\mu\text{m}$ -1.5 $\mu\text{m}$  (gamme des télécoms). Il est donc primordial d'investiguer la possibilité de réaliser de telles structures dans cette gamme. C'est ce qu'on se propose de développer dans ce paragraphe. Rappelons auparavant, qu'un nombre croissant de travaux concernant l'exploitation de plasmons de surface dans la gamme des Téra Hertz et des fréquences télécoms a été présenté récemment. Un filtre réjectif en forme d'anneau opérant dans l'infrarouge proche est proposé dans la référence [39] ; toutefois le rayon de l'anneau est de l'ordre de 0.5 $\mu\text{m}$  soit une surface de la cavité de 0.785 $\mu\text{m}^2$ , c'est-à-dire 33 fois plus large que la cavité proposée ci-dessus. Une cavité rectangulaire rempli par un matériau actif, dont la partie imaginaire de l'indice de réfraction (responsable de l'absorption optique) est commandé par un pompage optique est présenté comme un filtre optique dans la référence [40]. L'état on/off du pompage optique appliqué à la cavité conduit à l'absorption on/off de l'énergie incidente à une certaine fréquence ; d'où l'effet de commutation optique. Cependant les facteurs de qualité restent faibles à cause de la forte absorption dans la cavité, inhérente au processus de filtrage. Des guides Métal-SiO<sub>2</sub>-Métal de longueur finie, ont été utilisés dans des réseaux bidimensionnels pour faire de l'imagerie sub-longueur d'onde ; une résolution de l'ordre de  $\lambda/20$  a été atteinte [41]. Une structure métallique en 3D en forme de la lettre-T, déposée sur une plaque métallique du même métal (Ag), formant un réseau périodique à une dimension et baignant à une certaine hauteur de la lettre-T dans une couche de SiO<sub>2</sub> ; est proposée comme un émetteur thermique effectif et comme un bon bio-détecteur [42]. Des plots métalliques d'or, déposés sur une plaque métallique d'or également, et formant un réseau périodique à 1D sont proposés comme une pompe optique exaltant la photoluminescence d'une couche de molécules déposées à proximité du réseau grâce au champ exalté du mode plasmon excité localement autour des plots [43]. De plus, on a montré qu'en couplant un nano-guide de type MIM avec un ensemble de deux couches diélectriques ayant un indice optique différent, inséré à l'intérieur du guide et formant un réseau périodique suivant la direction de propagation du guide (un réseau de Bragg), on obtient une large bande interdite dans la gamme de fréquences télécoms [44]. Des réseaux de nano-fentes métalliques ont été employés pour la conception de dispositifs opérant dans le domaine des Téra Hertz,

ayant des applications en champ proche [45]. Les propriétés de luminescence en termes de polarisation et d'intensité émise par une molécule fluorescente ont été contrôlées, et ce en couplant la molécule à un mode plasmon d'une nanoparticule disposée à côté et agissant comme une nano-antenne [46, 47].

Dans cette section nous allons étudier les propriétés de filtrage sélectif, réjectif et démultiplexage, à travers un nano-guide de SiO<sub>2</sub> à 2D inséré entre deux plaques métalliques d'Ag (de type MIM), dans le domaine de fréquences télécoms.

### III-6.1) Filtre réjectif et sélectif

Dans ce paragraphe, nous allons étudier le couplage d'un guide Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag avec une cavité rectangulaire remplie du même diélectrique, et situé sur le côté du guide dans la gamme des télécoms. L'usage de SiO<sub>2</sub>, se justifie par le fait que comparé à l'air on obtient un meilleur confinement d'une longueur d'onde incidente donnée  $\lambda_0$ , puisqu'en plus du confinement due au mode plasmon du guide, on obtient un facteur supplémentaire de confinement de  $\lambda_0/n_{SiO_2}$  grâce au diélectrique. Ainsi des signaux excités dans la gamme des télécoms sont mieux insérés dans un guide de SiO<sub>2</sub> que dans un guide d'air. Ajoutons que le signal incident dans cette partie est excité dans la gamme [1,3 $\mu$ m, 1.73 $\mu$ m], et que les paramètres du modèle de Drude qui reproduisent au mieux les données expérimentales sont :  $\epsilon_\infty = 3.276$ ,  $\omega_p = 1.38 \times 10^{16}$  rad/s et  $\Gamma = 2.634 \times 10^{13}$  rad/s. Dans cette étude, on excite le mode antisymétrique. La largeur du guide est égale à  $d=50nm$  soit 31 fois inférieure à la longueur d'onde du signal incident autour de  $\lambda_0=1550nm$ .

La figure 22a montre le schéma de la structure ainsi que le spectre de transmission-réflexion correspondant, mesuré à la sortie du guide pour  $l=512nm$ ,  $w=100nm$  et  $g=32nm$ . On note une interaction forte entre le guide et la cavité à  $\lambda_r=1537nm$  avec une chute de puissance de -30dB dans le spectre de transmission, ce qui traduit l'excitation d'un mode plasmon-polariton de surface (SPP) de la cavité. Le spectre de réflexion montre que -5dB (64%) de puissance à la fréquence de résonance est réfléchi, ce qui indique qu'approximativement 36% d'énergie est absorbée dans la cavité ; on note également la transmission de toutes les autres longueurs d'onde. Ces estimations ne sont pas altérées par les pertes par propagation dans le guide, du fait que des calculs identiques à ceux faits dans le paragraphe traitant des pertes dans le guide effectués plus haut, indiquent des pertes de seulement 0.5dB/ $\mu$ m dans le guide. Dans la figure 22b, on donne la carte de champ magnétique à la fréquence de résonance où l'on remarque

que la structure du mode piégé dans la cavité est telle que celui-ci est fortement confiné sur les interfaces de la cavité (essentiellement ceux // à  $x$ ), ainsi qu'au milieu de celle-ci. Ce mode se différencie du mode excité dans le visible par le fait qu'il correspond à deux demi-oscillations parallèlement à l'axe des  $x$ . A noter que le système étudié présente une différence non triviale avec la structure proposée dans le visible, ici le guide de  $\text{SiO}_2$  est couplé avec une seule cavité, disposée sur le côté au lieu de deux. La raison en est que nos tests numériques montrent que dans cette gamme de longueurs d'ondes on atteint une interaction guide-cavité optimale avec seulement une cavité, ce qui se traduit par un zéro de transmission présentant une chute de -30dB de puissance. A l'inverse, ce résultat est obtenu dans le visible avec deux cavités symétriques par rapport au guide, sinon la puissance piégée par une seule cavité est de seulement -15dB. Le facteur de qualité atteint une valeur non négligeable de 153 en augmentant le paramètre  $g$  ( $g=40\text{nm}$ ). En comparant notre résultat à celui de la référence [36], on note que le plus haut facteur de qualité obtenu dans [36] à une fréquence proche de  $1.55\mu\text{m}$  est atteint pour  $g=40\text{nm}$  et vaut  $Q=21$ , soit sept fois inférieurs que ce que l'on obtient ici. Ainsi on montre la possibilité de créer un filtre réjectif dans la gamme des télécoms, accordable en fréquence, et ce en modifiant les dimensions de la cavité (le mode filtré a un comportement similaire en fonction de  $l$  et  $w$  à celui étudié dans la gamme du visible) ; de plus le système proposé ici atteint des valeurs de  $Q$  intéressantes par rapport à ce qui existe dans la littérature.

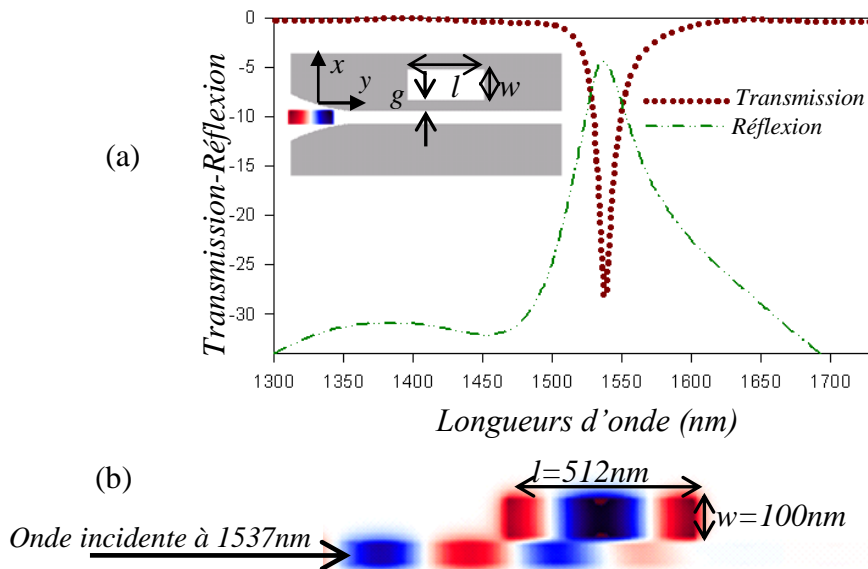


Figure 22 : (a) Schéma d'un guide d'Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag couplé à une cavité situé sur le côté dont les dimensions sont  $l=512\text{nm}$ ,  $w=100\text{nm}$  et  $g=32\text{nm}$ . Sur la même figure est présenté le spectre de transmission-réflexion correspondant. (b) Carte de champ magnétique d'une onde monochromatique incidente à la longueur d'onde du zéro de transmission de  $1537\text{nm}$ .

De manière similaire aux paragraphes précédents, la fonction de filtrage réjectif peut être inversée en filtrage sélectif en insérant cette fois-ci la cavité à l'intérieur du guide. La figure 23 montre le schéma correspondant pour  $l=512nm$ ,  $w=100nm$  et  $g=20nm$ . Dans la figure 23a, on montre également le spectre de transmission-réflexion correspondant. On remarque que la transmission sélective du mode est autour de 1540nm, soit quasiment le même mode filtré auparavant (avec le filtre réjectif) avec 64% (-5dB) de transmission. La réflexion est évaluée à 13% à l'entrée du guide, ce qui indique que seulement 24% d'énergie est absorbée dans la cavité soit une quantité bien inférieure à celle dissipée dans le filtre réjectif. Ceci est à relier au fait qu'ici on a moins de pénétration dans le métal ( $g=20nm$ ) en comparaison avec le filtre réjectif ( $g=32nm$ ). Dans la figure 23b, on présente la carte de champ magnétique à la longueur d'onde de résonance où l'on constate un fort couplage entre l'onde incidente et la cavité, qui se traduit par l'excitation d'un mode SPP de la cavité. On note également que le mode confiné dans la cavité à la même structure que le mode excité dans le cas du filtre réjectif. Par analogie aux systèmes de puits quantique à double barrières rencontrés en électronique [38], l'onde incidente monochromatique à la longueur d'onde de résonance est transmise par effet tunnel vers la sortie du guide.

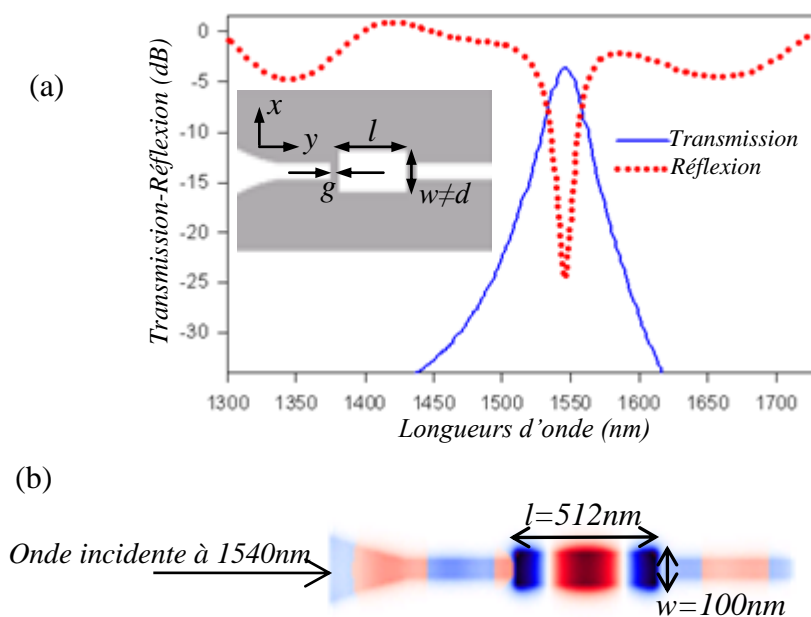


Figure 23 : (a) Schéma d'un guide d'Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag couplé à une cavité insérée à l'intérieur dont les dimensions sont  $l=512nm$ ,  $w=100nm$  et  $g=20nm$ . Sur la même figure est présenté le spectre de transmission-réflexion correspondant. (b) Carte de champ magnétique d'une onde monochromatique incidente à la longueur d'onde ( $\lambda_r= 1540nm$ ) du pic de transmission observé dans (a).

On peut noter une légère différence, mais qui est néanmoins non trivial entre la structure du filtre sélectif ici avec celui étudié dans le visible, à savoir que la largeur du guide est indépendante de celle de la cavité et peut être différente de celle-ci. En effet, nos calculs ici montrent qu'un couplage optimal est obtenu même quand la largeur de la cavité n'est pas prise égale à celle du guide. A l'inverse, dans le filtre sélectif étudié dans le visible, la largeur du guide devait être prise égale à celle de la cavité pour que l'interaction soit optimale. Plus précisément, nos tests montrent qu'avec une cavité de largeur  $w=100nm$  et de longueur  $l=240nm$ , insérée dans un guide de largeur  $d'=50nm \neq w$ , on obtient un pic de transmission de seulement  $\approx -15dB$  de hauteur, soit une perte de  $\approx 5dB$  par rapport au cas où  $w = 100nm = d'$  (largeur du guide égale à la largeur de la cavité). Ceci signifie que dans la structure du filtre proposé dans la gamme des télécoms, on peut filtrer sélectivement des modes donnés avec des guides dont la largeur peut être indéfiniment réduite. Ceci n'étant pas possible avec le filtre sélectif proposé dans le visible, puisque pour exciter et filtrer un mode donné de la cavité, celle-ci doit avoir une certaine largeur minimale au delà de laquelle aucun mode n'existe ; or ceci impose également une largeur minimale au guide. Ajoutons que le mode filtré ici présente un même comportement que le mode filtré sélectivement dans le visible en fonction de  $l$  et  $w$ . Les valeurs du facteur de qualité associées au mode filtré sont identiques au cas du filtre réjectif. Enfin au vue de ces résultats, on montre la possibilité de réaliser un nano-filtre sélectif accordable dans le domaine des télécoms.

#### III-6.2) Nano-démultiplexeur de SiO<sub>2</sub> en forme de Y

Dans cette section, on se propose d'exploiter les phénomènes de filtrage pour proposer une nouvelle structure à l'échelle nanométrique, réalisant la fonction de démultiplexage dans la gamme des télécoms. La figure 24a montre le schéma de la structure, il s'agit d'un guide d'Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag de largeur  $d=50nm$ , présentant une jonction en forme de la lettre Y. Celle-ci permet de scinder le guide linéaire initial en deux branches distinctes. Sur la figure 24b, on présente le spectre de transmission correspondant, mesuré à la sortie des deux branches du guide. La gamme du signal incident excitée ici s'étend de 1100nm à 2200nm. On note la séparation du signal large bande incident en deux signaux indépendant, ayant quasiment la même forme et la même intensité. Un paramètre géométrique important du guide est la distance séparant ses deux branches  $D=400nm$ . En effet, la valeur de  $D$  ici constitue une

innovation importante par rapport à ce qui existe dans la littérature. Par exemple dans la référence [48], la valeur de  $D$  dans une structure similaire est 625 fois plus grande, ce qui limite la performance du dispositif dans le sens où le but est de réduire la taille des composants (échelle nanométrique). Dans la figure 25a, on montre le schéma du guide Y, couplé à deux cavités rectangulaires, insérées à l'intérieur de chacune de ses branches. Les deux cavités ont la même largeur  $w=100nm$  et deux longueurs différentes. Les longueurs des deux cavités sont respectivement  $l_1=440nm$ ,  $480nm$  ou  $500nm$  pour la cavité située sur la branche inférieure (cavité 1) et  $l_2=512nm$  ou  $540nm$  pour la cavité de la branche supérieure (cavité 2). Dans la figure 25b, on montre le spectre de transmission correspondant pour les trois couples de valeurs ( $l_1=440nm$ ,  $l_2=512nm$ ), ( $l_1=480nm$ ,  $l_2=540nm$ ) et ( $l_1=500nm$ ,  $l_2=540nm$ ). On note dans les trois cas un phénomène de filtrage sélectif similaire au cas du guide linéaire. Pour le couple  $l_1=440nm$  et  $l_2=512nm$ , la longueur d'onde  $\lambda_{r1}=1340nm$  est transférée par effet tunnel par la cavité 1 avec un taux de 79% (-4dB) (c'est-à-dire par excitation d'un mode plasmon de celle-ci) et la longueur d'onde  $\lambda_{r2}=1550nm$  est transmise de la même manière par la cavité 2 avec  $\approx 64\%$ . Les autres fréquences étant toutes réfléchies de façon identique par les deux branches. Ceci montre un phénomène de démultiplexage accordable, c'est-à-dire transférer sélectivement deux fréquences données parmi un signal large bande et ce en modulant l'une des deux dimensions de la cavité. Enfin il est primordial de signaler que la performance de ce dispositif est conditionnée par une distance limite (minimale) entre l'emplacement des cavités et le début de la jonction Y ; en effet nos tests numériques montrent qu'au deçà de  $1.5\mu m$  les cavités sont fortement couplées. On observe dans ce cas au niveau du spectre de transmission que les pics de transmissions se dédoublent en deux voir plusieurs pics, ce qui perturbe fortement le phénomène. Dans nos calculs on a pris une distance de  $2.5\mu m$ .

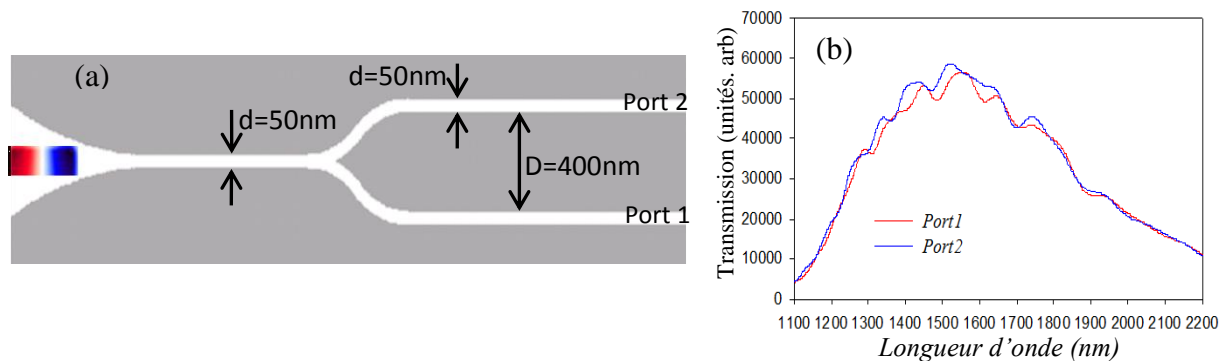


Figure 24 : (a) Schéma d'un guide d'Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag en forme de la lettre Y, de largeur  $d=50nm$ . (b) Spectre de transmission correspondant au schéma de (a), mesuré aux ports 1 et 2.

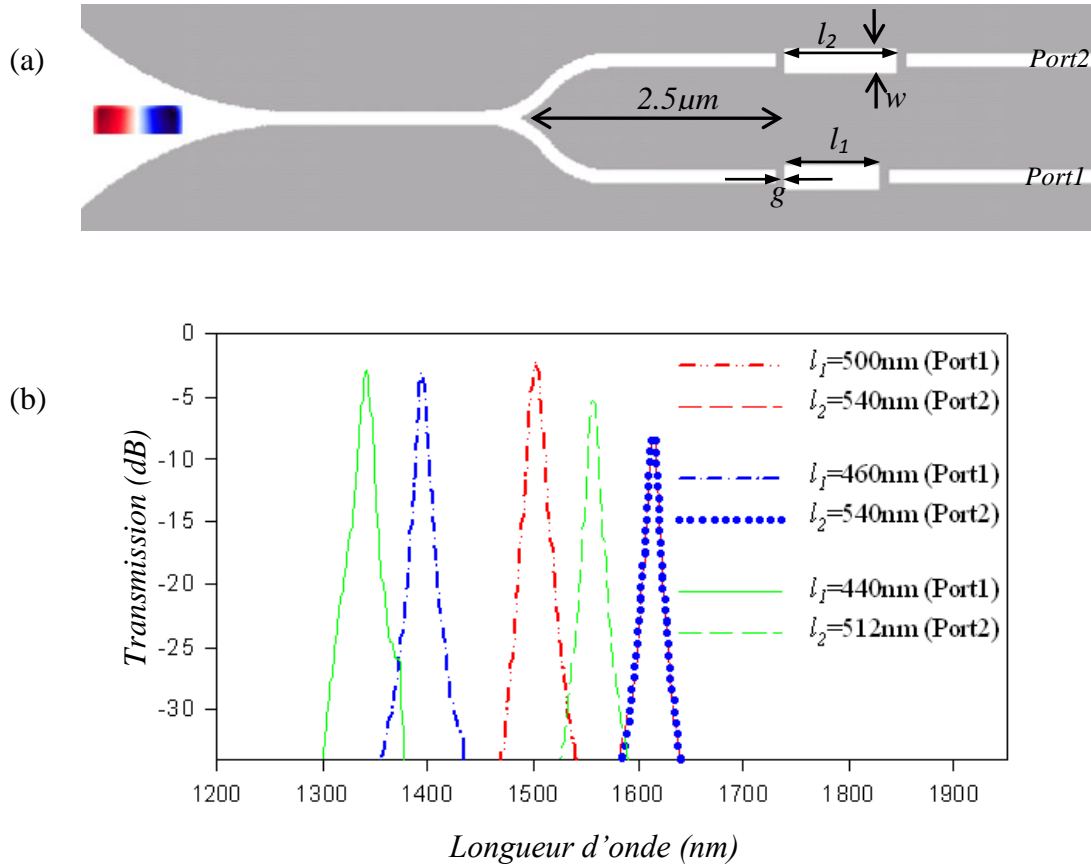


Figure 25 : (a) Schéma d'un guide d'Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag en forme de la lettre Y, couplé à un couple de deux cavités, situées sur chacune des deux branches du guide. Les dimensions des cavités sont  $l_1=440$ ,  $460$  et  $500\text{nm}$  pour la cavité de la branche inférieure ; et  $l_2=512$  et  $540\text{nm}$  pour la cavité de la branche supérieur. La hauteur des deux cavités étant  $w=100\text{nm}$  et le gap métallique est pris égal à  $g=20\text{nm}$ . (b) Spectre de transmission correspondant au schéma de (a), mesuré aux ports 1 et 2.

Les cartes de champ magnétique pour deux ondes monochromatiques aux longueurs d'ondes de résonances ( $1340\text{nm}$  et  $1550\text{nm}$ ), correspondants aux pics transmis dans le cas où  $l_1=440\text{nm}$  et  $l_2=512\text{nm}$ , sont données dans la figure 26. On peut observer le transfert sélectif de deux fréquences par excitation des modes plasmons des cavités ainsi que le rejet des autres fréquences.

Ce phénomène peut être inversé en démultiplexage réjectif en disposant les cavités sur les côtés de chacune des deux branches du guide Y. La figure 27a, montre le schéma de la structure. La figure 27b donne le spectre de transmission correspondant pour les deux couples

de valeurs ( $l_1=440nm$ ,  $l_2=512nm$ ), ( $l_1=460nm$ ,  $l_2=540nm$ ). Le gap métallique  $g$ , qui sépare les branches du guide des cavités est pour cette structure égal à  $36nm$  ( $g=36nm$ ). Tous les autres paramètres ( $d$ ,  $D$ ) de la structure sont identique au cas précédent (cavités insérées dans les branches du guide Y).

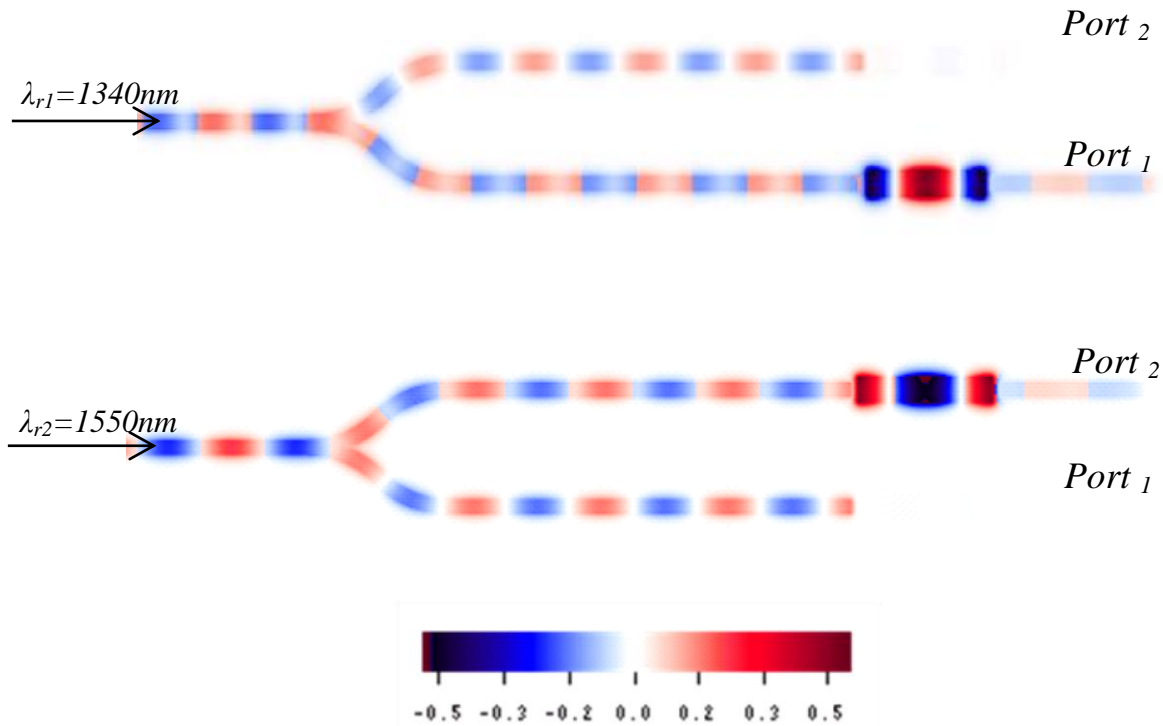


Figure 26 : Cartes de champ magnétique pour deux ondes monochromatiques aux longueurs d'ondes de résonances ( $1340nm$  et  $1550nm$ ), correspondants aux pics transmis dans le cas où  $l_1=440nm$  (cavité 1) et  $l_2=512nm$  (cavité 2).

Pour le couple  $l_1=440nm$ ,  $l_2=512nm$ , la longueur d'onde  $\lambda_{r1}=1350nm$  est réfléchiée par la cavité 1, et la longueur d'onde  $\lambda_{r2}=1560nm$  est réfléchiée par la cavité 2. Les zéros de transmission situés à  $\lambda_{r1}$  et à  $\lambda_{r2}$  ont respectivement une profondeur de  $-28dB$  et  $-22dB$ . On peut noter que les longueurs d'onde de résonance sont quasiment identiques à celles obtenues dans le cas où les cavités sont insérées à l'intérieur des branches du guide Y. On observe pour le couple de valeurs  $l_1=460nm$  et  $l_2=540nm$ , la réflexion vers l'entrée du guide de  $\lambda_{r3}=1400nm$  par la cavité 1 et de  $\lambda_{r4}=1620nm$  par la cavité 2. La profondeur des zéros de transmission situés à  $\lambda_{r3}$  et à  $\lambda_{r4}$  est de  $\approx -27dB$  pour  $\lambda_{r3}$ , et de  $\approx -30dB$  pour  $\lambda_{r4}$ . Au niveau du spectre de transmission, on peut remarquer également une transmission de  $\approx 4dB$  (dépassant le  $0dB$ ), autour des longueurs d'onde de résonances (autour des zéros de transmission). Ceci, s'explique en partie par le fait qu'une partie de l'onde réfléchiée par l'une des deux cavités à la

longueur d'onde de résonance et transmise au niveau de la jonction-Y, vers l'autre branche du guide. D'autre part, une partie du signal transmis même assez faible, réfléchi par les couches PML (qui ne sont pas parfaitement absorbantes) à droite de la structure peut contribuer à la transmission parasite observée. Néanmoins, ceci ne perturbe pas énormément le phénomène de filtrage, étant donné la faible quantité d'énergie qui lui est associée ( $\approx 4dB$ ).

Enfin ces résultats montrent la possibilité de réaliser expérimentalement un nouveau dispositif effectuant la fonction de démultiplexage (sélectif ou réjectif), ayant des dimensions latérales à l'échelle du nanomètre ( $d_{guide}=50nm=\lambda_0/51$ ) et fonctionnant dans la gamme de fréquences télécoms. Ajoutons que cette structure peut être ainsi considérée comme un instrument prometteur pour la conception de futurs nanocircuits optique traitant de l'information.

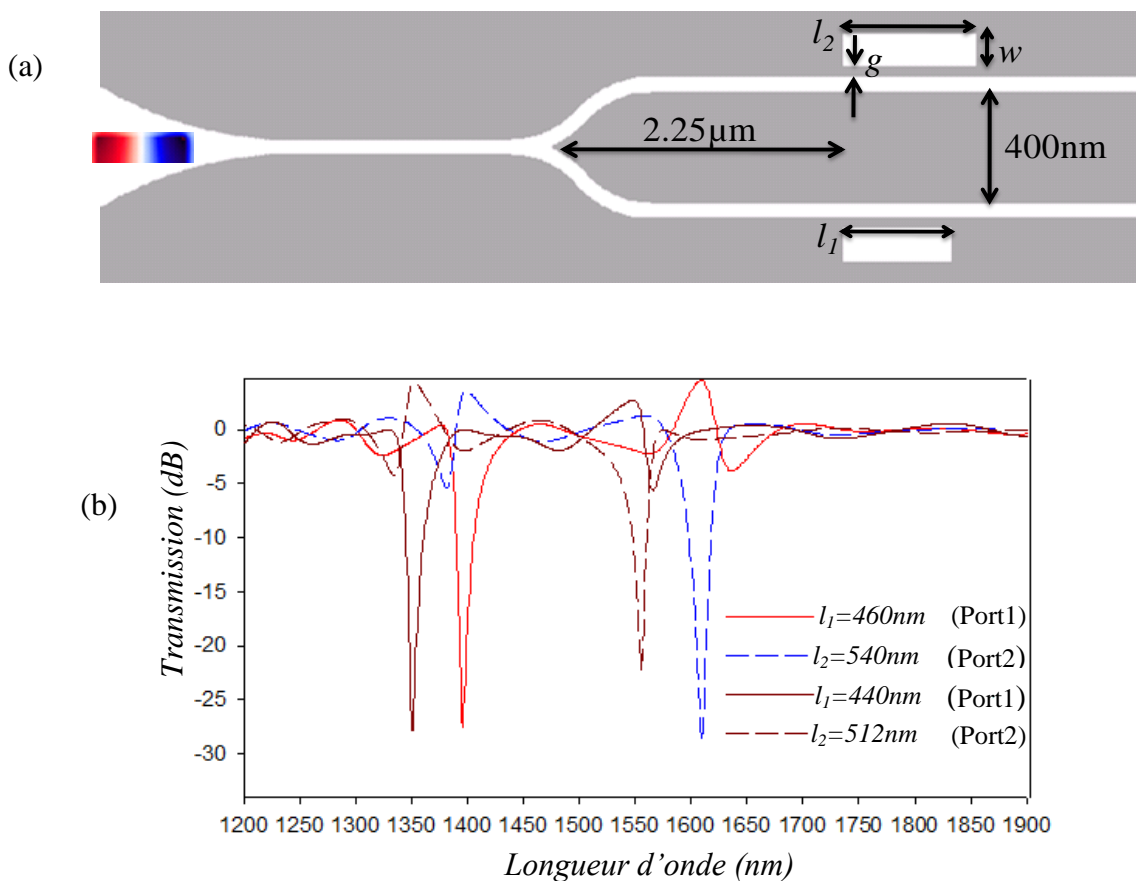


Figure 27 : (a) Schéma d'un guide d'Ag-SiO<sub>2</sub>-Ag en forme de Y, couplé à un couple de cavités, situées chacune sur le côté de l'une des deux branches du guide. (b) Spectre de transmission correspondant au schéma de (a), mesuré à la sortie des deux branches du guide Y. Les dimensions des cavités sont : ( $l_1=440nm, 460nm$ ) pour la cavité de la branche inférieure et ( $l_2=512nm, 540nm$ ) pour la cavité de la branche supérieure. La hauteur des deux cavités est  $w=100nm$ , et l'épaisseur du gap métallique est  $g=36nm$ .

### III-7) Conclusion :

Dans ce chapitre, on a exploité les propriétés de confinement sub-longueur d'onde des plasmons de surface (SPP) pour investiguer les propriétés de guidage à travers un nano-guide d'air, pris en sandwich entre deux plaques métalliques d'argent (de type MIM), dont la largeur est 10 fois plus petite que la longueur d'onde incidente. Celle-ci, étant excitée autour de 500nm, c'est-à-dire dans le domaine de fréquence du visible. L'interaction du mode SPP antisymétrique de ce guide avec ceux d'une nano-cavité rectangulaire, disposée symétriquement de part et d'autre du guide, et séparée du guide par un gap métallique, révèle au niveau du spectre de transmission-réflexion, une réflexion résonante (à  $\approx -30\text{dB}$ ). La configuration des champs électromagnétiques, ainsi que la répartition de leurs intensités dans la cavité, indiquent que ceux-ci sont essentiellement confinés sur les interfaces de la cavité avec le métal d'argent. L'étude de l'évolution de ce mode en fonction des dimensions de la cavité, montre d'une part la possibilité d'accorder la longueur d'onde de résonance. Et d'autre part, un comportement qui ne peut être attribué à un simple mode Péro-Fabry d'une cavité optique classique. Ainsi, on a pu conclure que le mode excité est un mode SPP de la cavité. L'étude des différents modes possibles de la cavité en fonction de ses dimensions, tout en gardant ceux-ci assez petits devant la longueur d'onde du pulse incident (domaine sub-longueur d'onde), indique une diversité de modes possibles. La configuration de ces modes dans la cavité (confinement sur les interfaces ou coins de la cavité), et l'évolution de leur longueur d'onde en fonction des dimensions de la cavité, confirment que ces modes sont des modes plasmons-polaritons de surface de la cavité. L'insertion de la cavité à l'intérieur du guide, permet de produire un pic de résonance (à la même fréquence) dans le spectre de transmission-réflexion, accordable avec les dimensions de la cavité. Ce qui montre la possibilité de réaliser un nano-filtre sélectif ajustable. On a également montré que le facteur de qualité des résonances peut être significativement amélioré en augmentant le gap métallique ou les dimensions de la cavité, et ce dans le cas du filtre réjectif (cavité située sur le côté du guide) et sélectif (cavité insérée dans le guide).

L'ensemble de ces phénomènes a été également étudié à travers un nano-guide (de type MIM) de  $\text{SiO}_2$ , inséré entre deux plaques métalliques d'argent, dont la largeur est cette fois-ci, 31 fois plus petite que la longueur d'onde incidente (autour de 1554nm). En plus du confinement de la lumière incidente offert par le mode SPP antisymétrique du guide, le matériau diélectrique  $\text{SiO}_2$  permet encore plus de confinement par rapport à l'air. Le couplage de ce guide avec une seule nano-cavité rectangulaire, située sur le côté du guide, indique une

réflexion résonante d'une seule fréquence (autour de 1554nm), dans le spectre de transmission-réflexion. Contrairement au système étudié dans le visible, l'utilisation d'une seule cavité (et non d'un couple de cavités symétriques) dans ce système, permet d'atteindre un degré de puissance réfléchié suffisant, à la résonance, de  $\approx -30\text{dB}$ . La configuration des champs à la résonance, ainsi que l'évolution de ceux-ci en fonction des dimensions de la cavité, montrent un comportement similaire, en le comparant avec celui obtenu dans le visible. Ce qui montre d'un côté la possibilité d'accorder le mode excité, et d'un autre côté que celui-ci est un mode SPP de la cavité. Le filtrage sélectif est produit de la même manière que le système précédent, c'est-à-dire en disposant la cavité à l'intérieur du guide, avec toutefois une certaine différence. En effet, dans le guide de  $\text{SiO}_2$ , contrairement au guide d'air, il n'est pas indispensable de prendre la même largeur du guide pour la cavité, pour produire un filtrage sélectif optimal en termes d'énergie transférée à la résonance (hauteur du pic de transmission). Ce qui signifie que l'on peut ainsi, réduire pour une largeur donnée de la cavité ( $\approx 100\text{nm}$  en générale), celle du guide sans limite, en particulier pour des applications qui n'exigent pas de longues distances de propagation (les pertes par propagation augmentent avec la réduction de la largeur du guide). En optimisant l'ensemble des paramètres géométriques, le facteur de qualité des résonances, atteint pour ce système une valeur de  $\approx 153$ , ce qui constitue une amélioration intéressante en comparaison aux systèmes proposés dans la littérature. Enfin, ces propriétés ont été exploitées pour proposer un nouveau nano-démultiplexeur plasmonique (en sélection et réjection), bien plus compact comparé à ceux proposés dans la littérature, et opérant dans la gamme des fréquences télécoms.

## Bibliographie :

- [1] W. L. Barnes, A. Dereux and T. W. Ebbesen, *Nature*. 424, 824–30 (2003).
- [2] C. Billaudeau, guidage optique dans des cristaux plasmoniques 1D et 2D, Thèse de doctorat, Université de Paris 11, 16 novembre (2007).
- [3] P. Berini, *Phys. Rev. B*. 61, 10484–503 (2000).
- [4] E. Verhagen, A. Polman, and L. K. Kuipers, *Opt. Express* 16, 45–57 (2008).
- [5] S. Park et al, *Opt. Express*, 17, 697-702 (2009).
- [6] M. Quintin, A. Leinter, J. R. Krenn and F. R. Aussenegg, *Opt. Lett.* 23, 1331–3 (1998).
- [7] S. A. Maier et al, *Nat. Mater.* 2, 229–32 (2003).
- [8] L. Dobrzynski, A. Akjouj, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, M. Bouazaoui, J. P. Viltot, H. Al Wahsh, P. Zielinski and J. P. Vigneron, *Phys. Rev. E*. 69, 035601 (2004).
- [9] K. Song and P. Mazmuder, *IEEE Inter. Conf. on Nanotechnology*, August 2-5, Hong Kong, 637-643 (2007).
- [10] R. Sainidou and F. J. García de Abajo, *Opt. Express*. 16, 4499-4506 (2008).
- [11] D. E. P. Pile and D. K. Gramotnev, *Opt. Lett.* 30, 1186 (2005).
- [12] S. I. Bozhevolnyi, V. S. Volkov, E. Devaux and T. W. Ebbesen, *Phys. Rev. Lett.* 95, 046802 (2005).
- [13] S. I. Bozhevolnyi, V. S. Volkov, E. Devaux, J. Y. Laluet, and T. W. Ebbesen, *Nature*, 440, 508 (2006).
- [14] D. Arbel, and M. Orenstein, *Opt. Express*. 16, 3114 (2008).
- [15] T. Lee and S. Gray, *Opt. Express*. 13, 9652 (2005).
- [16] G. Veronis and S. Fan, *Appl. Phys. Lett.* 87, 131102 (2005).
- [17] H. Gao, H. Shi, C. Wang, C. Du, X. Luo, Q. Deng, Y. Lv, X. Lin, and H. Yao, *Opt. Express* 13, 10795 (2005).
- [18] J. Chen, A. S. Gennady, R. B. Steven, and J. M. Kevin, *Opt. Express*. 16, 14902-14909 (2008).
- [19] R. D. Arthur, V. S. Ilya, S. I. Bozhevolnyi, and S. K. Yuri, *J. Nanophoto.* 4, 043509 (2010).
- [20] R. Charbonneau, C. Scales, I. Breukelaar, S. Fafard, N. Lahoud, G. Mattiussi, and P. Berini, *J. Lightwave Technol.* 24, 477-494 (2006).
- [21] J. T. Kim, S. Park, J. J. Ju, S. K. Park, M.-S. Kim, and M. H. Lee, *IEEE Photon. Technol. Lett.* 19, 1374-1376 (2007).

- [22] Y. H. Joo, M. J. Jung, J. Yoon, S. H. Song, H. S. Won, S. Park, and J. J. Ju, *Appl. Phys. Lett.* 92, 161103 (2008).
- [23] J. A. Dionne, L. A. Sweatlock, H. A. Atwater and A. Polman, *Phys. Rev. B.* 72, 075405 (2005).
- [24] T. Søndergaard, J. Jung, S. I. Bozhevolnyi, and G. D. Valle, *New J. Phys.* 10, 105008 (2008).
- [25] H. T. Miyazaki and Y. Kurokawa, *Phys. Rev. Lett.* 96, 097401 (2006).
- [26] J. A. Dionne, L. A. Sweatlock, H. A. Atwater and A. Polman, *Phys. Rev. B.* 73, 035407 (2006).
- [27] Z. Yu, G. Veronis, S. Fan and M. L. Brongersma, *Appl. Phys. Lett.* 92, 041117–9 (2008).
- [28] P. Neutens, P. V. Dorpe, L. D. Vlamincx, L. Lagae and G. Borghs, *Nat. Photon.* 3, 283 (2009).
- [29] Z. Han, A. Y. Elezzabi, and V. Van, *Optics Letters.* 35, 502-504 (2010).
- [30] E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids*, New York: Academic (1985).
- [31] S. L. Xian, and G. H. Xu, *Opt. Lett.* 33, 2874-2876 (2008).
- [32] P. Berini, *Opt. Express.* 14, 13030-13042 (2006).
- [33] K. Kasaya, O. Mitomi, M. Naganuma, Y. Kondo, and Y. Noguchi, *Photo. Tech. Lett.* 5, 345-347 (1993).
- [34] S. Xiao, L. Liu and M. Qiu, *Opt. Express.* 14, 2932 (2006).
- [35] A. Hosseini and Y. Massoud, *Appl. Phys. Lett.* 90, 181102 (2007).
- [36] Q. Zhang, X. G. Huang, X. S. Lin, J. Tao, and X. P. Jin, *Opt. Express.* 17, 7549-7555 (2009).
- [37] M. K. Seo, S. H. Kwon, H. S. Ee and H. G. Park, *Nano. Lett.* 9 (12), 4078–4082 (2009).
- [38] L. Esaki, *Proc. 3rd Int. Symp. Foundations of Quantum Mechanics (Tokyo)*, pp 369–82 (1989).
- [39] Z. Han, V. Van, W. N. Herman and P. T. Ho, *Opt. Express.* 17, 12678 (2009).
- [40] C. Min and G. Veronis, *Opt. Express.* 17, 10757 (2009).
- [41] X. Wu, J. Zhang and Q. Gong, *Opt. Express.* 17, 2818 (2009).
- [42] Y. C. Hang, C. M. Wang, M. N. Abbas, M. H. Shih and D. P. Tsai, *Opt. Express.* 17, 13526 (2009).
- [43] R. J. Gómez, G. Vecchi and V. Giannini, *New J. Phys.* 10, 105007 (2008).
- [44] Y. Gong, L. Wang, X. Hu, X. Li and X. Liu, *Opt. Express.* 17, 13727 (2009).

- [45] K. J. Ahn, K. G. Lee, H. W. Kihm, M. A. Seo, A. J. L. Adam, P. C. M. Planken and D. S. Kim, *New J. Phys.* 10, 105003 (2008).
- [46] T. H. Taminiau, F. D. Stefani and N. F. V. Hulst, *New J. Phys.* 10, 105005 (2008).
- [47] A. Mohammadi, V. Sandoghdar and M. Agio, *New J. Phys.* 10, 105015 (2008).
- [48] R. Charbonneau, N. Lahoud, G. Mattiussi, and P. Berini, *Opt. Express.* 13, 977-984 (2005).

# Chapitre IV



## Chapitre IV : Modélisations des propriétés optiques de nanoparticules métalliques : application pour la conception de nano-sondes dédiées à la bio-détection

### IV-1) Introduction :

Les nanostructures métalliques suscitent actuellement un intérêt considérable en raison de leurs présentes et futures applications potentielles dans divers champs, tels que la science des matériaux, la catalyse chimique, et la spectroscopie Raman exaltée de surface [1, 2]. On voudrait citer plus particulièrement les bio-détecteurs basés sur la résonance de plasmon de surface de nanoparticules de métaux nobles, déposées sur des surfaces fonctionnalisées [3, 5]. En particulier, les nanoparticules d'or et d'argent absorbent fortement des bandes de fréquences étroites, qui peuvent être accordées en ajustant la forme, la taille, et la distance inter-particules. En plus, leurs propriétés optiques dépendent nettement de la chimie de surface [6, 7] sur laquelle elles sont déposées, et sur l'indice de réfraction de l'environnement diélectrique entourant ces nanostructures [8, 9]. Ceci rend ces interfaces appropriées pour des applications de bio-détection (basées sur la détection de variation d'indice).

Par ailleurs, récemment de nombreux travaux théoriques et expérimentaux ont été entrepris pour comprendre un comportement saisissant de la résonance plasmon de surface de nanoparticules métalliques déposées sur un substrat de verre, et recouvertes de couches d'un matériau diélectrique [6, 10-14]. La longueur d'onde de résonance associée au mode plasmon de surface localisée (LSPR) de ces particules, manifeste en effet une variation oscillatoire en fonction de l'épaisseur des couches du diélectrique déposées au dessus des particules, dont l'explication théorique reste à l'heure actuelle un problème ouvert. Quand l'épaisseur des couches diélectriques (déposées sur les particules) varie entre 0 (particules non enrobées) et une épaisseur de l'ordre de la taille des particules, on observe une décroissance exponentielle de la longueur d'onde de résonance [10, 11]. Il a été démontré expérimentalement pour des nanoparticules d'argent auto-assemblées, que la décroissance de la longueur d'onde de résonance (LSPR), sature pour une épaisseur du diélectrique déposé de l'ordre de 40 nm (taille des particules d'Ag) [12]. Ces travaux montrent d'importantes implications en termes de bio-détection des interfaces basées sur le déplacement de LSPR. Par exemple pour l'étalonnage des dimensions de produits biologiques. Quand des nanoparticules argentées de

forme triangulaire ont été placées au dessus d'un substrat de verre et recouvertes d'un autre matériau diélectrique, un déplacement substantiel de LSPR, et un changement de la forme du pic d'absorption correspondant ont été observés jusqu'à des épaisseurs de l'ordre de 300 nm [13]. Käll et ces collaborateurs ont étudié la variation de la fréquence de LSPR en fonction de l'épaisseur de couches d'acide tricosenoic-22 (un diélectrique d'indice de réfraction  $n=1.53$ ) [14]. Dans cette étude, l'épaisseur des couches de l'acide tricosenoic-22 déposées sur les nanostructures considérées, variaient de 0nm à 340nm. Les couches du diélectrique ont été déposées sur un substrat de  $SiO_2$ , au-dessus duquel deux types de nanostructures ont été investiguées. Un réseau aléatoire de nano-disques métalliques d'or (fig. 1a) ; puis un réseau aléatoire de nano-trous d'air, perforés dans un film d'or de 20nm d'épaisseur, après que celui-ci soit déposé sur  $SiO_2$  (fig. 1b). Une étude similaire a été réalisée avec des nanostructures d'or, déposées sur un substrat de  $SiO_2$  [6]. Les couches du diélectrique déposées sur les nanoparticules métalliques étaient du matériau  $SiO_x$ , et leurs épaisseurs variaient de 0 à 300nm. Les propriétés du déplacement observé de LSPR par cette étude, ont été exploitées pour une étude de l'hybridation de la molécule d'ADN.

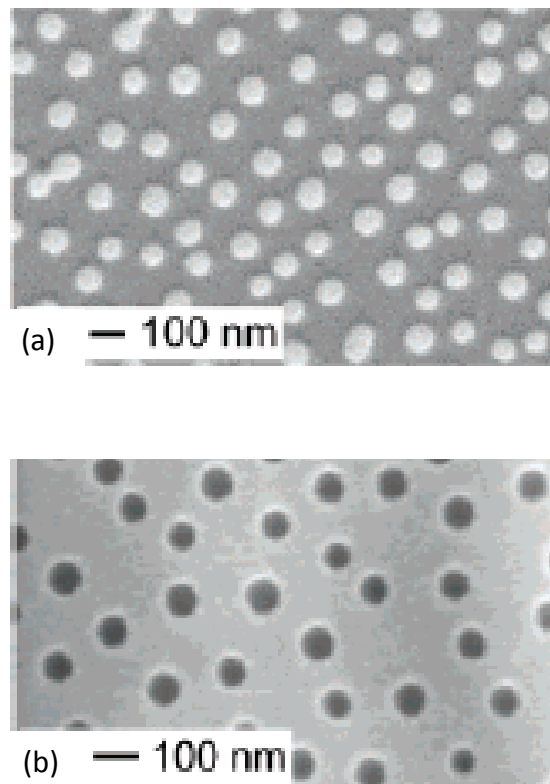


Figure 1 : (a) Vue de dessus au moyen du microscope électronique à balayage (SEM), d'un réseau de nano-disques d'argent, formés sur un substrat de verre de  $SiO_2$ . (b) Même chose qu'en (a), mais d'un réseau de nano-trous d'air, perforés dans un film métallique d'or de 20nm d'épaisseur, déposé sur un substrat de  $SiO_2$  [Réf. [14)].

En raison du grand nombre de paramètres influençant le comportement de LSPR, il est primordial de pouvoir mettre en œuvre des modèles précis, permettant de prédire les propriétés optiques de différentes sondes basées sur la résonance plasmon de surface localisée. De tels modèles s'avèrent essentiels pour l'optimisation et l'évaluation de divers prototypes de sondes préalablement à l'expérience. En plus, ils pourraient permettre la compréhension ou du moins la confirmation théorique de tels phénomènes observés expérimentalement. Diverses tentatives ont été entreprises afin de modéliser les propriétés optiques de nanoparticules métalliques, en particulier la réponse plasmonique en fonction des différents paramètres physiques et géométriques mis en jeu [11], [15-18].

Dans ce chapitre, on rapporte les résultats de simulations numériques basées sur le modèle de Lorentz-Drude (description détaillée dans le chapitre 1) [19], concernant la réponse optique de nanoparticules métalliques déposées sur un substrat de  $SiO_2$ . Cette étude est effectuée d'une part, en fonction des différents paramètres géométriques des particules, et d'autre part en fonction de l'épaisseur de couches de diélectriques déposées sur ces nanostructures ( $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ ). On montre une forte sensibilité de la réponse plasmonique des nanoparticules métalliques aux divers paramètres géométriques des nanoparticules, et un comportement oscillatoire de LSPR en fonction de l'épaisseur des couches diélectriques  $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ . Cette variation oscillatoire de LSPR est exploitée pour concevoir de nouveaux nano-capteurs de produits biologiques. Plus précisément, on verra que ceux-ci sont basés sur la variation de la longueur d'onde de résonance plasmonique des particules suite au dépôt de molécules biologiques au dessus des couches diélectriques. Enfin, en procédant à l'investigation de l'oscillation de LSPR en fonction des dimensions des particules métalliques, on montre la possibilité d'optimiser l'amplitude d'oscillation de LSPR, et donc la sensibilité de futurs nano-sondes biologiques. L'intérêt de cette étude est double, puisque d'un côté on s'intéresse à un aspect fondamental du problème à savoir l'interaction lumière-nanostructures métalliques, disposées dans une certaine configuration géométrique, et en contact avec un certain type de matériaux (des diélectriques). D'un autre côté, les études antérieures citées plus haut, et qui ont orientés nos recherches dans le choix d'étudier ce type de structures, suggèrent fortement l'exploitation du déplacement de LSPR en terme de bio-détection. Cette étude a fait l'objet d'une collaboration avec l'équipe bio-interface de l'IRI et de l'IEMN. Une telle coopération nous a permis d'une part de confronter les résultats de nos simulations avec ceux de l'expérience, et d'autre part de proposer de nouvelles pistes d'investigations (théoriquement) préalablement à l'expérience.

## IV-2) Modélisation de nanostructures plasmoniques

La figure 1a montre le schéma illustrant la configuration de la nanostructure plasmonique typique à 2D utilisée pour la modélisation théorique. Des rubans métalliques d'or caractérisés par les paramètres géométriques,  $l$  pour le diamètre,  $h$  pour la hauteur, et  $a$  pour la période de réseau des rubans, sont déposés sur un substrat en verre transparent de  $SiO_2$  (d'indice de réfraction  $n_1= 1.51$ ). Ensuite, les rubans sont recouverts d'une couche d'un matériau diélectrique d'épaisseur  $d$ . Dans le cadre de cette étude, le diélectrique peut être le matériau  $SiO_x$  ( $n_2= 1.45$ ) ou  $Si_3N_4$  ( $n_3=2.01$ ). Enfin, la structure est enrobée d'un matériau non absorbant utilisé comme milieu de détection, à savoir l'air ( $n_4=1.00$ ). La réponse optique des nanoparticules est décrite ici à l'aide de la constante diélectrique complexe du métal d'or, issue du modèle de Lorentz-Drude (L-D) :

$$\varepsilon_{LD}(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{m=0}^M \frac{G_m \Omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_m} \quad (4.1)$$

On rappelle que,  $G_m$  est la pondération affectée à l'oscillateur ' $m$ ' dont la fréquence de transition inter-bande est  $\omega_m$  et le coefficient de frottement est  $\Gamma_m$ . Le paramètre  $\Omega_m$  est égal à  $\sqrt{G_m}\omega_p$ , enfin le nombre entier  $M$  est le nombre total d'oscillateurs considérés, soit  $M=5$  dans notre étude (suffisant pour ajuster la constante diélectrique de l'or). Notons que ce nombre, ainsi que les valeurs de ( $G_m$ ,  $\varepsilon_{\infty}$ ,  $\omega_m$ ,  $\Gamma_m$ , et  $\omega_p$ ) sont choisis dans la référence [19], de sorte que les parties réelle et imaginaire de  $\varepsilon_{LD}$  en fonction de la fréquence reproduisent les courbes expérimentales correspondantes issues de la référence [20]. La valeur de la constante diélectrique aux fréquences infinies dans la référence [19] est  $\varepsilon_{\infty} = 1$ . Les valeurs des autres paramètres de L-D sont données dans le tableau suivant :

Oscillateur ' $m$ '	$G_m$	$\omega_p$ (rad. s <sup>-1</sup> )	$\omega_m$ (rad. s <sup>-1</sup> )	$\Gamma_m$ (rad. s <sup>-1</sup> )
0	0.76	$1.37188.10^{16}$	0.0000	$8.05202.10^{13}$
1	0.024	$1.37188.10^{16}$	$6.30488^{14}$	$3.66139.10^{14}$
2	0.01	$1.37188.10^{16}$	$1.26098.10^{15}$	$5.24141.10^{14}$
3	0.071	$1.37188.10^{16}$	$4.51065.10^{15}$	$1.32175.10^{15}$
4	0.601	$1.37188.10^{16}$	$6.53885. 10^{15}$	$3.78901.10^{15}$
5	4.384	$1.37188.10^{16}$	$2.02364. 10^{16}$	$3.36362.10^{15}$

Tableau 1 : Valeurs des paramètres physiques intervenants dans l'expression mathématique de la constante diélectrique complexe, issue du modèle de Lorentz-Drude pour le métal d'or.

Dans la figure 1b, on a tracé la variation des parties réelle et imaginaire de la constante diélectrique issues du modèle de Lorentz-Drude ainsi que celles déduites des données expérimentales. On note une bonne concordance entre l'approche théorique et expérimentale, dans une large gamme de fréquence, en particulier entre  $\omega=2.35.10^{15} s^{-1}$  soit  $\lambda=800nm$  et  $\omega=4.75.10^{15} s^{-1}$  soit  $\lambda=400nm$  (gamme de longueur d'onde d'excitation utilisée dans ce chapitre). Afin d'effectuer des calculs avec le modèle de L-D, il est nécessaire de fixer les paramètres géométriques caractérisant la structure étudiée, et ce pour donner un sens à la confrontation avec les résultats expérimentaux.

Dans cet esprit, nous allons décrire brièvement dans un premier temps le processus expérimental permettant de réaliser une telle structure ainsi que les méthodes de caractérisation des paramètres géométriques du problème ( $l$ ,  $h$ ,  $a$ ).

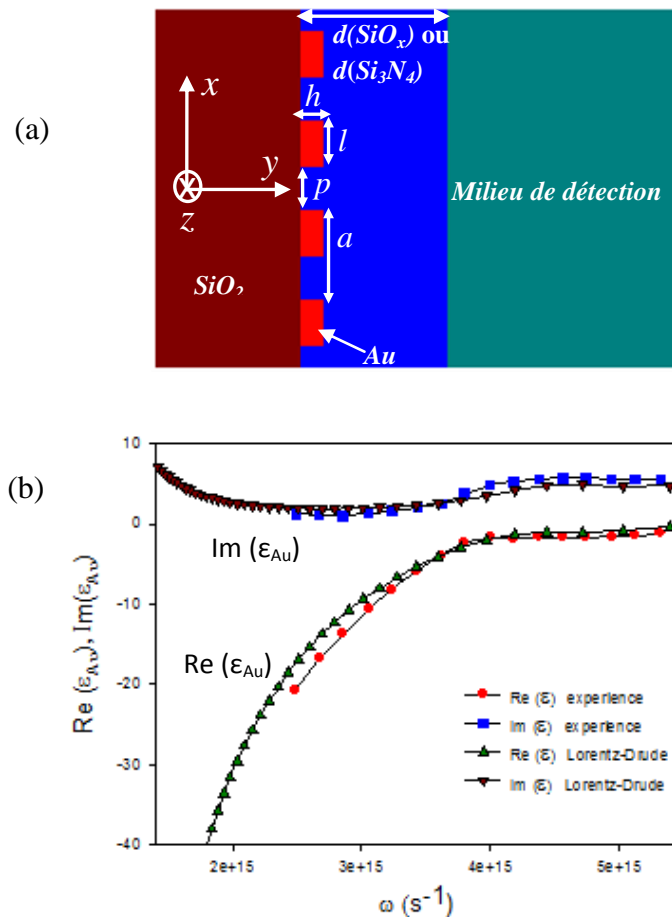


Figure 1 : Schéma de la structure typique modélisée, à savoir des rubans d'or espacés de  $a$  et caractérisés par la longueur  $l$  et la hauteur  $h$ . La structure est déposée sur un substrat de verre ( $n=1.51$ ), et recouverte d'une couche de diélectrique (SiO<sub>x</sub> ou Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) et puis d'un milieu de détection, soit l'air ici. (b) Variation des parties réelle et imaginaire de la constante diélectrique du métal d'or en fonction de la fréquence angulaire, à partir du modèle de Lorentz-Drude et des données expérimentales.

### IV-3) Réalisation expérimentale des nanoparticules et caractérisation des paramètres géométriques

Les nanoparticules d'or ont été déposées sur des surfaces de verre ( $SiO_2$ ,  $76 \times 26 \times 1 \text{ mm}^3$ ) par évaporation thermique d'un film mince d'or de 4 nanomètre de hauteur, suivie d'une phase de recuit à  $500^\circ\text{C}$  pendant un temps court de 1min. L'étape du recuit a été effectuée grâce à un four spécifique (Jipelec Jet First 100), permettant un chauffage rapide, porté à une pression atmosphérique du gaz de nitrogène. Notons, que préalablement à la disposition des échantillons dans les chambres d'évaporation thermiques, ceux-ci ont été nettoyés avec une solution d'isopropanol et à l'acétone dans un bain d'ultrasons à une température ambiante. Ensuite, les échantillons sont rincés avec une eau ultra pure (l'eau Milli-Q), et puis séchés sous un jet de molécules d'azote, les échantillons propres sont alors soumis à l'évaporation. Les couches de  $SiO_x$  étaient déposées sur le substrat de verre au dessus des nanostructures d'or, par déposition chimique en phase gazeuse, dans un réacteur à plasma (plasma enhanced chemical vapor deposition). Dans celui-ci, les produits gazeux introduits subissent par décharge électrique une ionisation à basse pression (0.005 Torr), ce qui conduit à la formation de radicaux libres, d'électrons libres et d'ions activés. Les ions activés, après diffusion (par dépression) vers le substrat, réagissent sur la surface de celui-ci pour ainsi former les couches minces de  $SiO_x/Si_3N_4$ , au-dessus des nanoparticules d'or. Les conditions de croissance utilisées étaient : une température de substrat de  $300^\circ\text{C}$  ; un mélange gazeux de  $SiH_4$  (5% en  $N_2$ ) et de  $N_2O$  (le débit des gaz vers le substrat était de 150 et 700 sccm pour  $SiH_4$  et  $N_2O$ , respectivement). La pression totale dans la chambre du réacteur, était de 1 Torr, et enfin la puissance de celui-ci était de 20 W à une fréquence de 13.56 mégahertz. Dans ces conditions expérimentales, le taux de dépôt atteint était de  $681 \text{ \AA min}^{-1}$ , et les films de silice déposés manifestaient un indice de réfraction de  $n=1.45$ . Notons qu'afin de pouvoir mesurer la réponse optique des particules pour chaque valeur d'épaisseur des films déposés, plusieurs échantillons ont été réalisés. Pour l'un de ces échantillons, une épaisseur totale de 300nm a été déposée. Les couches minces de  $Si_3N_4$  étaient déposées sur un substrat de verre de  $SiO_2$  préalablement enduit de nanostructures d'or par une procédure similaire, à savoir, un dépôt chimique en phase gazeuse dans un réacteur à plasma. Les conditions de croissance de  $Si_3N_4$ , étaient comme suit : une température du substrat de  $200^\circ\text{C}$  ; un mélange de gaz de  $SiH_4$  (5% en  $N_2$ ) débitant avec un taux de 360 sccm, et du gaz de  $NH_3$  à un débit de 20 sccm. La pression totale régnant dans le réacteur était de 1 torr, et sa puissance était de 10 W à une fréquence de 13.56 mégahertz. Dans ces conditions expérimentales, la vitesse du dépôt

atteinte valait  $72 \text{ \AA min}^{-1}$ , et les films montraient un indice de réfraction égal à  $n=2.01$ . De manière analogue au dépôt des films de silice, plusieurs échantillons ont été réalisés, ayant chacun une épaisseur donnée des films de  $Si_3N_4$  déposés. Une épaisseur totale de 300 nanomètre a été déposée pour l'un de ces échantillons.

Le microscope électronique à balayage (SEM) a été utilisé afin de pouvoir caractériser les nanoparticules dans le plan de la surface les supportant. Dans la figure 2a, on montre une coupe de dessus de la forme globale des particules. On peut noter la forme assez aléatoire des particules, ce qui a nécessité de déterminer des statistiques relatives aux dimensions des nanoparticules dans le plan (diamètre et distance inter-particules),  $l$  et  $p$  (respectivement).

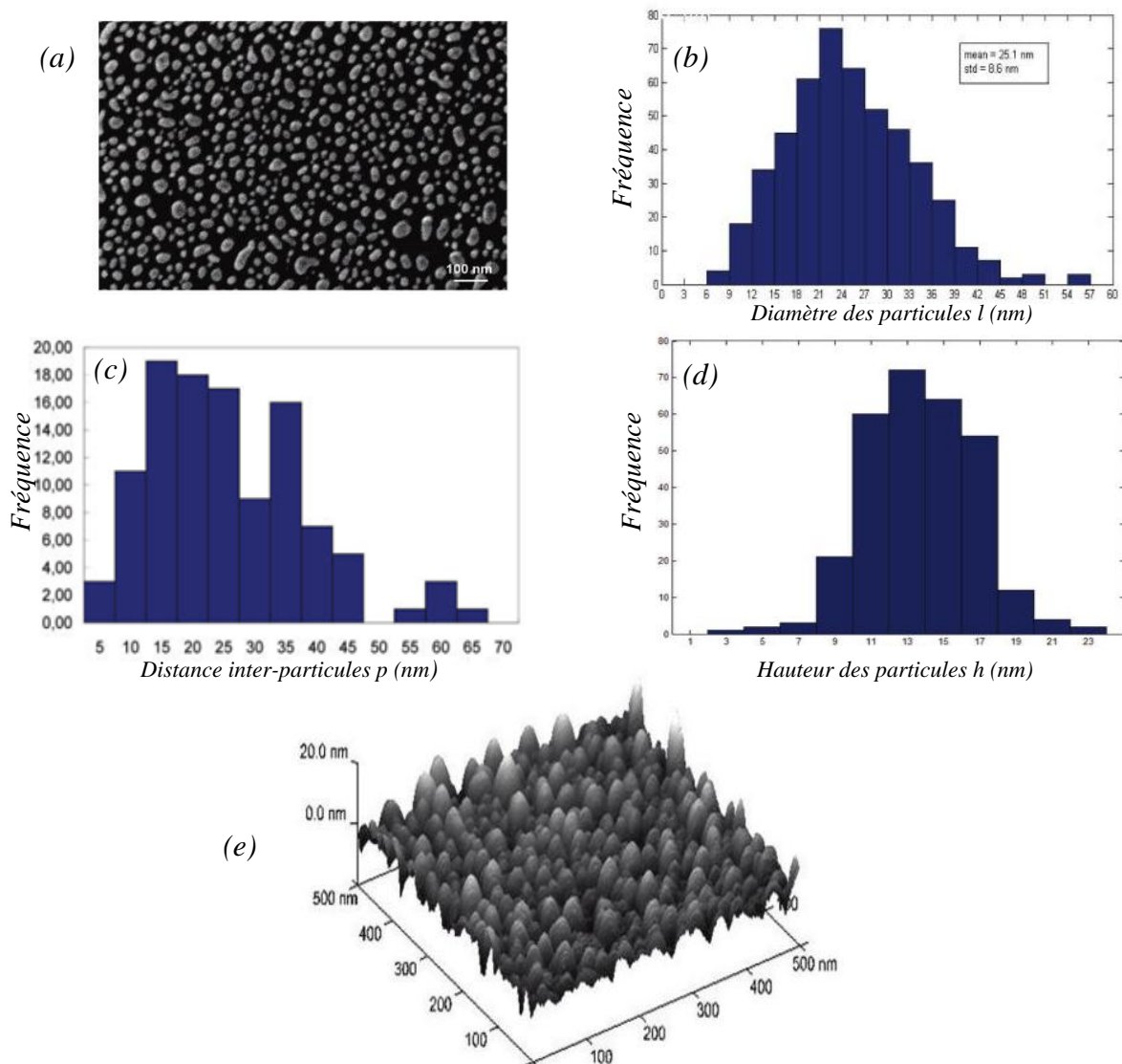


Figure 2 : (a) Une coupe de dessus visualisant les nanoparticules métalliques d'or, déposées sur le substrat de verre, avec le microscope électronique à balayage (SEM). (b) Statistique relative au diamètre des particules, réalisée avec le SEM. (c) Même chose qu'en (b) mais relativement à la distance inter-particules. (d) Evaluation statistique de la hauteur des particules avec le microscope à force atomique (AFM). (e) Sur cette figure, est donnée une visualisation à 3D des particules d'or, avec le microscope AFM.

Les figures 2b et 2c, donnent les résultats de telles statistiques, respectivement pour  $l$  et  $p$ , obtenus grâce au SEM. On voit alors que les valeurs les plus probables sont  $25\pm 8\text{nm}$  pour le diamètre  $l$ , et  $16\pm 8\text{nm}$  pour la distance inter-particule  $p$ . L'emploi du microscope à force atomique (AFM), a permis de déterminer la statistique relative à la troisième direction de l'espace, c'est-à-dire la hauteur des particules  $h$ . La figure 2d montre les résultats obtenus par le microscope, on note que la valeur la plus fréquente est  $h=13.6\pm 3\text{nm}$ . Enfin, sur la figure 2e, une image à 3D des particules déposées sur  $\text{SiO}_2$ , obtenue avec l'AFM, est rapportée. Ces données correspondent à un taux d'allongement, c'est-à-dire le rapport entre hauteur et dimension dans le plan des particules de  $h/l=0.54$  ; et à un facteur de remplissage du métal sur la surface du substrat de 37%.

#### IV-4) Etude de la réponse plasmonique des particules métalliques en fonction des paramètres $l$ , $a$ et $h$ .

En se basant sur les données expérimentales, on va à présent fixer les paramètres ( $l$ ,  $a$  et  $h$ ), de sorte que la réponse plasmonique des particules en terme de fréquence soit quasiment la même théoriquement et expérimentalement. Pour ce faire, on a d'une part fixé l'épaisseur de la couche du diélectrique ( $\text{SiO}_x$ ) déposée sur les particules à  $d=140\text{nm}$  ; et d'autre part on a fait varier la longueur  $l$ , la période de réseau des particules  $a$ , et puis la hauteur des plots  $h$ . Ces variations ont été effectuées avec les contraintes expérimentales décrites au paragraphe IV-3, un taux de remplissage à une dimension pour la structure théorique  $f=l/a=0.37$  ; et le choix des valeurs de  $l$ ,  $a$  ( $a=l+p$ ) et  $h$  dans les mêmes ordres de grandeurs fournis par l'expérience. Enfin, avec ces investigations, on compare le spectre d'absorption calculé avec le modèle de L-D (pour  $d=140\text{nm}$ ), avec le coefficient d'absorption déduit expérimentalement pour la même épaisseur de  $\text{SiO}_x$ ,  $d=140\text{nm}$ . Dans notre modèle, on excite un pulse électromagnétique avec une source de courant plane spatialement, puisque la structure se répète périodiquement à l'infini, parallèlement à l'axe des 'x'. Temporellement, la source de courant est excitée durant un laps de temps  $\Delta t$  fini avec un profil gaussien, de sorte que dans l'espace de Fourier correspondant, le signal large bande crée s'étend de  $\lambda = 400\text{nm}$  à  $\lambda = 800\text{nm}$ . On rappelle, que dans cette gamme de fréquence, on obtient une bonne concordance entre le modèle de Lorentz-Drude et les données expérimentales. La figure 3 montre le résultat du calcul théorique de l'absorption des plots métalliques (structure de la figure 1a) en fonction de la fréquence, et ce suite à l'interaction des plots avec un pulse lumineux incident

[400nm-800nm] ; les valeurs des paramètres choisies suite à l'investigation décrite plus haut sont :  $l=30nm$ ,  $a=80nm$  et  $h=15nm$ . Dans le but de comparer théorie et expérience, la figure 3 inclut également le spectre d'absorption, enregistré expérimentalement avec un spectrophotomètre UV-Visible (fonctionnant dans le visible et l'ultra-violet). Les spectres reportés théoriques et expérimentaux correspondent à une épaisseur de  $SiO_x$  égale à  $d=140nm$ , ceux-ci sont comparés au cas où les particules sont en contact avec l'air, c'est-à-dire en absence de couche de  $SiO_x$ . On peut remarquer une assez bonne concordance entre les spectres théoriques (traits en pointillés) et expérimentaux (traits continus) ; et ce dans les cas où les plots (particules métalliques) sont recouverts de 140nm de  $SiO_x$  (courbes noires), ainsi que dans le cas de plots non recouverts (courbes bleues). Par ailleurs, au-delà de la comparaison théorie-expérience, on note dans les deux cas une forte absorption des plots à la longueur d'onde  $545nm$  (sans la couche de  $SiO_x$ ), et à  $568nm$  quand ceux-ci sont recouverts ( $d=140nm$ ). Ces longueurs d'onde correspondent à l'excitation du mode plasmon-polariton de surface des particules, confiné au niveau de l'interface entre les particules et les diélectriques les environnant. Le fort déplacement de la résonance plasmonique, en passant du cas de particules en contact avec l'air à des particules recouvertes de  $SiO_x$ , constitue une signature du mode plasmon de surface et non de volume, du fait de la sensibilité de celui-ci à l'environnement diélectrique. Un léger décalage en termes d'intensité d'absorption des plots est observé entre les spectres théoriques et expérimentaux. Cependant, l'accord obtenu est plutôt satisfaisant si on tient compte du fait que le système réel est constitué de particules avec des tailles variables, assez désordonnées dans leur arrangement et qui sont en plus à 3D.

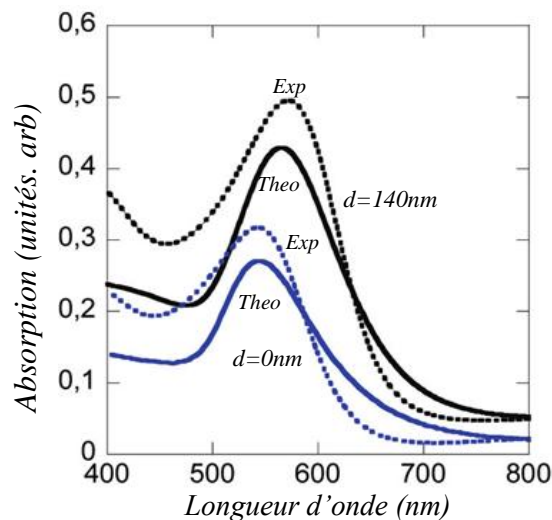


Figure 3 : Spectres d'absorption théoriques des plots métalliques, dans le cas où  $l=30nm$ ,  $a=80nm$  et  $h=15nm$ , et ce pour deux valeurs de l'épaisseur de couche de  $SiO_x$  :  $d=0$  (traits en pointillés bleus) et  $140nm$  (traits en pointillés noirs). Sur la même figure, sont représentés les spectres d'absorption expérimentaux à titre de comparaison, pour les mêmes valeurs de  $d=0nm$  (traits bleues continus) et  $d=140nm$  (traits noirs continus).

A partir de ces résultats, on fixera désormais les paramètres géométriques des nanoparticules ( $l=30nm$ ,  $a=80nm$  et  $h=15nm$ ), pour tous les calculs ultérieurs. Dans ce paragraphe, on a évalué avec le modèle de L-D, le comportement de la réponse optique des particules, en particulier à la résonance plasmonique en fonction des paramètres  $l$ ,  $a$  et  $h$ . On a procédé de la façon suivante : d'abord on fixe la longueur des particules  $l=30nm$ , et la période du réseau  $a=80nm$ , puis on varie la hauteur des particules  $h$  entre 5 et 40nm. La figure 4a donne le spectre de transmission calculé pour quelques valeurs de  $h=5, 10, 15$ , et 18nm, pour une épaisseur de  $SiO_x$  déposée de 140nm. La figure 4b montre l'évolution de la longueur d'onde de résonance plasmon des particules en fonction de  $h$ , dans une plus large gamme de valeurs possibles, entre 5 et 40nm. Au niveau du spectre de transmission de la fig. 4a, on note une assez importante chute de puissance de l'ordre de 50% (-6dB) en moyenne, autour d'une certaine longueur d'onde ( $\lambda_0$ ). Celle-ci correspond à la fréquence à laquelle l'onde incidente se couple fortement aux électrons libres des particules, au niveau de l'interface entre la surface de celles-ci et le diélectrique les entourant ( $SiO_x$ ). C'est à dire, un mode plasmon-polariton de surface des particules métalliques. Le zéro de transmission correspondant à cette résonance est fortement déplacé vers les basses longueurs d'onde lorsqu'on augmente  $h$ . En effet, dans la figure 4b, on observe une forte décroissance quasi-hyperbolique de  $\lambda_0$ ; celle-ci passe de 735nm à 550nm, quand la hauteur des particules  $h$  varie de 5 à 20nm. Ensuite,  $\lambda_0$  continue à baisser de façon beaucoup moins importante, mais toutefois non négligeable ; on passe de 550nm à 515nm, lorsque  $h$  varie de 20nm à 40nm. Ces résultats montrent une forte sensibilité de la réponse plasmonique des particules à la hauteur de celles-ci, en particulier pour les faibles hauteurs entre 5 et 20nm. Cette sensibilité permet un balayage de plus de 230nm de la réponse plasmonique, ce qui permet en fonction de  $h$  d'accorder celle-ci pour des applications spécifiques.

Dans un second lieu, on a étudié le comportement du mode plasmon en fonction de la période de réseau des particules  $a$ , et ce en fixant tous les autres paramètres ( $l=30nm$ ,  $h=15nm$  et  $d=140nm$ ). Notons que le paramètre  $a$  caractérise directement le comportement collectif des particules métalliques à savoir les interactions dipolaires inter-particules. Ainsi, l'étude de la réponse plasmonique des plots en fonction de  $a$ , donne une indication directe sur le degré d'implication des interactions inter-plots sur la résonance observée dans les spectres de transmission ou d'absorption. La figure 5a montre le spectre de transmission des plots métalliques en fonction du paramètre de réseau à une dimension, dirigé parallèlement à l'axe des ' $x$ ' (voir la fig. 1a). Dans cette figure, le spectre de transmission est calculé pour  $a=40, 50, 60, 70$  et  $80nm$ .

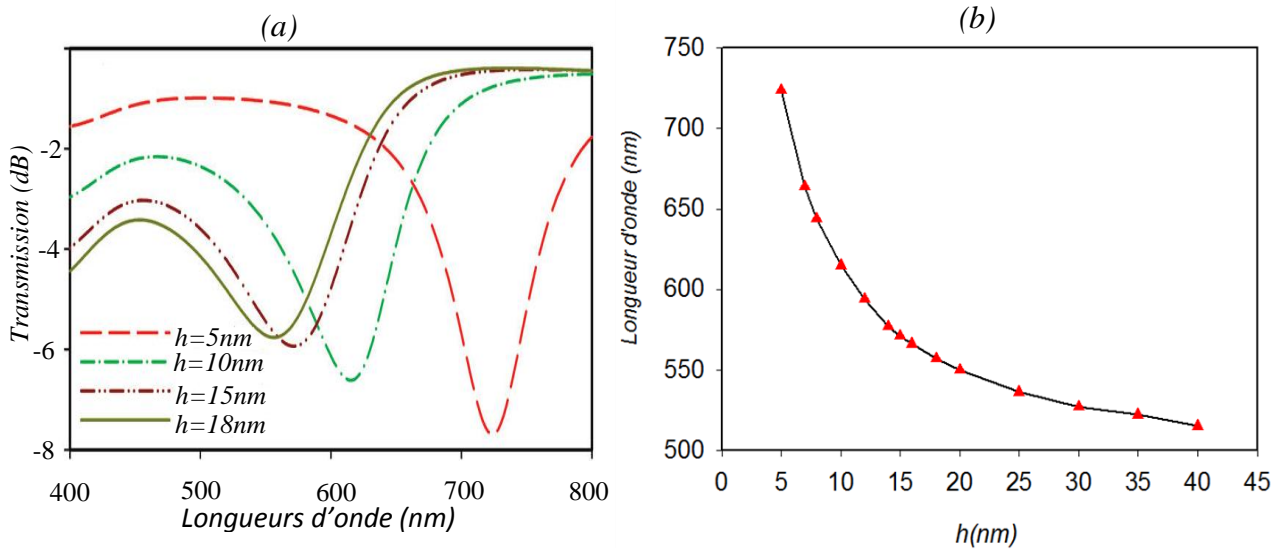


Figure 4 : (a) Spectre de transmission correspondant à la structure de la figure 1a, pour les valeurs de  $h=5, 10, 15$  et  $18\text{nm}$  (hauteur des plots), les autres paramètres étant gardés constants soient  $l=30\text{nm}$ ,  $a=80\text{nm}$  et  $d=140\text{nm}$  (épaisseur de  $\text{SiO}_x$  déposée sur les plots). (b) Evolution de la longueur d'onde de résonance correspondant au zéro de transmission observé dans (a), en fonction de la hauteur des plots métalliques  $h$ , sur une plus large gamme de valeurs.

On note un déplacement spectaculaire de la longueur d'onde de résonance, de  $580\text{nm}$  à  $700\text{nm}$ , en variant ' $a$ ' de  $40\text{nm}$  à  $80\text{nm}$ . Par ailleurs, une information pertinente est d'observer qu'à  $a=40\text{nm}$ , c'est-à-dire quand les plots sont distants que de  $p=10\text{nm}$ , le zéro de transmission correspondant à la réponse plasmonique, montre une absorption des plots de 93%. A l'inverse, on remarque que pour  $p=50\text{nm}$  ( $a=80\text{nm}$ ), les plots absorbent 50% d'énergie incidente à la résonance ( $-5\text{dB}$ ). Donc, en plus du déplacement de la fréquence du plasmon en rapprochant les plots (passage de  $50\text{nm}$  à  $10\text{nm}$ ), il se produit un renforcement de la résonance plasmonique en termes d'énergie d'absorbée de 43%. Ces deux remarques montrent une forte implication des interactions dipolaires inter-plots dans la réponse plasmonique, et que celles-ci résultent du comportement collectif des plots. Néanmoins, en éloignant suffisamment ceux-ci, leur réponse plasmonique subsiste, et qu'ainsi celle-ci est gouvernée par la réponse individuelle des plots et les interactions dipolaires entre ceux-ci. Sur la figure 5b est reportée l'évolution de la longueur d'onde de résonance plasmonique des plots, en fonction de  $a$ . Le paramètre de maille  $a$  varie entre  $35\text{nm}$  et  $120\text{nm}$ . On remarque une décroissance non-linéaire spectaculaire de la longueur d'onde de résonance plasmonique des plots qui passe de  $\lambda_0 \approx 775\text{nm}$  à  $\lambda_0 \approx 560\text{nm}$  (soit un déplacement de  $215\text{nm}$ ), lorsque  $a$  varie seulement de  $35\text{nm}$  à  $80\text{nm}$ . Ensuite, on note une diminution bien plus faible, de  $560\text{nm}$

à 550nm, lorsque  $a$  varie de 80 à 120 nm. Ce qui est à relier à ce qui a été discuté juste avant, c'est-à-dire que dans le régime de faible couplage entre les plots (plots suffisamment éloignés), la variation de  $a$  n'a quasiment plus d'effet sur la réponse des particules. D'ailleurs, à partir de  $a \geq 120$ nm, on tend vers une réponse individuelle des plots, autour de 550nm, puisque ceux-ci sont dans ce cas très éloignés.

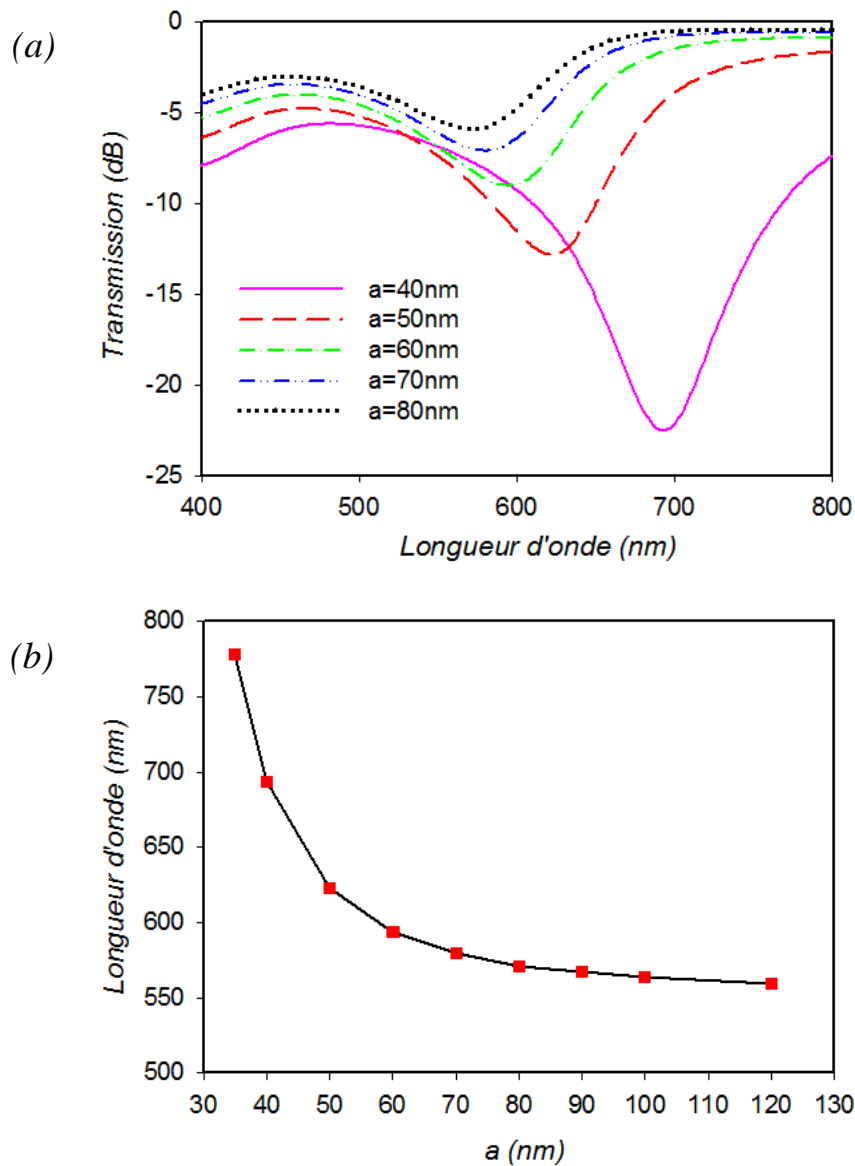


Figure 5 : (a) Spectre de transmission correspondant à la structure de la fig. 1a, pour les valeurs de  $a=40, 50, 60, 70$  et  $80$ nm (période de réseau), les autres paramètres étant gardés constants soient  $l=30$ nm,  $h=15$ nm et  $d=140$ nm (épaisseur de  $\text{SiO}_x$  déposée sur les plots). (b) Evolution de la longueur d'onde de résonance correspondant au zéro de transmission observé dans (a), en fonction de la période du réseau des plots métalliques ' $a$ ', sur une plus large gamme de valeurs.

Enfin, on a regardé l'effet de la longueur des plots dans le plan du substrat supportant ceux-ci ( $l$ ), sur la réponse plasmonique des plots en gardant les autres paramètres géométriques constants, c'est-à-dire  $a=80nm$ ,  $h=15nm$  et  $d=140nm$ . Dans la figure 6a, on donne le spectre de transmission pour  $l=30, 35, 40, 45$  et  $50nm$ . On note un déplacement assez important de la longueur d'onde du zéro de transmission correspondant à la réponse plasmonique des plots vers les grandes longueurs d'onde (basses fréquences) de 568 à 675nm. Ceci, s'opère en augmentant progressivement  $l$  de 30nm à 50nm, ce qui signifie un déplacement de 107nm, pour une augmentation de  $l$  de 20nm seulement. On note aussi une plus forte absorption des plots avec l'augmentation de  $l$ . Ceci peut être relié, d'une part à plus d'énergie confinée avec l'augmentation de  $l$  (aux interfaces particules-diélectriques à la résonance), soit donc un plus grand coefficient d'absorption. D'autre part, l'augmentation de  $l$  rapproche les plots, et l'on a vu précédemment qu'en régime de fort couplage inter-plots, on atteint un fort coefficient d'absorption de ceux-ci. Sur la figure 6b, on rapporte l'évolution de la fréquence des zéros de transmission, observés dans la figure 6a (réponse plasmonique), en fonction de  $l$ , dans une plus large gamme de valeurs possibles, soit entre  $l=10nm$  et  $l=75nm$ . Cette figure montre une information plus précise sur le comportement du plasmon en fonction de  $l$ . On voit en effet qu'entre  $l=10nm$  et  $l=50nm$ , c'est-à-dire entre une situation où la distance inter-plots est de 60nm et de 30nm respectivement ; la longueur d'onde de résonance croît quasi-linéairement avec  $l$ . A partir, de  $l \geq 50nm$ , on observe une brusque croissance non-linéaire très importante de la longueur d'onde de résonance  $\lambda_0$ , qui passe de 700nm à 1150nm (proche infrarouge), pour une augmentation de  $l$  de 25nm seulement. Ces deux remarques peuvent être expliquées en partie, par le fait qu'entre  $l=10nm$  et  $l=50nm$ , les plots ne sont que faiblement couplés ce qui conduit à une variation linéaire de  $\lambda_0$  avec  $l$ . Tandis, qu'à partir de  $l \geq 50nm$ , les plots sont fortement couplés et donc une variation non linéaire de  $\lambda_0$  en fonction de  $l$ .

Les résultats de ce paragraphe indiquent un comportement de la réponse plasmonique des nanoparticules métalliques assez original, en particulier, l'hyper-sensibilité et la variation non-linéaire de la fréquence du plasmon en fonction de  $l$  et  $a$  ; et ce d'autant plus que les plots sont fortement couplés ( $a$  petit, ou  $l$  grand). En fonction de  $h$ , le mode plasmon montre une très forte sensibilité, en particulier pour les petites hauteurs des plots, et ce indépendamment du régime de couplage des plots. Ces informations laissent entrevoir de potentielles applications liées à la conception de nano-capteurs biologiques. En particulier, en choisissant de façon appropriée les valeurs de ces paramètres, on peut choisir la gamme de la réponse plasmonique en fonction des produits biologiques à détecter.

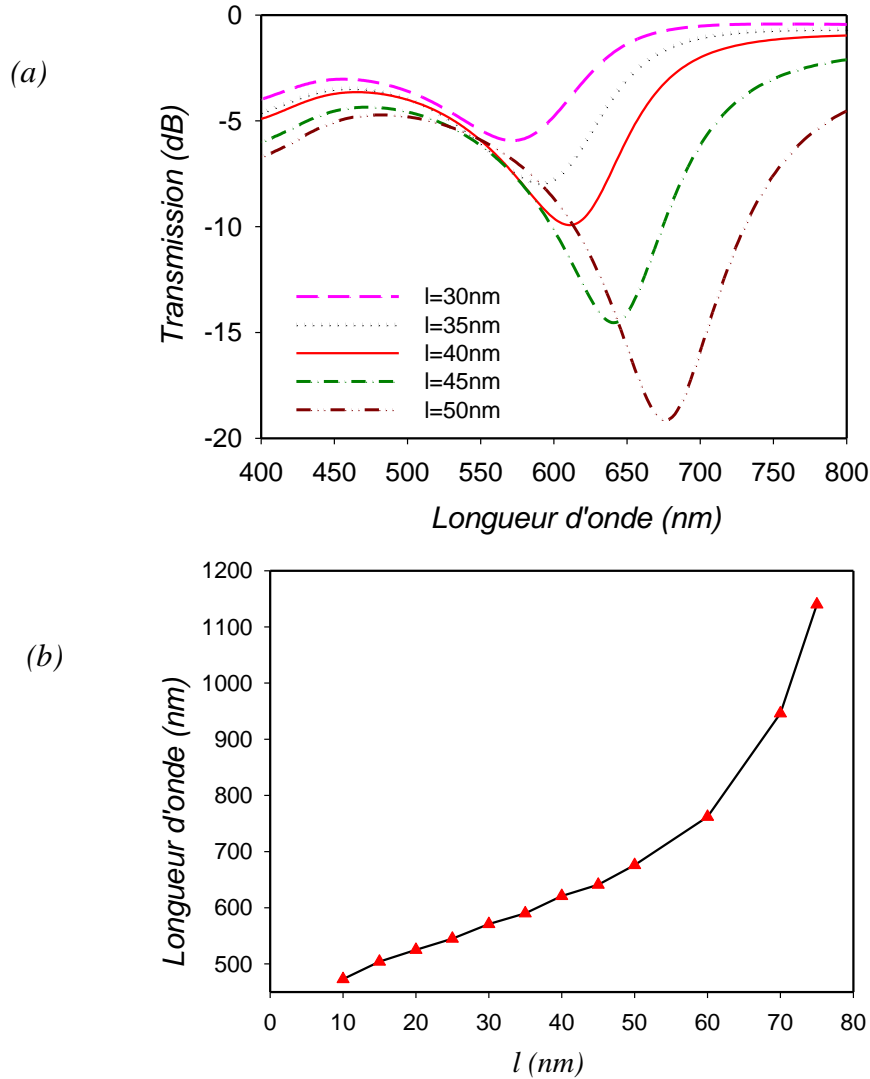


Figure 6 : (a) Spectre de transmission correspondant à la structure de la fig. 1a, pour les valeurs de  $l=30, 35, 40, 45$  et  $50\text{nm}$  (longueur des plots), les autres paramètres étant gardés constants soient  $a=80\text{nm}$ ,  $h=15\text{nm}$  et  $d=140\text{nm}$  (épaisseur de  $\text{SiO}_x$  déposée sur les plots). (b) Evolution de la longueur d'onde de résonance correspondant au zéro de transmission observé dans (a), en fonction de la longueur des plots métalliques ' $l$ ' sur une plus large gamme de valeurs.

## IV-5) Effet de couches diélectriques déposées sur les plots métalliques sur la réponse plasmonique.

### IV-5.1) Effet de $\text{SiO}_x$

De nombreux capteurs biologiques reposant sur le principe de la résonance de plasmon de surface, ont été proposés, essentiellement dans la configuration de Kretschmann [21, 22].

Celle-ci consiste en un film métallique déposé sur un prisme (figure 7), au dessus duquel sont greffées des molécules biologiques ; celles-ci en interagissant avec le film, causent une petite variation de l'indice de réfraction du diélectrique en contact avec le film. Cette variation, s'opère au niveau de l'interface film-diélectrique environnant, et est détectée de la manière suivante : un faisceau laser en incidence limite ( $\theta = \theta_i$ ), est totalement réfléchi, sauf lorsque la projection du vecteur d'onde de l'onde incidente sur la surface du film, s'accorde au vecteur d'onde du plasmon de surface ( $k_p //$  surface du film). L'une des manières pour réaliser cet accord, s'obtient en ajustant la longueur d'onde incidente, de sorte que la condition de résonance se réalise. Ceci se traduit sur le spectre de réflexion en fonction de  $\theta$ , par un minimum de réflexion, à un certain angle  $\theta_r$ . La position de ce minimum de réflexion, identifiée par  $\theta_r$ , dépend de l'indice de réfraction du diélectrique en contact avec le film métallique. Ainsi, une infime variation de celui-ci à cause des molécules greffées sur le film, cause un léger décalage de la position du zéro. La quantité correspondant à la variation  $\Delta\theta$ , permet alors de mesurer la variation d'indice ; et enfin de remonter aux types de molécules biologiques en contact avec le film, connaissant quantitativement leur effet sur l'indice optique d'un diélectrique donné.

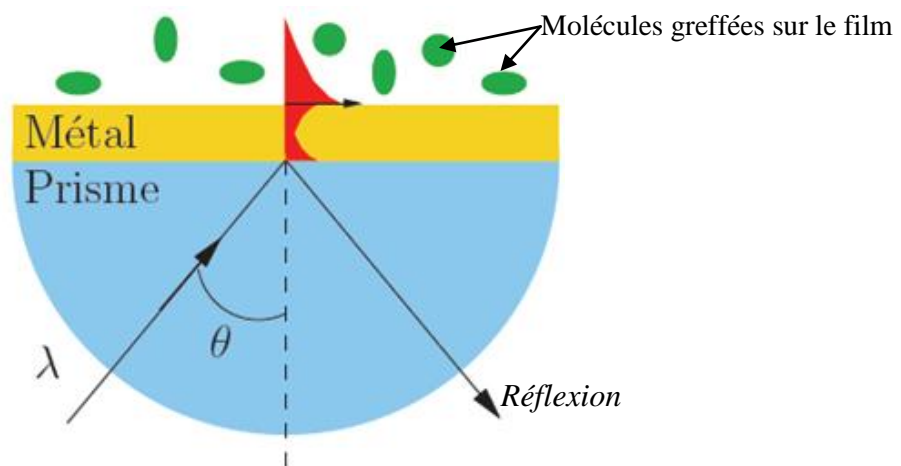


Figure. 7 : Schéma de principe d'un détecteur SPR, la réflexion totale d'un faisceau laser monochromatique incident, est mesurée en fonction de l'angle d'incidence. L'excitation du mode plasmon de surface, se traduit par un minimum d'intensité dans le spectre de réflexion ; la position de ce minimum dépend du métal choisi et de l'indice du milieu en contact avec celui-ci [Réf. 23].

Ce type de capteurs dits SPR, jugé efficace, permet néanmoins d'identifier des molécules biologiques greffées sur les films métalliques de ceux-ci, c'est-à-dire très proches (à très courtes distances  $\approx 0$ ). Les nouvelles structures émergentes dans la littérature, destinées à la bio-détection, citées dans l'introduction de ce chapitre, permettent comme on le verra par la suite la détection de molécules proches, mais également très éloignées. On a en effet atteint récemment des distances de l'ordre de  $1\mu\text{m}$  [24], voir plus, ce qui apporte par rapport aux anciennes configurations de nouveaux potentiels d'applications technologiques en bio-détection.

Dans le cadre de notre étude, l'effet de couches de  $\text{SiO}_x$ , déposées sur les nanoparticules d'or a été étudié en augmentant progressivement l'épaisseur des couches de  $\text{SiO}_x$  de  $d=0$  à  $d=400\text{nm}$ . La figure 8a montre le spectre de transmission des plots en fonction des valeurs de  $d=20, 80, 120, 160$  et  $280\text{nm}$ , en gardant tous les autres paramètres constants ( $a=80\text{nm}$ ,  $h=15\text{nm}$ , et  $l=30\text{nm}$ ). On note une absorption des plots de  $-5\text{dB}$  (44%) à  $-6\text{dB}$  (50%) d'énergie incidente à la résonance plasmonique, quasiment pour toutes les valeurs de  $d$ , et également une oscillation de la longueur d'onde de la réponse plasmonique (longueur d'onde des zéros de transmission).

Pour mieux cerner cette oscillation observée, on a reporté la longueur d'onde de la réponse plasmonique en fonction de  $d$ , et puis l'on a procédé à la comparaison avec les résultats de l'expérience sur la figure 8b. La courbe en trait continu noir avec des carrés rouges, représente les résultats théoriques, et celle en trait continu noir avec des cercles pleins noirs correspond aux résultats expérimentaux. On observe un certain décalage quantitatif entre les deux courbes entre  $d=50\text{nm}$  et  $d=200\text{nm}$ , ainsi qu'entre  $d=275$  et  $300\text{nm}$ ; ce qui peut être relié aux mêmes raisons évoquées plus haut (différence entre structure théorique et expérimentale). Néanmoins, beaucoup de similitudes sont relevées, à savoir la confirmation du phénomène saisissant d'oscillation de la fréquence de la réponse plasmonique avec  $d$ , ainsi qu'un très bon accord pour les autres régions de  $d$ . Celle-ci montre effectivement un très important décalage vers le rouge (déplacement vers les basses longueurs d'ondes) quasi linéaire à courte épaisseur, entre  $d=0$  et  $50\text{nm}$ , ensuite un décalage vers le bleu (déplacement vers les basses longueurs d'ondes) est observé dans le domaine  $60\text{nm}<d<140\text{nm}$ . Celui-ci est suivi à nouveau d'un décalage vers le rouge jusqu'à  $\approx 300\text{nm}$ , et l'oscillation continue jusqu'à  $d=1\mu\text{m}$  (figure 8c). L'amplitude des oscillations continue à croître au fur et à mesure que  $d$  augmente entre  $d=0$  et  $400\text{nm}$ . On relève une amplitude maximale de  $16\text{nm}$  entre  $d=300$  et  $360\text{nm}$ ; puis celle-ci ne cesse de croître quasi-linéairement jusqu'à  $d=1000\text{nm}$ . On atteint une variation de

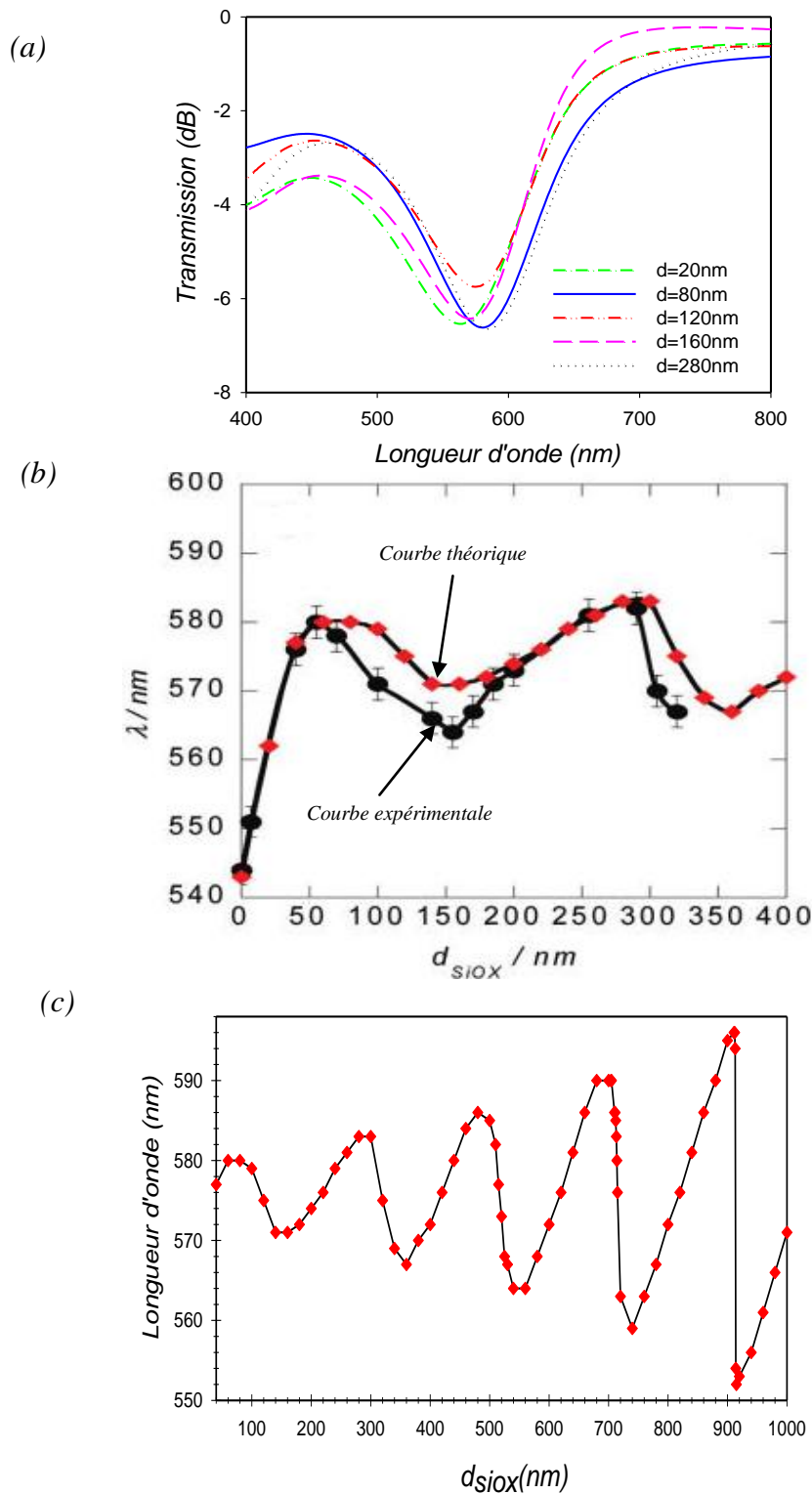


Figure 8 : (a) Spectre de transmission correspondant à la structure de la fig. 1a, pour les valeurs de  $d=20, 80, 120, 160$  et  $280$  nm (épaisseur de  $\text{SiO}_x$ ), les autres paramètres étant gardés constants tel que :  $a=80$  nm,  $h=15$  nm et  $l=30$  nm. (b) Courbe d'évolution de la longueur d'onde de résonance correspondant au zéro de transmission observé dans (a), en fonction de  $d$ , calculée théoriquement avec le modèle de Lorentz-Drude (carrés rouges), et comparée à celle mesurée expérimentalement (cercles pleins noirs) avec un spectrophotomètre UV-visible. (c) Courbe théorique d'évolution de la longueur d'onde de résonance plasmonique en fonction de  $d$ , pour des valeurs allant jusqu'à  $1 \mu\text{m}$ .

l'amplitude spectaculaire de  $44nm$  avec une infime variation de  $d$ , soit entre  $d=900nm$  et  $915nm$ . Par ailleurs, on note une périodicité de l'oscillation de  $d_p \approx 200nm$ , et que celle-ci peut être évaluée par l'équation suivante :  $d_p(SiO_x) \approx \frac{\lambda_{moy}}{2n} = 199nm$ , où  $n=1,45$  est l'indice optique de  $SiO_x$ , et  $\lambda_{moy} \approx 576nm$  la longueur d'onde moyenne de l'oscillation. Ceci montre un comportement similaire aux modes de résonance et antirésonance d'une cavité Péro-Fabry. Notons également, que la réponse plasmonique se déplace beaucoup plus rapidement dans les régions de décalage vers le bleu, que dans les régions de décalage vers le rouge. En effet, on passe par exemple de  $563nm$  à  $596nm$  quand  $d$  varie entre  $760nm$  et  $900nm$ , alors que dans la région de décalage vers le bleu qui s'ensuit, on passe de  $596nm$ , pour  $d=900nm$  à  $552nm$ , pour  $d=915nm$ . Ceci signifie que l'oscillation de la résonance plasmonique est anharmonique (c'est-à-dire qu'elle n'a pas une forme régulière). L'explication de ce phénomène d'oscillation de la réponse plasmonique, en fonction de  $d$ , pourrait être reliée à un fort couplage entre le mode plasmon des plots et les modes d'un Péro-Fabry. Celui-ci est formé, par la cavité constituée de  $SiO_x$ , et délimitée de part et d'autre du substrat de  $SiO_2$  supportant les plots métalliques, et du milieu de détection, qui est l'air ici. Ce phénomène est exploité pour la conception d'une nouvelle génération de nano-capteurs biologiques, qui peut scruter des produits biologiques à courtes et à très longues distances par rapport aux particules métalliques. Le principe est le suivant : pour une épaisseur de  $SiO_x$  donnée, on dépose des molécules biologiques ayant une certaine extension dans l'espace, sur l'interface  $SiO_x$ -Air (milieu de détection). Ceci modifie alors légèrement l'épaisseur de la couche de  $SiO_x$  d'une petite quantité  $d_b$ , telle que la nouvelle épaisseur est donnée par  $d=d_0$  (originale) +  $d_b$ , ce qui induit alors un déplacement de la réponse plasmonique. Le déplacement  $\Delta\lambda_0$ , observé, même léger, permet de remonter d'une part aux dimensions des molécules biologiques déposées, et d'autre part à la nature de celles-ci [6].

#### IV-5.2) Effet de $Si_3N_4$

On a également regardé l'influence de l'épaisseur de couches du matériau diélectrique  $Si_3N_4$ , sur la réponse plasmonique des particules d'or. L'objectif étant d'étudier l'impact de l'indice optique du diélectrique déposé sur les particules sur l'oscillation plasmonique, puisque l'indice de  $Si_3N_4$  est égal à 2,01. Il faut noter qu'outre l'indice du diélectrique qui recouvre les particules métalliques, l'indice du milieu incident (substrat) ainsi que l'indice du milieu final où la transmission est calculée influent fortement sur la résonance plasmon sans toutefois

changer la période des oscillations. Dans les mesures sur les produits biologiques, le milieu final peut souvent être l'eau. Nous avons commencé à étudier l'effet relatif de ces différents indices sur les spectres de transmission, ce qui constitue une perspective de ce travail. Dans ce chapitre nous présentons principalement l'effet de changement d'indice du diélectrique recouvrant les nanoparticules.

Sur la figure 9a, on donne le spectre de transmission des plots, en fonction de l'épaisseur des couches diélectriques de  $Si_3N_4$ , déposées sur les particules, et ce pour les valeurs de  $d=20, 80, 100, 140$  et  $240nm$ , avec  $a=80nm$ ,  $h=15nm$ , et  $l=30nm$ . On note alors un résultat similaire à l'effet de  $SiO_x$ , c'est-à-dire un comportement oscillatoire du déplacement de la réponse plasmonique avec  $d$ . Un constat intéressant ici, est que l'on remarque une absorption bien plus nette, qui varie de 60% (-8dB) à 75% (-12dB) à la résonance plasmonique. L'intérêt de cette remarque, tient au fait qu'une plus grande absorption des plots ici, tend à confirmer la piste d'explication donnée plus haut. En effet, le contraste d'indice dans le cas présent entre  $Si_3N_4$  et l'air est plus grand que dans le cas de  $SiO_x$ . Ce qui signifie, une meilleure réflexion à l'interface  $Si_3N_4$ -air, et donc une meilleure excitation des modes de la cavité Pérot-Fabry (substrat/ $Si_3N_4$ /air), soit en définitif un plus fort couplage plots-cavité. Tous ceci conduits à un renforcement du coefficient d'absorption des plots à la résonance de plasmon de surface. Sur la figure 9b on montre l'évolution de la longueur d'onde de résonance plasmonique en fonction de  $d$ , calculée théoriquement (traits continus noirs avec carrés rouges). On observe un très grand décalage vers le rouge quasi-linéaire, entre  $d=0nm$  et  $60nm$ , où l'oscillation sature, suivi d'un décalage vers le bleu entre  $d=60nm$  et  $120nm$ , puis à nouveau un décalage vers le rouge, entre  $d=120nm$  et  $220nm$ . L'oscillation plasmonique se poursuit ainsi jusqu'à  $d=400nm$ , avec l'augmentation quasi-linéaire de l'amplitude d'oscillation. La période de l'oscillation observée, comme dans le cas de  $SiO_x$ , coïncide avec l'expression mathématique donnant les modes d'un Pérot-Fabry, on a en effet :  $d_p(Si_3N_4) \approx \frac{\lambda_{moy}}{2n} = 152nm$ , où  $n=2.01$  est l'indice optique de  $Si_3N_4$ , et  $\lambda_{moy} \approx 612nm$  la longueur d'onde moyenne d'oscillation. Afin de confronter les résultats théoriques et expérimentaux, on regroupe dans la fig. 9c les deux courbes correspondantes. Celles-ci présentent la même allure, avec un certain décalage, dans les régions  $120nm < d < 190nm$ , et  $250nm < d < 300nm$ , et un bon accord dans les autres régions. En comparaison avec le cas de  $SiO_x$  où la résonance plasmon oscillait dans le domaine de 560 à 580 nm, on note que celle-ci se produit dans le domaine entre  $620nm$  et  $660nm$  pour  $Si_3N_4$ . De surcroît, l'amplitude d'oscillation dans le cas présent est bien plus

grande, on atteint une variation d'amplitude spectaculaire de  $80\text{nm}$  entre  $d \approx 380\text{nm}$  et  $400\text{nm}$ , qui est à comparer avec seulement  $16\text{nm}$  entre  $d=300\text{nm}$  et  $360\text{nm}$  dans le cas de  $\text{SiO}_x$ .

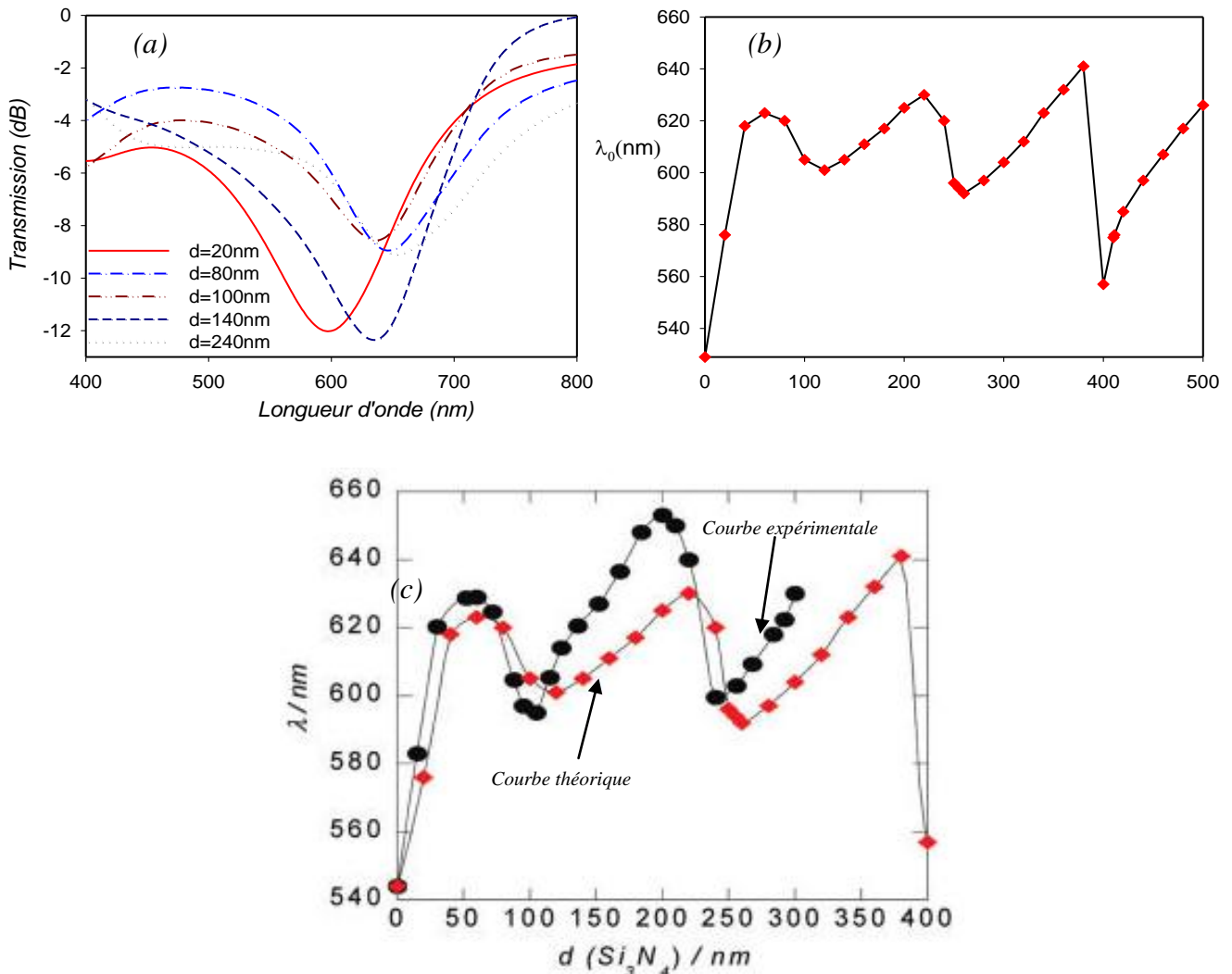


Figure 9 : (a) Spectre de transmission correspondant à la structure de la fig. 1a pour les valeurs de  $d=20, 80, 100, 140$  et  $240\text{nm}$  (épaisseur de  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), les autres paramètres étant gardés constants par ailleurs, tels que :  $a=70\text{nm}$ ,  $h=15\text{nm}$  et  $l=25\text{nm}$ . (b) Courbe d'évolution de la longueur d'onde de résonance correspondant au zéro de transmission observé dans (a), en fonction de  $d$  ( $d=0$  à  $500\text{nm}$ ), calculée théoriquement avec le modèle de Lorentz-Drude. (c) Comparaison de la courbe théorique et expérimentale d'évolution de la longueur d'onde de résonance plasmonique en fonction de  $d=0$  à  $400\text{nm}$ .

Ceci, tend à confirmer d'une part, l'interaction du mode plasmon des plots avec les modes de la cavité de  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . C'est-à-dire, qu'à cause du plus grand indice de ce matériau, on a un plus fort couplage entre le mode des plots et les modes de cavité, d'où une amplitude d'oscillation plus importante. Ajoutons que dans les deux cas (dépôt de  $\text{SiO}_x$  ou  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), on note une même tendance, à savoir qu'à part les faibles épaisseurs (fort décalage vers le rouge de la résonance),

l'amplitude d'oscillation plasmonique ne cesse de croître quasi-linéairement, avec  $d$ . Par ailleurs, on a expliqué au paragraphe IV-5.1 que la sensibilité de nano-capteurs biologiques basés sur ce phénomène est liée au déplacement de la longueur d'onde de résonance de la réponse plasmonique des particules avec  $d$ , c'est-à-dire que dans les régions de  $d$  où la variation d'amplitude d'oscillation est importante, la sensibilité est optimale. Ceci indique une plus grande efficacité de bio-détection avec ces structures, pour les courtes ( $d \leq 50nm$ ), et longues épaisseurs ( $d \geq 300nm$ ) où la variation d'amplitude est très importante. Pour  $50nm \leq d \leq 300nm$ , on a une efficacité intermédiaire.

Enfin, le dépôt d'un diélectrique sur les plots ayant un plus grand contraste d'indice avec les interfaces, le délimitant, conduit à un nano-capteur biologique bien plus performant, grâce à une meilleure sensibilité de la réponse plasmonique avec  $d$ .

#### IV-6) Effet des paramètres géométriques sur l'oscillation plasmonique observée dans le cas de $SiO_x$ .

L'investigation des différents paramètres susceptibles de gouverner l'oscillation de la réponse plasmonique en fonction de l'épaisseur du diélectrique déposé, est d'une importance majeure pour la conception de futurs nano-capteurs biologiques. En effet, l'optimisation de tous les paramètres (géométriques et physiques) de sorte à ce qu'on obtienne la plus grande sensibilité de la réponse plasmonique, conduira à la réalisation de nouveaux capteurs biologiques plus efficaces. Par exemple, l'utilisation de milieu de détection tel que l'air, permet d'avoir un contraste d'indice maximal, avec n'importe quel diélectrique déposé. Néanmoins, l'air n'est pas efficace pour greffer des molécules à détecter (sur l'interface diélectrique-milieu de détection). L'utilisation de l'eau ou d'autres solvants pour un meilleur greffage des produits biologiques, entraîne une perte en terme de contraste d'indice. Ainsi, l'optimisation d'autres paramètres, pourra éventuellement contrebalancer la perte de sensibilité de la réponse plasmonique, engendrée par la perte de contraste d'indice.

Dans cet esprit, on a regardé théoriquement l'influence des paramètres géométriques ( $l$ ,  $a$  et  $h$ ), sur l'oscillation plasmonique observée dans le cas où le matériau diélectrique  $SiO_x$  est déposé sur les particules métalliques. En fixant  $l$  et  $a$  à  $30nm$  et  $80nm$ , on a fait varier la hauteur des particules  $h$ , progressivement de  $10$ ,  $15$  à  $20nm$ , et puis calculé pour chacune de ces valeurs, la réponse plasmonique des plots en fonction de  $d$  ( $0$  à  $400nm$ ). La figure 10a

montre les résultats correspondants à la variation de la longueur d'onde de résonance en fonction de  $d$ , pour chaque valeur de  $h$ . On note un déplacement important du domaine d'oscillation plasmonique vers les basses longueurs d'ondes. En effet, la longueur d'onde moyenne d'oscillation passe de  $618nm$  ( $h=10nm$ ), à  $576nm$  ( $h=15nm$ ), puis jusqu'à  $554nm$  ( $h=20nm$ ). Ce résultat n'est pas étonnant, si l'on relie avec ce qui a été discuté plus haut, c'est-à-dire la réponse plasmonique des particules en fonction de  $h$ . Par ailleurs, on remarque que l'amplitude maximale de l'oscillation, qui se produit entre  $d \approx 300nm$  et  $380nm$ , augmente de presque un facteur 2, soit de  $\Delta\lambda_{max}=9nm$  pour  $h=10nm$ , à  $\Delta\lambda_{max}=16nm$  pour  $h=15nm$ , puis jusqu'à  $\Delta\lambda_{max}=21nm$  pour  $h=20nm$ . Ajoutons, que la période d'oscillation  $d_p(SiO_x) \approx \frac{\lambda_{moy}}{2n} = 200nm$ , reste inchangée, et donc totalement indépendante de  $h$ . Ce qui conforte encore une fois l'idée du couplage du mode plasmon des particules avec ceux de la cavité de  $SiO_x$ . Enfin, notons que cette étude montre une forte augmentation de l'amplitude d'oscillation plasmonique en fonction de la hauteur des particules métalliques.

Dans un second temps, on a étudié l'influence de la longueur des particules métalliques sur l'oscillation plasmonique, les autres paramètres étant gardés constants par ailleurs ( $a=80nm$ ,  $h=15nm$ ). Le même procédé que précédemment a été suivi, à savoir, pour chaque valeur de  $l=25nm$ ,  $30nm$  et  $35nm$ , on calcule la réponse plasmonique des plots pour chaque valeur de  $d$  ( $d=0$  à  $400nm$ ). La figure 10b donne les résultats correspondants, soit la variation de la longueur d'onde du mode plasmon en fonction de  $d$  pour chaque valeur de  $l$ . On observe, cette fois ci, un décalage vers les grandes longueurs d'ondes de la longueur d'onde moyenne d'oscillation. Celle-ci, passe de  $550nm$  pour  $l=25nm$ , à  $576nm$  pour  $l=30nm$ , puis jusqu'à  $594nm$  pour  $l=35nm$ , soit un déplacement total de  $44nm$  pour une variation de  $10nm$  seulement de  $l$ . D'un autre côté, l'amplitude maximale d'oscillation (entre  $d=300nm$  et  $380nm$ ), évolue de  $\Delta\lambda_{max}=22nm$  ( $l=25nm$ ), à  $\Delta\lambda_{max}=16nm$  ( $l=30nm$ ), puis jusqu'à  $\Delta\lambda_{max}=14nm$  pour  $l=35nm$ . Ceci signifie que l'amplitude d'oscillation est fortement sensible à  $l$ , entre  $l=25nm$  et  $l=30nm$ , puisque l'amplitude est divisée par un facteur de 1.4 dans ce domaine et elle sature à partir de  $l \geq 30nm$ . Enfin, la période d'oscillation reste inchangée avec l'évolution de  $l$ . Ainsi la longueur  $l$  des particules est un paramètre pertinent pour le choix de la gamme d'oscillation de la réponse plasmonique des particules (déjà évoqué plus haut), ainsi qu'à l'optimisation de la sensibilité de celle-ci (amplitude maximale d'oscillation). Enfin, on a étudié l'effet de la période de réseau des particules métalliques sur l'oscillation plasmonique. En gardant les paramètres  $l=30nm$  et  $h=15nm$  constants, on a pris  $a=60nm$ ,  $80nm$  et  $100nm$ , et calculé la réponse plasmonique en fonction de  $d$  ( $0$  à  $300nm$ ).

La figure 10c donne la variation de longueur d'onde de résonance en fonction de  $d$  pour chacune des valeurs de  $a$ . On remarque un léger déplacement de celle-ci vers les basses longueurs d'onde. En effet, la longueur d'onde moyenne de résonance, passe de  $594nm$  pour  $a=60nm$  à  $576nm$  pour  $a=80nm$ , puis jusqu'à  $\approx 560nm$  pour  $a=100nm$ , soit un déplacement total de  $34nm$  pour une variation de  $40nm$  de  $a$ . Ceci est à relier avec ce qui a été discuté plus haut, à savoir qu'en régime de faible couplage (particules suffisamment éloignées,  $a \geq 60nm$ ), l'effet du paramètre de maille  $a$  reste faible. Par ailleurs, l'amplitude d'oscillation varie de  $\Delta\lambda_{max}=15nm$  pour  $a=60nm$ , à  $\Delta\lambda_{max}=16nm$  pour  $a=80nm$ , puis elle atteint  $\Delta\lambda_{max}=22nm$  pour  $a=100nm$ , soit en définitif une augmentation totale de  $7nm$ . En résumé de cette étude théorique, mis à part la possibilité d'accorder la gamme d'oscillation plasmonique avec la variation de  $l$ ,  $a$ , et  $h$ , le résultat le plus remarquable, est certainement la possibilité d'optimiser la sensibilité de la réponse plasmonique des particules, et donc de futurs nano-sondes biologiques, en augmentant  $h$ ,  $a$ , et en réduisant  $l$ . Ceci d'ailleurs, confirme ce qui a été cité en début de ce paragraphe, à savoir la possibilité de compenser (via ces optimisations) des pertes de sensibilités éventuelles, dues à des contraintes expérimentales, comme l'utilisation de milieu de détection autre que l'air.

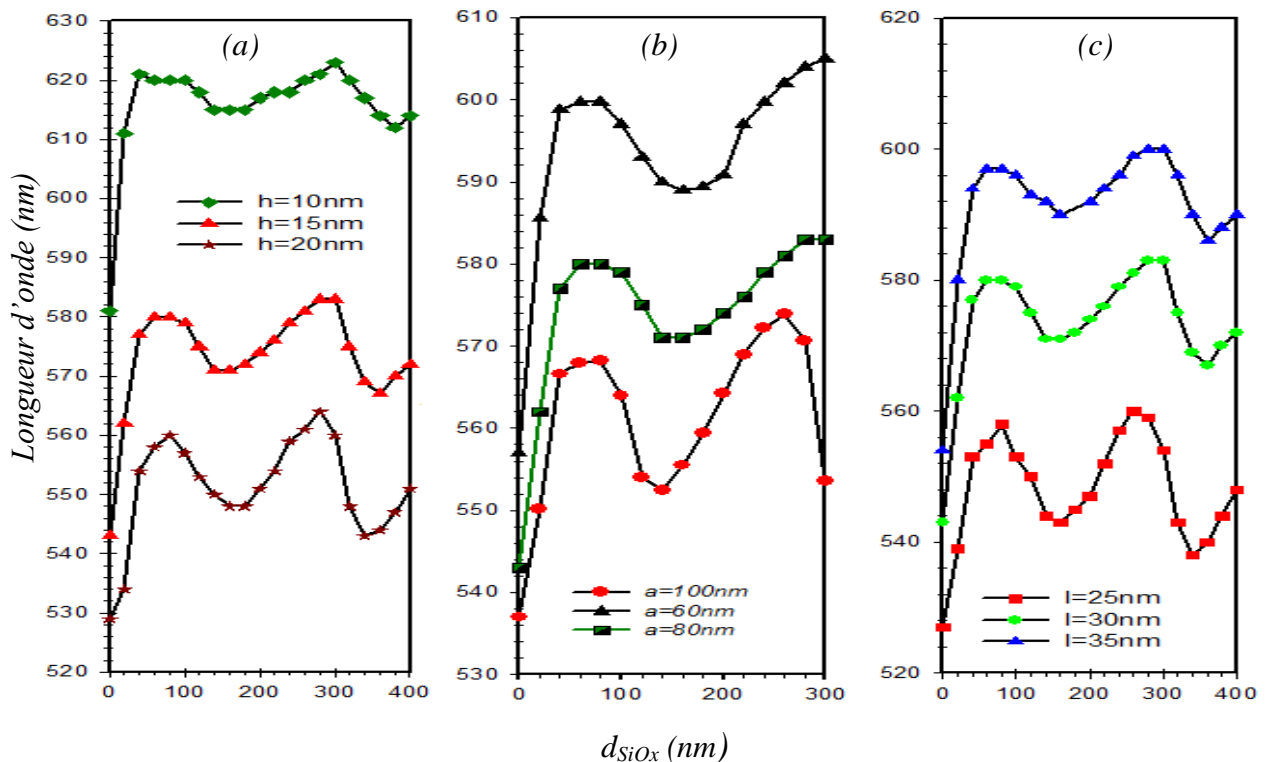


Figure 10 : (a) Evolution de la longueur d'onde de la réponse plasmonique des particules métalliques en fonction de l'épaisseur des couches de  $SiO_x$ , pour trois valeurs de la hauteur des particules métalliques  $h$ , soit  $h=10$ ,  $15$  et  $20nm$ . Les autres paramètres étant fixes ( $a=80nm$  et  $l=30nm$ ). (b) Même chose qu'en (a), mais pour les valeurs de la longueur des particules  $l=25$ ,  $30$  et  $35nm$ . (c) Même chose qu'en (a), mais pour les valeurs de la période de réseau des particules  $a=60$ ,  $80$  et  $100nm$ .

## IV-7) Conclusion :

Dans ce chapitre, on a étudié théoriquement les propriétés optiques de nanoparticules métalliques (d'or), déposées sur un substrat de verre de  $SiO_2$ , et au-dessus desquelles des couches de diélectriques telles que les matériaux  $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ , ont été déposées. L'interaction d'un pulse lumineux incident avec les particules, montre une forte absorption de celles-ci, autour d'une certaine fréquence, située dans le visible. Cette fréquence correspond à l'excitation du plasmon-polariton de surface des particules, dont la signature est une forte sensibilité à l'environnement diélectrique (traduite par un déplacement de la fréquence de résonance). L'absorption à la résonance des particules, calculée théoriquement avec le modèle de Lorentz-Drude, montre un bon accord avec celle issue des mesures expérimentales. La réponse plasmonique des particules montre une très grande sensibilité aux paramètres géométriques. Ce qui laisse envisager, en fonction d'un choix approprié de ces paramètres, de sélectionner la gamme de la réponse plasmonique des particules. On a également montré que la longueur d'onde de résonance de la réponse plasmonique manifeste une variation oscillatoire en fonction de l'épaisseur de couches diélectriques déposées sur les particules. Ce phénomène est interprété en termes de couplage du mode plasmon de surface des particules avec ceux de la cavité optique, qui est constituée de  $SiO_x$ , et délimitée de part et d'autre du milieu de détection (l'air) et du substrat  $SiO_2$ . Le même résultat a été montré avec  $Si_3N_4$ , dans une gamme accordée vers les basses fréquences, avec toutefois une accentuation du phénomène, attribuée à un contraste d'indice plus important avec  $SiO_2$  et le milieu de détection. Cette sensibilité du plasmon de surface des particules avec l'épaisseur de couches de diélectriques est exploitée pour contribuer à concevoir une nouvelle génération de nano-capteurs biologiques. Ceux-ci sont étudiés depuis quelques années dans les travaux de recherche, et tendent à remplacer les anciens capteurs plasmoniques. En effet, contrairement à ceux-ci, les structures étudiées dans cette thèse permettent la détection de molécules biologiques situées à proximité des particules métalliques, mais également, et surtout à très longues distances, c'est-à-dire des molécules situées à plusieurs centaines de nanomètres des particules. Dans ce travail, on a montré pour la première fois que l'amplitude d'oscillation de la réponse plasmonique, ne cesse de croître avec l'épaisseur de couches diélectriques, jusqu'à  $1\mu m$ , voire éventuellement au-delà. Nos résultats théoriques confrontés aux expériences effectuées par l'équipe Bio-Interface de l'IRI, montrent globalement un accord satisfaisant, en tenant compte des différences entre la structure expérimentale (réseau de particules aléatoires à 3D), et théorique (réseau ordonné de plots à 2D).

## Bibliographie:

- [1] A. N. Shipway, E. Katz, I. Willner. *J. Phys. Chem. C.* 1, 18 (2000).
- [2] E. Hutter, J. H. Fendler. *Adv. Mater.* 16, 1685 (2004).
- [3] C. R. Yonzon, D. A. Stuart, X. Zhang, A. D. MacFarland, C. L. Haynes, R. P. Van Duyne. *Talanta.* 67, 438 (2005).
- [4] P. K. Jain, X. Huang, I. H. El-Sayed, M. A. El-Sayed. *Plasmonics.* 2, 107–118 (2007).
- [5] S. Szunerits, V. G. Praig, M. Manesse, R. Boukherroub, *Nanotechnology.* 19, 195712–195719 (2008).
- [6] S. Szunerits, M. R. Das, R. Boukherroub. *J. Phys. Chem. C.* 12, 8239–8243 (2008).
- [7] I. Doron-Mor, Z. Barkay, N. Filip-Granit, A. Vaskevich, I. Rubinstein. *Chem. Mater.* 16, 3476 (2004).
- [8] M. D. Malinsky, K. L. Kelly, G. C. Schatz, R. P. Van Duyne. *J. Am. Chem. Soc.* 123, 1471–1482 (2001).
- [9] J. Zhao, L. Jensen, J. Sung, S. Zou, G. C. Schatz, R. P. Van Duyne. *J. Am. Chem. Soc.* 129, 7647–7656 (2007).
- [10] A. J. Haes, S. Zou, G. C. Schatz, R. P. J. Van Duyne. *Phys. Chem. B.* 108, 6961–6968. (2004).
- [11] H. Xu, M. Käll, *Sens. Actuators. B.* 87, 244, (2002).
- [12] A. J. Haes, W. P. Hall, L. Chang, W. L. Klein, R. P. Van Duyne. *Nano Lett.* 4, 1029 (2004).
- [13] W. A. Murray, J. R. Suckling, W. L. Barnes. *Nano Lett.* 6, 1772 (2006).
- [14] T. Rindzevicius, Y. Alaverdyan, M. Käll, W. A. Murray, W. L. Barnes, *J. Phys. Chem. C.* 111, 11806, (2007).
- [15] T. R. Jensen, G. C. Schatz, R. P. Van Duyne. *J. Phys. Chem. B.* 103, 2394 (1999).
- [16] G. Mie. *Ann. Phys.* 25, 377–445 (1908).

- [17] W. Gotschy, K. Vonmetz, A. Leitner, F. R. Aussenegg. *Opt. Lett.* 21, 1099 (1996).
- [18] G. L. Hornyak, C. J. Patrissi, C. R. Martin. *J. Phys. Chem. B.* 101, 1548 (1997).
- [19] A. D. Rakic, A. B. Djuristic, J. M. Elazar, M. L. Majewski. *Appl. Opt.* 37, 5271 (1998).
- [20] P. B. Johnson, R. W. Christy. *Phys. Rev. B.* 6, 4370-4379 (1972).
- [21] J. Homola, I. Koudelab, S. S. Yeea. *Sen. Act. B. Chem.* 54, 16–24 (1999).
- [22] R. L. Rich. D. G. Myszka. *Curr. Opin. Biotech.* 11, 54–61 (2000).
- [23] C. Billaudeau, guidage optique dans des cristaux plasmoniques 1D et 2D, Thèse de doctorat, Université de Paris 11, 16 novembre (2007).
- [24] E. Galopin, A. Noual, J. Niedziółka-Jönsson, M. Jönsson-Niedziółka, A. Akjouj, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, R. Boukherroub, S. Szunerits. *J. Phys. Chem. C.* 113, 15921-15927 (2009).

# Conclusion générale



## Conclusion générale :

Dans cette thèse, nous avons modélisé et simulé numériquement la propagation d'ondes électromagnétiques à travers des nanostructures plasmoniques, et des structures photoniques submicroniques. La méthode de discrétisation numérique des équations de propagation utilisée étant la méthode FDTD (Finite difference time domain). Dans celle-ci, on a intégré les modèles de Drude et de Lorentz-Drude après une transformation de l'espace de Fourier vers le domaine temporelle, afin de pouvoir simuler des matériaux métalliques. La structure photonique étudiée était un guide de semi-conducteur diélectrique d'InP, baignant dans l'air (à contraste d'indice), dont la largeur est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde du pulse incident. On a démontré que le couplage de ce guide avec un couple de cavités rectangulaires (stubs) identiques, et disposées symétriquement de part et d'autre du guide (en contact direct avec le guide), conduit au phénomène de filtrage réjectif. Une étude quantitative de celui-ci en fonction des différents paramètres géométriques du problème, montre la possibilité de sélectionner les fréquences réfléchies, avec un choix approprié des dimensions des cavités. Il est également possible d'améliorer significativement le facteur de qualité des résonances, en ajustant les dimensions du stub, ou en séparant le guide des cavités par du vide. Ensuite, en couplant le guide à une série de cavités (identiques au système précédent), disposée linéairement le long du guide, on crée au niveau du spectre de transmission, un gap de photons interdit ; et ainsi l'insertion d'un couple de cavités défauts, produit un pic de résonance sélectif dans le spectre de transmission, soit du filtrage sélectif. Ce phénomène est également accordable avec les dimensions du stub défaut. Par ailleurs, on a mis en évidence un autre type de gap avec le même système, dit gap de périodicité, dont la position en fréquence dépend de la distance inter-stubs. On a montré que l'ajustement de la longueur des stubs pour une distance inter-stubs donnée, conduit au recouvrement des deux gaps (gap de périodicité et celui associé à un zéro de transmission du stub). Ce qui permet d'obtenir une bande de transmission très étroite séparant les deux gaps, c'est-à-dire un pic de transmission. En outre, la position en fréquence du pic de transmission peut être modifiée en ajustant judicieusement la distance inter-stubs et la longueur des stubs. Ceci, montre la possibilité de réaliser un filtre sélectif accordable sans avoir à insérer un stub défaut dans la structure. Ces

phénomènes ont été mis à profit pour proposer un nouveau démultiplexeur de fréquences, en réjection et en sélection. Dans cette étude, les gammes de fréquences exploitées, étaient le proche infrarouge (télécommunications) et l'infrarouge lointain.

Ensuite, en exploitant les propriétés remarquables de confinement des plasmons de surface (SPP), on a investigué les propriétés de guidage à travers un nano-guide d'air, pris en sandwich entre deux plaques métalliques d'argent (simulées avec le modèle de Drude), dont la largeur est 10 fois plus petite que la longueur d'onde incidente. L'interaction du mode SPP antisymétrique de ce guide avec ceux d'un nano-résonateur rectangulaire, disposé symétriquement de part et d'autre du guide, et séparé avec le guide par un gap métallique (permettant d'ajuster l'intensité de couplage entre le guide et la cavité), révèle une réflexion résonante (à -30dB). La configuration des champs électromagnétiques, ainsi que la répartition de leurs intensités dans la cavité, indique que ceux-ci sont essentiellement confinés sur les interfaces de celle-ci avec le métal d'argent. Par ailleurs, l'étude de l'évolution de ce mode avec les dimensions de la cavité, montre d'une part l'accordabilité de la longueur d'onde de résonance, c'est-à-dire la possibilité de réaliser un nano-filtre réjectif ajustable. Et d'autre part, un comportement qui ne peut être attribué à un simple mode Pérot-Fabry d'une cavité optique classique, et ainsi de conclure que le mode excité, est un mode SPP de la cavité. L'exploration des différentes dimensions possibles pour la cavité, en gardant celles-ci dans un domaine sub-longueur d'onde, indique une diversité de modes possibles. La manière dont ces modes sont confinés dans la cavité, et leurs comportements en fonction des dimensions de celle-ci (très différents des modes optiques ordinaires), renforce l'idée qu'il s'agit de modes plasmons-polaritons de surface. L'insertion de la cavité, à l'intérieur du guide, permet de produire un pic de résonance (à la même fréquence) dans le spectre de transmission, accordable avec les dimensions de la cavité. Ce qui peut être exploité pour réaliser un nano-filtre sélectif ajustable. Le facteur de qualité des résonances dans les deux configurations est amélioré avec le gap métallique, séparant le guide de la cavité, ainsi qu'avec les dimensions de celle-ci. Ces phénomènes ont été produits dans la gamme de fréquences du visible autour de 500nm.

L'ensemble de ces propriétés a été également étudié à travers un guide de  $SiO_2$ , du même type que le précédent (MIM), c'est-à-dire inséré entre deux plaques métalliques d'argent, dont la largeur est cette fois-ci, 31 fois plus petite que la longueur d'onde incidente autour de 1554nm.

En plus du confinement de la lumière incidente offert par le mode SPP antisymétrique du guide, le matériau diélectrique  $SiO_2$ , permet encore plus de confinement, par rapport à l'air. Le couplage de ce guide, avec une seule nano-cavité rectangulaire, située sur le côté du guide, indique une réflexion résonante d'une seule fréquence (autour de 1554nm), dans le spectre de transmission. Contrairement au système étudié dans le visible, l'utilisation d'une seule cavité (et non d'un couple de cavités symétriques) dans ce système, permet d'atteindre un degré de puissance réfléchie suffisant, à la résonance, de -30dB. La configuration des champs à la résonance, ainsi que l'évolution de celle-ci en fonction des dimensions de la cavité, montre un comportement similaire, en comparaison avec celui obtenu dans le visible. Ce qui montre d'un côté la possibilité d'ajuster la longueur d'onde du mode excité, et que celui-ci est un mode SPP de la cavité. Le filtrage sélectif est produit de façon similaire qu'avec le système précédent, c'est-à-dire en insérant la cavité à l'intérieur du guide, avec toutefois une certaine différence. Dans le guide de  $SiO_2$ , la largeur du guide est indépendante de celle de la cavité et peut être différente de celle-ci, puisque pour une largeur de la cavité de 100nm on obtient un pic de transmission de -4,8dB de hauteur quelle que soit la valeur de la largeur du guide. A l'inverse, dans le filtre sélectif étudié dans le visible, nos simulations montrent qu'avec une cavité de largeur  $w=100nm$  et de longueur  $l=240nm$ , insérée dans un guide de largeur  $d'=50nm \neq w$ , on obtient un pic de transmission de seulement  $\approx -15dB$  de hauteur. C'est-à-dire, une perte de 5dB par rapport au cas où  $w=100nm=d'$ , où l'on obtient un pic de transmission de -10dB de hauteur (la hauteur du pic de transmission diminue d'avantage pour  $d' \leq 50nm$  et  $w=100nm$ ). Ceci, signifie que l'on peut réduire pour une largeur donnée de la cavité (100nm en générale), celle du guide de  $SiO_2$  sans limite, en particulier pour des applications qui n'exigent pas de longues distances de propagation (les pertes à la propagation augmentent avec la réduction de la largeur du guide). En optimisant l'ensemble des paramètres géométriques, le facteur de qualité des résonances atteint pour ce système une valeur de  $\approx 153$ , ce qui comparé aux systèmes proposés dans la littérature, constitue une amélioration intéressante. Enfin, ces propriétés, ont été exploités pour le design d'un nouveau nano-démultiplexeur plasmonique en réflexion et en réjection, bien plus compact, comparé à la littérature, et opérant dans la gamme de fréquences télécoms.

Enfin, on a étudié les propriétés optiques de nanoparticules métalliques d'or déposées sur un substrat de verre de  $SiO_2$ , et recouvertes de couches de diélectriques de deux types de matériaux diélectriques ( $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ ). On a montré que ce système exhibe une résonance dans le visible,

où les particules absorbent fortement l'énergie incidente autour de 50%. Cette résonance est attribuée à la réponse plasmonique des particules, dont la signature présente une forte sensibilité à l'environnement diélectrique entourant les particules. L'étude systématique de l'excitation plasmonique des particules en fonction des dimensions de celles-ci, indique une sensibilité spectaculaire pour de faibles variations des dimensions des particules. Ce qui laisse envisager de potentielles applications, en termes de choix de la gamme de réponse, avec un ajustement judicieux des paramètres géométriques. Le comportement du mode SPP avec la distance inter-particules, montre clairement que celui-ci résulte d'une part des interactions dipolaires inter-particules, mais également de la réponse individuelle de celles-ci. L'effet des couches de diélectriques déposées sur les particules, se traduit par une fascinante oscillation de la réponse plasmonique de celles-ci en fonction de l'épaisseur des couches. Ce phénomène, est attribué à un couplage de l'excitation plasmonique des particules avec les modes Pérot-Fabry de la cavité du diélectrique, entourée d'un côté de  $SiO_2$  et de l'autre du milieu de détection qui est l'air. D'ailleurs, la période d'oscillation coïncide quasi-parfaitement avec la formule des modes d'un Pérot-Fabry, c'est-à-dire  $d_p \approx \frac{\lambda_{moy}}{2n}$  ( $\lambda_{moy}$ , étant longueur d'onde moyenne d'oscillation et  $n$  l'indice du diélectrique déposé).

Entre  $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ , on a observé un déplacement de la gamme d'excitation plasmonique, et une amplification de l'amplitude d'oscillation de celle-ci ; ce qui a renforcé l'idée d'un couplage particules-cavité de  $SiO_x/Si_3N_4$ , et puis confirmé la sensibilité de la résonance au diélectrique environnant. La sensibilité de la résonance plasmonique des particules est exploitée pour la conception d'une nouvelle génération de nano-capteurs biologiques, basée sur la détection de variation de l'épaisseur de diélectriques déposés. En ce sens, on a procédé à une étude systématique de l'oscillation plasmonique en fonction des différents paramètres des particules, dans le but d'optimiser la sensibilité de futurs nano-capteurs, et ce d'autant plus que le milieu de détection tel que l'air est inadéquat pour le greffage de molécules biologiques. En effet, l'utilisation de milieux adéquats présentant des propriétés de solubilité, tel que l'eau, conduit à un contraste d'indice plus faible entre le milieu diélectrique déposé sur les particules et ceux-ci. Ainsi, l'optimisation de l'amplitude d'oscillation via d'autres paramètres du problème, s'avère dans ce cas d'une importance capitale pour compenser cette perte de contraste d'indice. La confrontation de nos simulations numériques avec les mesures expérimentales, montre en général

un accord satisfaisant, hors mis quelques décalages concernant l'oscillation plasmonique dans deux régions de l'épaisseur des couches déposés (pour  $SiO_x$  et  $Si_3N_4$ ). Ces décalages, ne sont pas très gênants, compte tenu des différences structurelles entre les configurations théoriques et expérimentales ; puisque les premières sont constituées de particules à 2D, ordonnées suivant un réseau périodique à une dimension. Tandis que la configuration expérimentale, consiste en un réseau aléatoire de particules à 3D, ayant une forme et distribution aléatoires, mais qui s'approche en moyenne à des demi-sphères déposées sur  $SiO_2$ .

En termes de perspectives de ce travail, concernant les guides plasmoniques, il serait intéressant d'étudier l'effet de différents types de matériaux diélectriques, tels que le silicium ou le matériau semi-conducteur InP, insérés entre deux plaques métalliques d'argent (l'argent étant moins absorbant dans le visible et l'infrarouge proche). Contrairement à l'air ou  $SiO_2$ , le silicium ou le matériau InP, présente un meilleur confinement de la lumière en plus de celui offert par le mode SPP, grâce à leurs indices optiques plus grands. Ensuite, on pourrait étudier le couplage de ces guides (de  $Si$  ou d'InP) avec une cavité, constituée du même matériau ou d'autres tels que l'air ou  $SiO_2$ . Les guides plasmoniques proposés dans cette étude peuvent être étudiés à 3D, avec la même ou d'autres géométries, telle que la géométrie cylindrique par exemple. Par ailleurs, une idée intéressante qui émerge dans la littérature (voir les références citées dans l'introduction générale), est d'étudier l'effet de remplir la cavité couplée à un guide plasmonique (de type MIM) d'air, de  $SiO_2$  ou de  $Si$ , avec un matériau actif (présentant un gain optique) sur les propriétés de guidage et de filtrage.

Concernant les propriétés optiques des nanoparticules métalliques, la poursuite de ce travail pourrait porter sur la modélisation d'une configuration plus proche de la structure expérimentale, c'est-à-dire des particules d'or à 3D, déposées sur  $SiO_2$ , ayant une forme et distribution aléatoires (en moyenne des sphéroïdes formant un réseau désordonné à 2D). Il serait également intéressant d'étudier l'effet de différents types de matériaux diélectriques servant de substrats, de couches diélectriques déposées sur les particules ainsi que de milieux de détection. On pourrait envisager également d'investiguer l'influence de différentes géométries à 3D possibles pour les particules métalliques sur l'oscillation de leur réponse plasmonique observée (en fonction de l'épaisseur de couches diélectriques déposées sur les particules).



## **Abstract:**

This work concerns the modeling and simulation by the finite difference method (FDTD) of plasmonic and photonic structures at the submicron scale. In the first part of the thesis we studied the propagation of electromagnetic-waves through two different dielectric nanoscale waveguides (made out of air and  $\text{SiO}_2$ ), sandwiched between two metallic plates (Metal-insulator-Metal). The excitation of surface plasmon-polariton at the interfaces of such waveguides enables light waveguiding at the subwavelength domain. We did study the waveguiding properties in the visible and near infrared ranges of frequency. Coupling of the main waveguide with a nano-resonator was investigated to achieve optical operations as filtering (in rejection and selection) and demultiplexing. These same optical functionalities have been studied in a submicron photonic structure constituted by waveguides of *InP* surrounded by air, coupled to several cavities. Such nano and microstructures are essential for the design of new all-optical integrated circuits. The second part of the thesis concerns modeling of electromagnetic-waves interaction with metallic (gold) nanoparticles deposited on a glass substrate ( $\text{SiO}_2$ ) and covered with a dielectric layer. These structures are promising for the conception of plasmonic nanosensors, which would be used to characterize small amount of biological molecules deposited on the dielectric layer surface. We have shown that the frequency of the plasmonic resonance of metallic particles exhibits an oscillatory variation with the thickness of the layer, with an amplitude reaching tens of nanometers. One investigated this phenomenon according to geometrical parameters of the gold particles and the refractive index of the dielectric layer covering the particles. The aim of such study is to understand how the physical and geometrical parameters influence the frequency range of the plasmonic resonance of the particles and the sensitivity of the nanosensor. This theoretical work was confronted with experimental results realized by Bio-interfaces team of IRI (Interdisciplinary institute of research, University of Lille 1).

**Key words:** Modeling and simulation by the FDTD method, surface plasmon-polariton, nano-plasmonic and photonic structures, plasmons resonances of metallic nanoparticles.



## Résumé :

Ce travail porte sur la modélisation et simulation avec la méthode des différences finies (FDTD) de structures plasmonique et photoniques à l'échelle submicronique. Dans une première partie, nous avons modélisé la propagation des ondes électromagnétiques à travers des nano-guides diélectriques (air ou  $SiO_2$ ), pris en sandwich entre deux plaques métalliques (de type Metal-Isolant-Metal). L'excitation des plasmons-polaritons aux interfaces permet le guidage d'ondes lumineuses à une échelle sub-longueur d'onde. Nous avons étudié les propriétés de guidage dans le domaine du visible et de l'infrarouge proche, notamment le couplage du guide avec des nano-résonateurs en vue d'explorer des fonctionnalités telles que le filtrage sélectif ou par réjection ainsi que des dispositifs de démultiplexage. Ces mêmes propriétés ont été étudiées dans une structure photonique submicronique constituée de guides d'ondes d' $InP$  entouré d'air, couplé à un ensemble de cavités. Ces nano et microstructures constituent les briques de base pour la conception de nouveaux circuits intégrés tout-optique. Dans une seconde partie de la thèse, on s'est intéressé à la modélisation de l'interaction des ondes électromagnétiques avec des nanoparticules d'or déposées sur un substrat de  $SiO_2$ , et recouvertes d'une couche d'un matériau diélectrique. Ce type de structures est prometteur pour réaliser des nano-capteurs bioplasmoniques en vue de caractériser des produits biologiques déposés en faible quantité sur la surface du diélectrique. Nous avons montré que la fréquence de la réponse plasmonique des particules présente une variation oscillatoire périodique en fonction l'épaisseur du diélectrique, avec une amplitude des oscillations qui peut atteindre quelques dizaines de nanomètres. Nous avons étudié ce phénomène en fonction des paramètres géométriques des nanoparticules d'or et de l'indice du diélectrique qui les recouvrent. L'objectif est de comprendre comment ces paramètres influencent la gamme de fréquence plasmonique ainsi que la sensibilité du détecteur. Ce travail théorique a été confronté aux résultats expérimentaux réalisés par l'équipe Bio-Interfaces de L'IRI (Institut de recherche interdisciplinaire, Lille 1).

Mots-clés : Modélisation et simulation FDTD, plasmons-polariton de surface, structures photoniques et nano-plasmoniques, résonances plasmons de nanoparticules métalliques.

