

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Physique

Spécialité : Nanophysique

Présenté par :

Soumaya-Wafaa AMARI

Thème

Étude des résonances Fano dans les nanostructures plasmoniques à base de cylindres imbriqués.

Devant le jury d'examen composé de :

BELKHIR	Abderrahmane	Professeur	U. M. M. T. O.	Président
DJOUER	Madjid	Maître de Conférences A	U. M. M. T. O.	Examineur
MEZEGHRANE	Abdelaziz	Maître de Conférences A	U. M. M. T. O.	Rapporteur

Soutenu publiquement le : 12/07/2018

Remerciements

Ce stage de master a été effectué au laboratoire de physique et chimie quantique LPCQ de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou. À cet effet, je tiens à remercier tout le personnel y travaillant (Enseignants, doctorants et ingénieurs) et à leur tête son directeur le professeur Hamid Bouzar pour leur accueil chaleureux et pour n'avoir ménagé aucun effort pour rendre le séjour de tous les stagiaires au sein du laboratoire le plus agréable possible.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadreur Abdelaziz Mezeghrane pour le bon suivi de mon travail, en m'orientant et en m'encourageant durant ces quelques mois de stage. J'exprime aussi toute ma gratitude au professeur Abderrahmane Belkhir pour sa disponibilité et son aide inestimable apportée à ce travail.

J'exprime mes sincères remerciements aux membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'examiner ce travail. Mes remerciements vont également à toutes les personnes qui m'ont conseillée lors de la préparation de ce rapport de stage : les enseignants, les étudiants de doctorat particulièrement ceux de l'équipe n°3 Photonique.

Enfin, je tiens à remercier ma famille et ma belle famille. Une pensée particulière pour mon père, il a toujours été fier de moi et je suis sûre qu'il l'est encore plus là où il est. Ma mère pour ses encouragements et sa présence tout au long de mes études ainsi que mes frères, mes belles sœurs, ma nièce Maria, mes cousines et mes amies de promotion Melissa, Tina, Lynda, Selma, Samira...

Résumé

Nous avons, dans le cadre de ce travail, étudié la résonance Fano dans une nanostructure plasmonique, anneau à double disque DDR (dual-disk ring), présentant une brisure de symétrie faite à base d'un matériau faiblement dissipatif qu'est l'argent. Une étude 3D de ce phénomène a été réalisée par la méthode FDTD. Le pic de résonance Fano est observé dans la gamme du visible sur les spectres d'extinction de la nanostructure, que ce soit dans le cas où elle est isolée ou rangée en réseau. L'excitation de cette résonance est interprétée en terme de couplage entre le mode octupolaire de l'anneau et le mode dipolaire du double disque.

Dans un second temps, une nanostructure métallique constituée d'un disque mince à l'intérieur d'un anneau a été considérée. Des résonances Fano ont été observées uniquement dans le cas où le disque et l'anneau sont désaxés. Une modification des paramètres géométriques a été menée à fin de voir l'effet sur la résonance Fano.

La rupture de symétrie dans cette structure permet un couplage entre des modes multipolaires plasmoniques différents (sub-radiants et super-radiants) aboutissant à une résonance Fano. Nous trouvons que les résonances Fano d'ordre supérieur sont générées lorsque la taille du disque est réduite et tombe dans la plage de visible.

Abstract

We have studied the Fano resonance in a symmetric broken symmetry nanostructure which consists of a double disk DDR ring, using a weakly dissipative material which is silver. A preliminary 2D study of this phenomenon was carried out by the FDTD method, the Fano resonance peak is observed in the visible range of the extinction spectra of nanostructures whether in the case where the nanostructure is isolated or arranged in a network, the excitation of this resonance is interpreted in terms of coupling between the octupolar mode of the ring and the double-disc dipole mode.

In a second step, a nanostructure consisting of a thin disk inside a ring was chosen in order to study the Fano resonances generated in this ring (disk), a modification of the geometric parameters was conducted to see the effect on Fano resonance.

The symmetry break in this structure allows a coupling between plasmon modes of different multipolar order, resulting in tunable Fano resonance, it supports subradiant and superradiant modes. We find that higher order Fano resonances are generated when the disk size is reduced and falls in the visible range.

Table des matières

Table des matières	iii
Table des figures	v
Introduction générale	1
1 Généralités	3
1.1 Introduction	3
1.2 Réponse optique des métaux	3
1.2.1 Modèle de Drude à deux points critiques	4
1.3 Résonance Fano	5
1.3.1 Formule générale associée à la résonance Fano	5
1.4 Résonance plasmonique de surface	6
1.4.1 Plasmons de surface délocalisés	6
1.4.2 Plasmons de surface localisés	8
1.5 Conclusion	9
2 FDTD : outil de simulation numérique	10
2.1 introduction	10
2.2 Principes de base de la méthode FDTD	10
2.3 Stabilité numériques	13
2.4 Dispersion numérique	14
2.5 Les conditions aux limites	14
2.5.1 Conditions aux limites périodiques de Floquet-Bloch	14
2.5.2 Conditions parfaitement absorbantes aux frontières : PML de Bérenger	15
2.6 Conclusion	16
3 Résultats et Discussions	17
3.1 Introduction	17
3.2 Présentation de la structure	17
3.3 Localisation de la résonance Fano de la structure DDR isolée	18
3.3.1 Discussions des résultats	20
3.3.2 Influence du milieu diélectrique sur la résonance Fano	22
3.4 Arrangement périodique de la structure DDR	23

<i>Table des matières</i>	iv
3.5 Étude de la résonance Fano dans la structure NCSDR	25
3.6 Conclusion	27
Conclusion générale	29
Bibliographie	30

Table des figures

1.1	Comparaison entre les valeurs expérimentales de la fonction diélectrique de l'or [8] avec les modèles à 4L et à D2CP [9] : (a) Partie réelle (b) Partie imaginaire.	4
1.2	Profils Fano normalisés pour différentes valeurs du paramètre asymétrique q . . .	5
1.3	(a) Vision schématique de la propagation des oscillations du plasma d'électrons libres à la surface du métal. (b) Composante normale du champ électrique du plasmon de surface selon la direction z perpendiculaire à la surface [15].	6
1.4	Courbe de dispersion du plasmon de surface et le cône de lumière dans le vide [15].	7
1.5	a) Configuration par prisme, b) Excitation de plasmons de surface délocalisés par réseau et c) Courbe de dispersion des plasmons	8
1.6	Schéma représentatif de l'oscillation de charges dans une nanoparticule métallique en réponse à un champ électromagnétique extérieur.	9
2.1	Schéma de Yee (discrétisation spatiale à 3 dimensions)	12
2.2	Discrétisation temporelle selon le schéma de saute-mouton.	12
2.3	PML de Bérenger	15
3.1	Présentation schématique de la structure étudiée : a) vue en 3D et b) coupe transversale	18
3.2	Spectre d'extinction.	19
3.3	Distribution du champ électrique autour de la résonance Fano.	20
3.4	Distribution de charge électrique sur la structure :anneau à double disque pour $\lambda = 694nm$	20
3.5	a) Vue 3D de la structure anneau seul. b) Spectre d'extinction associé.	21
3.6	a)Distribution de champ électrique sur la structure :anneau b) Distribution de charge électrique sur l'anneau	21
3.7	Structure constituée de deux disques a) et spectre d'extinction associé b). . . .	22

3.8	a) Distribution du champ électrique sur la structure à deux disques en argent b) Distribution de charge électrique sur les deux disques.	22
3.9	a) Longueur d'onde de la résonance Fano en fonction de l'indice du milieu. b) Spectre d'extinction dans trois milieux différents.	23
3.10	Spectre d'extinction optique pour différents pas de réseau	24
3.11	a) Carte d'évolution de la longueur d'onde de résonance en fonction du pas de réseau considéré. b) Anomalies de Rayleigh en fonction de la période Λ	25
3.12	Schéma de la structure NCSDR en argent : anneau et disque non concentriques.	26
3.13	Spectre d'extinction en fonction du rayon R du disque.	26
3.14	a) Distribution de champ électrique sur la structure NCSDR en argent. b) Distribution de charge électrique associée.	27

Introduction générale

Les nanostructures plasmoniques ont suscité un intérêt considérable au cours de ces dernières années en raison de leur capacité à manipuler la lumière à l'échelle nanométrique ainsi que leurs applications dans les domaines de la chimie et de la détection biologique. Une autre application significative consiste en leur intégration sur des plateformes, appelées Lab on Chip, pour la bio-détection en exploitant leur sensibilité à la variation de l'indice de réfraction du milieu environnant. Cette sensibilité est d'autant plus importante lorsque ces structures supportent des résonances de type Fano qui se distinguent par un profil asymétrique et un facteur de qualité important.

La majorité des structures précédemment suggérées ont des pics de résonance Fano prononcés dans la gamme spectrale proche IR, alors que pour de nombreuses applications pratiques, il est préférable voire nécessaire d'obtenir une réponse spectrale sensible située dans le domaine du visible [1].

Cette résonance a été découverte en 1961 par le physicien Ugo Fano en étudiant le phénomène d'auto-ionisation des atomes d'hélium [2]. La caractéristique des résonances de type Fano est d'avoir un profil asymétrique : passage brusque d'un minimum de transmission vers un maximum de transmission. De plus leur largeur spectrale est beaucoup plus faible que les résonances dipolaires plasmoniques, d'où un facteur de qualité plus important et donc une meilleure sensibilité aux variations subies par le milieu hôte.

Plus récemment les résonances de Fano ont été identifiées dans les cristaux photoniques, les nanoparticules plasmoniques et les métamatériaux électromagnétiques. Ce phénomène a stimulé de nombreuses recherches aussi bien expérimentales que théoriques et qui a conduit au développement de nombreuses applications importantes dans des domaines allant de la physique à la médecine.

Les propriétés optiques des nanostructures métalliques constituées à partir de géométries simples ont été étudiées sous plusieurs aspects ; elles supportent les résonances plasmoniques dont les énergies peuvent dépendre de façon sensible de leur forme géométrique [3].

Dans certains métamatériaux, la rupture de symétrie dans le système de nanoparticules, par exemple un anneau cylindrique entourant deux disques, peut introduire des interactions qui rendront certains modes normalement "sombres" excitables à des longueurs d'onde optiques, ce qui entraîne des améliorations des performances électromagnétiques beaucoup plus importantes que celles associées aux nanosphères.

Objectif Ce travail porte sur la modélisation des nanostructures plasmoniques de diverses géométries pouvant supporter des résonances Fano qui correspondent au couplage d'un mode radiatif (bright) et d'un mode non radiatif (dark) dans le but d'obtenir des fréquences de résonance situées dans la plage du visible. La sensibilité des réponses optiques des nanostructures proposées aux variations de l'indice de réfraction a également été étudiée et analysée.

Ce mémoire de master s'articule autour de trois chapitres :

Le premier est consacré au rappel de quelques notions utiles telles que les réponses optiques des métaux, la résonance Fano, les plasmons de surface ainsi que le mécanisme d'excitation des plasmons de surface non localisées.

Le second chapitre est consacré à la présentation de la méthode FDTD utilisée dans le cadre de cette étude. Les équations de Maxwell discrétisées aux différences finies centrées selon le schéma explicite de Yee sont données. Les problèmes de dispersion et de stabilité inhérents à la technique FDTD sont discutés. Les conditions de Floquet-Bloch pour modéliser la périodicité des réseaux et celles aux frontières absorbantes (PML de Bérenger) pour décrire l'espace libre sont rapportées.

Le dernier chapitre se subdivise en deux parties : la première est dédiée à la présentation et à l'interprétation des résultats de simulations effectuées pour l'étude de la résonance Fano dans une nanostructure faite en argent composée d'un anneau à double disque dans le cas isolé ou rangée en réseau périodique. Une autre structure proposée dans la littérature, constituée d'un anneau à un seul disque (anneau/disque), a également été modélisée dans la deuxième partie. Une étude paramétrique de la résonance Fano en fonction du rayon du disque intérieur a été menée.

Le manuscrit se termine par une conclusion générale.

Chapitre 1

Généralités

1.1 Introduction

La nanotechnologie moderne permet de réduire la dimension de divers dispositifs importants : capteurs, puces, fibres, etc. et ouvre ainsi de nouveaux horizons pour leurs applications. Récemment, une variété de travaux théoriques a révélé de tels modèles dans différents contextes physiques.

Après un bref rappel des propriétés optiques des métaux et les modèles décrivant leurs fonctions diélectriques, nous exposerons dans ce premier chapitre les notions fondamentales liées à la résonance Fano établie par le physicien Ugo Fano [4] ainsi que les plasmons de surface, et nous clôturerons par une conclusion.

1.2 Réponse optique des métaux

Du fait qu'ils soient très réfléchissants, les métaux sont très utilisés en nano-optique notamment pour des applications en plasmonique. Dans la gamme optique, le métal est assimilé à un milieu dispersif, homogène et isotrope. Ainsi il est caractérisé par une constante diélectrique complexe fonction de la pulsation du champ électromagnétique mais indépendante de son amplitude (hypothèse de la réponse linéaire), et qui s'écrit comme suit :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) \quad (1.1)$$

La partie réelle $\varepsilon'(\omega)$ caractérise l'aspect propagatif de l'onde dans le métal et la partie imaginaire $\varepsilon''(\omega)$ rend compte des pertes par absorption.

Les modèles de Drude et Drude-Lorentz sont bien adaptés aux calculs des propriétés optiques de certains métaux dans la gamme du visible/proche IR [5]. Par contre d'autres métaux (or et argent) possèdent des propriétés optiques difficiles à modéliser par ces modèles, en raison des transitions inter-bandes non négligeables dans cette gamme de fréquence. Pour pallier à cette insuffisance, la dispersion de ces métaux dans la gamme optique sera décrite par le modèle de Drude à deux points critiques (D2CP) [6, 7]. C'est ce modèle qui sera utilisé tout au long de ce présent travail.

1.2.1 Modèle de Drude à deux points critiques

Ce modèle proposé initialement par Etchegoin [7], permet de mieux rendre compte du comportement des métaux nobles dans la gamme optique IR/visible/proche UV. Son expression analytique est la somme de trois contributions principales :

$$\varepsilon_{D2PC} = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\Gamma_D} + \sum_{p=1}^{p=2} G_P(\omega) \quad (1.2)$$

avec :

$$G_P(\omega) = A_P \Omega_P \left(\frac{e^{i\phi_p}}{\Omega_p - \omega - i\Gamma_p} + \frac{e^{-i\phi_p}}{\Omega_p + \omega + i\Gamma_p} \right) \quad (1.3)$$

où A_p représente l'amplitude, Ω_p l'énergie du gap, ϕ_p la phase et Γ_p la largeur de la transition. Les deux premiers termes du membre droit de l'équation (1.2) représentent la contribution standard du modèle de Drude. Les transitions inter-bandes sont décrites dans la somme du troisième terme de cette même équation et dont le développement est donné par l'équation (1.3).

La figure 1.1 montre une comparaison des valeurs expérimentales de la fonction diélectrique de l'or [8] avec le modèle à quatre lorentziennes (4L) et celui de Drude à deux points critiques (D2CP). Cette comparaison démontre la précision du modèle de Drude à deux points critiques dans la description de la fonction diélectrique de l'or comparable au modèle (4L) avec un avantage de moins de paramètres à déterminer.

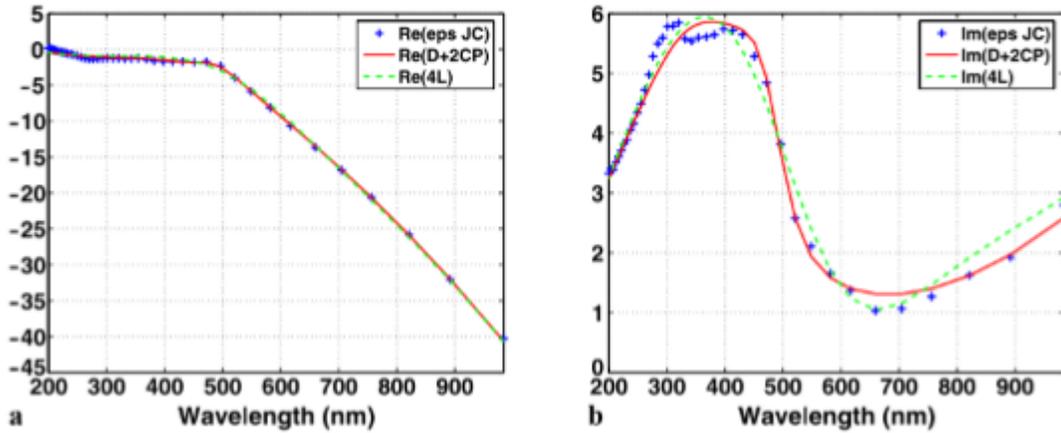


Figure 1.1 – Comparaison entre les valeurs expérimentales de la fonction diélectrique de l'or [8] avec les modèles à 4L et à D2CP [9] : (a) Partie réelle (b) Partie imaginaire.

1.3 Résonance Fano

Les résonances Fano ont été introduites pour la première fois par Ugo Fano qui a proposé une description théorique dans son célèbre article paru en 1961 [2]. C'est la présence inhabituelle de pics fins dans le spectre d'absorption d'un gaz noble (hélium), observés par Beutler en 1935 [10], qui a attiré son attention. Une des principales caractéristiques de la résonance Fano est d'exhiber un profil de raie asymétrique bien distinct. Cette asymétrie provient du couplage entre un état discret et un continuum. Ce type de résonance peut-être observé dans de nombreux domaines de la physique, comme en physique quantique [11], en plasmonique [12], mais aussi en photonique [13].

1.3.1 Formule générale associée à la résonance Fano

C'est U. Fano qui, pour la première fois, a suggéré une explication théorique à l'origine du profil asymétrique en se basant sur le principe de superposition [14]. La forme exacte du profil obtenu dépend en effet de l'interaction entre l'état discret et l'état continu. La forme du profil de résonance est décrite par l'expression analytique suivante [11] :

$$\sigma = \frac{(\varepsilon + q)^2}{\varepsilon^2 + 1} \quad (1.4)$$

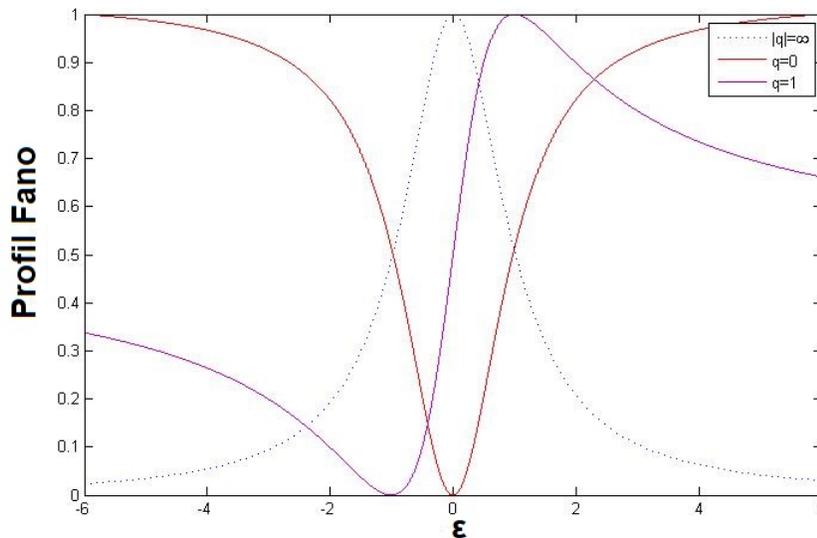


Figure 1.2 – Profils Fano normalisés pour différentes valeurs du paramètre asymétrique q .

Cette expression est communément désignée par la formule de Fano et où ε représente l'énergie réduite et q le paramètre asymétrique. Ce paramètre asymétrique représente le rapport des probabilités de transition d'un état mixte vers un continu (voir figure 1.2). Ainsi,

$$k_{sp} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_D(\omega) \varepsilon_m(\omega)}{\varepsilon_D(\omega) + \varepsilon_m(\omega)}} \quad (1.5)$$

où k_{sp} désigne le vecteur d'onde de propagation du plasmon dans la direction x sur la surface métallique. ε_m et ε_D sont respectivement les fonctions diélectriques du métal et du diélectrique.

La figure (1.4) est une représentation de la relation de dispersion donnée par l'équation 1.5. On note que la courbe de dispersion des plasmons de surface reste toujours strictement en dessous de la courbe dite ligne de lumière à laquelle correspond la relation de propagation dans le vide. Cette absence d'intersection entre la ligne de lumière et la courbe de dispersion des plasmons de surface interdit tout couplage ou résonance entre une onde électromagnétique plane propagative du domaine du visible en particulier, et un mode de propagation des plasmons de surface [15].

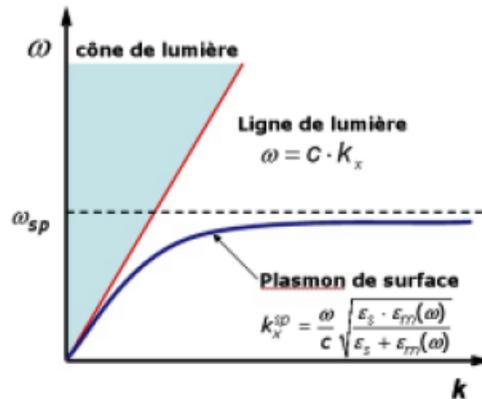


Figure 1.4 – Courbe de dispersion du plasmon de surface et le cône de lumière dans le vide [15].

Mécanisme d'excitation des plasmons de surface

Pour exciter et observer des plasmons de surface, il faut donc se servir de systèmes optiques à géométrie particulière. Les plus utilisés sont des montages par prisme à indice n plus élevé que celui du diélectrique. Ces configurations spécifiques ont pour but d'augmenter le vecteur d'onde des photons incidents sur la surface, comme celles d'Otto et de Kreschmann [16] dites de couplage par prisme. Ainsi le vecteur d'onde incident à l'interface est augmenté et la ligne de lumière passe au-dessous de la courbe de dispersion, ce qui favorise l'excitation des plasmons de surface au niveau de l'interface métal/diélectrique. Le couplage peut aussi être obtenu par l'introduction de rugosités périodiquement réparties au niveau de l'interface, c'est le couplage par réseau (voir figure 1.5). La projection du vecteur d'onde sur la surface peut alors parfaitement s'accorder à celle du plasmon de surface.

Lorsque l'onde excitatrice éclaire un réseau de pas a avec un angle d'incidence θ , les composantes du vecteur d'onde associées peuvent s'exprimer comme suit [6] :

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sin(\theta) \pm \Delta k_x \quad (1.6)$$

$\Delta k_x = \frac{2n\pi}{a}$ (n entier) est induit par la rugosité périodique du métal et permet ainsi l'accord de phase nécessaire au couplage entre le plasmon de surface et l'onde incidente. En effet, la norme du vecteur d'onde est augmentée de Δk_x et le couplage entre le plasmon de surface et la lumière se produit (voir figure 1.5.c).

cette méthode a été validée expérimentalement par Teng et Stern [17] qui ont également démontré que la résonance plasmon associée pouvait être élargie et décalée lorsque les plasmons de surface se découplaient ou excitaient d'autres plasmons par diffraction.

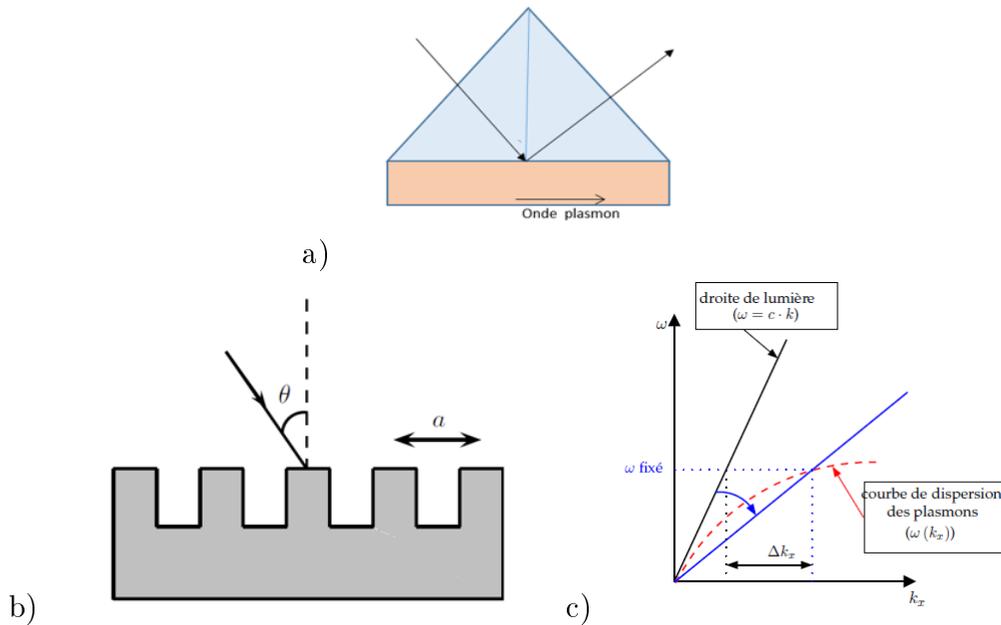


Figure 1.5 – a) Configuration par prisme, b) Excitation de plasmons de surface délocalisés par réseau et c) Courbe de dispersion des plasmons .

1.4.2 Plasmons de surface localisés

Le plasmon de surface localisé (LSP) est une oscillation collective et cohérente des électrons de conduction à la surface d'une particule métallique de taille nanométrique sous l'action d'un champ électrique extérieur (voir figure 1.6). À l'inverse des plasmons de surface délocalisés, les LSP peuvent être directement excités par la lumière incidente et sont confinés à l'échelle de la nanoparticule. Leurs propriétés très intéressantes confèrent aux LSP un grand intérêt de la part des nano-opticiens avec l'étude des effets de la taille, de la forme, de la

nature de la nanoparticule et de la matrice diélectrique hôte (ou du substrat en cas de dépôt) sur la position et la largeur de la résonance plasmon de surface localisé (LSPR).

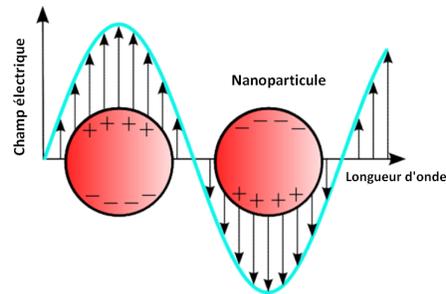


Figure 1.6 – Schéma représentatif de l'oscillation de charges dans une nanoparticule métallique en réponse à un champ électromagnétique extérieur.

1.5 Conclusion

Dans ce présent chapitre, nous avons exposé les différentes réponses optiques des métaux. Nous avons ensuite décrit l'aspect théorique de la résonance Fano et sa formule mathématique associée. Nous avons également donné un aperçu sur les résonances plasmoniques de surface et nous avons conclu ce chapitre par leur mécanismes d'excitation. Le chapitre suivant sera entièrement dédié à la présentation de la méthode de simulation FDTD (méthode des différences finies dans le domaine temporel).

Chapitre 2

FDTD : outil de simulation numérique

2.1 introduction

La modélisation électromagnétique des nanostructures pour la compréhension de leurs interactions avec un faisceau lumineux nécessite la résolution des équations de Maxwell. Cependant cette résolution reste très difficile sans avoir recours aux méthodes numériques, notamment les structures complexes qui contiennent plusieurs matériaux ayant des indices optiques complexes et des formes géométriques différentes. Pour cela des méthodes intuitives, souples et faciles à implémenter ont été utilisées. Parmi ces méthodes, la méthode des différences finies dans le domaine temporel [18, 19] occupe une place de choix. Elle consiste à approcher les dérivées ponctuelles spatiales et temporelles qui apparaissent dans les équations de Maxwell par des différences finies centrées. La limite principale de cette méthode réside dans la taille du maillage et le temps de calcul qui en résulte. L'accélération de l'évolution des moyens de calcul scientifique de plus en plus performants en ont fait l'une des méthodes de calcul les plus utilisées pour la simulation de la propagation de la lumière dans des nanostructures de plus en plus complexes.

Dans le cadre de ce mémoire, nous avons utilisé cette méthode qui représente une approche très populaire et dont plusieurs variantes ont été implémentée au sein de l'équipe. À cet effet, nous présenterons dans ce chapitre un bref aperçu des principes de base de cette méthode et de son implémentation numérique.

2.2 Principes de base de la méthode FDTD

Le principe de la méthode FDTD repose sur la résolution des équations de Maxwell :

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho_{libre} \quad (2.1)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\vec{\text{rot}} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\vec{\text{rot}} \vec{H} = \vec{j}_{\text{libre}} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.4)$$

\vec{E} et \vec{D} sont respectivement les vecteurs champs électrique et induction électrique. \vec{H} et \vec{B} désignent respectivement les vecteurs champs magnétique et d'induction magnétique. Ces champs sont reliés par les équations constitutives du milieu :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \quad (2.5)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.6)$$

où ε est la permittivité diélectrique, \vec{j} la densité de courant électrique et μ la perméabilité magnétique.

Pour simplifier la résolution de ces équations, on se limite à un milieu linéaire, isotrope, sans densité de courant ($\vec{j}_{\text{libre}} = 0$) et sans densité de charges libres excédentaires.

La méthode FDTD est basée sur la double discrétisation (spatiale et temporelle) aux différences finies centrées des équations de Maxwell qui s'écrivent dans un repère cartésien sous la forme suivante :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right] \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right] \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right] \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right] \quad (2.12)$$

Dans le schéma de Yee, le calcul des composantes électriques et magnétiques se fait en des points distincts bien particuliers dans une maille élémentaire, les composantes électriques se calculent aux milieux des arêtes (appelés nœuds électriques) et les composantes magnétiques se calculent aux milieux des faces (appelés nœuds magnétiques) du schéma de Yee (figure 2.1). De telle façon que chaque composante de \vec{H} est entourée par quatre composantes de \vec{E} et

de la même manière chaque composante de \vec{E} est entourée par quatre composantes de \vec{H} . Les coordonnées d'espace et du temps s'écrivent en fonction d'indices entiers i, j, k et n .

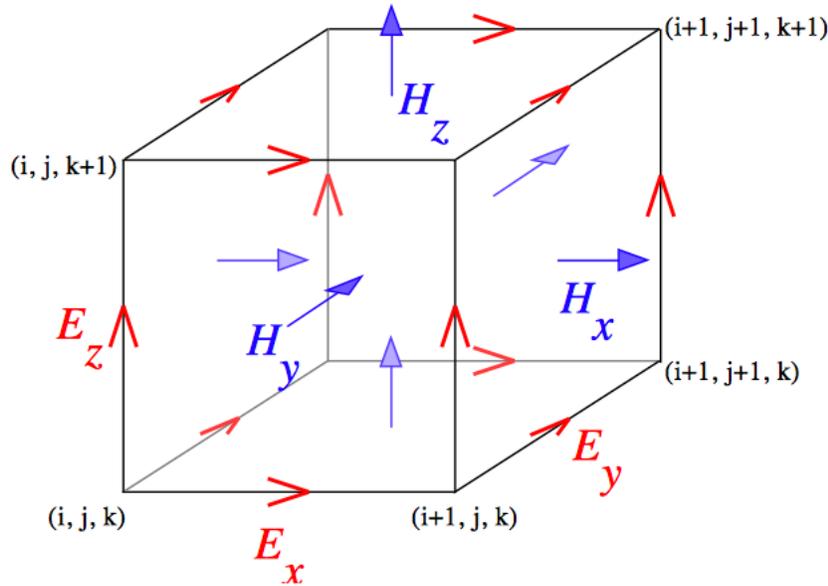


Figure 2.1 – Schéma de Yee (discrétisation spatiale à 3 dimensions)

Les composantes électriques sont calculées aux instants $n\Delta t$, et les composantes magnétiques sont décalées d'un demi pas de temps et donc calculées aux instants $(n + \frac{1}{2})\Delta t$. Une telle formulation permet d'évaluer les dérivées temporelles de manière centrée et d'obtenir un schéma explicite, appelé saute-mouton (voir figure 2.2). Cette disposition assure un processus itératif entièrement explicite qui permet de s'affranchir des inversions de matrice.

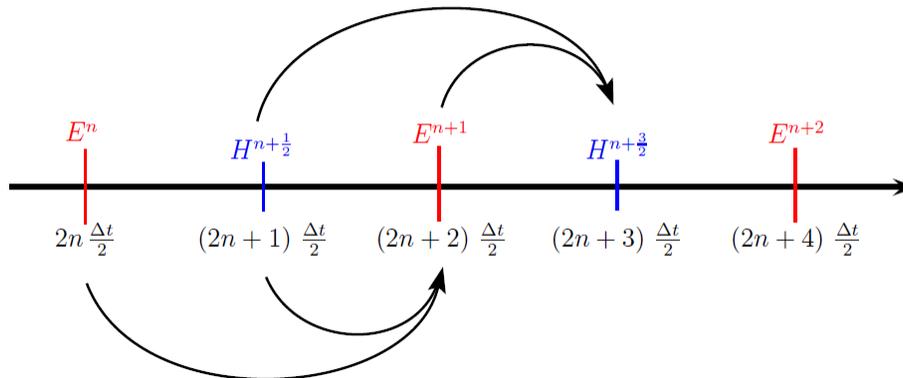


Figure 2.2 – Discrétisation temporelle selon le schéma de saute-mouton.

La méthode FDTD consiste à transformer les équations aux dérivées partielles en équations aux différences finies. La mise à jour des composantes des champs selon le schéma de Yee s'écrit alors comme suit :

$$E_{x(i+\frac{1}{2},j,k)}^{n+1} = E_{x(i+\frac{1}{2},j,k)}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta} \left\{ \left[H_{z(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)}^n - H_{z(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k)}^n \right] + \left[H_{y(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2})}^n - H_{y(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^n \right] \right\} \quad (2.13)$$

$$E_{y(i,j+\frac{1}{2},k)}^{n+1} = E_{y(i,j+\frac{1}{2},k)}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta} \left\{ \left[H_{x(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^n - H_{x(i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2})}^n \right] + \left[H_{z(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)}^n - H_{z(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)}^n \right] \right\} \quad (2.14)$$

$$E_{z(i,j+\frac{1}{2},k)}^{n+1} = E_{z(i,j+\frac{1}{2},k)}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta} \left\{ \left[H_{y(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^n - H_{y(i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^n \right] + \left[H_{x(i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^n - H_{x(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^n \right] \right\} \quad (2.15)$$

$$H_{x(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^{n+1/2} = H_{x(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta} \left\{ \left[E_{z(i,j+1,k+\frac{1}{2})}^n - E_{z(i,j,k-\frac{1}{2})}^n \right] + \left[E_{y(i,j+\frac{1}{2},k)}^n - E_{y(i,j+\frac{1}{2},k+1)}^n \right] \right\} \quad (2.16)$$

$$H_{y(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^{n+1/2} = H_{y(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta} \left\{ \left[E_{x(i+\frac{1}{2},j,k+1)}^n - E_{x(i+\frac{1}{2},j,k)}^n \right] + \left[E_{z(i,j,k+\frac{1}{2})}^n - E_{z(i+1,j,k+\frac{1}{2})}^n \right] \right\} \quad (2.17)$$

$$H_{z(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)}^{n+1/2} = H_{z(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta} \left\{ \left[E_{y(i+1,j+\frac{1}{2},k)}^n - E_{y(i,j+\frac{1}{2},k)}^n \right] + \left[E_{x(i+\frac{1}{2},j,k)}^n - E_{x(i+\frac{1}{2},j+1,k)}^n \right] \right\} \quad (2.18)$$

avec $\Delta = \Delta x = \Delta y = \Delta z$ le pas de discrétisation spatiale et Δt le pas de discrétisation temporelle, ces pas sont choisis de telle sorte à respecter les conditions de stabilité et de dispersion numériques. Cependant, dans un milieu dispersif c'est les composantes du champ d'induction $\vec{D} = \varepsilon \times \vec{E}$ qui sont calculées en premier pour rendre la dépendance vis-à-vis de la permittivité diélectrique implicite.

2.3 Stabilité numériques

Afin d'éviter que les champs divergent numériquement et atteignent des valeurs non physiques, le schéma de Yee est soumis à une condition qui fixe le pas de discrétisation temporelle Δt à partir des pas de discrétisation spatiale Δx , Δy et Δz . À 3 dimensions, ce critère de

stabilité est connu sous le nom de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) ; son expression est donné par :

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{max} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.19)$$

où v_{max} représente la vitesse maximale de propagation dans le milieu étudié, en général c'est la vitesse de la lumière dans le vide.

2.4 Dispersion numérique

Dans le grille FDTD, les signaux numériques se propagent au cours du temps avec une vitesse de phase inférieure à la vitesse réelle [6]. Ceci peut provoquer des erreurs de phase, une déformation des signaux, des pertes en amplitudes et un élargissement des impulsions. Cette dispersion est minimisée en respectant le critère suivant :

$$Max(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{min}}{n} \quad (2.20)$$

avec $n \geq 10$. Dans le cas d'un maillage uniforme ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$), ce critère se ramène à :

$$\Delta \leq \frac{\lambda_{min}}{n} \quad (2.21)$$

2.5 Les conditions aux limites

L'annulation du champ aux bords du domaine de calcul FDTD entraine des réflexions non physiques pouvant fortement perturber le signal. Pour contourner ces problèmes, nous avons utilisé les conditions aux limites périodiques de Floquet Bloch et les conditions d'absorption aux frontières de type PML (Perfectly Matched Layers) de Bérenger.

2.5.1 Conditions aux limites périodiques de Floquet-Bloch

Lors d'un calcul FDTD, le domaine de calcul est généralement borné par des parois absorbantes pour simuler l'espace infini. Il est aussi possible de modéliser un réseau infini et périodique en implantant sur les bords de la grille de calcul des conditions traduisant cette périodicité appelées conditions aux limites périodiques (CLP). Ces conditions sont directement issues du théorème de Floquet-Bloch. Pour une structure périodique de période p suivant chacune des trois directions de l'espace, ces conditions s'appliquent aux composantes du champ U selon la direction x par exemple comme :

$$U(x + p, y, z, t) = U(x, y, z, t) \exp(ik_x * p) \quad (2.22)$$

avec k_x la composante du vecteur d'onde suivant x .

2.5.2 Conditions parfaitement absorbantes aux frontières : PML de Bérenger

L'application des conditions aux limites a connu une évolution avec l'avènement des couches absorbantes parfaitement adaptées dites PML (Perfectly Matched Layer) développées dans les années 90 par Bérenger [20] et qui sont considérées aujourd'hui comme les conditions absorbantes les plus performantes. Cette technique est basée sur l'utilisation d'une couche absorbante entourant complètement la zone de calcul FDTD suivant les directions ouvertes (figure 2.3). Ces couches artificielles sont destinées à absorber sans réflexion vers l'objet les ondes incidentes ayant des angles d'incidence quelconques dans le but de simuler un espace infini.

L'utilisation des PML repose sur la condition d'adaptation d'impédance de deux ondes à l'interface entre deux milieux de même indice mais dont l'un est absorbant. Cette condition s'exprime comme suit :

$$\frac{\sigma^e}{\varepsilon} = \frac{\sigma^m}{\mu} \quad (2.23)$$

σ^e et σ^m représentent respectivement les conductivités électrique et magnétique du milieu artificiel.



Figure 2.3 – PML de Bérenger

L'onde plane qui arrive sur les PML est décomposée fictivement en deux ondes : l'une, se propageant en incidence normale, est absorbée par le milieu PML, et l'autre, rasante se pro-

pageant parallèlement à l'interface PML/milieu incident [21], ne subit aucune réflexion vers le milieu incident. Comme les PML sont conçues pour n'absorber que les ondes propagatives, elles doivent être placées à une distance minimale $d = \frac{\lambda_{max}}{2}$ de la structure étudiée.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donné un bref aperçu sur l'outil de simulation utilisé dans le cadre de notre stage de master à savoir la méthode FDTD. Le principe de base de son implémentation à travers le schéma de Yee est présenté. Les conditions de stabilité ainsi que les conditions aux limites périodiques et absorbantes utilisées sont présentées succinctement.

Chapitre 3

Résultats et Discussions

3.1 Introduction

Ce chapitre se décline en deux parties ; dans la première nous allons présenter une étude de la résonance Fano sur une structure composée d'un anneau à double disque (DDR pour Dual Disk Ring) dans le cas où elle est isolée ainsi que l'influence du milieu diélectrique sur cette résonance. La résonance sera observée sur les spectres d'extinction et sera illustrée par les cartes de distribution du champ électrique et de charge électrique. Par suite nous allons étudier la structure proposée lorsqu'elle est rangée en réseau infini. Dans la deuxième partie, nous allons étudier le même phénomène mais sur une structure composée d'un anneau à un seul disque non concentriques (NCSDR pour Non Concentric Single Disk Ring).

3.2 Présentation de la structure

Les nouvelles applications de la résonance de Fano dans les systèmes de la matière condensée comprennent des systèmes avec décohérence et absence de symétrie qui rendent le paramètre du profil de résonance complexe.

La rupture de symétrie d'un anneau métallique est obtenue en plaçant deux disques à l'intérieur de celui-ci et considérant la facilité de générer un pic d'extinction prononcé à la résonance Fano provenant d'un matériau faiblement dissipatif, l'argent (Ag) est choisi comme matériau plasmonique au cour de cette étude.

La figure 3.1 illustre la nanostructure DDR considérée et dont la géométrie est caractérisée par 5 paramètres : les rayons externe et interne r_1 et r_2 de l'anneau respectivement, le rayon R des deux disques, le nano-gap g qui représente l'intervalle entre l'anneau et le bord proche de chaque disque, et l'épaisseur t de la couche métallique, ce qui est équivalent à la hauteur des deux disques et de l'anneau[1].

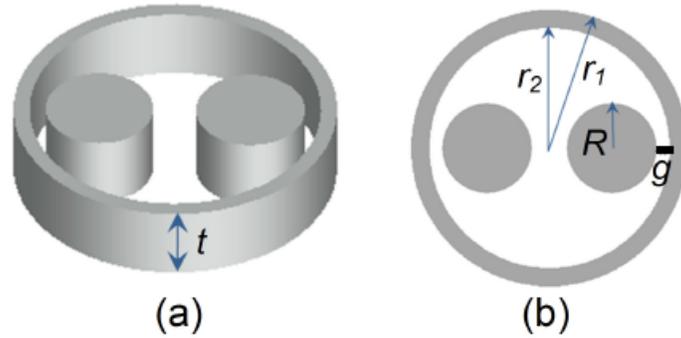


Figure 3.1 – Présentation schématique de la structure étudiée : a) vue en 3D et b) coupe transversale

3.3 Localisation de la résonance Fano de la structure DDR isolée

Afin d'obtenir le pic de résonance désiré avec l'exaltation maximale du champ local dans la gamme du visible, des calculs électrodynamiques avec la méthode FDTD ont été effectués en utilisant un modèle de Drude à deux points critiques avec les paramètres de l'ag obtenus par Palik [22]. La structure considérée repose sur un substrat de verre (SiO_2 avec un indice de réflexion de 1.456) et entourée d'air assimilable à du vide. Les paramètres géométriques de la structure proposée sont : $r_1 = 146nm$, $r_2 = 120nm$, $R = 44nm$ et $g = 10nm$. Ces paramètres géométriques ont été adaptés pour situer la résonance Fano dans la gamme du visible. les résultats de notre simulation sont rapportés sur la figure 3.2 Après avoir éclairé la structure avec une onde plane spatiale en incidence normale (selon z) polarisée transverse magnétique (TM) et dont le champ électrique est pris parallèle à l'écart g . Le profil temporel de l'onde incidente correspond à une gaussienne s'étalant sur un intervalle compris entre $400nm$ et $3000nm$. Le spectre d'extinction obtenu avec le code FDTD est représenté sur la figure 3.2. Les propriétés optiques du motif considéré peuvent être expliquées comme un hybride entre les deux disques d'argent et l'anneau

Sur ce spectre, on observe un dip (point b sur la figure) correspondant à un pic de transmission importante (onde propagative) située dans la gamme du visible suivi d'un pic d'extinction (point c sur la figure). Ceci s'apparente à des interférences constructive et destructive respectivement. Ajouté à cela le profil asymétrique du spectre dans cette région (voir l'insert sur la figure 3.2), ce qui constitue la signature d'une résonance Fano. De plus, la résonance Fano a été constaté sur la position du pic qui est en accord avec l'aspect théorique du profil asymétrique de la résonance Fano (voir figure 1.2) dans les structures avec brisure de symétrie.

Habituellement, l'état discret est créé par un défaut qui permet (un ou plusieurs) chemins de propagation supplémentaires de la lumière qui peuvent alors interférer de manière constructive ou destructive. Par conséquent, cet effet d'interférence conduit à une transmis-

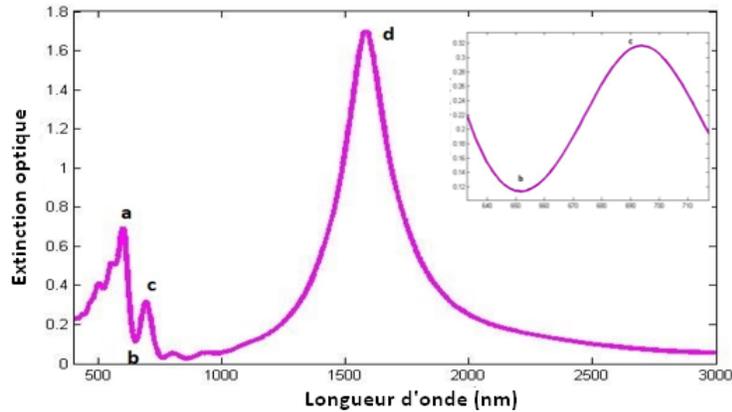


Figure 3.2 – Spectre d'extinction.

sion parfaite ou à une réflexion parfaite, produisant un profil asymétrique net qui caractérise la résonance Fano. Notons que ces résultats sont en bon accord avec ceux obtenus dans la référence [1], ce qui constitue également une validation de notre code FDTD.

Il est à noter également que sur les structures avec une symétrie brisée, les résonances Fano peuvent survenir en raison de l'interaction entre des modes sombres étroits et des modes larges lumineux. Ce phénomène a été théoriquement étudié pour une variété de structures comme les réseaux de nanoparticules [23].

En étudiant la distribution du champ électrique afin d'identifier les différentes résonances associées aux positions a , b , c et d respectivement qui sont montré sur la figure 3.3. Les interactions fortes entre les résonances plasmoniques de l'anneau et des disques entraînent une exaltation plus importante de champ électrique.

À la position c où $\lambda = 694nm$, il y a une interaction qui est une conséquence particulièrement fascinante de la rupture de symétrie; c'est l'apparition de la résonance Fano. Ce phénomène provient du couplage entre le mode octupolaire de l'anneau et le mode dipolaire des disques comme le montre la distribution du champ électrique sur la figure (3.3.c) qui met également en évidence une forte intensité du champ électrique à cette position.

Sur la figure (3.2.a), le pic de résonance faiblement large à la longueur d'onde $600nm$ représente la combinaison de modes anti-liants à haute énergie du dipôle annulaire et du dipôle des disques. Le pic de résonance d à $\lambda = 1584nm$ est le mode liant de basse énergie obtenu à partir de la combinaison du dipôle de l'anneau et du dipôle des disques. Le pic de résonance b où $\lambda = 652nm$ représente le minimum d'extinction et qui est aussi un maximum de transmission de l'onde dans notre structure.

La distribution de charge électrique sur l'anneau fait apparaître 6 nœuds, correspondant au mode plasmonique octupolaire. les charges sur les côtés gauche et droit de l'anneau ont des signes opposés qui représente une caractéristique de la résonance Fano octupolaire (voir la figure3.4). Cet effet est associé aux deux disques qui oscillent en phase. Par conséquent, seuls les modes de résonance avec des charges de signes opposés sur le côté gauche et le côté droit de l'anneau sont susceptibles d'être excités, ce qui engendre une résonance Fano octupolaire.

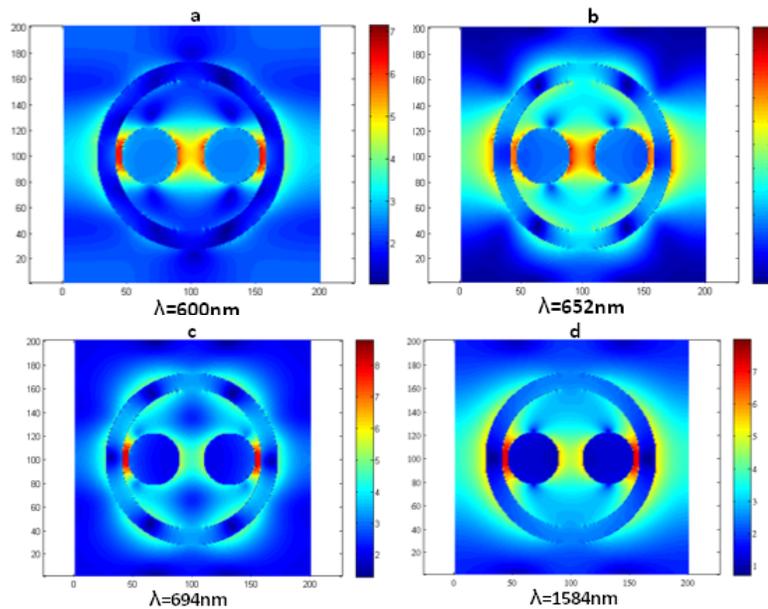
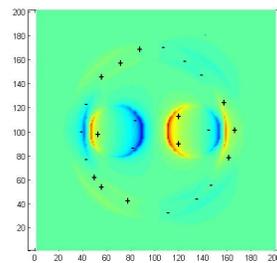


Figure 3.3 – Distribution du champ électrique autour de la résonance Fano.

Figure 3.4 – Distribution de charge électrique sur la structure :anneau à double disque pour $\lambda = 694nm$.

3.3.1 Discussions des résultats

Pour pouvoir discuter le résultat obtenu, nous avons calculé l'extinction pour la structure anneau seul et pour la structure deux disques seuls montrée sur les figures 3.5 et 3.7. Nous avons également représenté les distributions du champ électrique et de charges pour chacune des structures.

Comme première observation sur le spectre d'extinction associé à l'anneau seul, on note la présence de la résonance plasmonique dipolaire à $\lambda = 1500nm$, confirmée par les distributions de champ et de charges associées, alors que la résonance octupolaire est quasiment absente. Cela est dû au fait que cette résonance est de type dark mode qui se caractérise par une efficacité d'excitation par une onde plane très faible.

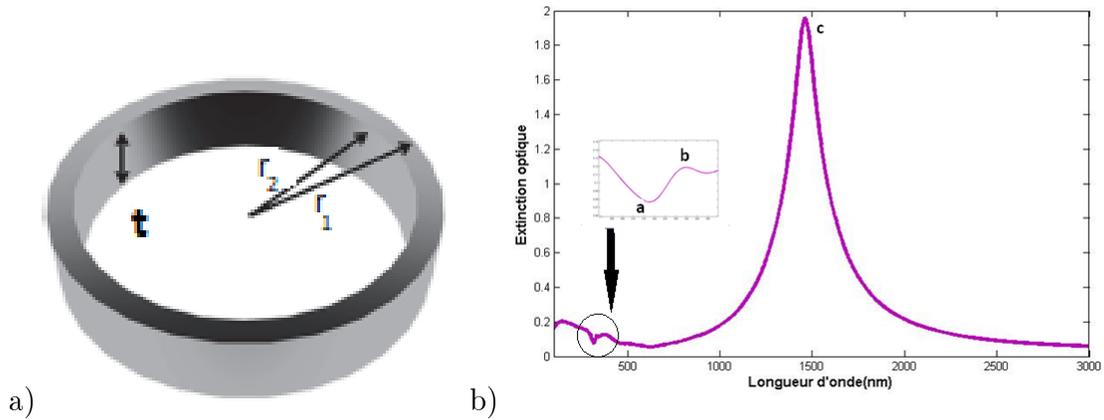


Figure 3.5 – a) Vue 3D de la structure anneau seul. b) Spectre d’extinction associé.

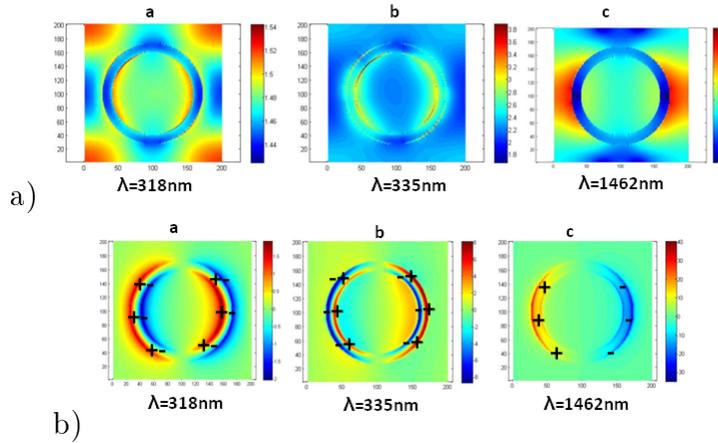


Figure 3.6 – a) Distribution de champ électrique sur la structure :anneau b) Distribution de charge électrique sur l’anneau

On observe sur la figure 3.7 la présence d’un maximum d’extinction située dans la gamme du visible associé à une résonance plasmonique dipolaire qui est due à l’interaction forte entre les deux disques (voir distributions de champ et de charges associées). De plus un dip (minimum) d’extinction est présent et qui signifie que l’onde est propagative dans la structure considérée. En outre le pic de résonance Fano a été constaté précédemment sur la structure DDR autour de $\lambda = 694nm$, et qui n’est pas loin de la résonance plasmonique apparue à la position $\lambda = 685nm$.

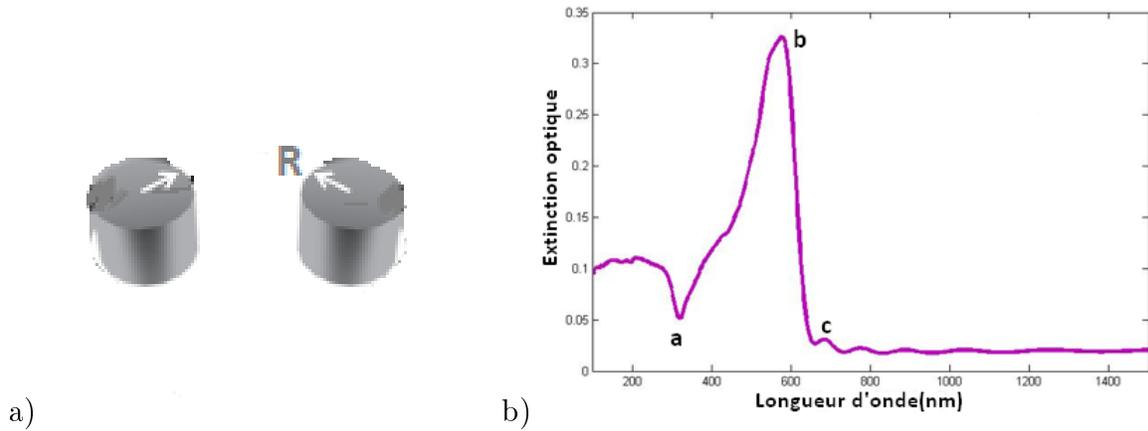


Figure 3.7 – Structure constituée de deux disques a) et spectre d’extinction associé b).

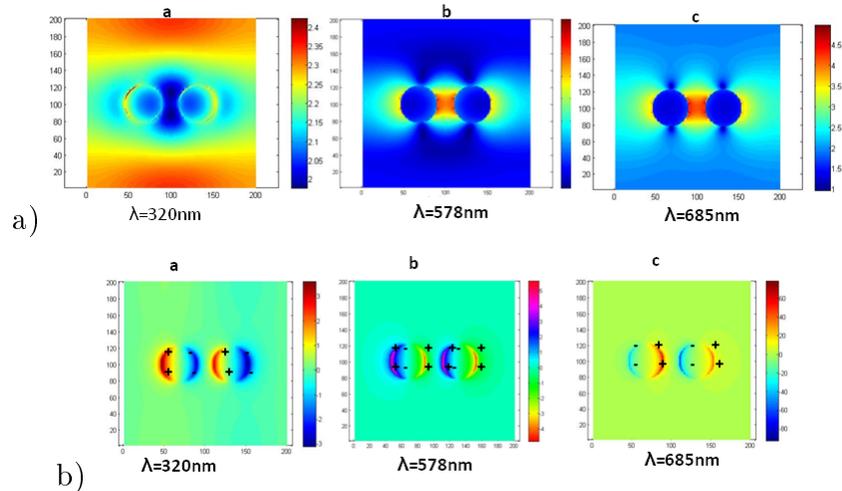


Figure 3.8 – a) Distribution du champ électrique sur la structure à deux disques en argent b) Distribution de charge électrique sur les deux disques.

De ce qui précède, nous pouvons affirmer que lorsque les fréquences lumineuses résonnent avec les deux modes lumineux et sombre, le mode lumineux des disques sera excité selon deux voies : $|I\rangle \rightarrow |B\rangle$ et $|I\rangle \rightarrow |B\rangle \rightarrow |D\rangle \rightarrow |B\rangle$, où les états $|I\rangle$, $|B\rangle$ et $|D\rangle$ représentent la source d’excitation, le mode lumineux (Bright) et le mode sombre (dark) respectivement. Près de la fréquence de résonance, les deux voies interfèrent de manière destructive.

3.3.2 Influence du milieu diélectrique sur la résonance Fano

Dans cette étude la structure étudiée est toujours supportée par un substrat en verre mais immergée complètement dans une matrice diélectrique. Cette étude est motivée par le fait que les résonances plasmoniques dépendent fortement de l’indice du milieu environnant.

Sur la figure 3.9, nous avons représenté les profils d'extinction pour différentes valeurs de l'indice de réfraction de la matrice hôte ainsi que la courbe de variation de la position de la résonance Fano en fonction également de l'indice de réfraction.

Les résultats obtenus confirment nos prédictions et montrent que la position de la résonance Fano dépend sensiblement de l'indice du milieu diélectrique et cette dépendance est quasiment linéaire. Ce comportement peut être attribué au nano-gap g qui représente un espace très réduit donnant lieu à un changement de l'énergie de la résonance Fano plus important et donc à une sensibilité à l'indice de réfraction plus élevée.

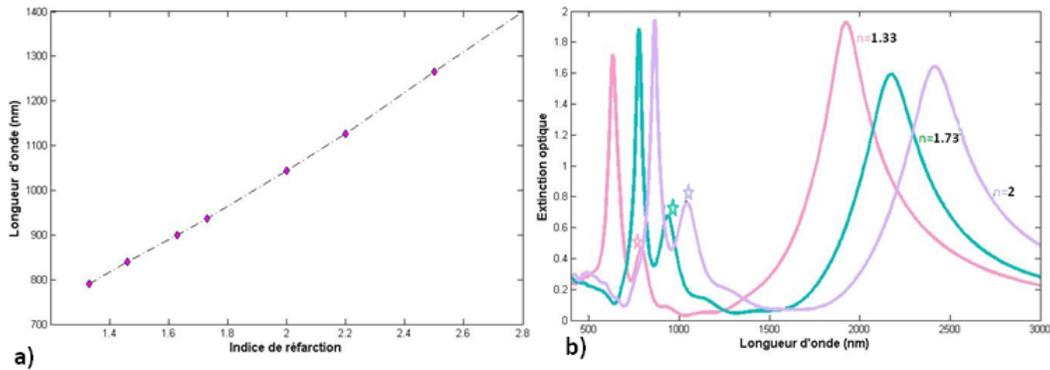


Figure 3.9 – a) Longueur d'onde de la résonance Fano en fonction de l'indice du milieu. b) Spectre d'extinction dans trois milieux différents.

3.4 Arrangement périodique de la structure DDR

Nous nous intéressons dans ce qui suit à l'évolution de la résonance Fano de la structure DDR disposée sur un substrat en verre (d'indice de réfraction $n=1.45$) tout en maintenant les paramètres intrinsèques considérés mais qui est maintenant disposée périodiquement sur un réseau carré de période Λ variant de 350nm à 600nm . La structure est éclairée en incidence normale à partir du verre avec une polarisation TM pour laquelle le champ électrique est parallèle à l'axe Ox (axe du gap) et la transmission est mesurée dans l'air.

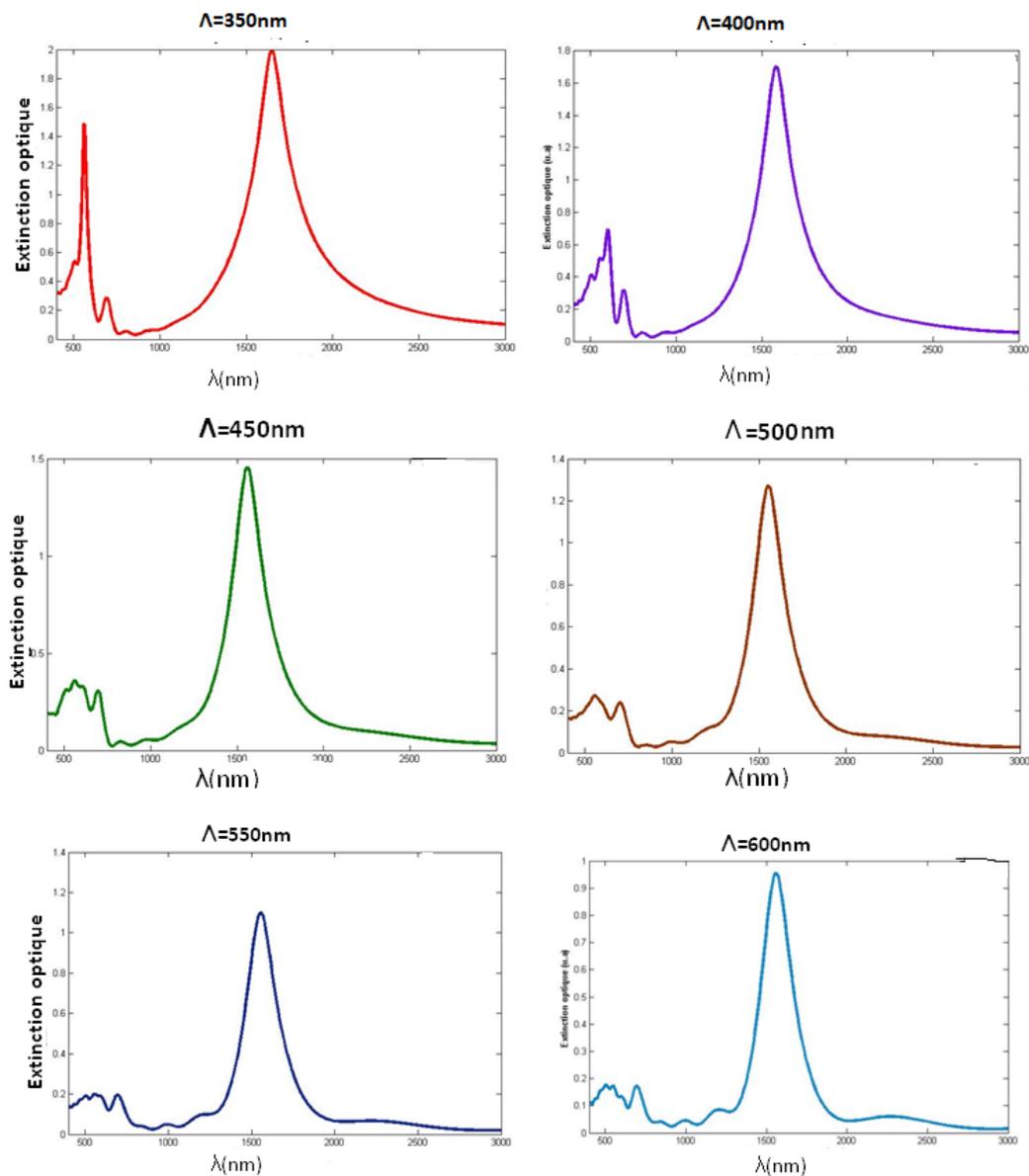


Figure 3.10 – Spectre d’extinction optique pour différents pas de réseau

Les spectres d’extinction optique calculés pour différents pas du réseau sont illustrés sur la figure (3.10). Nous remarquons que la position de la résonance Fano subit un léger déplacement vers les grandes longueurs d’onde lorsque la période du réseau augmente alors que son intensité diminue jusqu’à disparaître complètement. Cela est dû à la distance importante entre les nanoparticules et par l’approche des anomalies de Rayleigh d’ordre (1,0) qui repoussent la résonance Fano (red shift). Pour rappel, ces anomalies sont calculées par la formule suivante :

$$\lambda_R = n \times \Lambda \quad (3.1)$$

avec λ_R est la longueur d'onde de Rayleigh (onde incidente), n indice du milieu et Λ représente la constante du réseau. L'évolution de la longueur d'onde de Rayleigh est montrée sur la figure 3.11b.

De plus, on observe un rétrécissement significatif de la largeur du grand pic en augmentant la constante du réseau, cela est dû à la constante d'amortissement des électrons de surface qui diminue ce qui induit une augmentation de la durée de vie des plasmons de surface.

La figure 3.11.a illustre l'évolution de la longueur d'onde de résonance en fonction de la constante du réseau. Comme première observation et pour des pas de réseau compris entre $300nm$ et $500nm$, le couplage entre les nanoparticules structurées en réseau est fort autour des longueurs d'onde de résonance situées dans deux plages : la première dans le visible entre $500nm$ et $700nm$ où la résonance Fano apparait et la deuxième dans l'Infra-Rouge lointain (IR) entre $1400nm$ et $2000nm$. Ce résultat peut être expliqué par l'interaction importante entre les nanoparticules quand la période Λ est petite ainsi que l'intensité du champ qui est importante.

Pour des périodes supérieures à $500nm$ la résonance se stabilise et la structure réagit comme des nanoparticules individuelles. On retrouve la réponse d'une structure isolée.

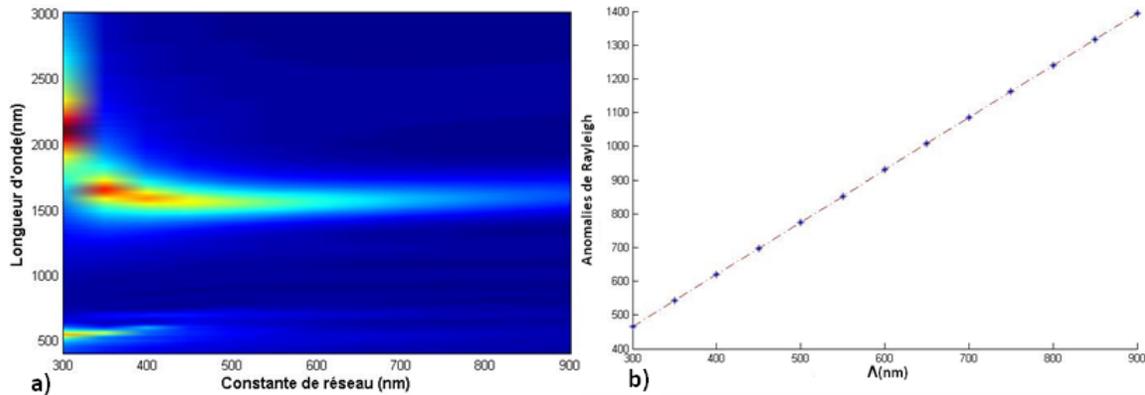


Figure 3.11 – a) Carte d'évolution de la longueur d'onde de résonance en fonction du pas de réseau considéré. b) Anomalies de Rayleigh en fonction de la période Λ .

3.5 Étude de la résonance Fano dans la structure NCSDR

Les nanostructures métalliques supportent des résonances plasmoniques dont les énergies peuvent dépendre de façon sensible de la forme géométrique de la structure. Dans cette partie, la brisure de symétrie dans la structure considérée est obtenue lorsqu'on induit un décalage du disque par rapport au centre de l'anneau formant un nano-gap $g = 10nm$ entre le disque et

l'anneau. Cette structure asymétrique est désignée ici comme une nanostructure métallique constituée d'un disque à l'intérieur d'un anneau non concentriques NCSDR comme le montre la figure 3.12.

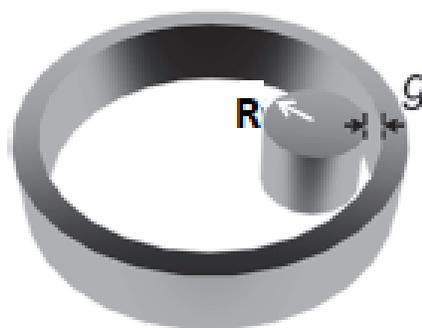


Figure 3.12 – Schéma de la structure NCSDR en argent : anneau et disque non concentriques.

Comme précédemment, l'onde électromagnétique éclaire la structure NCSDR en incidence normale avec une polarisation TM parallèle au nano-gap g . Les rayons extérieur et intérieur de l'anneau sont $r_1 = 146\text{nm}$ et $r_2 = 120\text{nm}$ et le nano-gap $g = 10\text{nm}$. On fait varier le rayon du nanodisque R afin d'étudier son influence sur la résonance Fano et les formes de leurs profils.

La figure 3.13 représente les spectres d'extinction de la nanostructure plasmonique considérée pour différentes valeur du rayon R : 40nm , 60nm et 80nm .

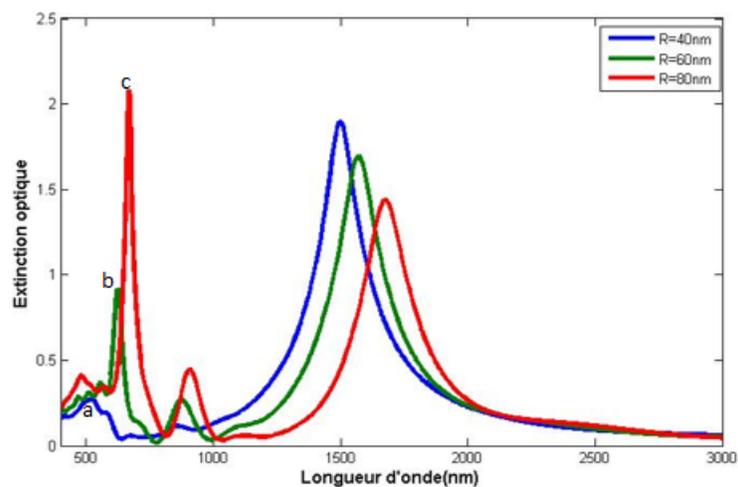


Figure 3.13 – Spectre d'extinction en fonction du rayon R du disque.

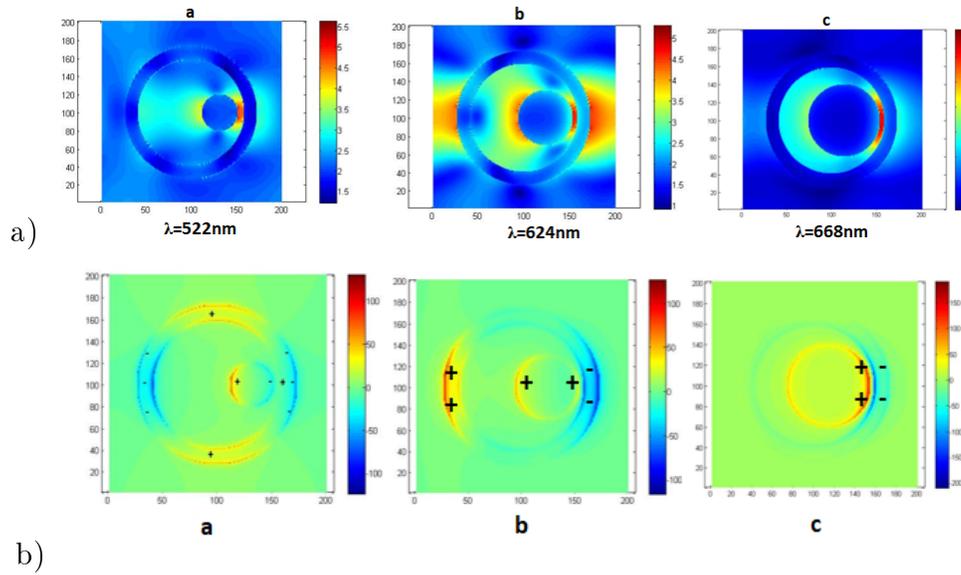


Figure 3.14 – a) Distribution de champ électrique sur la structure NCSDR en argent. b) Distribution de charge électrique associée.

D'après cette figure 3.13, on remarque un décalage vers le rouge (red shift) de la longueur d'onde de résonance Fano. Cette structure supporte des modes sub-radiants et super-radiants (c-à-d : sombre et lumineux) qui résultent d'un couplage entre les modes plasmoniques quadripolaire sombre de l'anneau et dipolaire lumineux du disque. Ce couplage induit une résonance Fano asymétrique présente sur les spectres d'extinction. En effet, lorsque les surfaces en regard entre le disque et la surface interne de l'anneau augmente, l'interaction entre les modes du disque et de l'anneau augmente entraînant un fort décalage vers le rouge de la résonance en plus de l'apparition de pics supplémentaires vers 900nm qui sont probablement des modes de cavité. Les cartographies de l'intensité du champ et de charge associées au point a (voir figure 3.14) montrent clairement le mode quadripolaire de l'anneau et le mode dipolaire du disque. Ce qui constitue une signature de la résonance Fano.

On constate également que lorsque le rayon augmente, la résonance Fano devient de plus en plus faible. Ceci peut s'expliquer par la résonance dipolaire du disque qui devient de plus en plus intense mais qui excite faiblement le mode quadripolaire de l'anneau, ce qui inhibe complètement la résonance Fano. En effet, le petit disque à l'intérieur de l'anneau joue le rôle d'un dipôle excité par l'onde EM incidente, puis ce dipôle induit l'excitation des modes sombres multipolaires de l'anneau en raison du couplage en champ proche.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mené une étude FDTD sur l'excitation des résonances Fano dans les nanostructures plasmoniques DDR et NCSDR. Après avoir calculé les spectres d'extinction pour des paramètres géométriques appropriés, nous avons obtenu une résonance

Fano dans la gamme du visible. Nous avons étudié les cas où la nanostructure est isolée ou rangée en réseau carré. Lorsque la nanostructure est isolée, les calculs ont montré que la fréquence de résonance évolue proportionnellement avec l'indice de réfraction de la matrice hôte. Dans le cas périodique la résonance Fano est très sensible à la période du réseau surtout lorsque le pas du réseau est voisin de celle-ci. En effet, il y a une forte interaction entre les nanoparticules pour des périodes faibles et inversement.

Dans la seconde partie de ce chapitre, nous avons étudié l'effet du rayon du disque intérieur de la structure NCSDR sur la présence et la position de la résonance Fano sur les spectres d'extinction. La résonance Fano asymétrique résulte de la résonance quadrupolaire de l'anneau qui interagit avec la résonance dipolaire du disque. Nous avons également remarqué que la résonance Fano est complètement inhibée lorsque le rayon du disque devient important.

Conclusion générale

Le travail réalisé dans le cadre de ce travail de master a pour objectif principal l'étude de la résonance Fano dans les nanostructures plasmoniques faites en argent DDR et NCSDR présentant des ruptures de symétrie et susceptibles de supporter des résonances Fano dans la gamme du visible.

Nous avons commencé par l'introduction de quelques généralités sur le modèle de dispersion adopté tout au long de notre travail. L'aspect théorique de la résonance Fano ainsi que la formule mathématique décrivant sa forme sont donnés. Comme nous avons également rappelé les définitions des plasmons de surface localisés et délocalisés ainsi que les mécanismes d'excitation de ces derniers.

Le deuxième chapitre est un bref aperçu sur la méthode numérique utilisée pour la réalisation de nos simulations. Le principe de base de la méthode des Différences Finies dans le Domaine Temporel (FDTD) y est présenté ainsi que le schéma de Yee associé.

Dans le dernier chapitre, nous avons présenté nos résultats de simulation que nous avons comparé aux résultats obtenus dans la littérature [1], ce qui a permis de valider notre code de calcul. Les cas de nanostructures isolées où structurées en réseau carré sont considérés. De plus, l'influence du milieu diélectrique environnant a été étudiée.

Les résultats obtenus sur la structure DDR isolée ont montré que la résonance Fano, excitée dans le visible, est le résultat de l'interaction entre les modes octupolaire (sombre) de l'anneau et dipolaire (lumineux) du disque. Le mode octupolaire est faiblement excité par une onde plane et son excitation est due au mode dipolaire des disques. Cette résonance est également sensible à l'indice de réfraction du milieu environnant.

Dans la deuxième partie du dernier chapitre, nous avons mené une étude paramétrique sur une nanostructure plasmonique constituée d'un anneau et d'un disque non concentriques (NCSDR) inspirée de travaux de simulations récents dans le but de reproduire ou d'améliorer la résonance Fano. La résonance obtenue a pour origine un phénomène d'interférence du mode quadripolaire de l'anneau qui interagit avec le mode dipolaire du disque pour générer la caractéristique spectrale asymétrique de la résonance Fano située dans la plage du visible.

Comme perspective, nous envisageons de mener une étude paramétrique plus complètes (forme, taille, hauteur, nature du métal...) dans le but d'améliorer le facteur de qualité de la résonance Fano et de contrôler sa position.

Bibliographie

- [1] L. Niu, J. B. Zhang, Y. H. Fu, S. Kulkarni, B. Lukyanchuk, Fano resonance in dual-disk ring plasmonic nanostructures, *Optics express* 19 (23) (2011) 22974–22981. (document), 3.2, 3.3, 3.6
- [2] U. Fano, Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts, *Physical Review* 124 (6) (1961) 1866. (document), 1.3
- [3] Y. H. Fu, J. B. Zhang, Y. F. Yu, B. Luk'yanchuk, Generating and manipulating higher order fano resonances in dual-disk ring plasmonic nanostructures, *ACS nano* 6 (6) (2012) 5130–5137. (document)
- [4] B. Luk'yanchuk, N. I. Zheludev, S. A. Maier, N. J. Halas, P. Nordlander, H. Giessen, C. T. Chong, The fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials, *Nature materials* 9 (9) (2010) 707. 1.1
- [5] P. Drude, Zur elektronentheorie der metalle, *Annalen der Physik* 306 (3) (1900) 566–613. 1.2
- [6] M. Hamidi, Modélisation par la méthode fdtd des plasmons de surface localisés, Ph.D. thesis, Université Mouloud Mammeri (2012). 1.2, 1.4.1, 2.4
- [7] P. G. Etchegoin, E. Le Ru, M. Meyer, An analytic model for the optical properties of gold, *The Journal of chemical physics* 125 (16) (2006) 164705. 1.2, 1.2.1
- [8] P. B. Johnson, R.-W. Christy, Optical constants of the noble metals, *Physical review B* 6 (12) (1972) 4370. (document), 1.2.1, 1.1
- [9] S. A. Guebrou, Influence des plasmons de surface propagatifs sur la cohérence de systèmes optiques, Ph.D. thesis, Université Claude Bernard-Lyon I (2012). (document), 1.1
- [10] H. Beutler, Über absorptionsserien von argon, krypton und xenon zu termen zwischen den beiden ionisierungsgrenzen $2p\ 3\ 2/0$ und $2p\ 1\ 2/0$, *Zeitschrift für Physik* 93 (3-4) (1935) 177–196. 1.3
- [11] B. Gallinet, Fano resonances in plasmonic nanostructures. 1.3, 1.3.1

- [12] M. Rybin, A. Khanikaev, M. Inoue, K. Samusev, M. Steel, G. Yushin, M. Limonov, Fano resonance between mie and bragg scattering in photonic crystals, *Physical review letters* 103 (2) (2009) 023901. 1.3
- [13] A. Ueda, M. Eto, Resonant tunneling and fano resonance in quantum dots with electron-phonon interaction, *Physical Review B* 73 (23) (2006) 235353. 1.3
- [14] A. E. Miroschnichenko, S. Flach, Y. S. Kivshar, Fano resonances in nanoscale structures, *Reviews of Modern Physics* 82 (3) (2010) 2257. 1.3.1
- [15] C. Bonnard, Couplage fort entre plasmons de surface et excitons de semiconducteur organique, Ph.D. thesis, Université Claude Bernard-Lyon I (2006). (document), 1.3, 1.4.1, 1.4
- [16] E. K. Akowuah, T. Gorman, S. Haxha, J. V. Oliver, Dual channel planar waveguide surface plasmon resonance biosensor for an aqueous environment, *Optics express* 18 (24) (2010) 24412–24422. 1.4.1
- [17] Y.-Y. Teng, E. A. Stern, Plasma radiation from metal grating surfaces, *Physical Review Letters* 19 (9) (1967) 511. 1.4.1
- [18] K. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media, *IEEE Transactions on antennas and propagation* 14 (3) (1966) 302–307. 2.1
- [19] A. Taflove, S. C. Hagness, *Computational electrodynamics : the finite-difference time-domain method*, Artech house, 2005. 2.1
- [20] J.-P. Berenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *Journal of computational physics* 114 (2) (1994) 185–200. 2.5.2
- [21] B. Abderrahmane, Extension de la modélisation par fdtd en nano-optique, Ph.D. thesis, Université de Franche-comté. UFR des sciences et techniques (2008). 2.5.2
- [22] E. D. Palik, G. Ghosh, *Electronic handbook of optical constants of solids : User Guide*, Academic Press, 1999. 3.3
- [23] N. Verellen, Y. Sonnefraud, H. Sobhani, F. Hao, V. V. Moshchalkov, P. V. Dorpe, P. Nordlander, S. A. Maier, Fano resonances in individual coherent plasmonic nanocavities, *Nano letters* 9 (4) (2009) 1663–1667. 3.3