

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERRI DE TIZI-OUZOU  
FACULTÉ DES SCIENCES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



**THÈSE DE DOCTORAT LMD**

Filière  
PHYSIQUE

Spécialité  
PHYSIQUE DES MATÉRIAUX ET DES COMPOSANTS

Présentée par

**MESLI Sabrina**

---

Modélisation et Optimisation de Capteurs Optiques  
Métallo-Diélectriques

---

Devant le jury d'examen composé de :

M. Omar	LAMROUS	Professeur	UMMTO	Président
M. Mahdi	HAMIDI	M.C.A.	UMMTO	Rapporteur
M. Fadi Issam	BAIDA	Professeur	Univ. Franche-Comté	Co-Rapporteur
M. Azeddine	CHELOUCHE	Professeur	Univ. Bejaia	Examineur
M. Abdelaziz	MEZEGHRANE	Professeur	UMMTO	Examineur

Année universitaire 2020/2021

# Remerciements

*Je voudrais avant tout remercier DIEU, le tout puissant, pour tous ses bienfaits trop souvent négligés.*

*A l'issue de ce travail de thèse, ma conviction est que tout travail de recherche ne peut être mené seul. En effet, je n'aurais jamais pu finalisé ce travail sans le soutien d'un grand nombre de personnes qui m'ont permis de progresser dans cette phase aussi bien instructive que délicate.*

*Je commencerai, tout d'abord, par adresser mes remerciements au Professeur Hamid BOUZAR, Directeur du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, pour l'accueil et les commodités mises à notre disposition pour la réussite de ce travail.*

*Mon premier remerciement s'adresse à Monsieur Mahdi HAMIDI, Maître de conférences A à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-ouzou. Je lui suis également reconnaissante pour son attention de tout instant sur mes travaux. Son énergie et sa confiance ont été des éléments moteurs pour moi. J'ai pris un grand plaisir à travailler avec lui.*

*J'adresse de chaleureux remerciements à mon co-encadrant de thèse, Professeur Fadi Issam BAIDA, de l'université de Franche-Comté, pour le temps conséquent qu'il m'a accordé, pour m'avoir accueillie au sein de l'Institut FEMTO-ST et pour ses précieux conseils et sa patience. Je lui manifeste toute ma gratitude pour m'avoir encadrée durant cette thèse.*

*Bien sûr, atteindre ces objectifs n'aurait pas été possible sans l'aide des Professeurs Abderrahmane BELKHIR, Abdelaziz MEZEGHRANE pour leur aide dans la maîtrise de*

---

*la méthode de calcul FDTD et du Dr Hakim YALA de l'université de Bejaia pour son aide dans la compréhension de la méthode de calcul FMM.*

*Mes sincères remerciements vont également à tous les membres du jury, Pr Omar LAMROUS, Pr Azeddine CHELOUCHE et Pr Abdelaziz MEZEGHRANE pour l'honneur qu'ils me font à examiner et évaluer ce travail de thèse.*

*Tous ces remerciements seraient incomplets s'ils ne mentionnaient pas tous les membres de ma famille. Je remercie mes sœurs et frères Ouisssem, Toufik et Cherif. Un grand merci pour ma grande sœur Soraya, pour sa complicité et sa présence malgré la distance qui nous sépare.*

*Je n'en serais pas là aujourd'hui sans l'aide et le soutien de mes parents, vous êtes les plus grandes sources de mon bonheur.*

*Un merci pour mon Mari khaled, pour ta générosité, ta gentillesse.*

*Une dernière attention sera portée à mes amis et à tous les membres du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, enseignants et surtout doctorants pour les bons moments qu'on a passés ensemble.*



# Table des matières

<b>Introduction Générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Généralités sur les Guides d'ondes et capteurs optiques</b>	<b>5</b>
1.1 Théorie de l'optique guidée . . . . .	5
1.1.1 Guide d'onde plan unidimensionnel . . . . .	7
1.1.2 Guide d'onde à réseau périodique - Résonances des Modes Guidés	9
1.1.3 Influence des paramètres physiques et géométriques sur la ré-	
ponse des guides d'ondes <i>GMR</i> . . . . .	18
1.1.4 État lié dans le continuum (BIC) . . . . .	28
1.2 Généralités sur les capteurs optiques . . . . .	30
1.2.1 Détection dans le domaine de la biologie . . . . .	31
1.3 Conclusion . . . . .	39
<b>2 Méthodes de calcul : FDTD, FMM</b>	<b>41</b>
2.1 Introduction . . . . .	41
2.2 Méthode Des Différences Finies Dans Le Domaine Temporel (FDTD) . .	42
2.2.1 Principe de base et Schéma de Yee . . . . .	42
2.2.2 Stabilité et dispersion numérique . . . . .	45
2.2.3 Conditions aux limites . . . . .	46
2.2.4 Les milieux dispersifs dans la FDTD . . . . .	46
2.3 Méthode Modale de Fourier (FMM) . . . . .	49
2.3.1 Principe de base . . . . .	49
2.3.2 Stabilité de la méthode . . . . .	53
2.4 Test de validation . . . . .	55

## TABLE DES MATIÈRES

---

2.5	Conclusion . . . . .	55
<b>3</b>	<b>Étude paramétrique des performances d'un capteur à réseau 1D diélectrique</b>	<b>57</b>
3.1	Introduction . . . . .	57
3.2	Effet de la hauteur et de la polarisation . . . . .	59
3.3	Effet de la période . . . . .	62
3.4	Effet du facteur de remplissage . . . . .	63
3.5	Effet de l'indice de réfraction . . . . .	65
3.5.1	Indice de réfraction du substrat . . . . .	65
3.5.2	Indice de réfraction du réseau périodique . . . . .	67
3.6	Effet de la forme . . . . .	68
3.7	Premier bilan . . . . .	70
3.8	Effet de l'insertion de piliers sous le réseau . . . . .	72
3.8.1	Effet de la couche intermédiaire . . . . .	73
3.8.2	Effet des piliers . . . . .	75
3.9	Conclusion . . . . .	79
<b>4</b>	<b>Exploitation des modes protégés par la symétrie dans l'optimisation d'un capteur diélectrique - Application à la détection des impuretés dans le sang</b>	<b>81</b>
4.1	Introduction . . . . .	81
4.2	Résultats de la simulation . . . . .	83
4.2.1	Mise en évidence des modes SPM . . . . .	83
4.2.2	Étude paramétrique et calculs des performances de détection . . . . .	88
4.3	Conclusion . . . . .	95
<b>5</b>	<b>Modélisation et optimisation d'un capteur optique hybride (Diélectrique-métal)</b>	<b>97</b>
5.1	Introduction . . . . .	97
5.2	Couche métallique intermédiaire . . . . .	98
5.3	Réseau métallique . . . . .	102
5.3.1	Réseau métallique en dessous . . . . .	102
5.3.2	Réseau métallique au dessus . . . . .	103
5.4	Conclusion . . . . .	107
	<b>Conclusion Générale</b>	<b>109</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>111</b>

## TABLE DES MATIÈRES

---

**Annexe**

**122**



# Introduction Générale

La recherche scientifique dédiée au développement de capteurs, et plus particulièrement les capteurs optiques, a connu un bond extraordinaire au cours des deux dernières décennies en raison des divers champs d'application dans tous les domaines de la vie quotidienne, comme l'environnement (pollution de l'air, traitement de l'eau, ...), la sécurité sanitaire (détection des risques biologiques et des molécules cibles comme les gaz, les virus, les gènes, ...) et la sécurité industrielle (détection de pathogènes et de pesticides dans l'industrie agro-alimentaire). Par rapport aux autres types de capteurs (chimiques, mécaniques, magnétiques, ...), les capteurs optiques présentent l'avantage d'être plus stables dans des environnements agressifs et plus immunisés aux interférences électromagnétiques [1].

Le rôle d'un capteur est de transformer une grandeur à détecter (molécule cible) en un signal mesurable. La grandeur à mesurer diffère selon le domaine d'application : santé (recherche médicale) [2], sécurité sanitaire (protection biologique) [3], environnement (surveillance de la pollution) [4], sécurité alimentaire [5]. Les paramètres et performances caractérisant un capteur sont diverses. On citera, entre autres, le temps de réponse, la sensibilité, la limite de détection, la figure de mérite... Dans le cadre de ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés plus particulièrement à la sensibilité ( $S$  pour Sensitivity) et à la figure de mérite ( $FOM$  pour Figure of Merit). La sensibilité d'un capteur est définie par la détermination de l'évolution de la grandeur de sortie en fonction de la grandeur d'entrée en un point donné. Cette grandeur est une caractéristique intrinsèque au capteur et ne dépend pas ou peu des autres équipements de mesure. La figure de mérite est défini comme le rapport de la sensibilité et de la largeur à mi-hauteur de la bande de résonance. Cette caractéristique nous apporte, en plus de la sensibilité, l'information sur la finesse du pic de résonance impliquant la réduction des limites de détection.

La littérature scientifique est riche de différentes études portant sur différents types de capteurs optiques, qu'ils soient diélectriques, plasmoniques ou hybrides (diélectrique-métal). Les capteurs diélectriques reposent sur les résonances de modes guidés (GMR pour Guided Mode Resonances) mises en évidence par les travaux théoriques de Wang et Magnusson [6, 7] et exploités, depuis, dans différentes applications [8–15]. Dans des structures diélectriques combinant un réseau périodique et une couche de guide d'ondes planaire, les modes de diffraction induits par l'interaction de la lumière avec le réseau se traduisent par la propagation de modes dans le guide d'ondes planaire. Une partie de ces derniers sont fuyants le long de la surface du réseau et est ensuite couplée au champ électromagnétique externe, donnant lieu aux modes dits GMR ou modes de fuite [6, 7]. Dans le travail de Magnusson et al [16], et pour un réseau périodique sans la couche guide d'onde, un mode non fuyant a été mis en évidence dans la structure de bande en plus de ceux qui fuient. Ce mode non fuyant est associé à un état limite dans le continuum (BIC pour Bound state In the Continuum) lié au degré élevé de symétrie de la structure étudiée. Ce mode particulier, protégé par la symétrie (SPM pour Symmetry-Protected Mode), est un état localisé avec une durée de vie infinie, pouvant être excité, sous certaines conditions d'illumination, pour être transformé en un état résonnant avec une durée de vie finie et un facteur de qualité élevé.

Les capteurs plasmoniques reposent sur les résonances de modes de surface mis en évidence pour la première fois par Zenneck et Sommerfeld (1907) qui démontrèrent théoriquement qu'une onde électromagnétique de radio fréquence apparaissait à l'interface de deux milieux, lorsque l'un est métallique (absorbant) et l'autre est diélectrique (non absorbant) [17]. La résonance associée à cette onde de surface, dite "Résonance Plasmon de surface" (SPR pour Surface Plasmon Resonance), est caractéristique d'une oscillation collective des électrons libres de conduction du métal. Les plasmons de surface sont divisés en deux catégories selon le type de résonance plasmonique : SPR pour plasmons de surface délocalisés et LSPR (Localized Surface Plasmon Resonance) pour plasmons de surface localisés. Plusieurs travaux en rapport avec ce type de capteurs ont été publiés [18].

En parallèle avec leurs conceptions et leurs caractérisations, la modélisation de capteurs optiques occupe une grande place dans la littérature scientifique de ces deux dernières décennies. L'évolution des moyens de calcul a permis de modéliser et d'optimiser les performances de structures métallo-diélectriques plus ou moins complexes. Les méthodes de calcul les plus utilisées sont la méthode des différences finies dans le domaine

temporel (FDTD pour Finite-Difference Time-Domain) et la méthode modale de Fourier (FMM pour Fourier Modal Method) plus connues sous le nom de RCWA (Rigorous Coupled wave analysis). Les deux méthodes reposent sur des principes de fonctionnement différents et sont plus ou moins adaptées selon la géométrie et la périodicité de la structure. La FDTD fonctionne dans l'espace direct, dans le domaine temporel. Elle présente ainsi l'avantage d'être intuitive et assez souple puisqu'elle permet une description large bande des propriétés optiques de la structure étudiée. La FMM, quant à elle, fonctionne dans l'espace de Fourier et se base sur un développement en série de Fourier des composantes électromagnétiques. Cette méthode a montré sa fiabilité et son efficacité dans la modélisation des structures périodiques, notamment à 2 dimensions. Ces deux méthodes sont développées et exploitées au sein de notre équipe de recherche en collaborations avec les universités de Bejaia et de Franche-Comté.

C'est dans ce contexte que s'inscrit notre travail de thèse dont l'objectif assigné est la modélisation FDTD et FMM de capteurs diélectriques ou hybrides métal-diélectrique à base de structures dont le fonctionnement repose sur l'excitation des modes GMR (type SPM) avec des résonances à largeurs de bande très fines et sensibles à la variation de l'indice de réfraction de l'analyte.

Ce manuscrit est structuré en cinq chapitres :

Dans le premier chapitre, des généralités sur la théorie des guides d'ondes et sur les capteurs optiques, plus précisément ceux exploités dans le domaine de la détection biologique, y sont présentées. Un état de l'art sur les travaux réalisés en utilisant différents phénomènes pour la détection (capteurs plasmoniques, capteurs diélectriques ou capteur hybrides) y est rappelé.

Le deuxième chapitre présente les outils de base de notre travail de modélisation, à savoir les deux méthodes de calculs utilisées dans nos deux codes de simulation : la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) et la méthode modale de Fourier (FMM).

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation d'une nanostructure périodique GMR pour application dans la détection biologique. Une étude paramétrique combinant l'effet de la période, la hauteur, la largeur des lignes du réseau et l'indice de réfraction sur la résonance GMR y est menée afin de proposer une nouvelle structure optimale améliorant la sensibilité et la figure de mérite du capteur.

Dans le quatrième chapitre, nous avons démontré, dans le cas d'un réseau diélectrique périodique sans la couche guidante, l'existence, sous certaines conditions d'illumination, d'un mode non fuyant dans la structure de bande en plus des modes fuyants classiques. Ce

mode non fuyant est associé à un état limite dans le continuum (BIC) lié au haut degré de symétrie de la structure étudiée. L'excitation de ce mode protégé par la symétrie (SPM) se fait avec un facteur de qualité très élevé. Ce mode est exploité pour l'exaltation des performances de la structure étudiée pour des applications dans la détection des impuretés dans le sang.

Le dernier chapitre est consacré à une étude préliminaire pour le cas d'un capteur hybride (métal-diélectrique). Différents paramètres, comme la hauteur, la position relative et la largeur du métal, sont étudiés afin d'optimiser les performances de notre capteur (sensibilité et figure de mérite).

Le manuscrit se termine par une conclusion générale résumant le travail réalisé, les principaux résultats obtenus et quelques perspectives pour des travaux de recherche futurs.

# Généralités sur les Guides d'ondes et capteurs optiques

## Introduction

Les capteurs optiques à base de guides d'ondes diélectriques et/ou plasmoniques ont fait l'objet d'un intérêt théorique et expérimental de plus en plus croissant depuis les premiers travaux de Magnusson et Wang [6, 7], en raison de leurs performances optiques de plus en plus élevées, notamment leurs sensibilités et leurs limites de détection. Ces performances sont optimisées en parallèle avec les potentialités technologiques de miniaturisation de plus en plus développées et un spectre de détection des molécules de plus en plus large. La théorie de l'optique guidée est à la base du fonctionnement de ces capteurs optiques. Nous présenterons dans ce qui suit un aperçu succinct de cette théorie permettant de mieux comprendre le confinement et la propagation des modes guidés, plus particulièrement dans les guides d'ondes diélectriques. Le principe de fonctionnement des capteurs optiques et un état de l'art des différentes études, portant sur l'effet de différents paramètres géométriques et physiques, y sont également présentés.

## 1.1 Théorie de l'optique guidée

Un guide d'onde optique est une structure permettant le confinement et le transport guidé de la lumière sur une certaine distance à travers des dispositifs optiques à différentes échelles (métriques, centimétriques, nanométriques,...). La première étude théorique sur un guide d'onde, constitué par des tuyaux métalliques creux à section rectangulaire ou

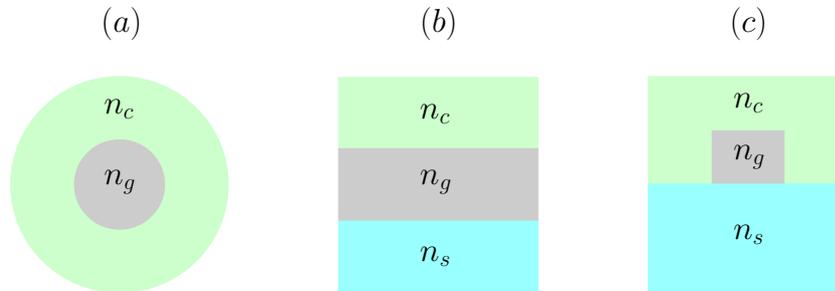


FIGURE 1.1 – Vue en coupe des différents types de guide d’onde : (a) fibre optique, (b) guide d’onde plan unidimensionnel et (c) guide d’onde à confinement bidimensionnel.  $n_s$ ,  $n_g$  et  $n_c$  sont, respectivement, l’indice de réfraction du superstrat, du cœur et du superstrat.

circulaire, fut réalisée par Lord Rayleigh en 1897 [19]. Un guide d’onde est généralement constitué d’une portion d’isolant (vide ou bien diélectrique), lieu de propagation de la lumière. Cette couche d’isolant est entourée d’une ou de deux couches (selon la forme) qui peuvent être diélectriques (l’interface est alors dite diélectrique) ou métalliques (l’interface est alors dite métallique). Dans les deux cas, l’onde électromagnétique est invariante par translation selon la direction de propagation. Les guides d’ondes se présentent sous deux formes : les fibres optiques (figure 1.1(a)) et les guides d’onde plans. Ces derniers peuvent être à confinement unidimensionnel (1D : finis suivant une direction et infinis suivant les deux autres), comme illustré sur la figure 1.1(b), ou bien à confinement bidimensionnel (2D : finis suivant deux directions et infinis suivant la troisième direction) comme illustré sur la figure 1.1(c).

La fibre optique est un guide d’onde de forme cylindrique composé d’un cœur, d’indice de réfraction  $n_g$ , entouré par une couche, dite gaine, d’indice de réfraction  $n_c$  (voir figure 1.1(a)). De par ses propriétés intéressantes de guidage parfait de la lumière à longue distance, la fibre optique est le dispositif le plus connu et le plus utilisé dans le domaine des télécommunications optiques [20]. Néanmoins, en plus du coût élevé de ses constituants, la fibre optique présente l’inconvénient majeur de sa difficulté d’utilisation dans le cadre de l’optique intégrée basée sur la miniaturisation des dispositifs optiques et l’intégration de différentes fonctions optiques comme le couplage [21], le multiplexage [22], le filtrage [23] ou la détection. Dans ce dernier cas, les fibres optiques sont plus souvent utilisées pour réaliser des capteurs distribués [24].

Les guides d’ondes plans 1D ou à confinement 2D, qui présentent un guidage à pertes sur de longues distances, sont de meilleurs candidats dans le cadre d’une détection plus localisée, au vu de leurs capacités d’intégration et de développement sur des plate-formes

miniaturisées et à large spectre de détection. Un guide d'onde plan 1D est constitué d'une couche centrale guidante (le *coeur* de hauteur  $h$  et d'indice de réfraction  $n_g$ ), en sandwich entre deux couches : la couche inférieure dite *substrat*, caractérisée par un indice de réfraction  $n_s$  et la couche supérieure, qu'on appelle le *superstrat* avec un indice de réfraction  $n_c$  (voir figure 1.1(b)). Lorsqu'il est à confinement bidimensionnel, le coeur entouré du superstrat sont déposés sur le superstrat comme illustré sur la figure 1.1(c)). Afin de favoriser le guidage de la lumière dans le coeur du guide d'onde plan (ou de la fibre optique), son indice de réfraction ( $n_g$ ) doit être supérieur aux deux indices de réfraction du substrat ( $n_s$ ) et du superstrat ( $n_c$ ) (ou à l'indice de réfraction de la gaine  $n_c$ ) .

### 1.1.1 Guide d'onde plan unidimensionnel

La propagation guidée de la lumière dans un guide d'onde plan (mais aussi dans une fibre optique) peut être étudiée dans le cadre de l'optique géométrique (réflexion totale interne) lorsque les dimensions et les distances de propagation sont largement supérieures à la longueur d'onde de propagation. Le chemin de la lumière dans le coeur du guide d'onde dépend fortement de l'angle d'incidence du faisceau lumineux entrant, qui détermine la réflexion et la réfraction aux niveau des deux interfaces coeur-substrat et coeur-superstrat. La réflexion totale interne de la lumière au niveau de ces deux interfaces est obtenue à partir des angles d'incidence critiques :

$$\theta_s = \arcsin\left(\frac{n_s}{n_g}\right), \quad \theta_c = \arcsin\left(\frac{n_c}{n_g}\right) \quad (1.1)$$

Ainsi :

- Si les indices de réfraction du substrat et du superstrat sont identiques, les deux angles critiques de l'interface inférieure et supérieure sont égaux ( $\theta_s = \theta_c$ ). Ces guides d'onde sont dits *symétriques*.
- Si les indices de réfraction du substrat et du superstrat sont différents (guide d'ondes plan *asymétrique*), les deux angles critiques obtenus ( $\theta_s$  et  $\theta_c$ , respectivement) sont différents pour les deux interfaces (inférieure et supérieure, respectivement).

·

Pour favoriser le guidage de la lumière dans le coeur et diminuer les pertes par réfraction aux interfaces, il faut évidemment imposer que l'angle d'incidence  $\theta$  dans le coeur au niveau de chaque interface soit supérieur à la fois aux deux angles critiques  $\theta_s$  et  $\theta_c$

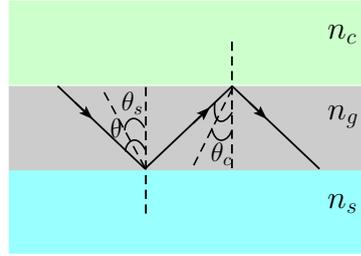


FIGURE 1.2 – Confinement de la lumière dans un guide d'onde plan 1D, avec  $\theta_s < \theta < \pi/2$  et  $\theta_c < \theta < \pi/2$ .

(tout en restant inférieur à  $\pi/2$ ). Dans ce cas le faisceau lumineux est totalement réfléchi aux interfaces le long du guide d'onde et un confinement de la lumière dans le cœur par réflexion totale interne est obtenu (figure 1.2).

Une seconde condition de propagation guidée du faisceau lumineux dans la couche du coeur impose que cette dernière ne puisse supporter qu'un ensemble discret de valeurs de l'angle d'incidence  $\theta$ , notées  $\theta_m$ . L'ensemble de ces valeurs caractérisent les modes guidés  $m$  décrits par leurs *constantes de propagation*  $\beta_m$  tel que :

$$\beta_m = k \sin(\theta_m) = k_0 n_g \sin(\theta_m) \quad (1.2)$$

où  $k = 2\pi/\lambda$  est le vecteur d'onde du mode guidé dans le coeur et  $k_0$  est le vecteur d'onde dans le vide.

Pour résumer, la propagation de la lumière dans un guide d'onde plan 1D est limitée par la condition donnée par l'équation (1.1) où l'angle d'incidence  $\theta_m$  de chaque mode guidé  $m$  doit vérifier les relations ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta_s = \arcsin\left(\frac{n_s}{n_g}\right) \leq \theta_m < \pi/2 \\ \theta_c = \arcsin\left(\frac{n_c}{n_g}\right) \leq \theta_m < \pi/2 \end{array} \right. \quad (1.3)$$

soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{n_s}{n_g}\right) \leq \sin(\theta_m) < 1 \\ \left(\frac{n_c}{n_g}\right) \leq \sin(\theta_m) < 1 \end{array} \right. \quad (1.4)$$

D'après l'équation (1.2), la valeur de la constante de propagation de chaque mode doit

aussi vérifier les relations suivantes :

$$\begin{cases} k_0 n_s \leq \beta_m < k_0 n_g \\ k_0 n_c \leq \beta_m < k_0 n_g \end{cases} \quad (1.5)$$

En introduisant, pour chaque mode guidé  $m$ , la notion d'indice effectif  $n_{\text{eff}_m}$  tel que :

$$n_{\text{eff}_m} = n_g \sin(\theta_m) = \frac{\beta_m}{k_0} \quad (1.6)$$

Les équations (1.5) et (1.6) permettent de réécrire la condition de propagation du mode guidé  $m$  comme suit :

$$\begin{cases} n_s \leq n_{\text{eff}_m} < n_g \\ n_c \leq n_{\text{eff}_m} < n_g \end{cases} \quad (1.7)$$

Les valeurs de  $n_{\text{eff}_m}$  vérifiant les relations (1.7) correspondent à des modes guidés, c-à-d à une réflexion totale interne dans la couche du coeur d'indice de réfraction  $n_g$ . Les autres valeurs de  $n_{\text{eff}_m}$ , qui ne vérifient pas ces relations correspondent à des modes non guidés qui s'échappent par réfraction dans les couches du substrat (modes de substrat) et/ou du superstrat (modes radiatifs).

### 1.1.2 Guide d'onde à réseau périodique - Résonances des Modes Guidés

La théorie des guides d'ondes diélectriques à réseau périodique est étroitement liée à l'apparition d'anomalie correspondant à de brusques variations (maxima et minima) d'intensité dans les spectres de transmission et de réflexion. Ces anomalies ont été mises en évidence, pour la première fois, par Wood dans le cas d'un réseau métallique illuminé par une source de lumière blanche [25]. Lord Rayleigh interpréta les anomalies observées par Wood en incidence rasante en les associant à l'apparition ou à la disparition de différents ordres de diffraction [26]. Par opposition aux anomalies de Rayleigh, Hessel et Onliner ont proposé un autre type d'anomalies, dites *anomalies de résonances*, dues à l'excitation d'une onde de surface [27]. Lors de l'excitation, l'énergie incidente est transférée et absorbée dans le cas des plasmons. Pour des guides d'onde à base de réseau périodique, l'énergie incidente est diffractée dans un des ordres de diffraction propagatifs de ce réseau. Le couplage entre un ordre de diffraction du réseau et un mode guidé se caractérise par une résonance à largeur de bande étroite, dite *Résonance de Mode Guidé* (GMR pour Guided Mode Resonance en anglais) ou *mode de fuite* (Leaky Mode en anglais). Cette ré-

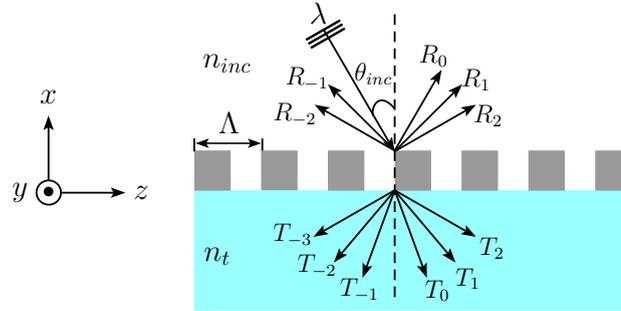


FIGURE 1.3 – Schéma de diffraction d'une onde lumineuse, de longueur d'onde  $\lambda$ , incidente avec un angle  $\theta_{inc}$ , par un réseau périodique de période  $\Lambda$ .  $n_{inc}$  et  $n_t$  sont les indices de réfraction du superstrat et du substrat, respectivement.  $R_i$  et  $T_i$  sont les ordres réfléchis et transmis, respectivement.

sonance a été observée pour la première fois par Mashev et Popov en 1985 dans le cadre de la diffraction d'ordre zéro de réseaux diélectriques [28]. Des pics peuvent être observés lorsque la composante selon l'axe  $Oz$  du vecteur d'onde d'une des ondes diffractées correspond à une des constantes de propagation du mode guidé (voir figure 1.3).

La diffraction est un phénomène caractéristique de l'interaction de la lumière avec une structure périodique dont les dimensions géométriques sont du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de la lumière incidente. Il ne peut donc pas être décrit dans le cadre de l'optique géométrique. La fameuse expérience des fentes de Young en est l'exemple le plus simple. Lorsque le nombre de fentes est augmenté et la distance entre elles est maintenue constante, on obtient un réseau périodique nanométrique. L'interaction de la lumière avec cette structure périodique provoque l'apparition d'ordres diffractés dans plusieurs directions [29, 30] comme illustré sur la figure 1.3.

L'étude de l'excitation de ces modes diffractés peut se faire selon deux approches différentes : l'approche optique et l'approche électromagnétique.

### 1.1.2.1 Approche optique

Dans le cas de réseaux périodiques, les directions de propagation des différents ordres diffractés (transmis et réfléchis) sont déterminées par les relations suivantes :

$$n_t \sin(\theta_m) = n_{inc} \sin(\theta_{inc}) \pm p \frac{\lambda}{\Lambda} \quad (1.8.a)$$

$$n_r \sin(\theta_m) = n_{inc} \sin(\theta_{inc}) \pm p \frac{\lambda}{\Lambda} \quad (1.8.b)$$

Le système d'équations (1.8) permet de déterminer les angles de diffraction  $\theta_m$  des modes diffractés d'ordre  $p$  en fonction de l'angle d'incidence ( $\theta_{inc}$ ) et des indices de réfraction des milieux d'incidence ( $n_{inc}$ ), de transmission ( $n_t$ ) et de réflexion  $n_r$ .

Dans le cas où il y'a couplage entre l'ordre  $p$  diffracté, vérifiant les équations (1.8), et le mode guidé  $m$  dans le cœur, on peut alors écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_0 n_{\text{eff}_m} = k_0 n_g \sin(\theta_m) = \beta_m \\ n_g \sin(\theta_m) = n_{inc} \sin(\theta_{inc}) \pm p \frac{\lambda}{\Lambda} \end{array} \right\} \implies n_{\text{eff}_p} = \left| n_{inc} \sin(\theta_{inc}) - p \frac{\lambda}{\Lambda} \right| \quad (1.9)$$

Des équations (1.7) et (1.9),  $n_{\text{eff}_p}$  doit être borné pour avoir des modes guidés dans le cœur :

$$\max[n_s, n_c] \leq n_{\text{eff}_p} < n_g \quad (1.10)$$

Enfin, la fusion des équations (1.9) et (1.10) permet d'obtenir la condition suivante :

$$\max[n_s, n_c] \leq \left| n_{inc} \sin(\theta_{inc}) - p \frac{\lambda}{\Lambda} \right| < n_g \quad (1.11)$$

L'équation (1.11) résume toute la théorie des guides d'ondes, à réseau périodique, excités par des modes diffractés. Elle relie les indices de réfraction des trois milieux (substrat, cœur et superstrat), l'angle d'incidence, l'ordre diffracté ( $p \neq 0$ ) ainsi que la longueur d'onde et la période du réseau. Elle permet également de déterminer la plage permise de la présence des longueurs d'onde des modes diffractés guidés. En effet, dans une structure constituée d'un réseau périodique sur une couche de même indice de réfraction, déposés sur un substrat et entourés par un superstrat (voir figure 1.4), le réseau périodique sert à coupler la lumière incidente et induire des modes diffractés et la couche au-dessous du réseau (avec un indice de réfraction élevé) sert à guider la lumière. Les longueurs d'onde des modes diffractés guidés dans le cœur du guide sont associées aux résonances GMR de la structure.

### 1.1.2.2 Approche électromagnétique

Pour des applications en optique intégrée, une description plus complète de la propagation de la lumière à travers un guide d'onde à réseau périodique nécessite le recours à l'approche électromagnétique. Dans le cas où les différentes couches diélectriques constituant le guide d'onde sont non magnétiques, et en l'absence de sources de charge et de densités de courant, les équations de Maxwell, qui décrivent la propagation d'une onde

électromagnétique dans un milieu d'indice de réfraction  $n$ , s'écrivent comme suit :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \quad (1.12)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0 \quad (1.13)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.14)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \varepsilon_0 n^2 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.15)$$

$\mu_0$ , et  $\varepsilon_0$  représentent la perméabilité et la permittivité du vide.

Les champs électrique  $\vec{E}$  et magnétique  $\vec{H}$ , associés à une telle onde se propageant selon l'axe ( $Oz$ ), ont pour expressions (sous leurs formes complexes) :

$$\begin{cases} \vec{E}(x, y, z) = \vec{E}(x, y) \exp^{i(\omega t - \beta_m z)} \\ \vec{H}(x, y, z) = \vec{H}(x, y) \exp^{i(\omega t - \beta_m z)} \end{cases} \quad (1.16)$$

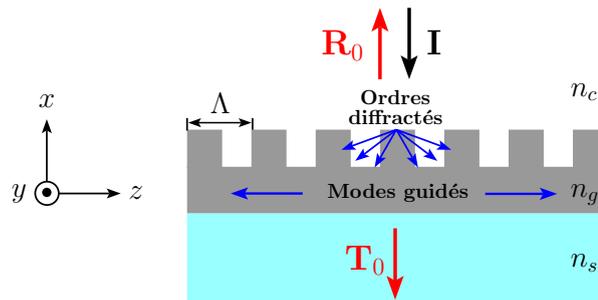


FIGURE 1.4 – Schéma d'un guide d'onde à réseau périodique avec une couche guidante planaire d'indice de réfraction  $n_g$ , déposés sur un substrat d'indice de réfraction  $n_s$  et éclairés par une onde incidente  $I$  dans le superstrat d'indice de réfraction  $n_c$ .  $R_0$  et  $T_0$  sont, respectivement la réflexion et la transmission d'ordre zéro.

Les équations (1.14) et (1.15) peuvent alors s'écrire comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_z}{\partial y} + i\beta E_y = -i\omega\mu_0 H_x \\ -i\beta E_x - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -i\omega\mu_0 H_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -i\omega\mu_0 H_z \end{array} \right. \quad (1.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H_z}{\partial y} + i\beta H_y = i\omega\varepsilon E_x \\ -i\beta H_x - \frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega\varepsilon E_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = i\omega\varepsilon E_z \end{array} \right. \quad (1.18)$$

Dans le cas du guide d'onde illustré sur la figure 1.4, l'onde optique qui se propage selon ( $Oz$ ) est confinée dans la direction ( $Ox$ ) et le profil d'indice est constant dans la direction ( $Oy$ ). Par conséquent, les champs électromagnétiques sont indépendants de la direction  $Oy$  ( $\frac{\partial}{\partial y} = 0$ ). On aboutit alors aux deux systèmes d'équations suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_x = \frac{-\beta}{\omega\mu_0} E_y \\ -i\beta E_x - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -i\omega\mu_0 H_y \\ H_z = \frac{i}{\omega\mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} \end{array} \right. \quad (1.19)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} i\beta H_y = i\omega\varepsilon E_x \\ -i\beta H_x - \frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega\varepsilon E_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} = i\omega\varepsilon E_z \end{array} \right. \quad (1.20)$$

En optique intégrée, la polarisation constitue un paramètre important qui a une influence sur la réponse optique des guides d'ondes. On distingue deux catégories de modes guidés que sont les modes transverse électrique (TE) et transverse magnétique (TM).

### Mode guidé TE

Pour le mode TE, la répartition du champ électrique est perpendiculaire au plan de propagation de l'onde ( $E_x = 0$ ,  $E_z = 0$  et  $H_y = 0$ ) (voir figure 1.5). Les systèmes d'équa-

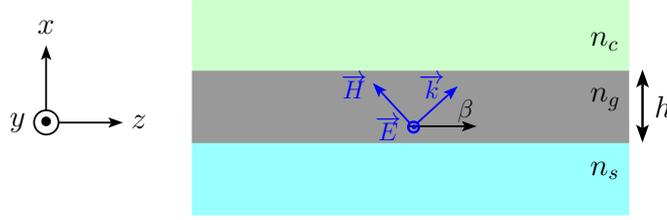


FIGURE 1.5 – Direction des champs électrique et magnétique pour la propagation du mode guidé Transverse Électrique (TE).

tions (1.19) et (1.20) se simplifient alors et s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} H_x = \frac{-\beta}{\omega \mu_0} E_y \\ H_z = \frac{i}{\omega \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} \end{cases} \quad (1.21)$$

$$-i\beta H_x - \frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega \varepsilon E_y \quad (1.22)$$

En remplaçant les expressions de  $H_x$  et  $H_z$  du système d'équations (1.21) dans l'équation (1.22), on obtient l'équation d'onde suivante :

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + (k_0^2 n^2 - \beta^2) E_y = 0 \quad (1.23)$$

avec  $k_0 = \omega/c = \omega\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$ . De l'équation (1.23) et en remplaçant  $\beta_m$  par son expression (équation (1.6)), on obtient l'équation d'onde :

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n(x)^2 - n_{\text{eff}}^2) E_y = 0 \quad (1.24)$$

Dans le cas de notre guide d'onde, le profil de l'indice de réfraction varie par rapport à la hauteur  $h$  de la couche guidante (cœur) d'indice  $n_g$  comme suit :

$$n(x) = \begin{cases} n_c & \text{pour } h < x \\ n_g & \text{pour } 0 \leq x \leq h \\ n_s & \text{pour } x \leq 0 \end{cases} \quad (1.25)$$

L'équation d'onde (1.24) devient alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} - \gamma_c^2 E_y = 0 & \text{pour } h < x & (\text{superstrat}) \\ \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k_f^2 E_y = 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq h & (\text{coeur}) \\ \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} - \gamma_s^2 E_y = 0 & \text{pour } x \leq 0 & (\text{substrat}) \end{cases} \quad (1.26)$$

avec :

$$\begin{cases} \gamma_c^2 = \beta^2 - k_0^2 n_c^2 \\ k_f^2 = k_0^2 n_g^2 - \beta^2 \\ \gamma_s^2 = \beta^2 - k_0^2 n_s^2 \end{cases}$$

Les valeurs de la composante  $E_y$  du champ électrique dans le superstrat, le cœur et le substrat sont optimisées par la résolution du système d'équations (1.26) comme suit :

$$E_y = \begin{cases} A \exp^{-\gamma_c x} & \text{pour } h < x \\ B \exp^{ik_f x} + C \exp^{-ik_f x} & \text{pour } 0 \leq x \leq h \\ D \exp^{-\gamma_s x} & \text{pour } x \leq 0 \end{cases} \quad (1.27)$$

Les conditions aux limites exigent que  $E_y$  et  $\partial E_y / \partial x$  soient continues aux interfaces superstrat-cœur ( $x = h$ ) et cœur-substrat ( $x = 0$ ). Cela donne lieu à quatre équations reliant les paramètres constants  $A, B, C$  et  $D$  et la constante de propagation  $\beta_m$ . Par conséquent, cinq quantités inconnues sont déterminées d'un ensemble de quatre équations. La résolution de cet ensemble d'équations produit l'équation suivante [31] :

$$\tan(k_f h) = \frac{k_f (\gamma_s + \gamma_c)}{k_f^2 - \gamma_s \gamma_c} \quad (1.28)$$

en rappelant que  $h$  est la hauteur de la couche guidante et que :

$$\begin{cases} \gamma_s = (\beta_m^2 - k_0^2 n_s^2)^{1/2} \\ k_f = (k_0^2 n_g^2 - \beta_m^2)^{1/2} \\ \gamma_c = (\beta_m^2 - k_0^2 n_c^2)^{1/2} \\ \beta_m = k_0 n_{\text{eff}} = k_0 \left[ n_{\text{inc}} \sin(\theta_{\text{inc}}) + p \frac{\lambda}{\Lambda} \right] \end{cases}$$

L'équation (1.28) est considérée comme la *relation de dispersion* des guides d'ondes pour la configuration TE. Elle est appliquée surtout pour les guides d'ondes asymétriques ( $n_s \neq n_c$ ). Cette relation permet de relier tous les paramètres constituant le guide d'onde

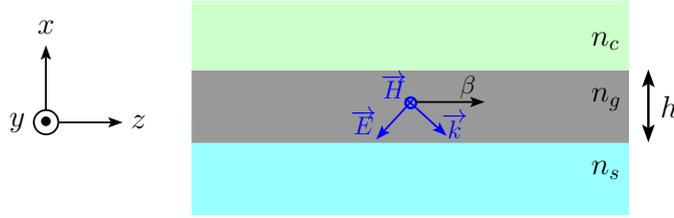


FIGURE 1.6 – Direction des champs électrique et magnétique pour la propagation du mode guidé Transverse Magnétique (TM).

(indices de réfraction des différentes couches, hauteur de la couche guidante et constante de propagation définie en fonction de la valeur de l'entier  $p$  correspondant à l'ordre du mode diffracté).

### Mode guidé TM

Le mode guidé associé à la polarisation TM correspond à un champ magnétique perpendiculaire au plan de propagation de l'onde ( $H_x = 0$ ,  $H_z = 0$ ,  $E_y = 0$ ) (voir figure 1.6). Les équations (1.19) et (1.20) s'écrivent alors comme suit :

$$i\beta E_x - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -i\omega \mu_0 H_y \quad (1.29)$$

$$\begin{cases} i\beta H_y = i\omega \varepsilon E_x \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} = i\omega \varepsilon E_z \end{cases} \quad (1.30)$$

L'équation d'onde obtenue pour le mode guidé TM est légèrement différente de celle du mode TE en raison du facteur  $(1/n^2)$  dans la continuité de la composante du champ magnétique dérivé. Elle s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{n^2} \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) + \left( k_0^2 - \frac{\beta^2}{n^2} \right) H_y = 0 \quad (1.31)$$

En remplaçant  $\beta_m$  par son expression dans l'équation (1.31), on aboutit à :

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} + k_0^2 (n(x)^2 - n_{\text{eff}}^2) H_y = 0 \quad (1.32)$$

En tenant en compte de la variation de l'indice de réfraction et en utilisant la même approche que pour le mode TE, l'équation de dispersion du mode TM est alors décrite par :

$$\tan(k_f h) = \frac{k_f (\tilde{\gamma}_s + \tilde{\gamma}_c)}{k_f^2 - \tilde{\gamma}_s \times \tilde{\gamma}_c} \quad (1.33)$$

tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_f = (k_0^2 n_g^2 - \beta_m^2)^{1/2} \\ \tilde{\gamma}_c = \frac{n_g^2}{n_c^2} \gamma_c = \frac{n_g^2}{n_c^2} (\beta_m^2 - k_0^2 n_c^2)^{1/2} \\ \tilde{\gamma}_s = \frac{n_g^2}{n_s^2} \gamma_s = \frac{n_g^2}{n_s^2} (\beta_m^2 - k_0^2 n_s^2)^{1/2} \\ \beta_m = k_0 n_{eff} = k_0 (n_{inc} \sin(\theta_{inc}) + p \frac{\lambda}{\Lambda}) \end{array} \right.$$

Les équations (1.28) et (1.33) sont les équations de dispersion pour les polarisations TE et TM correspondant aux modes guidés  $TE_{p,m}$  et  $TM_{p,m}$  ( $p$  et  $m$  sont, respectivement, l'ordre diffracté et le mode guide dans le cœur). Ainsi, pour ( $p = \pm 1$  et  $m = 0$ ) la résonance GMR correspondante est dite résonance du mode fondamental.

Les résonances des modes guidés supérieurs ( $m > 0$ ) sont déterminées par les équations ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{ll} k_f h = \arctan\left(\frac{k_f (\gamma_s + \gamma_c)}{k_f^2 - \gamma_s \times \gamma_c}\right) + m \pi & \text{mode TE} \\ k_f h = \arctan\left(\frac{k_f (\tilde{\gamma}_s + \tilde{\gamma}_c)}{k_f^2 - \tilde{\gamma}_s \times \tilde{\gamma}_c}\right) + m \pi & \text{mode TM} \\ m = 1, 2, 3, \dots & \end{array} \right. \quad (1.34)$$

Toutes les résonances guidées GMR permises dans le cœur, ainsi que la plage des longueurs d'ondes associées à chaque résonance (équation (1.11)) sont identifiées grâce à l'équation (1.34).

Dans la littérature, plusieurs travaux en rapport avec la propagation des modes guidés GMR ont été publiés [7, 10]. Dans [10], les résonances des modes guidés ont été identifiées analytiquement par l'équation (1.34) et numériquement par des codes de calcul se basant sur la méthode RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis). La structure proposée est un guide d'onde à réseau périodique (de période  $\Lambda = 350$  nm) dont les indices de réfraction des différentes couches ont pour valeurs  $n_s/(n_g = n_w)/n_c = 1.6/2.4/1$  (voir figure 1.7).

Dans le cas d'une incidence normale ( $\theta_{inc} = 0^\circ$ ), la plage permise des longueurs

d'onde vérifie la condition de propagation (équation 1.11) qui devient pour  $p = \pm 1$  :

$$[n_s, n_c] \leq \frac{\lambda}{\Lambda} < n_g \implies 1.6 \leq \frac{\lambda}{\Lambda} < 2.4 \quad (1.35)$$

Cette condition est bien vérifiée sur la figure 1.8 où la longueur d'onde normalisée ( $\lambda/\Lambda$ ) du mode fondamental est bornée entre  $n_s$  et  $n_g$ .

### 1.1.3 Influence des paramètres physiques et géométriques sur la réponse des guides d'ondes GMR

Dans la section précédente nous avons présenté l'équation de dispersion (équation (1.34)) pour les deux polarisations TE et TM permettant de déterminer les résonances des modes guides GMR dans le guide d'onde diélectrique. Cette relation relie tous les paramètres physiques et géométriques du guide d'onde que sont les indices de réfraction ( $n_s, n_g, n_c$ ), l'angle incidence, la période du réseau, la hauteur de la couche guidante, le facteur de remplissage  $f$  (défini comme le rapport de la largeur des lignes du réseau et de sa période) et la polarisation. La réponse optique de la structure GMR dépend fortement de la variation de ces différents paramètres.

#### 1.1.3.1 Effet de la polarisation

La polarisation est un facteur important dans l'expression de la dispersion des modes guidés GMR. Cela s'explique par la forte dépendance des ondes lumineuses dans la struc-

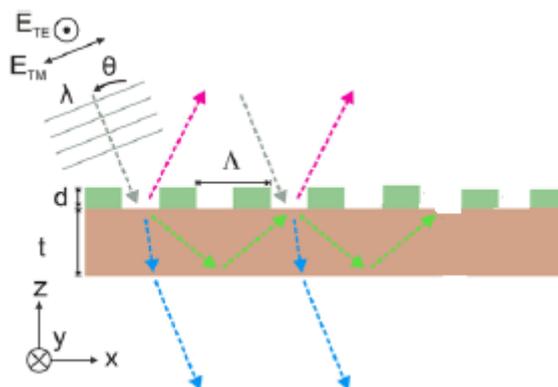


FIGURE 1.7 – Structure composée d'une couche guidante de hauteur  $t$  et d'indice de réfraction  $n_g = n_w = 2.4$  illuminée en incidence normale ( $\theta_{inc} = 0^\circ$ ). Les indices de réfraction du substrat et du superstrat sont, respectivement,  $n_s = 1.6$  et  $n_c = 1$  [10].

ture sublongueur d'onde à la polarisation due à la modulation spatiale périodique.

Wang et Magnusson ont étudié l'effet de la polarisation (TE et TM) sur les résonances GMR d'un guide d'onde plan basique (de hauteur  $h$ ) à réseau 1D périodique (de période  $\Lambda$ ) pour des applications dans le filtrage optique [7]. Dans cette étude, les auteurs ont constaté un déplacement vers les grandes longueurs d'onde de la résonance GMR pour la polarisation TE par rapport à celle obtenue pour la polarisation TM (figure 1.9). A titre indicatif, un décalage d'une vingtaine de nanomètres a été observé pour le mode

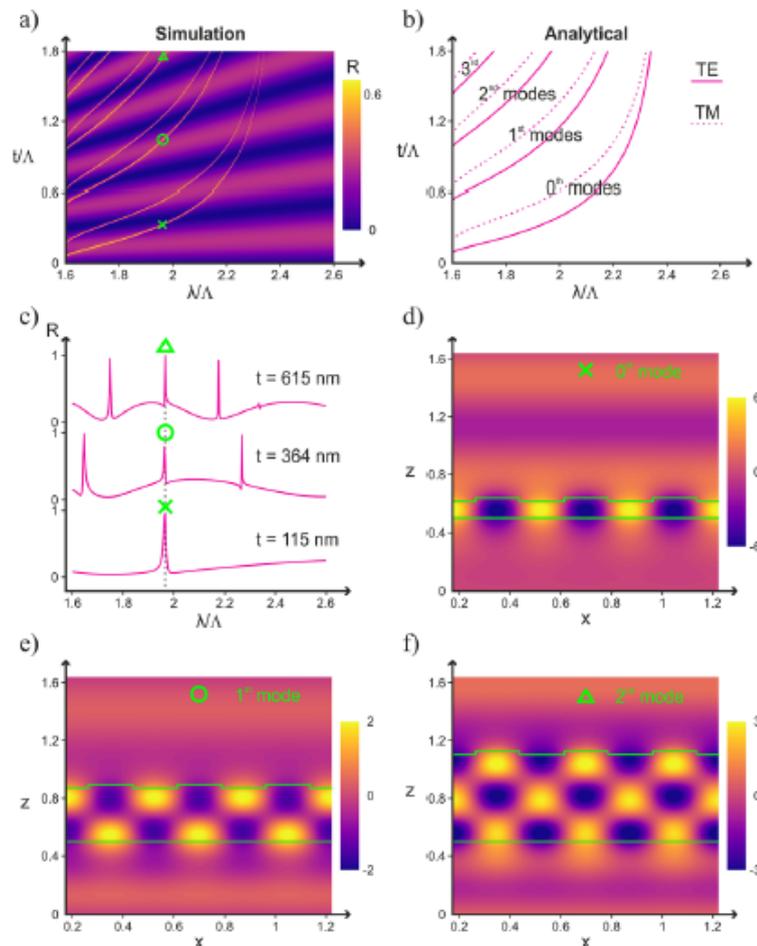


FIGURE 1.8 – Calculs (a) RCWA et (b) analytiques (équation (1.34)) de la réflectance à différentes longueurs d'onde et hauteurs  $t$  de la couche guidante pour les deux polarisation TE et TM. (c) Spectres RCWA de réflectance pour trois hauteurs  $t = 115, 364, 615$  nm dans le cas d'une polarisation TE. (d-f) Profils de champ électrique en régime permanent ( $\Re(E_y/E_0)$ ), en polarisation TE, correspondant respectivement à la résonance du mode fondamental, du premier et du deuxième mode GMR avec la même longueur d'onde  $\lambda = 687$  nm pour chacune des trois hauteurs ci-dessus (extrait de [10]).

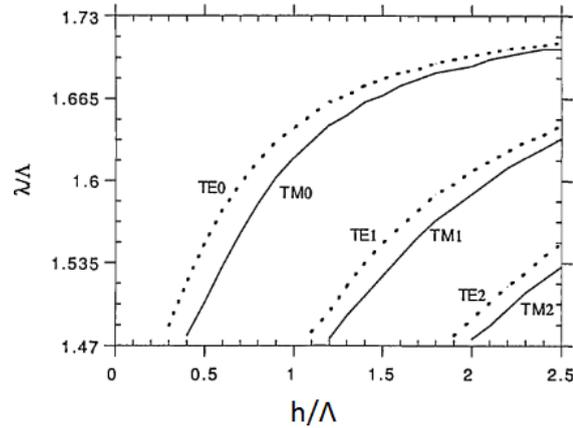


FIGURE 1.9 – Évolution de la position du pic de résonance GMR normalisée à la période du réseau en fonction de la hauteur normalisée à la période du réseau pour les deux polarisations TE et TM [7].

fondamental ( $p = 1$  et  $m = 0$ ) :  $\lambda(TE_{1,0}) - \lambda(TM_{1,0}) = 24$  nm.

### 1.1.3.2 Effet de la hauteur de la couche guidante

L'effet de ce paramètre a fait l'objet de plusieurs études montrant l'influence de l'augmentation de la hauteur de la couche guidante sur l'apparition de résonances GMR d'ordres supérieurs [7, 10]. Dans l'étude comparative de [10], les spectres de réflexion mettent en évidence l'effet de la hauteur de la couche guidante sur la position et le nombre de modes GMR (d'ordre supérieurs) vérifiant l'équation (1.34). Cette étude montre aussi que différents modes GMR ( $m = 0, 1, 2$  avec  $p = 1$ ) peuvent apparaître à la même longueur d'onde pour différentes hauteurs de la couche guidante (voir figure 1.8-c). Pour une même longueur d'onde ( $\lambda = 678$  nm) sont associés différents ordres de résonance GMR pour différentes hauteurs. Pour une hauteur  $t = 115$  nm, c'est le mode fondamental qui est excité tandis que pour des hauteurs plus élevées, des modes d'ordre supérieur sont excités (le premier mode pour  $t = 364$  nm et le deuxième mode pour  $t = 615$  nm). Notons enfin que l'étude de [10] a mis en évidence des résonances GMR à des longueurs d'onde ( $\lambda_{GMR}$ ) supérieures à celle de l'anomalie de Rayleigh ( $\lambda_R$ ) dans le substrat ou le superstrat, confirmant ainsi les résultats de [7] :

$$\lambda_{GMR} > n_{s(c)} \frac{\lambda_R}{p} \quad (1.36)$$

### 1.1.3.3 Effet de l'angle incidence

Comme tous les guides d'onde, les guides d'onde à résonance GMR dépendent de la variation de l'angle d'incidence  $\theta_{inc}$ . Cette dépendance est illustrée par la variation de la plage permise des longueurs d'onde de résonance GMR en fonction de la valeur de l'angle d'incidence. Un déplacement des résonances GMR vers les grandes longueurs d'onde est observé pour des valeurs plus élevées de  $\theta_{inc}$  comme illustré sur la figure 1.10.

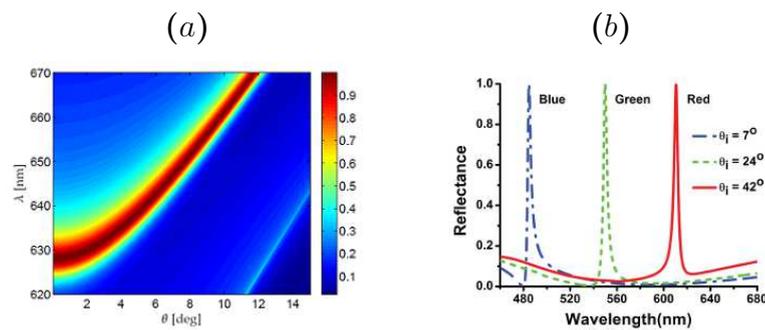


FIGURE 1.10 – (a) Calcul FMM de la longueur d'onde de résonance en réflectance pour différents angles d'incidence dans le cas d'une polarisation TM [32]. (b) Spectres RCWA de la réflectance pour différents angles d'incidence [33].

Dans [34], la dépendance de la position de la longueur d'onde GMR avec l'angle d'incidence ( $\theta_{inc} = 0^\circ, 10^\circ$ ) pour différents ordres diffractés ( $p = \pm 1$ ) dans le calcul du mode fondamental avec les deux polarisations TE et TM par l'équation (1.34) a été étudiée (voir figure 1.11). L'étude montre que pour une incidence normale ( $\theta_{inc} = 0^\circ$ ) et une valeur  $p = \pm 1$  de l'ordre diffracté, le mode propagé dans le guide d'onde est le mode fondamental ( $P_0$ ). Pour une incidence oblique ( $\theta_{inc} = 10^\circ$ ), deux modes différents ont été obtenus (le mode  $P_1$  correspondant à l'ordre diffracté  $p = +1$  et le mode  $P_2$  correspondant à l'ordre diffracté  $p = -1$ ).

### 1.1.3.4 Effet du facteur de remplissage

Il a été démontré que l'augmentation du facteur de remplissage  $f$  d'une structure sublongueur d'onde déplaçait le pic de résonance GMR vers les plus grandes longueurs d'onde [35]. Ce déplacement du pic de résonance s'accompagnait d'une diminution de la largeur à mi-hauteur comme illustré sur la figure 1.12. Cela peut s'expliquer par la diminution de l'écart des fentes formées par le réseau de diffraction.

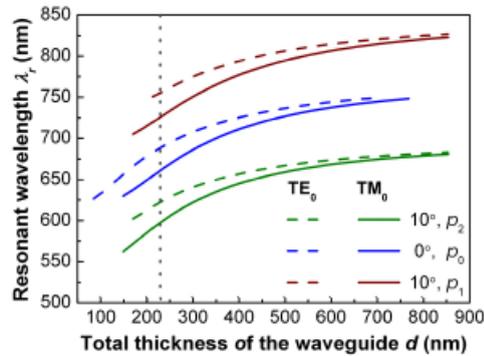


FIGURE 1.11 – Dépendance de la résonance GMR du mode fondamental ( $TE_0$  et  $TM_0$ ) pour différentes valeurs d'ordres diffractés ( $p = \pm 1$ ) et pour deux angles incidentes  $\theta_{inc} = 0^\circ$  et  $\theta_{inc} = 10^\circ$  en fonction de la hauteur de la couche guidante pour les deux polarisations TE et TM [34] obtenus par l'équation (1.34).

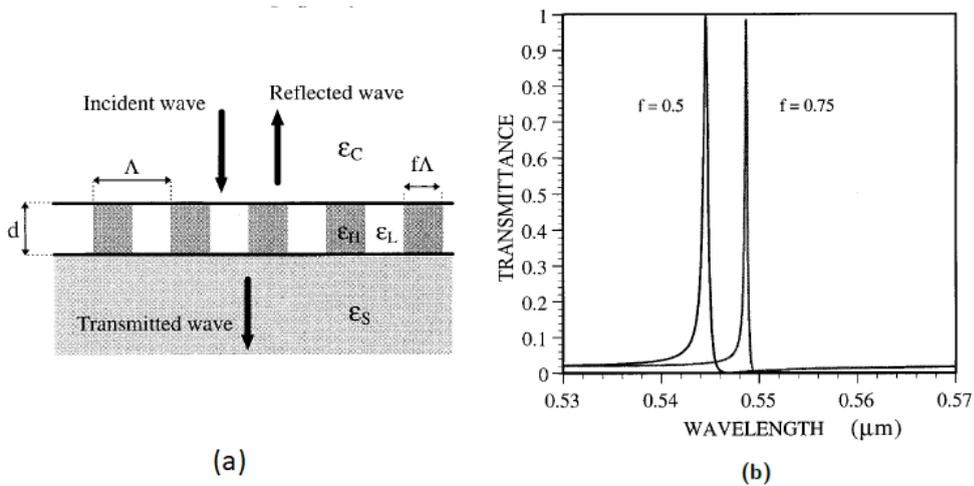


FIGURE 1.12 – (a) Guide d'onde plan 1D de hauteur  $d$ , formé par un réseau rectangulaire ayant un indice élevé ( $\epsilon_H$ ) et des fentes caractérisées par un indice faible ( $\epsilon_L$ ) déposé sur un substrat d'indice ( $\epsilon_s$ ). (b) Spectres de transmission pour deux différentes valeurs du facteur de remplissage [35].

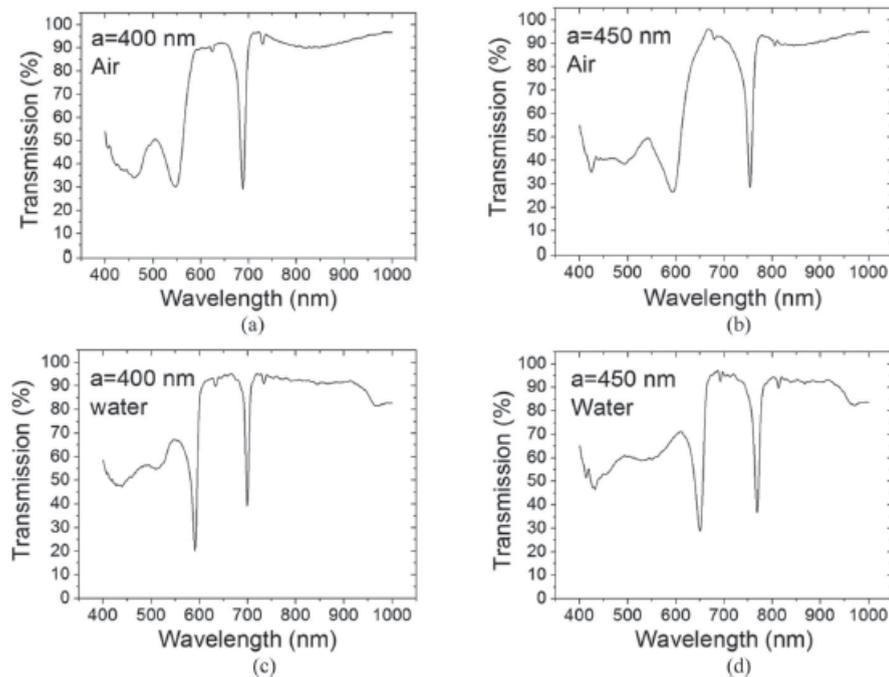


FIGURE 1.13 – Spectres RCWA de la transmission pour deux superstrats différents (air et eau) et pour deux périodes différentes [36]

### 1.1.3.5 Effet de la période

La période du réseau de diffraction du guide d'onde a aussi une influence sur la résonance GMR. La variation de la période impacte la plage permise des résonances GMR comme le montre l'équation (1.11). L'effet de la période sur la résonance GMR a fait l'objet de plusieurs études comme celles de [36]. Dans cette étude, les résultats montrent que l'augmentation de la période (de  $a = 400$  nm à  $a = 450$  nm), pour deux superstrats différents (air et eau), a pour conséquence le déplacement vers les grandes longueurs d'onde de la position de résonance GMR, confirmant ainsi les prédictions théoriques de l'équation (1.11) (voir figure 1.13). Par conséquent, la zone permise de résonance GMR en dépend fortement.

### 1.1.3.6 Effet de l'indice de réfraction

**Indice de réfraction du substrat :** Comme la relation de dispersion dépend de l'indice de réfraction du substrat ( $n_s$ ), les auteurs de [12] ont étudié l'influence de ce paramètre sur la position de la résonance GMR (figure 1.14). Les résultats de leur étude montrent que l'augmentation de l'indice de réfraction du substrat permet de déplacer la résonance GMR

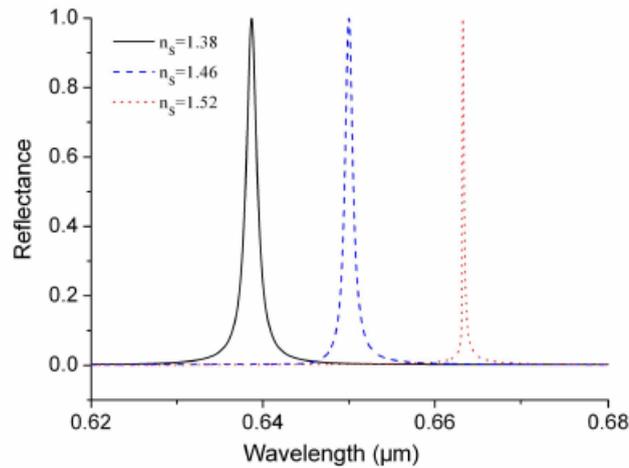


FIGURE 1.14 – Spectre de réflectance pour différents indices de réfraction du substrat [12]

vers les plus grandes longueurs d'ondes. Il en ressort aussi que les pics de résonances GMR deviennent plus fins pour des valeurs plus élevées de  $n_s$  et, par conséquent, plus proches de  $n_g$ . Cela peut s'expliquer par la diminution de l'écart d'indices aux bords (interface cœur-substrat).

**Indice de réfraction du superstrat :** Dans le travail de [36], la dépendance de la résonance GMR par rapport à l'indice de réfraction du superstrat, pour les deux polarisations TE et TM de l'onde incidente, a été étudiée. Les spectres de transmission tracés pour deux types de superstrat (eau et air) mettent en évidence un déplacement des résonances GMR vers les plus grandes longueurs d'ondes lorsque la valeur de l'indice du superstrat augmentait (voir figure 1.15). Cela est dû au déplacement de la plage permise tel que prédit théoriquement par l'équation (1.11).

**Indice de réfraction de la couche guidante :** L'augmentation de l'indice de réfraction de la couche guidante influe grandement sur la plage permise des longueurs d'ondes des résonances GMR [9]. Un déplacement vers les plus grandes longueurs d'ondes est constaté pour de grandes valeurs de  $n_g$  comme l'illustre la figure 1.16. On y remarque un élargissement des pics de résonance qui serait associé au confinement d'énergie qui augmenterait lorsque l'écart d'indices de réfraction aux bords (interfaces cœur-substrat et cœur-superstrat) est plus élevé. Des modes supérieurs vont aussi apparaître avec l'augmentation de la hauteur de la couche guidante. De cette étude, il en ressort aussi que

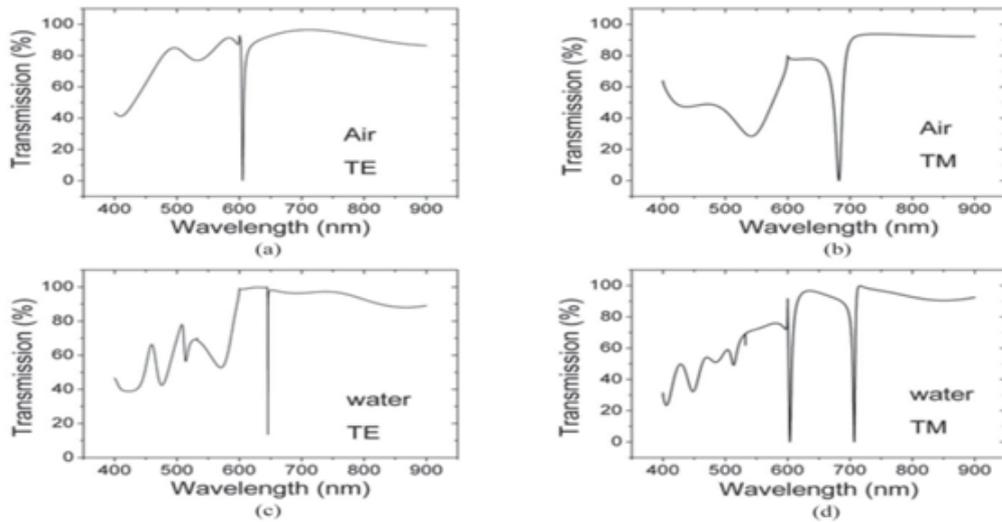


FIGURE 1.15 – Calcul de transmission pour les deux polarisations TE et TM pour deux milieux extérieurs différents (eau et air) [36].

l'indice de réfraction du cœur a une influence sur la position de résonance GMR ainsi que sur les modes propagatifs permis dans la couche guidante. Rappelons que la structure utilisée dans les travaux précédemment cités [9], est composée d'un réseau de diffraction et d'une couche guidante avec un indice  $n_g$  plus élevé que l'indice du substrat et du superstrat (figure 1.17-a). Le réseau périodique est utilisé pour induire des modes diffractés afin d'exciter des modes guidés dans la couche guidante.

Un autre type de guide d'onde GMR a été proposé avec une structure diélectrique composée uniquement d'un réseau périodique induisant en même temps la diffraction et le guidage de la lumière. Dans ce type de guide d'onde, le réseau sub-longueur d'onde ayant un indice de réfraction élevé est directement déposé sur un substrat et entouré par un superstrat (voir figure 1.17-b). La présence et l'absence de la couche guidante influe sur l'indice de réfraction effectif  $n_{\text{eff}}$  (équation (1.6)). En effet, dans le cas d'absence de la couche guidante, l'indice effectif est le même pour les directions parallèles aux rainures du réseau, mais il est différent pour les directions normales. Le profil d'indice de réfraction dans la direction perpendiculaire du réseau n'est plus constant. Ce problème a été traité par l'introduction d'un autre indice, dit *indice de réfraction moyen*  $n_{\text{moy}}$  [37]. Le calcul de cet indice moyen est effectué à l'aide de l'indice de réfraction dit *ordinaire*  $n_o$  et de l'indice de réfraction dit *extraordinaire*  $n_e$  donnés par la méthode des milieux effectifs

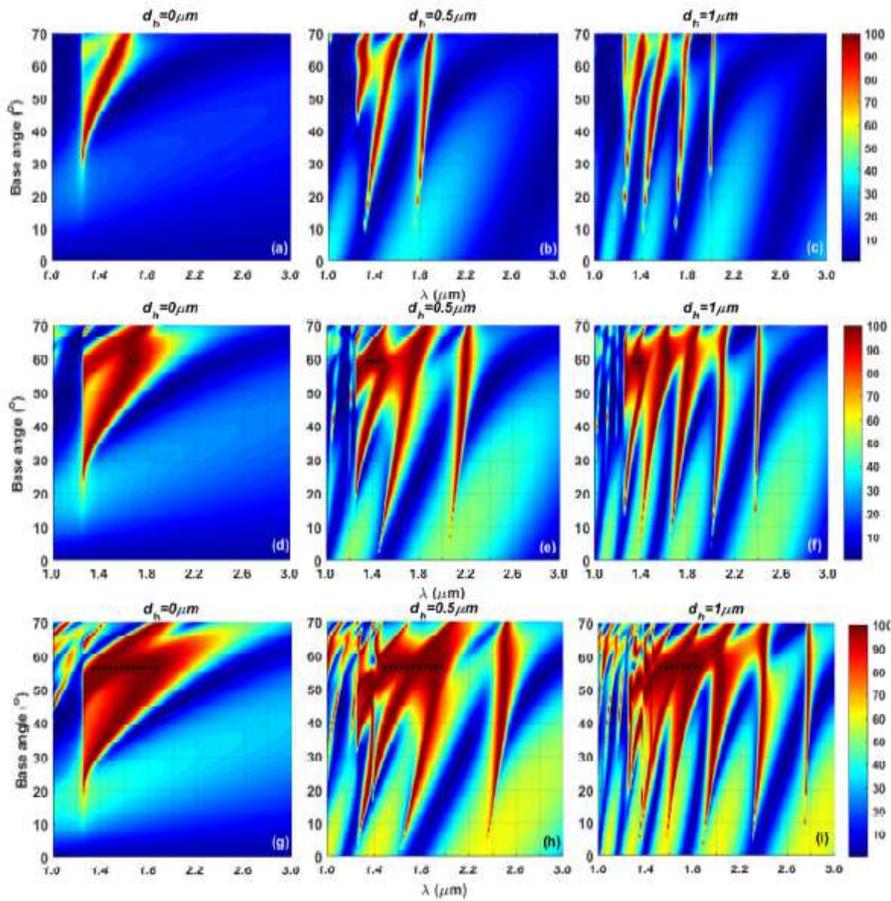


FIGURE 1.16 – Variation des pics de réflexion pour différents indices de réfraction de la couche guidante : (a-c)  $n_g = 1.5$ , (d-f)  $n_g = 3$  et (g-i)  $n_g = 3.48$  et pour différentes hauteurs de la couche guidante ( $d_h = 0 - 1 \mu\text{m}$ ). [9].

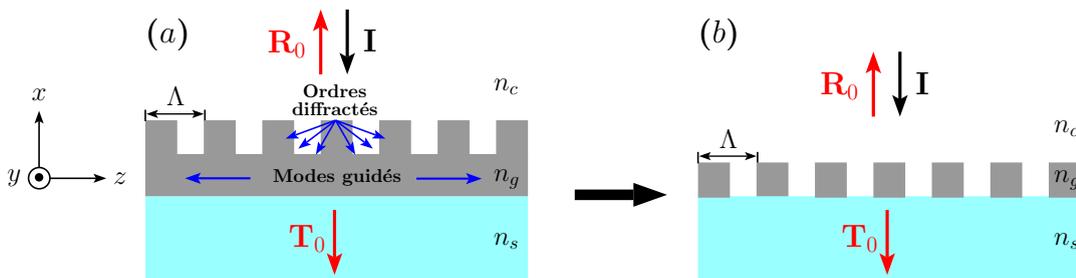


FIGURE 1.17 – (a) Structure composée d'un réseau de diffraction et d'une couche guidante avec un indice de réfraction  $n_g$  déposé sur un substrat d'indice de réfraction  $n_s$ . (b) Structure contenant un réseau périodique avec un indice de réfraction  $n_g$  déposé sur un substrat d'indice de réfraction  $n_s$ .

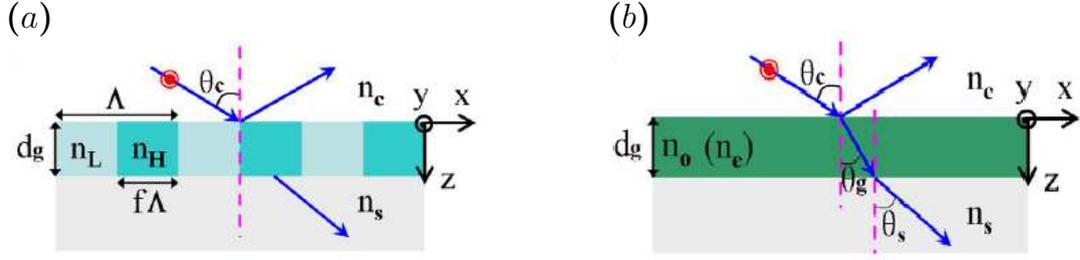


FIGURE 1.18 – Guide d'onde 1D : (a) Discontinuité d'indice ( $n_H, n_L$ ) dans une couche de hauteur  $d_g$ ; (b) Structure équivalente avec un indice de réfraction homogène ( $n_o, n_e$ ) [37]

(EMT pour Effective Media Theory) [38] :

$$\begin{cases} n_o = [n_g^2 f + n_c^2 (1 - f)]^{\frac{1}{2}} \\ n_e = [\frac{f}{n_g^2} + \frac{1 - f}{n_c^2}]^{-\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (1.37)$$

D'autre part, comme le guide dépend fortement de la polarisation de la lumière, cela implique l'introduction de deux indices de réfraction moyens par rapport aux polarisations TE et TM. Dans le cas général d'une incidence oblique avec un angle d'incidence  $\theta_c$  (voir figure 1.18-a), la valeur de l'indice de réfraction ordinaire est attribuée à la valeur de l'indice de réfraction moyen par rapport à la polarisation TE comme suit :

$$n_{moyTE} = n_o = [n_g^2 f + n_c^2 (1 - f)]^{\frac{1}{2}} \quad (1.38)$$

La valeur de l'indice de réfraction moyen par rapport à la polarisation TM est donnée par la relation suivante :

$$n_{moyTM} = \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \sin^2(\theta_g) + n_o^2 \cos^2(\theta_g)}} \quad (1.39)$$

tel que :

$$\theta_g = \arctan\left[\frac{n_o n_e \sin(\theta_c)}{\sqrt{n_e^2 n_o^2 - n_e^2 n_c^2 \sin^2(\theta_c)}}\right]$$

Dans le cas particulier d'une incidence normale ( $\theta_g = \theta_c = 0$ ), l'indice de réfraction moyen pour la polarisation TM devient égal à l'indice de réfraction extraordinaire ( $n_{moyTM} = n_e$ ). La discontinuité d'indice de réfraction dans la direction perpendiculaire au réseau va être remplacée par une structure équivalente constituée d'une couche homogène d'indice  $n_{moy}$  (figure 1.18-b).

Si, comme énoncé précédemment, la propagation des modes permis dans le cœur est gouvernée par l'équation de dispersion (1.34) qui dépend évidemment de l'indice de réfraction  $n_g$  de la couche guidante, les équations de dispersion pour les deux polarisations, dans le cas de guides d'ondes sans couche guidante, sont modifiées. L'indice de réfraction  $n_g$  est remplacé par les indices moyens  $n_{moyTM}$  et  $n_{moyTE}$ . Des modifications sont aussi portées sur l'équation de la constante de propagation, qui décrit la plage permise de  $\lambda_{GMR}$ , comme suit :

$$\begin{cases} k_f h = \arctan\left[\frac{k_f(\gamma_s + \gamma_c)}{k_f^2 - \gamma_s \gamma_c}\right] + \vartheta \pi & \text{pour TE} \\ k_f h = \arctan\left[\frac{k_f(\tilde{\gamma}_s + \tilde{\gamma}_c)}{k_f^2 - \tilde{\gamma}_s \tilde{\gamma}_c}\right] + \vartheta \pi & \text{pour TM} \end{cases} \quad (1.40)$$

tel que :

$$\begin{cases} k_f = (k^2 n_{moy(TE/TM)}^2 - \beta^2)^{1/2} \\ \max[n_s, n_c] \leq |n_{inc} \sin(\theta_{inc}) - p \frac{\lambda}{\Lambda}| < n_{moy(TE/TM)} \end{cases} \quad (1.41)$$

### 1.1.3.7 Effet de la forme

La forme géométrique du réseau périodique influe sur la position de la résonance GMR et les modes propagés dans la couche guidante. Plusieurs travaux ont étudié l'effet de différentes géométries du réseau périodique (figure 1.19). Il a ainsi été mis en évidence que le passage d'une forme rectangulaire à une forme sinusoïdale permettait d'éliminer la dépendance de la résonance GMR à la polarisation (TE ou TM) de l'onde incidente [39]. Dans une autre étude, la forme triangulaire a été proposée pour améliorer le spectre de réflexion de la résonance GMR [9]. Les auteurs de [40] ont utilisé la forme sphérique pour améliorer la détection d'un capteur d'humidité.

### 1.1.4 État lié dans le continuum (BIC)

Les états liés dans le continuum font généralement référence au phénomène d'un ou de quelques états liés discrets intégrés dans un spectre continu d'états étendus. Le terme BIC (pour Boundstate In Continuum) fut introduit pour la première fois en 1926 par Neumann et Winger qui ont construit un potentiel quantique artificiel pour supporter un état électronique dont l'énergie est supérieure au seuil du continuum [41]. Même si la proposition originale de Neumann et Wigner n'a jamais été réalisée en pratique, d'autres mécanismes

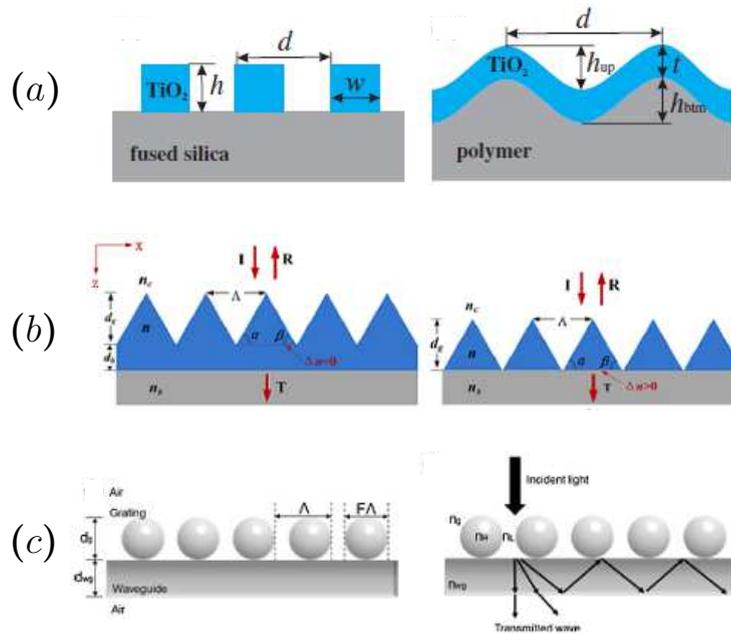


FIGURE 1.19 – Différentes géométries du réseau périodique : (a) forme rectangulaire et sinusoïdale [39]; (b) forme triangulaire avec et sans la couche guidante [9] et; (c) forme sphérique [40].

et systèmes de formation de BIC ont été suggérés théoriquement et démontrés expérimentalement [42–44].

La figure 1.20 présente différents modes pouvant être excités dans un système ouvert. On y associe la couleur bleue aux modes du continuum. En dehors de ce continuum se trouvent des niveaux discrets d'états conventionnels liés (présentés en vert) qui sont des modes hautement localisés et qui ne présentent pas de canaux pour être rayonnés. En électronique, de tels modes peuvent être vus comme les électrons liés d'un atome (à des énergies négatives). En nanophotonique, ces modes sont des modes confinés qui ne peuvent pas être excités (modes sombres; sous la ligne claire). A l'intérieur du continuum, on peut trouver des résonances qui ressemblent localement à un état lié mais qui, en fait, se couplent aux ondes étendues et s'échappent. Ces modes sont dits *modes de fuite* (présentés en orange). Les BICs (représentés en rouge) sont parfaitement localisés et ne présentent aucune fuite dans le continuum. Cela implique un temps d'interaction lumière-matière infini et donc un facteur de qualité  $Q$  qui tend vers l'infini.

Les BICs sont donc des états sombres avec une durée de vie radiative infinie et nécessitent généralement au moins une dimension de la structure s'étendant à l'infini. Cependant, dans la pratique, et en raison de l'étendue finie des structures étudiées, des propriétés

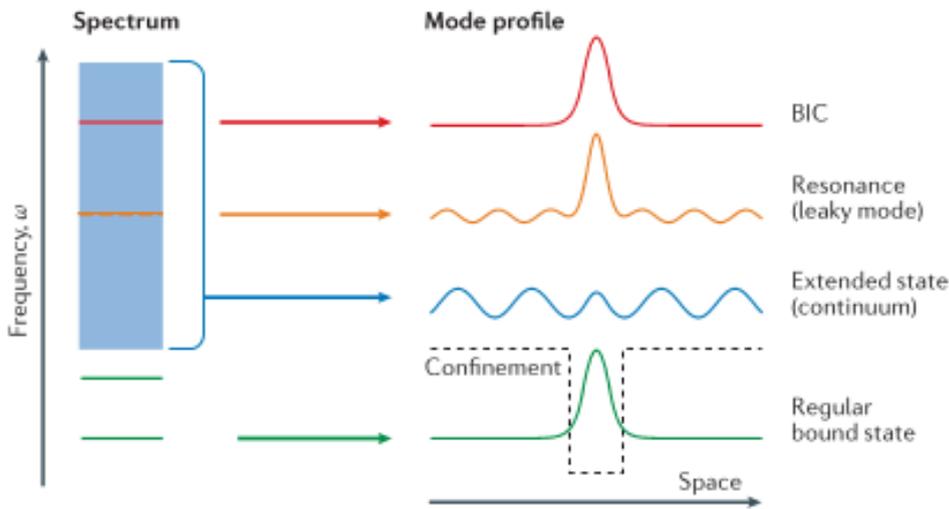


FIGURE 1.20 – Différents types de modes dans un système ouvert.

d'absorption du matériau, et d'autres perturbations externes, les BICs s'effondrent et apparaissent sous la forme d'une résonance Fano, dû à la compensation des radiations et des interférences destructives entre plus de deux modes dégénérés pour renforcer l'interaction lumière-matière avec un facteur de qualité  $Q$  radiatif non infini. De telles résonances sont connues sous le nom de *quasi-BICs* et ont été utilisées pour obtenir des résonances à très haut facteur de qualité dans de nombreuses structures photoniques [44, 45]. Ces modes protégés par la symétrie qu'on appelle aussi SPM (pour Symmetry Protected Modes), peuvent être convertis en modes de fuite avec un facteur de qualité très élevé (proche de l'infini) à cause d'une petite brisure de symétrie. Ces modes sont perturbés pour qu'ils deviennent brillants et rayonnent sous certaines conditions expérimentales d'illumination et de fabrication, soit par une rupture de symétrie intrinsèque telle que la modification de la géométrie de la structure [45–48], ou par une rupture de symétrie extrinsèque telle qu'un écart par rapport à une incidence normale [49, 50].

## 1.2 Généralités sur les capteurs optiques

Ces dernières années, l'un des objectifs majeurs de la recherche scientifique est de participer à la protection de notre planète des diverses attaques qu'elle subit (maladies

dangereuses, pollution, gaz toxiques, ...etc). C'est dans ce contexte, qu'on a été amené à concevoir et développer des capteurs intelligents pouvant détecter ces molécules et organismes microscopiques (dans les différentes phases gazeuse, liquide et solide) susceptibles d'être dangereux. Le rôle d'un capteur est de transformer une grandeur à détecter (molécule cible) en un signal mesurable. La grandeur à mesurer diffère selon les domaines d'application comme la santé (recherche médicale) [2], la sécurité (protection biologique) [3], l'environnement (surveillance de la pollution) [4] et l'industrie alimentaire (contrôle et évaluation de la présence d'allergènes) [5]. En plus des capteurs biologiques, il existe d'autres types de détecteurs tels les capteurs de température, de vitesse, de force, de pression, ...etc.

Un capteur optique est généralement caractérisé par différents paramètres de performance comme le temps de réponse, la sensibilité, la limite de détection, la figure de mérite, ...etc. Nous définissons dans ce qui suit deux de ces paramètres qui ont fait l'objet de notre attention dans le cadre de ce travail de thèse.

**Sensibilité ( $S$ ) :** La sensibilité d'un capteur optique est définie par la détermination de l'évolution de la grandeur de sortie  $D_s$  en fonction de la grandeur d'entrée  $D_m$  en un point donné, c'est-à-dire la dérivée de la grandeur de sortie par rapport à celle d'entrée en ce point. Cette grandeur est une caractéristique intrinsèque au capteur et ne dépend pas, ou peu, des autres équipements de mesure :

$$S = \frac{D_s}{D_m} = \frac{\delta s}{\delta m}$$

**Figure de Mérite ( $FOM$ ) :** La figure de mérite d'un capteur optique est définie comme le rapport de sa sensibilité et de la largeur à mi-hauteur ( $FWHM$ ) pour Full Width at Half Maximum) de la raie de résonance [51]. Cette caractéristique nous apporte, en plus de la sensibilité, une information sur la finesse du pic de résonance :

$$FOM = \frac{S}{FWHM}$$

### 1.2.1 Détection dans le domaine de la biologie

Dans le domaine de la détection biologique, ou bio-détection, le premier biocapteur moderne fut celui proposé en 1962 pour la détection du glucose dans le sang [52]. Depuis, le domaine de la bio-détection a connu un engouement de plus en plus croissant,

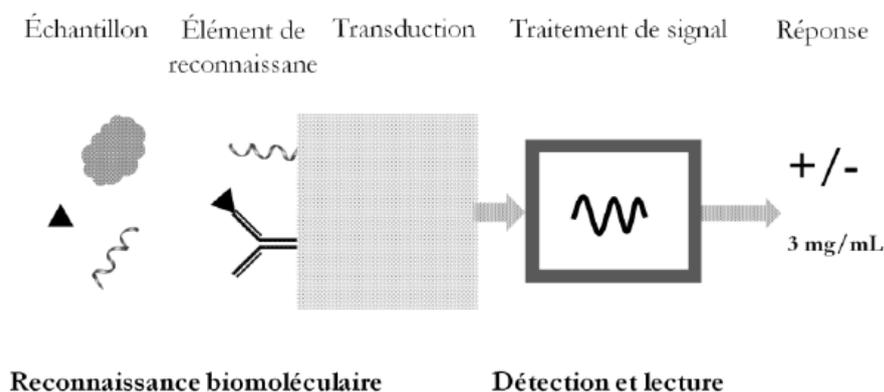


FIGURE 1.21 – Schéma de fonctionnement de base d'un biocapteur.

notamment lors de ces 20 dernières années [53].

A la base, un biocapteur est constitué de deux parties : la première est dédiée à la reconnaissance biomoléculaire par laquelle une molécule cible est liée et reconnue. La deuxième partie est liée à la détection et la lecture. La molécule cible est détectée et traduite par un transducteur physico-chimique en un signal traitable (figure 1.21).

L'élément de reconnaissance doit être choisi d'une manière spécifique pour produire un signal mesurable par le transducteur lors de la reconnaissance de la molécule cible et non pas lors de l'interaction (voir figure 1.22). Commercialement, les capteurs les plus connus sont composés de systèmes de reconnaissance enzymatique [54]. Ces bio-capteurs utilisent des enzymes de type oxydoréduction qui catalysent des réactions d'oxydation et/ou de réduction. Cependant, le principal inconvénient de la reconnaissance enzymatique est que les propriétés intrinsèques de l'échantillon (molécule cible) sont souvent modifiées lors de l'interaction avec l'enzyme. D'autres capteurs utilisent la reconnaissance basée sur l'affinité entre le récepteur et l'échantillon. Les récepteurs peuvent être des anticorps [55] ou des matériaux bio-mimétiques. Ce type de reconnaissance présente l'avantage de pouvoir être utilisé plusieurs fois car il n'affecte pas la molécule cible et le milieu de détection.

La partie de détection et de reconnaissance est considérée comme la partie la plus importante du capteur, car elle contient le transducteur qui traduit le phénomène physique en un signal mesurable. Le transducteur doit être choisi de façon à détecter de manière spécifique les propriétés physico-chimiques localisées causées par la formation du complexe sonde-cible [56]. Selon le domaine d'application, différentes propriétés physico-chimiques peuvent être détectées comme la masse, la charge électrique, la conductivité, l'indice de réfraction et d'absorption. Par conséquent, différents capteurs (transducteurs)

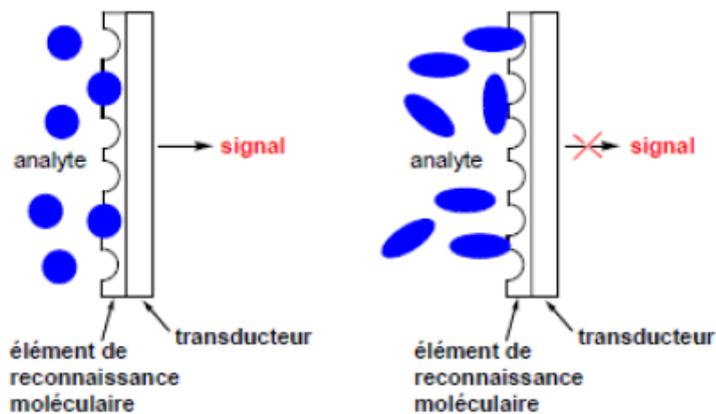


FIGURE 1.22 – Schéma de fonctionnement de l'élément de reconnaissance d'un biocapteur.

ont été développés selon le domaine de détection. Parmi les biocapteurs utilisés pour l'identification de la présence d'une molécule cible, on peut citer par exemple, les capteurs électrochimiques et les capteurs optiques.

Les capteurs électrochimiques sont de trois types : les ampérométriques, utilisés pour détecter les charges électriques [57], les potentiométriques, utilisés pour détecter les potentiels et les conductimétriques, utilisés pour détecter la conductivité.

Les capteurs optiques restent les capteurs les plus utilisés dans le domaine de la biologie pour leur facilité d'intégration et leur capacité de détection des molécules cibles à l'échelle nanométrique. Ils sont souvent utilisés pour la détection de l'indice de réfraction ou d'absorption.

Les capteurs optiques peuvent être plasmoniques ou bien diélectriques. Les capteurs plasmoniques, qui sont les plus utilisés dans la littérature, sont à base de résonance plasmonique de surface. Ces résonances peuvent être délocalisées ( SPR pour Surface Plasmon Resonance) [58] ou bien localisées (LSPR pour Localized Surface Plasmon Resonance) [59]. Les capteurs diélectriques se basent essentiellement sur le phénomène de résonance des modes guidés (GMR) [60].

### 1.2.1.1 Capteur optique plasmonique

En 1907, Zenneck et Sommerfeld démontrèrent théoriquement qu'une onde électromagnétique de radio fréquence apparaissait à l'interface de deux milieux lorsque l'un des deux est un métal (absorbant) et l'autre est un diélectrique (un milieu non absorbant) [17]. En 1957, Ritchie démontra théoriquement l'existence de plasmons transver-

saux à la surface d'un métal [61]. En 1960, Stern et Ferrell montrèrent aussi le rôle du couplage d'un rayonnement électromagnétique avec les plasmons de surface à une interface métallique [62]. Otto (1968) proposa une configuration dite FTR (pour Frustrated Total Reflection) pour le couplage des plasmons de surface avec une onde électromagnétique en utilisant un prisme [63]. La configuration proposée par Otto a été modifiée et simplifiée par Kretschmann en 1971 [64]. Cette configuration, dite ATR (pour Attenuated Total Reflection), est devenue actuellement la configuration technologique la plus adaptée et la plus utilisée.

Les capteurs utilisant le phénomène de résonance plasmonique de surface sont dits *Capteurs optiques plasmoniques* et se divisent en deux catégories selon le type de la résonance plasmonique exploitée (SPR ou LSPR).

**Capteur optique SPR :** La résonance Plasmon de surface correspond à une oscillation collective des électrons libres de conduction du métal. Le SPR est associé à la propagation d'une onde électromagnétique de surface le long de l'interface métal/diélectrique et peut atteindre quelque dizaines de micromètres. Les SPR ne peuvent pas être excités directement par une source lumineuse. Cette dernière doit passer par un système de couplage en utilisant un prisme (configuration ATR de Kretschmann par exemple) ou un réseau périodique.

Pour une **excitation par prisme**, le principe de fonctionnement d'un capteur SPR est réalisé par le dépôt d'un film mince métallique (généralement les métaux nobles : or ou argent par rapport à leur stabilité dans les solutions aqueuses). L'excitation des modes plasmoniques se fait par une onde évanescente transmise à la surface du prisme et induite par des réflexions totales internes [65]. La présence de l'échantillon (molécule cible) dans le milieu de détection provoque une modification de l'indice de réfraction (voir figure 1.23). Comme la résonance SPR est sensible à la variation de l'indice de réflexion, un déplacement de la résonance SPR est obtenu en présence de l'analyte (molécule cible). Ce déplacement de résonance peut être en fonction de la longueur d'onde ( $\lambda$ ) ou de l'angle d'incidence ( $\theta$ ). Les capteurs SPR à base de prisme présentent une bonne limite de détection avec des pics de résonances SPR relativement fins (*FWHM* faible), ce qui leur permet de détecter de faibles perturbations dans le milieu. L'inconvénient majeur de cette configuration réside dans la présence du prisme qui complique l'utilisation de l'appareillage de détection.

Pour remédier à l'utilisation du prisme, il est actuellement fait recours à une **excitation par fibre optique**. Les capteurs SPR à fibre optique (FO-SPR) présentent une meilleure

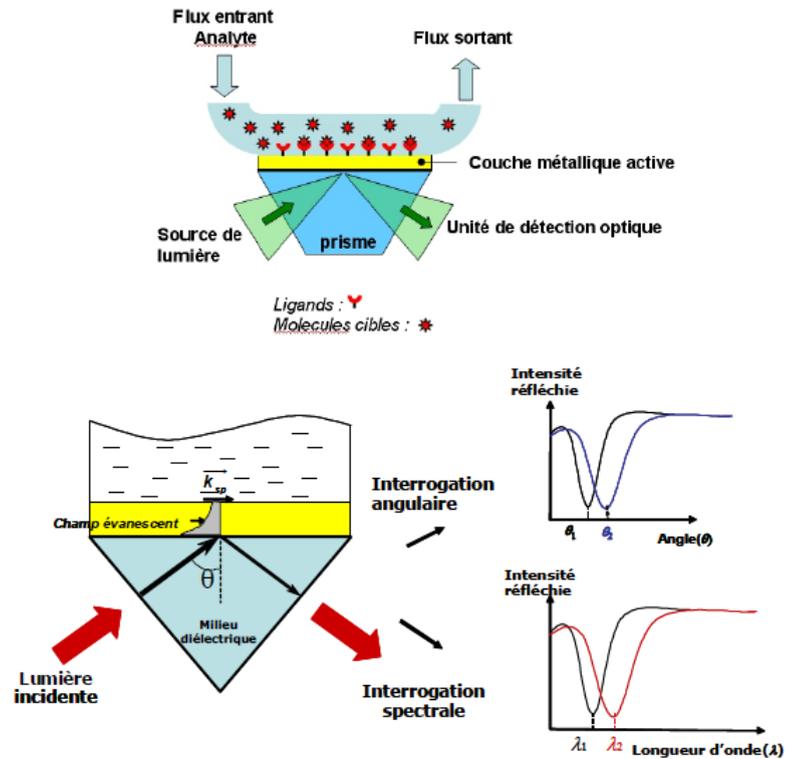


FIGURE 1.23 – Principe de fonctionnement de la détection par un capteur SPR à base de prisme (tirée de [66]).

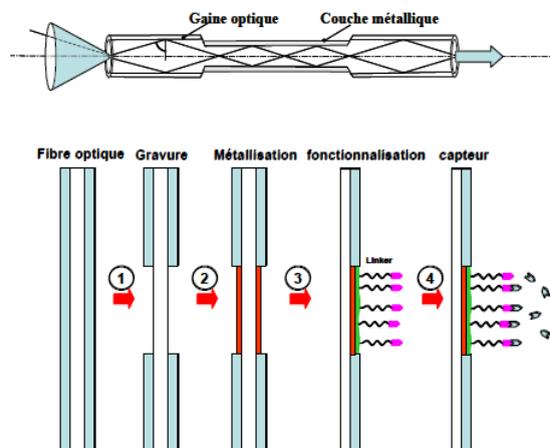


FIGURE 1.24 – Capteur FO-SPR où la zone de détection se situe au milieu de la fibre optique (tirée de [20]).

détection des molécules et sont plus faciles à intégrer en comparaison avec les capteurs à prisme (voir figure 1.24) [20]. En plus d'un meilleur facteur de qualité du à l'excitation des SPR, l'utilisation de la fibre optique facilite l'adaptation de ce type d'appareil. Cependant les FO-SPR rencontrent des problèmes importants comme la sensibilité de la structure de la fibre optique (qui contient des composant fragiles). Aussi, d'un point de vu commercial, les matériaux constituant la fibre optique sont très coûteux.

**Capteur optique LSPR :** Lorsque la taille du métal est de quelques nanomètres (nanoparticules métalliques), la résonance plasmon de surface devient localisée (LSPR) et l'onde de surface ne se propagera que sur quelques nanomètres à l'interface métal/diélectrique. La résonance LSPR est très utilisée dans la nanotechnologie, plus particulièrement dans le domaine de la détection (capteurs LSPR) car elle peut être directement excitée par une source lumineuse et est très sensible à la variation de l'indice de réfraction [68]. Le principe de fonctionnement de ces capteurs LSPR se fait via le dépôt des nanoparticules métalliques de différentes formes et tailles en contact avec des solutions contenant des analytes à détecter sur des substrats diélectriques. Un exemple de fonctionnement d'un capteur LSPR est représenté sur la figure (1.25) où la présence de la molécule cible induit un déplacement de la résonance LSPR [67]. Ces dernières années, les capteurs LSPR ont attiré beaucoup d'attention du fait que l'excitation des LSPR ne nécessite pas de système de couplage avec la lumière. Ainsi d'un point de vue commercial, la quantité de métal utilisée est réduite à l'échelle nanométrique (nanoparticule) contrairement aux films minces

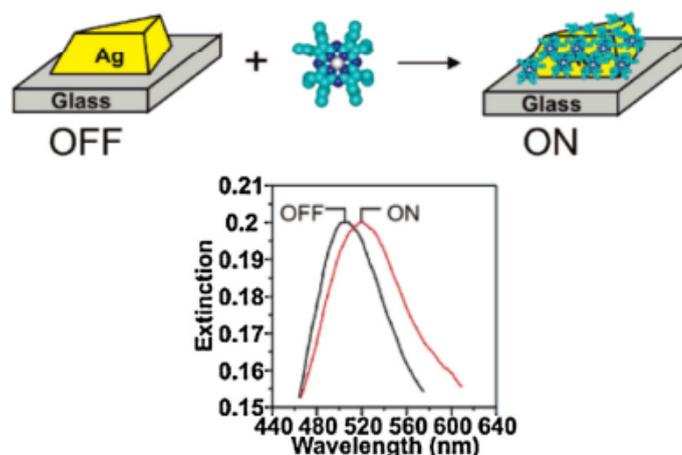


FIGURE 1.25 – Capteur LSPR à base de nanoparticule d'argent de forme triangulaire (tiré de [67]).

utilisés dans les capteurs SPR. Cependant la réduction de la taille (nanoparticule) influe négativement sur la largeur de la résonance LSPR (les pics LSPR sont plus larges que les pics SPR).

En plus des capteurs plasmoniques, il existe un autre type de capteurs optiques qui sont les capteurs diélectriques et les capteurs semi-conducteurs. Les plus adaptés sont les capteurs diélectriques car ils sont caractérisés par leur stabilité chimique et aussi par leur très faible coût.

**Capteur optique diélectrique :** Le fonctionnement d'un capteur diélectriques se base sur l'exploitation du phénomène de résonance des modes guidés (GMR) détaillé précédemment [69]. Rappelons que cette résonance résulte du couplage d'un mode diffracté induit par un réseau périodique et d'un mode guidé dans la couche guidante en contact avec ce réseau. Les capteurs GMR classiques sont généralement composés d'une couche guidante, en sandwich entre deux autres couches diélectriques d'indice de réfractons plus faibles que celui de la couche guidante. La variation de l'indice de réfraction du milieu extérieur est traduite par un déplacement de la résonance GMR soit en fonction de la longueur d'onde ( $\lambda$ ) ou bien en fonction de l'angle d'incidence ( $\theta$ ) (voir figure 1.26).

Ce type de capteur est devenu le plus utilisé dans la nanotechnologie du fait que, d'une part, la structure est composée des matériaux à faible coût et d'autre part, les résonances GMR sont caractérisées par un facteur de qualité très élevé en raison des faible pertes d'énergie (pas d'absorption en comparaison avec les métaux). Cependant, les capteurs GMR souffrent de la faible détection à la variation d'indice de réfraction comparés aux capteurs plasmoniques (SPR et LSPR). Il existe deux types de capteurs GMR selon que la couche guidante existe ou pas.

Le capteur diélectrique à base de **réseau périodique et couche guidante** est constitué d'une couche guidante (à indice de réfraction élevé) et d'un réseau diélectrique périodique

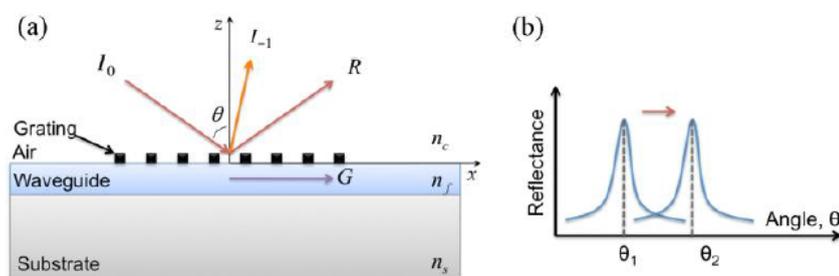


FIGURE 1.26 – Principe de fonctionnement d'un capteur optique GMR (tiré de [70]).

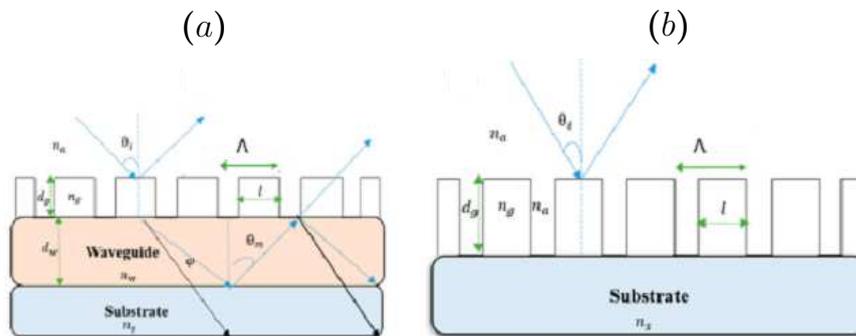


FIGURE 1.27 – Structure de base d'un capteur standard à base de résonance de modes guidés GMR (a) avec la couche guidante et (b) sans la couche guidante (tiré de [74]).

(voir figure 1.27(a)). l'ensemble est déposé sur un substrat et est entouré par le milieu de détection (analyte) dont la variation de l'indice de réfraction a pour effet le déplacement des résonances GMR avec des performances étroitement liées aux paramètres géométriques du réseau périodique [71–73]. L'inconvénient majeur de ce type de capteurs est que le confinement de l'énergie (situé dans la couche guidante) est loin du milieu de détection, ce qui induit une faible sensibilité à la variation de l'indice du milieu de détection. Pour cela un deuxième type est proposé.

Le capteur diélectrique à base de **réseau périodique sans couche guidante** est constitué uniquement d'un réseau périodique (d'indice de réfraction élevé) déposé sur le substrat (voir figure 1.27(b)). L'analyte à détecter est déposé directement sur le réseau [75].

Comme illustré sur l'étude comparative du tableau 1.1 [74], ce type de capteurs connaît un intérêt récent grandissant en raison des propriétés différentes qu'il présente par rapport à la disposition classique (avec couche guidante), à savoir des résonances plus fines et de meilleures valeurs de la sensibilité puisque le confinement de l'énergie qui se situe dans le réseau périodique est en contact direct avec le milieu de détection.

**Capteur optique hybride (métal-Diélectrique) :** Les structures mixtes (métal-diélectrique) offrent de nombreuses possibilités intéressantes, entre autres le mariage entre la résonance GMR et la résonance plasmonique fonctionnant à l'unisson pour créer divers dispositifs tels que des filtres [76] et des capteurs optiques [77, 78]. Des réseaux diélectriques entièrement gravés sur un substrat métallique ont été fabriqués pour l'amélioration de la sensibilité d'un détecteur de variation d'indice de réfraction. Cette amélioration serait due à la présence du substrat métallique [79]. Une sensibilité de l'angle de résonance à la variation d'indice de réfraction de  $154^\circ/\text{RIU}$  et une largeur de bande à mi-hauteur de  $0.2^\circ$  ont été

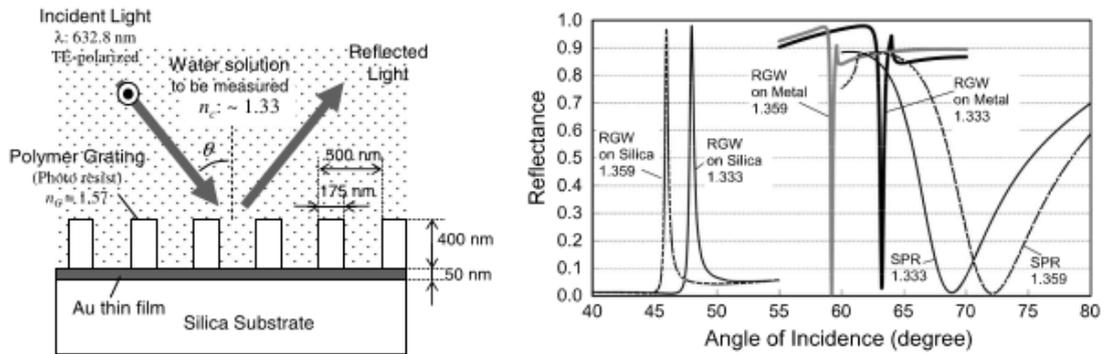


FIGURE 1.28 – Structure de base d'un capteur hybride standard (réseau diélectrique déposé sur une couche métallique) et spectres angulaires de réflectance pour différents indices de réfraction du substrat en présence et sans présence du réseau diélectrique (tiré de [79]).

obtenues pour une structure diélectrique avec un substrat en silice. A titre de comparaison, et pour le même capteur SPR, mais sans le réseau diélectrique, la sensibilité angulaire chute à  $129^\circ/\text{RIU}$  avec une largeur de bande à mi-hauteur de  $7.2^\circ$  (voir figure 1.28).

### 1.3 Conclusion

Dans cette première partie, nous avons défini les guides d'ondes diélectriques. Nous avons aussi mis en lumière les différents phénomènes physiques participant à l'apparition des résonances dites résonances modes guidés propagatives dans la couche guidante des

Property	GMR without a Planar Waveguide	GMR with a Planar Waveguide
Location of the resonance as a function of grating thickness	As the thickness of the grating increase the resonance shifts to longer wavelength.	
Location of the resonance as a function of grating period	As the period increases the resonance shifts the longer wavelength.	
FWHM as a function of polarization		For TM the FWHM is smaller
Typical sensitivity in the angular configuration	$70^\circ/\text{deg}$	$35.8^\circ/\text{deg}$ [40]
Sensitivity as a function of fill factor ( $f$ )	For $f$ between 0.25–0.5 the sensitivity is maximum.	As the $f$ increase the sensitivity decreases. [41]
Sensitivity as a function of thickness	As the thickness of the grating increases, the sensitivity increases.	As the thickness of the waveguide increases the sensitivity decreases. [42]

Tableau 1.1 – Comparaison des des différentes propriétés (position spectrale,  $FWHM$ ,  $S$ , angle d'incidence) de la structure GMR avec et sans la couche guidante (tiré de [74].)

guides d'ondes. Nous avons ainsi présenté une revue de la littérature traitant l'influence de chaque paramètre sur la position et la forme du pic de la résonance GMR. L'étude de ces paramètres permet de constater que les résonances GMR des guides d'ondes diélectriques possèdent des propriétés intéressantes comme la finesse du pic (faible perte d'énergie) et la stabilité chimique (nature diélectrique) ainsi que leur facilité d'intégration, ce qui les rend des bons candidats dans divers domaines : fibre optique [80], technologie des cellules solaires [81] et détection. Dans le domaine de filtres optiques par exemple, des résonances fines en réflexion dans différentes régions de la gamme optique (visible, infrarouge) ont été exploitées dans la communication [82]. Dans la détection, des capteurs à indice de réfraction [36] et d'humidité [40] ont été utilisés.

Dans la deuxième partie de ce chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement d'un capteur optique qui est la transformation d'une grandeur à détecter (molécule cible) en un signal mesurable. Nous nous sommes intéressés au domaine de la détection biologique, dont nous avons cité et comparé les différents outils utilisés. Les différentes méthodes et outils sont classés selon la nature de la matière (métallique, diélectrique ou bien mixte) qui constitue le capteur. Pour cela nous avons présenté quelques notions de base pour chaque type de capteur optique, qu'il soit SPR, LSPR, diélectrique ou hybride.

## Méthodes de calcul : FDTD, FMM

### 2.1 Introduction

Malgré le développement technologique des techniques de fabrication et de caractérisation des structures photoniques nanométriques (métalliques ou diélectriques), la complexité des nanostructures proposées en fonction des différents domaines d'application, font que les études expérimentales systématiques restent très coûteuses en temps et en argent. Le recours à la modélisation de ces structures en vue de l'optimisation de leurs propriétés et performances demeure primordial pour toute étude préalable ou en parallèle avec le processus expérimental. Dans le domaine de la nano-optique, deux des méthodes numériques très utilisées pour la simulation de la propagation des ondes électromagnétiques sont la méthode des Différences Finies dans le Domaine Temporel (FDTD pour Finite Difference Time-Domain) et la méthode modale de Fourier (FMM pour Fourier Modal Method). La méthode FDTD est adaptée à la modélisation de structures plus ou moins complexes et hétérogènes et nécessite un maillage spatial de la fenêtre de calcul. La méthode FMM est plus adaptée à des réseaux périodiques et ne nécessite pas de maillage spatial.

Notre travail de thèse, purement théorique, est réalisé, en modélisant les différents bio-capteurs proposés, via deux codes. Le premier, basé sur la méthode FDTD, est développé au sein de l'équipe Photonique du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'Université de Tizi-Ouzou en collaboration avec le Pr. BAIDA de l'équipe *Nano-Optique* (Département d'Optique P. M. Duffieux de Besançon, FEMTO-ST). Le deuxième, basé sur la méthode FMM, a été développé par le Dr. YALA de l'université de Bejaia [83]. Nous présenterons dans ce qui suit un aperçu bref et succinct sur ces deux méthodes. Une

présentation plus détaillée de ces deux méthodes est donnée dans [84–88].

## 2.2 Méthode Des Différences Finies Dans Le Domaine Temporel (FDTD)

### 2.2.1 Principe de base et Schéma de Yee

La méthode FDTD permet d’analyser les propriétés de propagation électromagnétiques dans des milieux à fort contraste d’indice de réfraction. Elle est naturellement basée sur la résolution des équations de Maxwell par discrétisation spatio-temporelle. Ces équations différentielles s’écrivent comme suit :

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho \quad (2.1.a)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (2.1.b)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.1.c)$$

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \vec{j}_{\text{libre}} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.1.d)$$

$\vec{D}$  et  $\vec{B}$  sont, respectivement, les vecteurs déplacement électrique et induction magnétique.  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  sont, respectivement, les vecteurs champ électrique et magnétique.  $\vec{j}$  est le vecteur densité de courant des charges électriques de densité  $\rho$ .

Nous nous limiterons, dans ce qui suit, au cas d’un milieu linéaire, isotrope sans densité de courant ( $\vec{j} = 0$ ). Les vecteurs champ électrique et magnétique sont reliés, via la permittivité  $\varepsilon$  et la perméabilité  $\mu$ , par les relations constitutives suivantes :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} \quad (2.2.a)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \quad (2.2.b)$$

$\varepsilon_0$  et  $\mu_0$  sont, respectivement, la permittivité et la perméabilité dans le vide.  $\varepsilon_r$  et  $\mu_r$  sont, respectivement, la permittivité et la perméabilité relatives.

La résolution numérique du système d’équations (2.1) est basée sur l’algorithme de

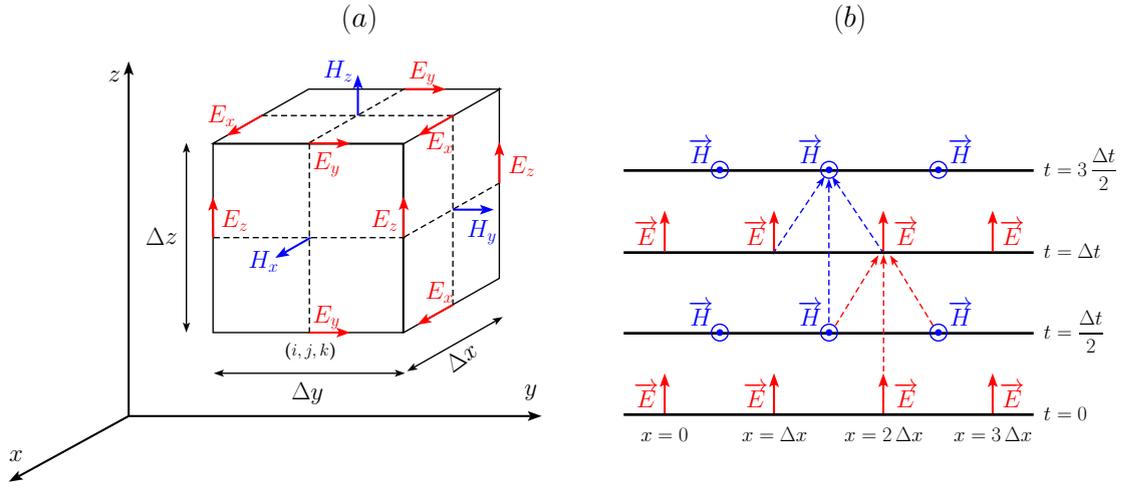


FIGURE 2.1 – (a) Discrétisation spatiale dans la cellule élémentaire du schéma de Yee. (b) Discrétisation temporelle par la méthode saute-mouton.

Yee qui fut proposé pour la première fois en 1966 [89]. Dans le cadre de cet algorithme, les dérivées partielles dans les équations de Maxwell sont remplacées par des différences centrées. La figure 2.1(a) illustre la manière avec laquelle est effectuée la discrétisation spatiale des composantes des champs électrique et magnétique qui sont calculées en des points différents de la maille élémentaire (Les composantes de  $\vec{E}$  suivant les arêtes et les composantes de  $\vec{H}$  perpendiculairement aux surfaces de la maille). La discrétisation temporelle est, quant à elle, établie selon la méthode dite *saute-mouton* où les composantes de  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  sont calculées alternativement à des instants multiples pair et impair du demi pas temporel  $\frac{\Delta t}{2}$  (voir figure 2.1(b))

Ainsi, la discrétisation des différentes composantes du champ magnétique  $\vec{H}$ , aux instants  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ , et du champ électrique  $\vec{E}$ , aux instants  $(n + 1)\Delta t$  permet d'écrire :

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left\{ \left[ \frac{E_y^n(i, j, k + \frac{1}{2}) - E_y^n(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \right] - \left[ \frac{E_z^n(i, j + \frac{1}{2}, k) - E_z^n(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right] \right\} \quad (2.3.a)$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_y^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left\{ \left[ \frac{E_z^n(i+\frac{1}{2}, j, k) - E_z^n(i-\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right] - \left[ \frac{E_x^n(i, j, k+\frac{1}{2}) - E_x^n(i, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} \right] \right\} \quad (2.3.b)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left\{ \left[ \frac{E_x^n(i, j+\frac{1}{2}, k) - E_x^n(i, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right] - \left[ \frac{E_y^n(i+\frac{1}{2}, j, k) - E_y^n(i-\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right] \right\} \quad (2.3.c)$$

$$E_x^{n+1}(i, j, k) = E_x^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left\{ \left[ \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right] - \left[ \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} \right] \right\} \quad (2.3.d)$$

$$E_y^{n+1}(i, j, k) = E_y^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left\{ \left[ \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} \right] - \left[ \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right] \right\} \quad (2.3.e)$$

$$E_z^{n+1}(i, j, k) = E_z^n(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left\{ \left[ \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right] - \left[ \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right] \right\} \quad (2.3.f)$$

A titre d'exemple, la composante  $E_z^n(i + \frac{1}{2}, j, k)$  du champ électrique est calculée à l'instant  $t = n\Delta t$  en un point spatial de coordonnées  $((i + \frac{1}{2})\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$  tel que  $i, j, k$ , et  $n$  sont des entiers et  $\Delta x, \Delta y$  et  $\Delta z$  sont les pas de discrétisation spatiale dans les trois direction  $Ox, Oy$  et  $Oz$ .

## 2.2.2 Stabilité et dispersion numérique

Afin de pouvoir modéliser et simuler correctement les phénomènes physiques par la méthode FDTD, et comme pour tout schéma explicite, le schéma de Yee est soumis à une condition de stabilité [84]. Cette dernière exige que la discrétisation temporelle, reliée aux pas de discrétisation spatiale, soit suffisamment fine et vérifie la condition *CFL* (*CFL* pour Courant-Friedrich-Levy) donnée par [84] :

$$\Delta t \leq \left[ c \cdot \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}} \right]^{-1} \quad (2.4)$$

$c$  désignant la vitesse de propagation de la lumière dans le vide.

La discrétisation spatiale du domaine de calcul entraîne inévitablement une dispersion (d'origine non physique mais numérique) de l'onde électromagnétique qui se propage dans ce domaine. Cette dispersion est d'autant plus élevée lorsque la fréquence du signal et les pas de discrétisation augmentent. Il a montré qu'elle pouvait être minimisée en appliquant le critère suivant :

$$\text{Max}(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{min}}{20} \quad (2.5)$$

$\lambda_{min}$  est la longueur d'onde minimale du domaine optique étudié.

### 2.2.3 Conditions aux limites

La restriction du domaine de calcul, imposée par la limitation de l'espace mémoire des calculateurs scientifiques, nécessite de recourir à des conditions aux limites pour rendre compte, aussi bien de l'espace libre que de la possible périodicité de la structure étudiée. La mise en oeuvre de la technique FDTD est devenue de plus en plus performante avec le développement et l'implémentation de conditions aux limites prenant en compte ces deux aspects.

Les conditions aux limites absorbantes les plus performantes et les plus utilisées dans les codes FDTD sont les couches absorbantes parfaitement adaptées de Bérenger, plus connues sous le nom de *PML* (PML pour Perfectly Matched Layers) [90]. Proposées et développées au début des années 1990, ces couches artificielles, introduites dans le but d'éviter les réflexions parasites aux bords de la fenêtre de calcul, sont composées d'un matériau fictif, de même indice de réfraction que le milieu de la fenêtre FDTD. Elles présentent, néanmoins, des conductivités électrique ( $\sigma$ ) et magnétique ( $\sigma^*$ ) non nulles vérifiant la condition d'adaptation d'impédance à l'interface avec ce dernier :

$$\frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\sigma^*}{\mu} \quad (2.6)$$

La périodicité des structures modélisées permet de limiter la fenêtre de calcul par l'implémentation de conditions aux limites périodiques (CLP) qui reposent sur le théorème de Floquet-Bloch [91]. L'application de ces CLP fait que les composantes de champ ( $E_x$  par exemple), calculées en un noeud du maillage (donné par la coordonnée  $r$ ), vont se reproduire de manière identique dans une période spatiale ( $p_r$ ) en avant ou en arrière (pendant un pas temporel  $\Delta t$ ) :

$$E_x(r + p_r, t) = E_x(r, t - \Delta t) \quad (2.7.a)$$

$$E_x(r, t) = E_x(r + p_r, t + \Delta t) \quad (2.7.b)$$

### 2.2.4 Les milieux dispersifs dans la FDTD

Dans le cas où le milieu de propagation est dispersif, ce qui est le cas avec les métaux, la réponse optique est caractérisée par une fonction diélectrique dépendant de la

fréquence (ou de la longueur d'onde). Cette fonction diélectrique prend en considération les transitions intrabandes (des électrons de conduction) et interbandes (des électrons liés). Plusieurs modèles ont été proposés et implémentés pour prendre en considération la réponse optique des métaux. On citera le modèle de Drude [85], le modèle de Drude-Lorentz [85, 92, 93] et le modèle plus récent de Drude à deux points critiques [88, 94, 95].

### Modèle de Drude

Les transitions intrabande sont bien prises en compte par le modèle de Drude dans lequel les interactions électron-électron et électron-noyau ne sont pas prises en considération. Il n'est tenu compte que de l'oscillation du gaz électronique constitué des électrons libres proches du niveau de Fermi. A l'application d'un champ électromagnétique, ces électrons de masse  $m$  et de densité  $n$ , vont osciller dans un mouvement amorti. Une approche classique du mouvement de chacun de ces électrons permet d'exprimer la fonction diélectrique relative comme suit :

$$\epsilon_D(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} \quad (2.8)$$

où  $\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}$  est la fréquence plasma du métal,  $\epsilon_\infty$  est la permittivité relative aux fréquences infinies et  $\gamma_D$  est la fréquence caractéristique de l'ensemble des oscillations amorties dues aux collisions avec d'autres électrons libres.

Le modèle de Drude permet de bien décrire la réponse optique (expérimentale) des métaux dans la gamme spectrale du visible-proche Infra Rouge (IR) où l'énergie excitatrice est inférieure au seuil des transitions interbandes.

### Modèle de Drude-Lorentz

Le modèle de Drude-Lorentz a été proposé pour palier aux limites du modèle de Drude dans la gamme du visible-proche ultra violet (UV). Pour rendre compte des transitions inter-bandes, plusieurs approches ont été proposées en ajoutant un ou plusieurs termes de Lorentz caractérisant l'électron lié, de la bande de valence, oscillant avec sa fréquence propre de résonance. Dans le cas d'un seul terme Lorentzien supplémentaire, La permittivité relative s'écrit comme suit [96] :

$$\epsilon_{DL} = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} - \frac{\Omega_L^2 \Delta\epsilon}{(\omega^2 - \Omega_L^2) + i\Gamma_L \omega} \quad (2.9)$$

où  $\Omega_L$  est la fréquence propre de l'oscillateur de Lorentz,  $\Gamma_D$  sa largeur spectrale et  $\Delta\varepsilon$  est un facteur de pondération.

Par rapports aux modèles à plusieurs termes Lorentziens, le modèle de Drude à un seul terme Lorentzien présente l'avantage de décrire avec plus ou moins de précision la dispersion des métaux nobles et de se s'implémenter aisément dans l'algorithme FDTD en réduisant l'espace mémoire et le temps de calcul.

### Modèle de Drude à deux points critiques

Si les propriétés optiques de certains métaux nobles comme l'argent et le cuivre sont bien décrites par le modèle de Drude Lorentz via plusieurs ajustements de la fonction diélectrique, les propriétés optiques de l'or sont beaucoup plus complexes, notamment dans la gamme spectrale visible-proche UV en raison de la contribution des transitions interbandes, plus particulièrement à deux longueurs d'onde (330 nm et 470 nm) qui ne peuvent être décrites par un simple oscillateur de Lorentz. En s'inspirant du modèle paramétrique de points critiques pour les semi-conducteurs, le modèle de Drude à 2 points critiques à été proposé pour décrire les propriétés optiques de l'or dans cette gamme spectrale [94]. L'expression de la fonction diélectrique dans le cadre de ce modèle paramétrique a pour expression :

$$\varepsilon_{DCP} = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} + \sum_{p=1}^{p=2} G_p(\omega) \quad (2.10)$$

tel que :

$$G_p(\omega) = A_p \Omega_p \left( \frac{e^{i\phi_p}}{\Omega_p - \omega - i\Gamma_p} - \frac{e^{i\phi_p}}{\Omega_p + \omega + i\Gamma_p} \right) \quad (2.11)$$

En plus de la contribution standard de l'approche classique de Drude (deux premiers termes de l'équation (2.10)), la contribution des transitions interbandes est représentée dans le troisième terme (somme) de l'équation (2.10) où  $A_p$ ,  $\Omega_p$  et  $\phi_p$  sont respectivement l'amplitude, l'énergie du gap et la phase de ces transitions interbandes aux deux points critiques cités ci-dessus. Ce modèle a été optimisé pour chaque type de métal (or, argent, ...) et implémenté dans un code FDTD fonctionnant en incidence normale et en incidence oblique [88].

C'est ce modèle de dispersion qui est implémenté dans notre code FDTD et exploité dans le cadre de ce travail de thèse pour modéliser et optimiser des capteurs optiques métallo-diélectriques.

## 2.3 Méthode Modale de Fourier (FMM)

La deuxième méthode de calcul numérique utilisée dans le cadre de ce travail de thèse est la méthode modale de Fourier (FMM pour Fourier Modal Method). Également connue sous le nom de méthode rigoureuse des ondes couplées (RCWA pour Rigorous Coupled Wave Analysis) [97–99]. Cette dernière est devenue une des méthodes les plus fiables et les plus efficaces pour la modélisation de la diffraction des ondes électromagnétiques par des réseaux périodiques, notamment après les travaux qui ont conduit à l’élaboration des règles de factorisation de Fourier [86, 87].

### 2.3.1 Principe de base

Contrairement à la méthode FDTD, basée sur la définition directe de la structure dans l’espace réel, la méthode FMM consiste en un développement des champs électromagnétiques  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  en séries de Floquet-Fourier. La structure est discrétisée suivant l’axe de propagation en plusieurs couches considérées comme *homogènes* (staircase approximation). En effet, l’évolution de la permittivité dans la direction transverse est connue dans chaque couche et est décrite par une série de Fourier. La résolution des équations de Maxwell se fait dans chaque couche par l’intermédiaire d’une matrice dont les valeurs propres et les vecteurs propres sont respectivement les indices effectifs et les modes propres pouvant se propager dans ladite couche. Grâce aux conditions de continuité entre chaque couche et à la propagation des modes dans chaque couche, le problème peut se résumer à mettre en cascade les matrices reliant les ondes entrantes et les ondes sortantes de chaque couche.

Le principe de la méthode FMM peut aisément se comprendre à travers l’exemple simple d’un réseau périodique lamellaire (de hauteur  $h$  et de période  $\Lambda$ ), non magnétique, excité par une onde incidente dans la direction  $Oz$  et polarisée TE (voir figure 2.2). La périodicité du réseau suivant la direction  $Ox$  fait que la permittivité relative puisse se décomposer en série de Fourier :

$$\varepsilon(x) = \sum_n \varepsilon_n e^{inKx} \quad (2.12)$$

où  $K = \frac{2\pi}{\Lambda}$  est le vecteur réseau (ou vecteur pulsation spatiale du réseau).

En appliquant le théorème de Floquet-Bloch, les composantes des champs électrique et magnétique peuvent s’écrire sous la forme d’une série de Fourier généralisée à l’inté-

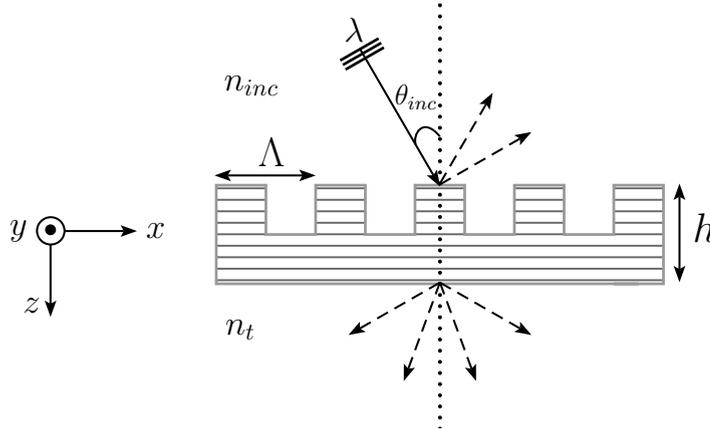


FIGURE 2.2 – Représentation schématique d'un réseau lamellaire sous incidence oblique donnant lieu à différents ordres diffractés.

rieur du réseau [100] :

$$E_y = \sum_n S_n(z) e^{i(k_x + nK)x} \quad (2.13.a)$$

$$H_x = -i \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_n U_n(z) e^{i(k_x + nK)x} \quad (2.13.b)$$

$$H_z = -i \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_n F_n(z) e^{i(k_x + nK)x} \quad (2.13.c)$$

$S_n$ ,  $U_n$  et  $F_n$  sont les harmoniques spatiales des champs considérés et  $n$  est un entier relatif.

En considérant une dépendance temporelle des champs de la forme  $e^{i\omega t}$ , les équations de Maxwell s'écrivent alors comme suit :

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega \epsilon_0 \epsilon_r E_y \quad (2.14.a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega \mu_0 H_x \quad (2.14.b)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = -i\omega \mu_0 H_z \quad (2.14.c)$$

En remplaçant le système d'équations (2.13) dans les équations (2.14), on aboutit à :

$$\frac{\partial U_n}{\partial z} = ik_{x_n} F_n - k_0 \sum_p \varepsilon_{n-p} S_p \quad (2.15.a)$$

$$\frac{\partial S_n}{\partial z} = k_0 U_n \quad (2.15.b)$$

$$ik_{x_n} S_n = -k_0 F_n \quad (2.15.c)$$

où  $k_{x_n} = k_x + nK$  (formule des réseaux) et  $k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$  est le vecteur d'onde dans le vide.

Précisons que l'équation (2.15.a) est un système infini d'équations différentielles couplées dont la résolution permet de déterminer les harmoniques  $S_n$ . Ce système d'équations est obtenu par projection sur la base  $e^{ik_{x_n} x}$ .

En combinant les équations (2.15.a) et (2.15.c), le système d'équations (2.15) se réduit à un système de deux ensembles d'équations couplées :

$$\frac{\partial U_n}{\partial z} = \frac{k_{x_n}^2}{k_0} S_n - k_0 \sum_p \varepsilon_{n-p} S_p \quad (2.16.a)$$

$$\frac{\partial S_n}{\partial z} = k_0 U_n \quad (2.16.b)$$

Précisons aussi que pour des raisons d'implémentation numérique, les séries de Fourier doivent évidemment être tronquées. L'ordre  $M$  de cette troncature limite le domaine des valeurs des entiers relatifs  $n$  et  $p$  ( $n, p \in [-M, M]$ ). Cet ordre  $M$  correspondant aux  $2M + 1$  termes de Fourier est généralement fixé en traçant la courbe de convergence.

Le système d'équations 2.16 peut alors s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial S_n}{\partial z} \\ \frac{\partial U_n}{\partial z} \end{bmatrix} = k_0 \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{I} \\ \mathcal{M} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_n \\ U_n \end{bmatrix}$$

et sous la forme compacte suivante :

$$\frac{d^2 S_n}{dz^2} = k_0^2 \mathcal{M} S_n \quad (2.17)$$

tel que  $\mathcal{I}$  est la matrice identité et  $\mathcal{M} = \mathcal{K}_x^2 - \mathcal{E}$ .  $\mathcal{K}_x$  est une matrice diagonale dont les éléments diagonaux  $(m, m)$  ont pour expression  $\frac{mk_{x_n}}{k_0}$ .  $\mathcal{E}$  désigne la matrice dite de *Toeplitz* dont les éléments  $(i, j)$  sont les composantes de Fourier  $\varepsilon_{i-j}$  de la permittivité relative.

La résolution de l'équation (2.17), fait intervenir les valeurs propres et les vecteur propres de la matrice  $M$ . Les harmoniques spatiales  $S_n$  se mettent alors sous la forme d'une somme d'ondes se propageant dans la direction  $Oz$  :

$$S_n(z) = \sum_{m=1}^n W_{n,m} \left\{ U_m e^{-k_0 \lambda_m z} + d_m e^{k_0 \lambda_m z} \right\} \quad (2.18)$$

les termes  $W_{n,m}$  sont les éléments de la matrice  $W$  des vecteurs propres de la matrice  $M$  alors que les termes  $\lambda_m$  sont les racines carrées positives de ses valeurs propres.

Cette solution représente la combinaison linéaire de toutes les ondes montantes et descendantes dans une couche du réseau. En combinant les équations (2.15.b) et (2.18), les harmoniques spatiales  $U_n$  auront alors pour expression :

$$U_n(z) = \sum_{m=1}^n V_{n,m} \left\{ -U_m e^{-k_0 \lambda_m z} + d_m e^{k_0 \lambda_m z} \right\} \quad (2.19)$$

Les termes  $V_{n,m}$  sont les éléments de la matrice  $V$  produit de la matrice  $W$  et de la matrice diagonale  $Q$  des valeurs propres. Les coefficients  $U_m$  et  $d_m$  sont obtenues en appliquant les conditions aux limites (pour les composantes tangentielles des champs électrique et magnétique).

Pour résumer, le champ électromagnétique total au niveau du réseau périodique est déterminé par la sommation, sur un domaine tronqué d'entiers relatifs  $n \in [-M, M]$ , des harmoniques (données par les équations (2.18) et (2.19)) dépendant de la variable  $z$  (direction de variation du profil d'indice) et multipliées par le terme  $e^{ik_{x_n} x}$  dépendant de la variable  $x$  (direction de périodicité). Dans les régions homogènes d'incidence et de transmission, hors réseau périodique, le champ électromagnétique réfléchi ( $U_r$ ) et transmis ( $U_t$ ) est donné simplement par un développement de Rayleigh :

$$U_r = \sum_n R_n e^{i(k_{x_n} x - \beta_{i_n} z)} \quad (2.20.a)$$

$$U_t = \sum_n T_n e^{i(k_{x_n} x + \beta_{t_n} z)} \quad (2.20.b)$$

tel que  $\beta_{i_n}^2 = k_i^2 - k_{x_n}^2$  et  $\beta_{t_n}^2 = k_t^2 - k_{x_n}^2$ ,  $k_i = n_{inc} k_0$  et  $k_t = n_t k_0$  étant les vecteurs d'onde dans les milieux incident et transmis, respectivement.

Dans les deux régions (milieu homogène et milieu périodique), les amplitudes  $R_n$  et  $T_n$  de l'ordre diffracté réfléchi et transmis sont alors calculés et les efficacités de diffraction correspondantes sont déterminées par les flux de vecteur de Poynting des modes réfléchi et transmis, normalisés par rapport à celui du mode incident.

### 2.3.2 Stabilité de la méthode

Dans le cas de la polarisation TM, un raisonnement analogue à celui mené pour la polarisation TE, conduit à la forme compacte suivante :

$$\frac{d^2 U_n}{dz^2} = k_0^2 \mathcal{M} U_n \quad (2.21)$$

avec  $\mathcal{M} = \mathcal{E} (\mathcal{K}_x \mathcal{E}^{-1} \mathcal{K}_x - \mathcal{I})$ .

Contrairement à la polarisation TE, l'implémentation de la FMM en polarisation TM a longtemps souffert de problèmes numériques en raison de la lenteur et/ou de la mauvaise convergence des séries de Fourier tronquées, nécessitant de retenir un nombre important d'ordres tel que les coefficients des exponentielles deviennent très grands et conduisent à des instabilités numériques. Ces instabilités numériques ont, pendant longtemps, limité l'utilisation de la méthode FMM jusqu'au milieu des années 90 avec l'introduction des règles correctes de factorisation de Fourier [97–99]. Ces règles ont permis d'assurer la convergences des équations tronquées et de l'étendre aux cas des réseaux à profils non lamélares [101].

Dans le cas de réseaux métalliques, le méthode FMM a montré son efficacité dans la gamme du visible et des micro-ondes. Néanmoins, toujours dans le cas de la polarisation TM, et même en tenant compte des nouvelles règles de factorisation, des instabilités numériques ont été mises en évidence dans le domaine visible-porche IR dans le cas de métaux nobles comme l'or ou l'argent [102]. Celles-ci se manifestent par l'apparition d'artefacts numériques indésirables. la figure (2.3) montre, pour un ordre de troncature  $M = 15$ , l'apparition de ces artefacts dans le calcul de l'ordre de diffraction en fonction du taux de remplissage. Ces artefacts peuvent néanmoins être réduits en augmentant l'ordre de troncature et par conséquent le temps de calcul proportionnel à  $(2M + 1)^3$ . Plusieurs approches ont alors été proposées afin de minimiser cette instabilité tout en minimisant autant que possible l'ordre de troncature. La plus récente est celle proposée par [86], basée

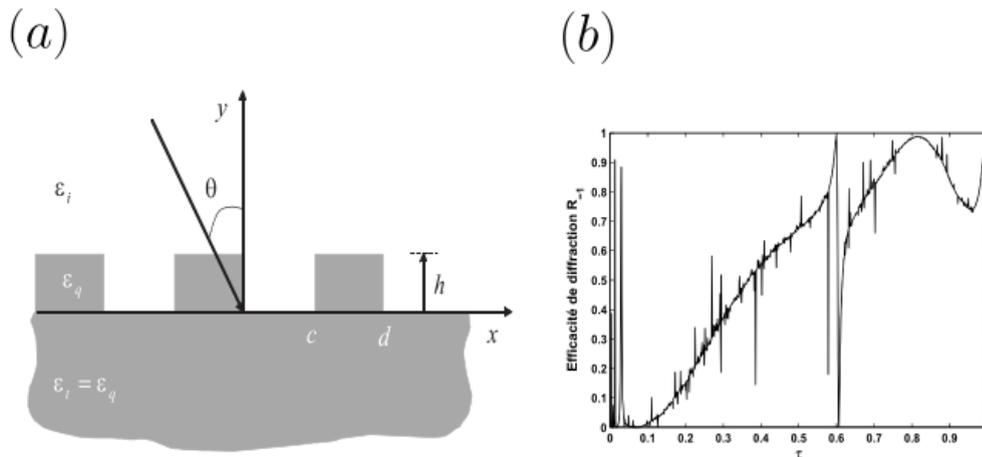


FIGURE 2.3 – (a) Géométrie du réseau de diffraction métallique à la longueur d’onde  $\lambda = 632.8$  nm, avec  $\theta = 30^\circ$ ,  $d = h = 500$  nm,  $\epsilon_i = 1$  et  $\epsilon_t = \epsilon_q = -100$ . (b) Évolution, en fonction du taux de remplissage  $\tau = c/d$ , de l’ordre de diffraction  $R_1$  en polarisation TM (tiré de [83])

sur le concept de la résolution spatiale adaptative, et beaucoup plus stable que la FMM classique. une nouvelle reformulation du problème aux valeurs propres a conduit à une meilleure stabilité avec un ordre de troncature bas. C’est cette dernière approche qui est implémenté dans le cadre du code FMM exploité dans le cadre de ce travail.

Comme nous venons de le voir, dans cette section, la mise en oeuvre de la méthode FMM est assez simple, notamment pour les réseaux périodiques, l’objectif étant de résoudre de façon exacte le problème de diffraction en périodisant la structure à modéliser. De plus, pour satisfaire les conditions des ondes sortantes, dans chaque période, il faut inclure des couches absorbantes (généralement des PML) pour éliminer tout champ réfléchi par ces couches et dont l’origine serait purement numérique et non physique. Dans la plupart des cas, la méthode FMM contient très peu de points puisque elle utilise une décomposition en ondes planes, permettant ainsi de modéliser avec le même encombrement mémoire les couches homogènes quelque soient leurs épaisseurs, contrairement à la méthode FDTD où le nombre de points de calcul peut être énorme si la structure est grande ou contient des traits fins. Le plus grand inconvénient de la méthode FMM est sa difficulté de mise en oeuvre dans le cas de structures non périodiques. La simulation d’objets plus complexes nous contraint à recourir aux techniques de super-cellules et à l’utilisation de conditions absorbantes sur les bords qui nécessitent, par conséquent, l’utilisation d’un nombre plus important d’ondes planes, réduisant ainsi l’intérêt de cette technique.

Utilisée dans le cadre de notre travail de thèse, la méthode FMM permet de bien modé-

liser la diffraction par des guides d'ondes diélectriques où les modes couplés, correspondant aux modes guidés des différentes couches de la structure modélisée, seront raccordés les uns aux autres suivant l'approche dite de la *matrice de diffraction* (ou matrice  $S$  pour Scattering-matrix) [103].

### 2.4 Test de validation

Nous présenterons dans ce qui suit une étude FDTD du phénomène de résonance GMR déjà étudié dans le cas de la structure guidante à base de réseau périodique par [10] (voir figure 1.7). Les calculs de la reflectance, pour différentes hauteurs  $t$  de la couche guidante, obtenus par notre code FDTD sont comparés aux résultats déjà obtenus par des calculs RCWA (figure 1.8(a)). Les résultats, présentés sur la figure 2.4, montrent le très bon accord obtenu entre nos calculs FDTD et les calculs RCWA, pour les deux polarisations TE et TM. La même dépendance de la position de la résonance, pour les deux polarisations TE et TM, est obtenue pour les différentes hauteurs de la couche guidante (voir figure 2.4(a-b)). Nous avons aussi reproduit les mêmes spectres de réflectance pour les trois valeurs particulières de la hauteur  $t$  dans le cas d'une polarisation TE (voir figure 2.4(c-d)). Le parfait accord obtenu dans le cadre de cette étude comparative constitue un test de validation de notre code FDTD qui sera exploité dans la suite de notre travail de thèse.

### 2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un bref aperçu des deux méthodes de simulations utilisées dans le cadre de notre travail de thèse. Nous avons énoncé les principes de base de la méthode FDTD, via le schéma de Yee et les conditions minimisant ses différentes contraintes numériques (stabilité et dispersion numérique). Nous avons aussi cité les techniques implémentées pour tenir compte des conditions aux limites absorbantes et périodiques ainsi que les propriétés dispersives des métaux. Les principes de base de la méthode FMM, mais aussi ses différentes contraintes, ont été aussi présentés à travers un exemple simple permettant de développer les composantes des champs électromagnétiques en séries de Floquet-Fourier afin d'aboutir aux efficacités de diffraction optique. Le chapitre se termine par un test de validation de notre code FDTD à travers une étude comparative avec des calculs RCWA tirés de la littérature en rapport avec les résonances GMR de structures guidantes à réseau périodique.

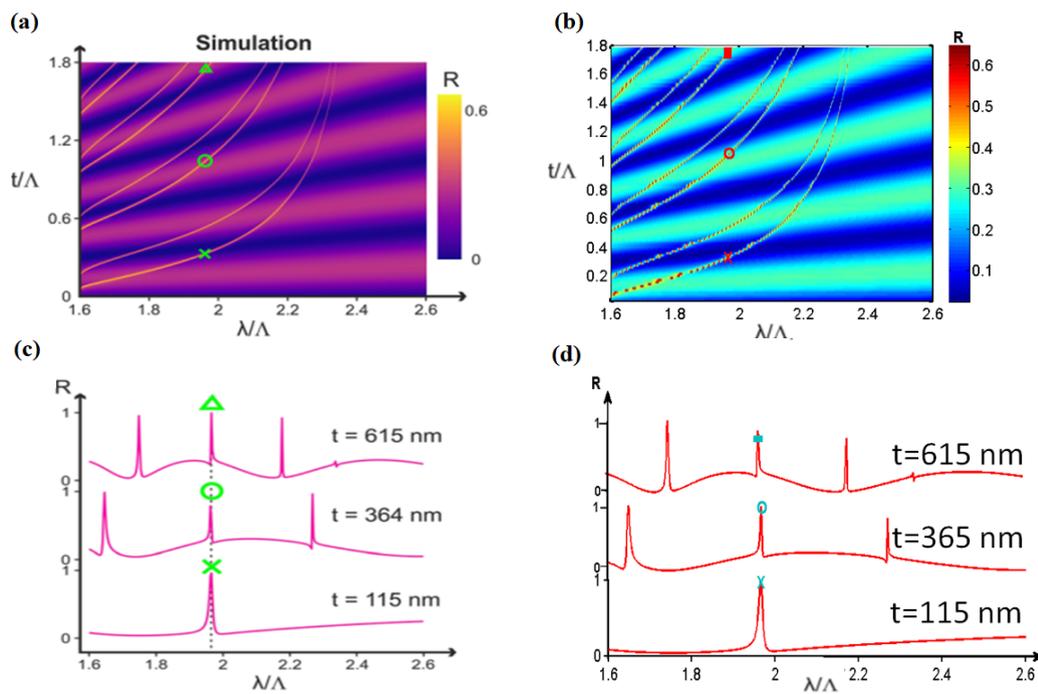


FIGURE 2.4 – Calcul (a) RCWA [10] et (b) FDTD de la réflectance à différentes longueurs d’onde de résonances  $\lambda$  correspondant aux différentes épaisseurs du guide d’onde  $t$  pour les deux polarisations TE et TM.

Spectres (c) RCWA [10] et (d) FDTD de la reflectance en polarisation TE pour trois valeurs particulières de la hauteur  $t$ .

# Étude paramétrique des performances d'un capteur à réseau 1D diélectrique

## 3.1 Introduction

Le premier objectif de ce travail de thèse est l'exploitation des résonances des modes guidés GMR et l'optimisation des performances d'un bio-capteur diélectrique sensible à la variation de l'indice de réfraction du milieu de détection. Le choix d'une structure guidante diélectrique est motivé, d'une part, par la résonance étroite exhibée, en comparaison avec les résonances plasmoniques, et d'autre part par la stabilité chimique de la nature diélectrique, dans les solutions aqueuses notamment.

Nous nous focaliserons sur deux des performances les plus étudiées dans la littérature, à savoir la sensibilité  $S$  (en nm/RIU) et la figure de mérite  $FOM$  (en RIU<sup>-1</sup>) dont les expressions sont comme suit :

$$S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n_c} \quad (3.1)$$

$$FOM = \frac{S}{FWHM} \quad (3.2)$$

La sensibilité détermine la variation de la longueur d'onde de la résonance GMR ( $\Delta\lambda$ ) engendrée par un changement d'indice de réfraction du milieu de détection ( $\Delta n_c$ ). La figure de mérite est associée, en plus de la sensibilité du bio-capteur, à la largeur à mi-

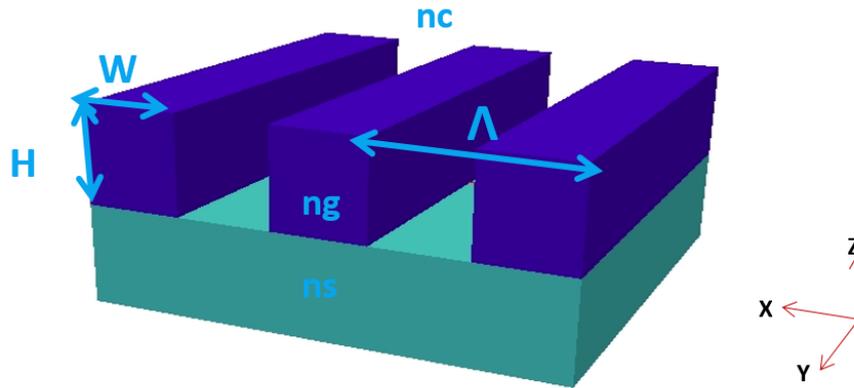


FIGURE 3.1 – Schéma de la structure diélectrique 2D à réseau périodique suivant la direction  $Ox$ , invariant suivant la direction  $Oy$  et fini suivant la direction  $Oz$ .  $n_s$ ,  $n_c$  et  $n_g$  sont les indices de réfraction du substrat, et du milieu de détection et du réseau périodique.  $W$ ,  $\Lambda$  et  $H$  sont la largeur, la période et la hauteur du réseau.

hauteur ( $FWHM$ ) de la bande de résonance. La sensibilité est d'autant plus importante que le déplacement de la résonance est élevé pour une faible perturbation de l'indice de réfraction du milieu de détection. Une  $FOM$  élevée est associée à des résonances étroites (largeurs à mi-hauteur très faibles).

C'est dans le but d'optimiser ces deux performances qu'une étude paramétrique (polarisation, hauteur de la couche guidante, indice de réfraction, période, facteur de remplissage, ...etc) a été menée. Pour cela nous avons choisi de travailler avec une structure 2D basique, composée d'un réseau diélectrique périodique d'indice de réfraction  $n_g = 2.4$  (qui pourrait être celui du  $TiO_2$ ), déposé sur un substrat en verre (d'indice de réfraction  $n_s = 1.45$ ) alors que l'indice du superstrat (milieu de détection biologique) varie dans le domaine  $n_c = 1.33 - 1.39$  (voir figure 3.1). Les spectres de diffraction sont calculés via notre code FDTD en prenant en considération l'invariance de la structure dans la direction ( $Oy$ ) et en appliquant les conditions aux limites périodiques suivant la direction ( $Ox$ ) et les PML suivant la direction ( $Oz$ ). L'excitation lumineuse se fait du côté de l'analyte ( $n_{inc} = n_c$ ) avec une incidence normale  $\theta = 0^\circ$ . La transmission est calculée dans le substrat.

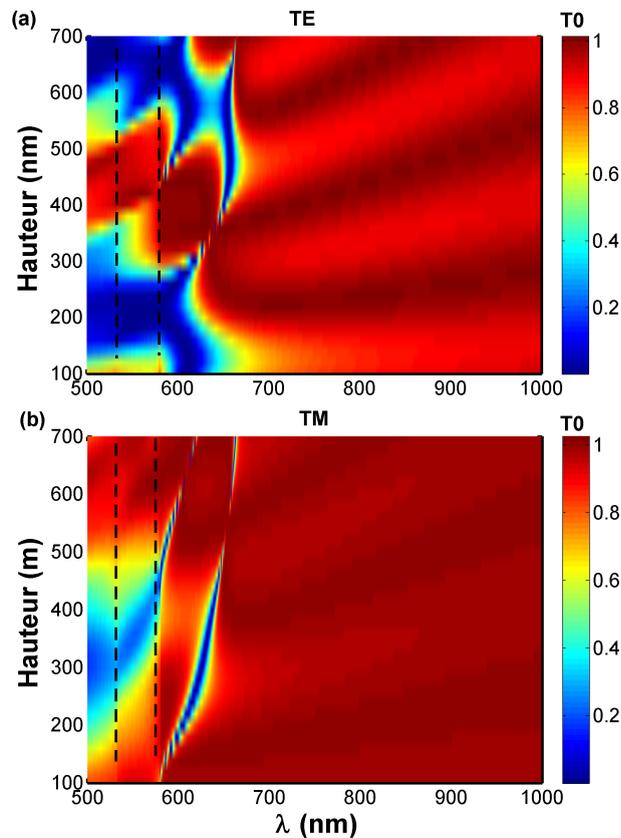


FIGURE 3.2 – Variation du coefficient de transmission ( $T_0$ ) en fonction de la Hauteur ( $H$ ), les lignes discontinues représentent les anomalies de Rayleigh du superstrat  $\lambda_{AR_1} = 532$  nm et du substrat  $\lambda_{AR_2} = 580$  nm.

### 3.2 Effet de la hauteur et de la polarisation

L'effet de la hauteur et de la polarisation est étudié dans le cas de notre structure en fixant la largeur et la période du réseau ( $W = 140$  nm et  $\Lambda = 400$  nm). Pour chacune des deux polarisations  $TE$  et  $TM$  de l'onde incidente, la transmission d'ordre zéro est calculée pour différentes hauteurs  $H$  allant de 100 nm à 700 nm. La figure 3.2 présente la distribution du coefficient de transmission calculé, dans le cas où le milieu de détection est l'eau ( $n_c = 1.33$ ), pour différentes valeurs de  $H$  et pour les deux polarisation  $TE$  et  $TM$ . Elle met en évidence :

- (i) Le déplacement de la résonance GMR vers les plus grandes longueurs d'onde avec l'augmentation de la hauteur pour les deux polarisations.
- (ii) L'apparition d'un mode guidé supérieur pour des hauteurs  $H \geq 450$  nm pour les deux polarisations.

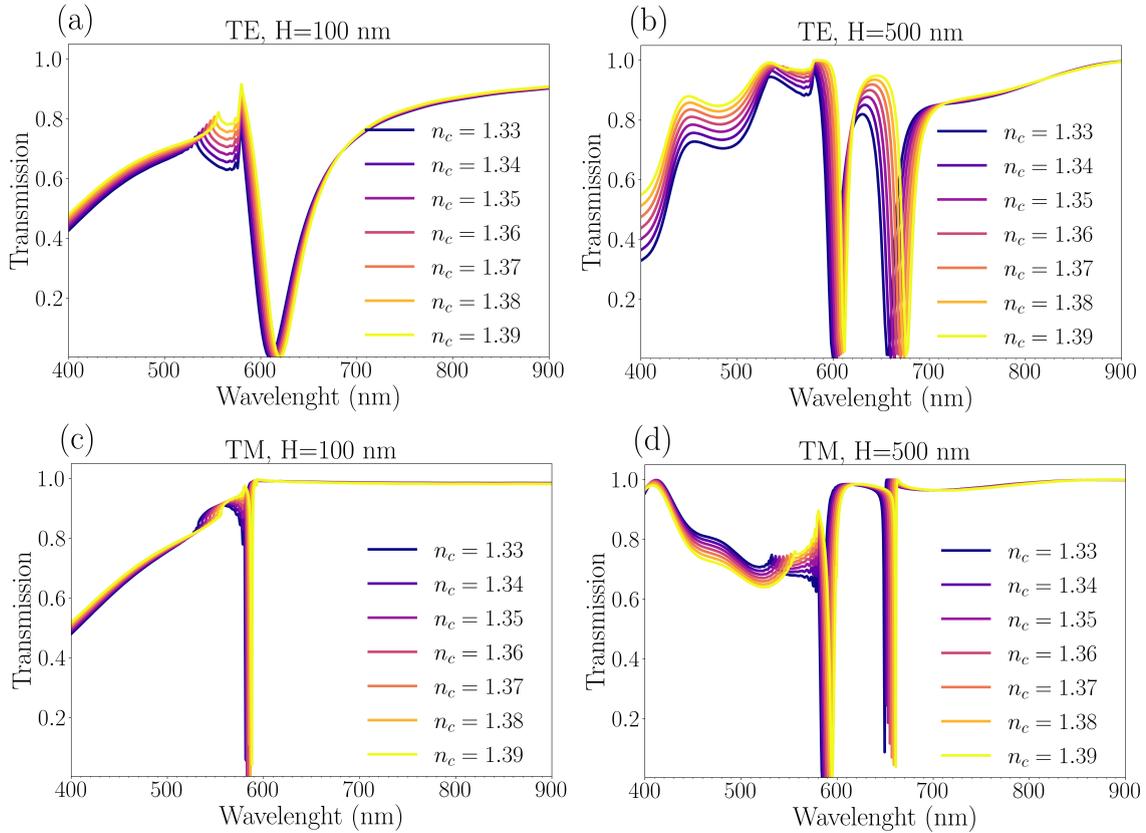


FIGURE 3.3 – Spectres de transmission d'ordre zero pour  $W = 140$  nm,  $\Lambda = 400$  nm,  $n_g = 2.4$ ,  $n_s = 1.45$  et  $n_c = 1.33 - 1.39$ . (a)  $H = 100$  nm en polarisation TE. (b)  $H = 500$  nm en polarisation TE. (c)  $H = 100$  nm en polarisation TM. (d)  $H = 500$  nm en polarisation TM.

Pour bien illustrer le comportement des résonances GMR pour les deux polarisations, nous avons représenté sur la figure 3.3 les spectres de transmission FDTD à deux hauteurs (l'une inférieure et l'autre supérieure à la hauteur critique d'apparition des modes guidés supérieurs). En plus des anomalies de Rayleigh ( $\lambda_{AR} = n \cdot \Lambda$ ) caractérisées par des extinctions de faibles intensités ( $\lambda_{AR_1} = 532$  nm dans le superstrat et  $\lambda_{AR_2} = 580$  dans le substrat) et insensibles à la variation de la hauteur, un mode GMR d'ordre supérieur apparaît à la hauteur  $H = 500$  nm, en comparaison avec la hauteur  $H = 100$  nm, pour les deux polarisations. Dans le cas de la hauteur  $H = 500$  nm, pour une polarisation TE, le calcul FDTD de la distribution de la partie réelle du champ électrique permet d'associer le mode fondamental  $TE_0$  à  $\lambda = 656$  nm et le mode supérieur  $TE_1$  à  $\lambda = 600$  nm. En comparant les deux polarisations, on note une résonance GMR beaucoup plus fine dans le cas de la polarisation TM en comparaison avec la polarisation TE. L'augmentation de la hauteur  $H$

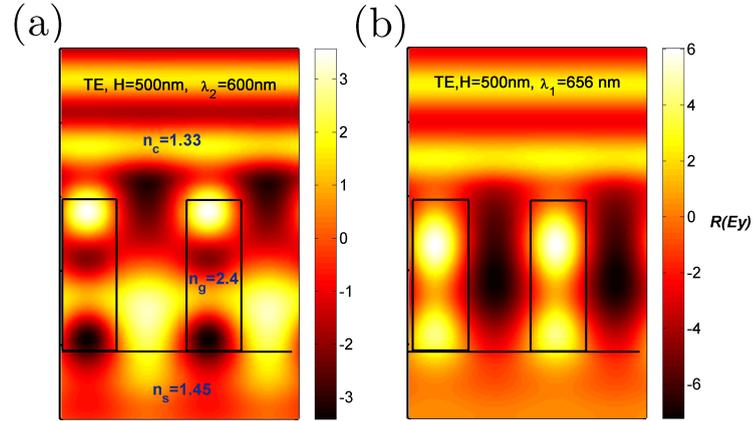


FIGURE 3.4 – Distribution de la partie réelle de la composante  $E_y$  du champ électrique ( $\Re(E_y)$ ) dans le cas de la polarisation TE avec  $W = 140$  nm,  $\Lambda = 400$  nm,  $n_g = 2.4$ ,  $n_s = 1.45$ ,  $n_c = 1.33$  et  $H = 500$  nm aux deux longueurs d'onde de résonance (a)  $\lambda_1 = 656$  nm et (b)  $\lambda_2 = 600$  nm.

a pour effet de déplacer la résonance vers les grandes longueurs d'onde tout en diminuant sa largeur de bande.

A l'image des deux exemples de la figure 3.3, des spectres de transmission calculés pour différentes hauteurs et pour différentes valeurs de l'indice de réfraction  $n_c$  du superstrat ont permis de tracer l'évolution de la sensibilité et la figure de mérite de notre structure GMR en fonction de la hauteur pour les deux polarisations (voir figure 3.5). Nous nous sommes intéressés au seul mode fondamental présentant une meilleure sensibilité que le mode GMR d'ordre supérieur [36]. Les résultats obtenus mettent en évidence des hauteurs optimales différentes pour la sensibilité et la FOM selon la polarisation. Pour de faibles hauteurs, où la sensibilité est comparable entre les deux polarisations (légèrement plus élevée dans le cas TE), la FOM est plus élevée dans le cas de la polarisation TM en raison de la faible largeur des raies de résonance. Lorsque la hauteur augmente, la sensibilité devient beaucoup plus importante pour la polarisation TE et atteint sa valeur maximale ( $S = 335$  nm/RIU) pour  $H = 200$  nm. Pour la polarisation TM, la sensibilité est maximale ( $S = 191$  nm/RIU) à une hauteur beaucoup plus élevée ( $H = 500$  nm). Ces hauteurs optimales pour la sensibilité ne coïncident malheureusement pas avec celles des FOM pour les deux polarisations. Si une meilleure FOM est obtenue dans le cas de la polarisation TE pour les faibles valeurs de  $H$  (valeur optimale de  $120$  RIU $^{-1}$  pour  $H = 350$  nm), les valeurs plus élevées de la hauteur sont à l'origine d'une FOM beaucoup plus élevée dans le cas d'une polarisation TM (valeur optimale de  $210$  RIU $^{-1}$  pour  $H = 500$  nm). Cette

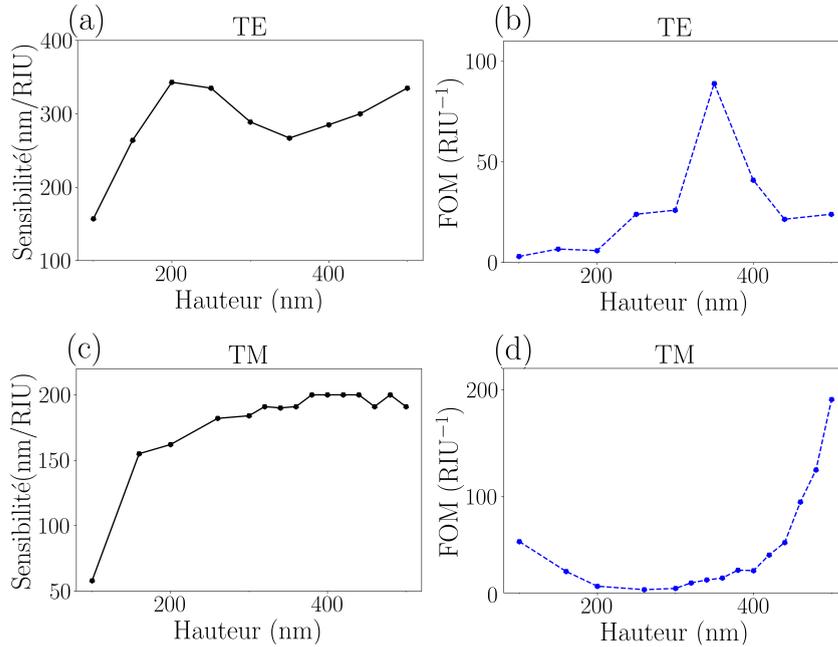


FIGURE 3.5 – Effet de la hauteur sur l'évolution de la sensibilité (a, c) et de la FOM (b, d) du mode fondamental pour les deux polarisations TE et TM avec  $W = 140$  nm,  $\Lambda = 400$  nm,  $n_g = 2.4$  et  $n_s = 1.45$ .

valeur élevée de la FOM à ces hauteurs est associée à la faible largeur des bandes de résonance, en comparaison avec la polarisation TE [11].

### 3.3 Effet de la période

Dans cette section nous allons montrer l'effet de la période sur la position de la résonance ainsi que sur les performances de notre capteur GMR. Les paramètres géométriques et physiques de notre structure de départ sont :  $n_g = 2.4$ ,  $n_s = 1.45$ ,  $n_c = 1.33 - 1.39$ ,  $W = 140$  nm et  $H = 500$  nm avec une polarisation TE. Le choix arbitraire de la hauteur et de la polarisation est tel que la sensibilité et la FOM soient intermédiaires entre les faibles valeurs et les valeurs optimales obtenues dans la section précédente afin de mettre en évidence l'effet de la période sur l'amélioration de ces valeurs.

Pour une période  $\Lambda$  variant entre 300 et 700 nm, les spectres de transmission obtenus pour les différentes valeurs de  $n_c$  (voir exemples dans la figure 3.6(a,b)) ont permis de tracer l'évolution de la sensibilité et de la FOM en fonction de la période du réseau (voir figure 3.6(c,d)). On peut noter, à travers les spectres de transmission, un déplacement de la réso-

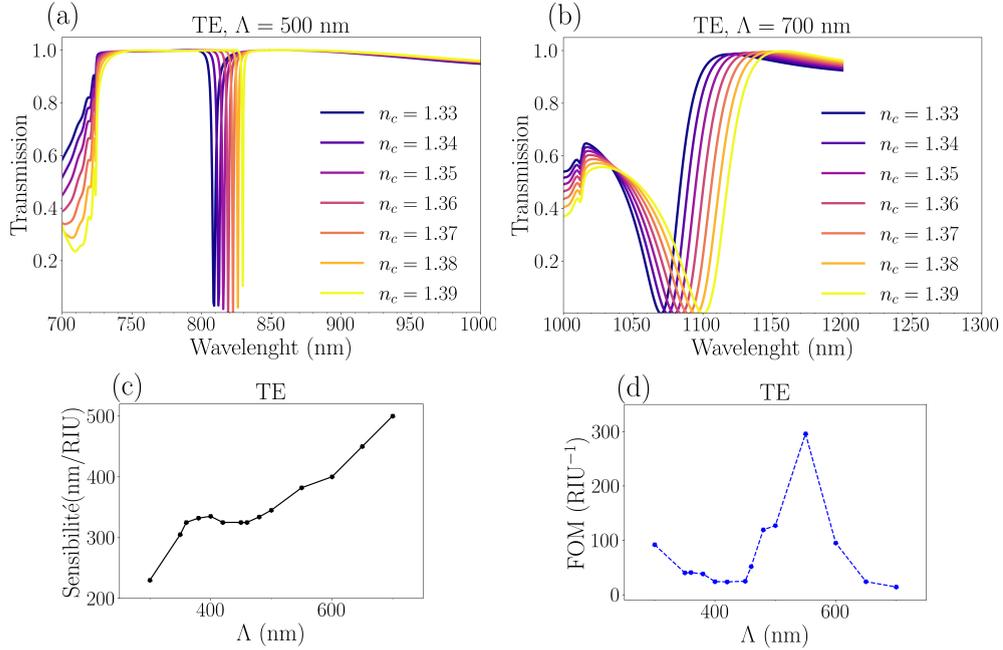


FIGURE 3.6 – Spectres de transmission d'ordre zero en polarisation TE pour  $W = 140$  nm,  $H = 500$  nm,  $n_g = 2.4$ ,  $n_s = 1.45$  et (a)  $\Lambda = 500$  nm ou (b)  $\Lambda = 700$  nm. Effet de la période sur l'évolution de la (c) sensibilité et de la (d) FOM.

nance GMR vers les grandes longueurs d'onde pour atteindre le domaine de l'Infra-Rouge (IR) à  $\Lambda = 700$ nm, en accord avec les résultats de [74]. Ce déplacement s'accompagne d'un élargissement de la résonance. L'augmentation de la période du réseau diélectrique a pour effet d'améliorer la sensibilité de notre capteur tandis que la  $FOM$  diminue en raison de l'élargissement des raies de résonance avant d'augmenter et d'atteindre une valeur maximale de  $296 \text{ RIU}^{-1}$  pour  $\Lambda = 550$  nm en raison de la prépondérance de la sensibilité sur l'élargissement de la raie de résonance.

### 3.4 Effet du facteur de remplissage

La largeur des lignes du réseau périodique est un autre paramètre géométrique important de par son influence sur la résonance GMR et sur les performance de notre capteur. Combiné à la période du réseau, il définit le facteur de remplissage  $f$  tel que  $f = W/\Lambda$ . En considérant une polarisation  $TE$ , une période et une hauteur fixes ( $\Lambda = 400$  nm et  $H = 500$  nm), les spectres de transmission sont calculés pour différentes valeurs de la largeur ( $140 < W < 300$  nm) correspondant à différentes valeurs du facteur de remplissage

## CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

( $0.35 < f < 0.75$ ) et pour différentes valeurs de  $n_c$ . Un exemple de spectres de transmission pour les deux valeurs extrêmes de  $f$  est présenté dans la figure 3.7(b).

Pour ces mêmes paramètres fixes, et pour  $f = 0.35$ , nous avons déjà attribué précédemment dans la figure 3.3(b), l'excitation d'un mode guidé d'ordre supérieur à la valeur élevée de la hauteur. Dans cette étude, il est aussi mis en évidence l'effet du facteur de remplissage dans l'excitation de ces modes d'ordres supérieur. Un troisième mode d'ordre supérieur (le mode  $TE_2$ ) est effectivement excité pour la valeur  $f = 0.75$ . Le déplacement

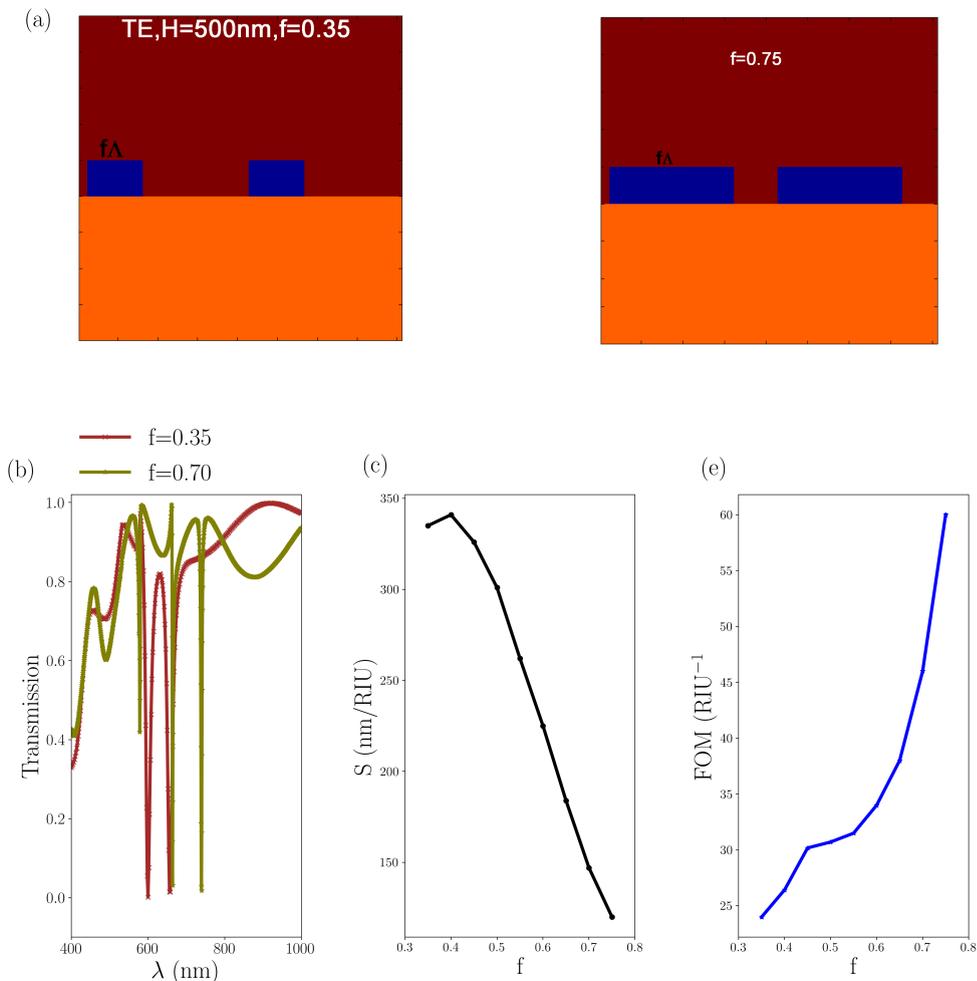


FIGURE 3.7 – (a) Schéma de la structure diélectrique pour deux largeurs (facteurs de remplissage) différentes :  $W = 140$  nm ( $f = 0.35$ ) et  $W = 300$  nm ( $f = 0.75$ ). (b) Transmission d'ordre zero en polarisation TE pour deux valeurs du facteur de remplissage avec  $\Lambda = 400$  nm,  $H = 500$  nm,  $n_s = 1.45$ ,  $n_g = 2.4$  et  $n_c = 1.33$ . Evolution de la (c) sensibilité et de la (d) FOM en fonction du facteur de remplissage

vers les grandes longueurs d'onde des différents modes GMR est aussi observé en augmentant le facteur de remplissage. Ce déplacement s'accompagne d'un rétrécissement des bandes de résonance qui pourrait être exploitable pour l'amélioration de la FOM. L'apparition de ces modes supplémentaires peut s'expliquer analytiquement par les équations (1.38) et (1.41), soit :

$$\max [n_s, n_c] \leq |n_{inc} \sin(\theta_{inc}) - p \frac{\lambda}{\Lambda}| < n_{moyTE}$$

$$n_{moyTE} = n_o = [n_g^2 f + n_c^2 (1 - f)]^{1/2}$$

En considérant les paramètres fixes de notre structure ( $n_c = 1.33$ ,  $n_s = 1.45$ ,  $n_g = 2.4$  et  $\Lambda = 400$  nm), les valeurs de l'indice de réfraction moyen  $n_{moyTE}$  correspondant aux valeurs extrêmes de  $f$  (1.78 pour  $f = 0.35$  et 2.13 pour  $f = 0.70$ ) permettent de déterminer les plages permises des modes guidés GMR :

- $580 \leq \lambda < 712$  nm pour  $f = 0.35$ .
- $580 \leq \lambda < 852$  nm pour  $f = 0.70$ .

Ainsi, plus le facteur de remplissage est grand, plus la plage permise s'élargit, permettant l'apparition d'autres modes supérieurs.

La sensibilité et la FOM ont été calculés pour les différentes valeurs du facteur de remplissage. Comme le montre la figure 3.7(c), la sensibilité, assez élevée pour les faibles valeurs du facteur de remplissage (valeur optimale de 340 nm/RIU pour  $f = 0.35$ ), chute de manière quasi-linéaire avec l'augmentation de  $f$  en accord avec les résultats de [74]. Cette diminution peut s'expliquer par la diminution de la surface de contact entre l'analyte et le substrat. Néanmoins, la diminution de la largeur de bande de la résonance GMR avec l'augmentation de  $f$  est à l'origine d'une élévation de la FOM qui passe de 23 RIU<sup>-1</sup>, pour  $f = 0.35$ , à 60 RIU<sup>-1</sup>, pour  $f = 0.75$  (voir figure 3.7(d)).

## 3.5 Effet de l'indice de réfraction

### 3.5.1 Indice de réfraction du substrat

Tous les calculs FDTD menés jusqu'à présent l'on été avec le même indice de réfraction du substrat fixé à  $n_s = 1.45$ . Nous allons présenter, dans cette section, l'effet de l'indice de réfraction du substrat sur l'évolution de la sensibilité et la figure de mérite de

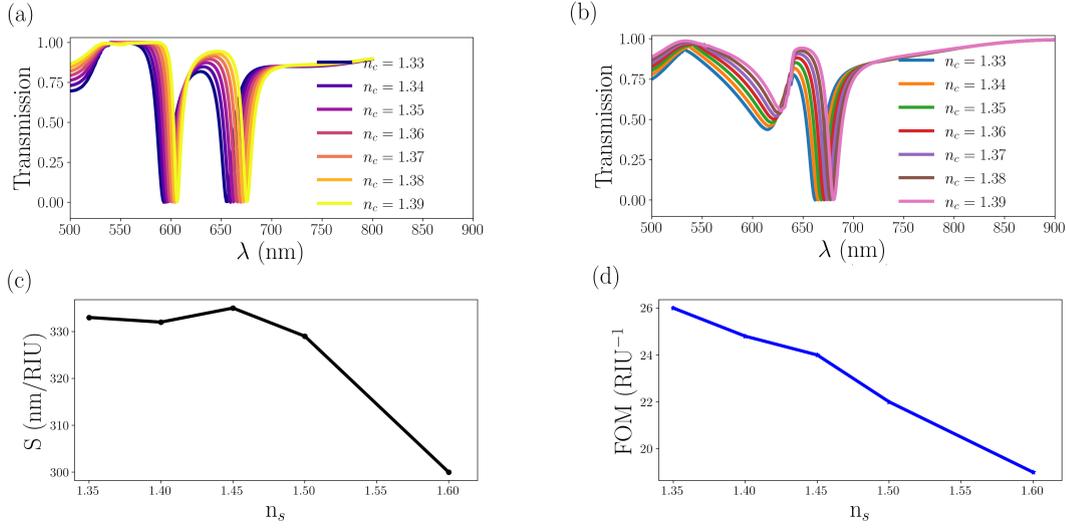


FIGURE 3.8 – Transmission d'ordre zéro en polarisation TE pour  $\Lambda = 400$  nm,  $W = 140$  nm,  $H = 500$  nm,  $n_g = 2.4$  et (a)  $n_s = 1.35$  ou (b)  $n_s = 1.60$ . (c) Évolution en fonction de  $n_s$  de la (c) sensibilité et de la (d)  $FOM$ .

notre bio-capteur diélectrique. Pour une excitation en polarisation TE avec une période, hauteur et largeur fixes ( $\Lambda = 400$  nm,  $H = 500$  nm,  $W = 140$  nm), la transmission a été calculée pour différentes valeurs de  $n_s$  allant de 1.35 (en se rapprochant des valeurs de  $n_c$  tel que la configuration des milieux entourant le réseau soit symétrique) à 1.60 (en s'éloignant encore plus des valeurs de  $n_c$  tel que la configuration soit asymétrique). Deux exemples des spectres de transmission pour les valeurs extrêmes de  $n_s$  sont représentés sur la figure 3.8(a,b). On notera un déplacement vers les grandes longueurs d'onde de la résonance du mode GMR fondamental et la disparition du mode supérieur en augmentant l'indice de réfraction du substrat. Cette dernière trouve son explication analytiquement dans la réduction de la plage permise permettant l'apparition de ces modes. En effet, en appliquant les équations (1.38) et (1.41), la borne supérieure  $n_{moyTE} = 1.78$  est maintenue constante tandis que la borne inférieure varie en fonction de  $n_s$  tel que la plage permise soit donnée par :

- $540 \leq \lambda < 712$  nm pour  $n_s = 1.35$ .
- $640 \leq \lambda < 712$  nm pour  $n_s = 1.60$ .

Le calcul des performances de détection, illustré sur la figure 3.8(c,d) met en évidence une diminution de la sensibilité et de la FOM lorsque  $n_s$  augmente (configuration diélectrique de plus en plus asymétrique) en accord avec les constatations déjà notées dans le cas de bio-capteurs diélectrique [104] et plasmonique [105]. Cette diminution de performance

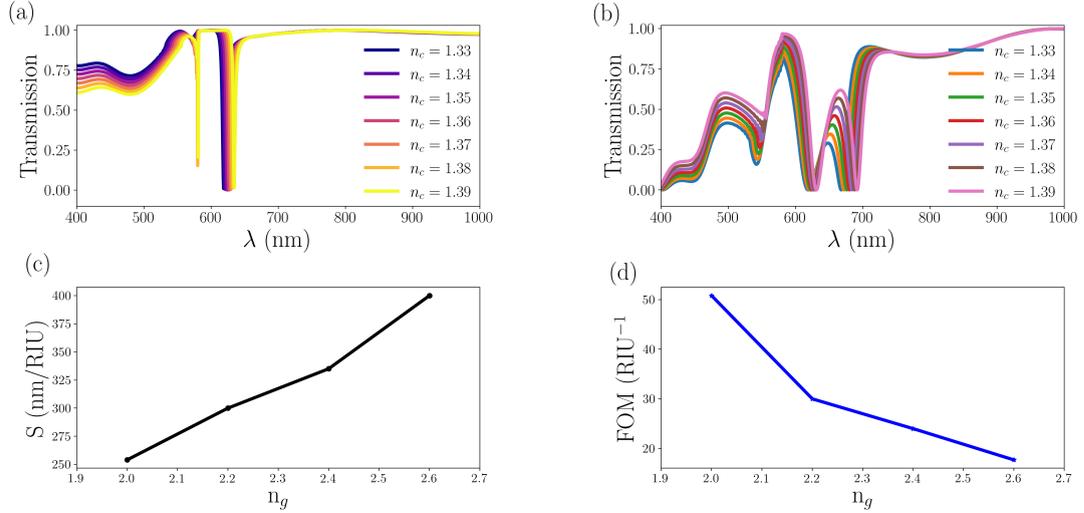


FIGURE 3.9 – Transmission d'ordre zéro en polarisation TE pour  $\Lambda = 400$  nm,  $W = 140$  nm,  $H = 500$  nm,  $n_s = 1.35$  et (a)  $n_g = 2.0$  ou (b)  $n_g = 2.6$ . (c) Évolution en fonction de  $n_g$  de la (c) sensibilité et de la (d)  $FOM$ .

(autour de 35 nm/RIU pour  $S$  et de 8 RIU<sup>-1</sup> pour la  $FOM$ ) peut s'expliquer par la diminution du gap entre les indices de réfraction du substrat et de la couche guidante qui n'est pas en faveur de performances de détection optimales. Ces résultats valident le choix du verre comme substrat dans l'optimisation des performances de détection des bio-capteurs diélectriques.

### 3.5.2 Indice de réfraction du réseau périodique

Tout comme les indices de réfraction du substrat et du superstrat, la valeur de l'indice de réfraction du réseau diélectrique périodique influe fortement sur la position de la résonance GMR et l'apparition des modes d'ordre supérieur. Ceci est mis en évidence en calculant les spectres de transmission, en polarisation TE, pour différentes valeurs de  $n_g$  (entre  $n_g = 2$  et  $n_g = 2.6$ ), et en maintenant fixes les autres paramètres de la structure ( $\Lambda = 400$  nm,  $W = 140$  nm,  $H = 500$  nm et  $n_s = 1.45$ ). Les figures 3.9(a,b) illustrent bien cette influence de la variation de  $n_g$  sur la position de la résonance GMR qui se déplace vers les grandes longueurs d'onde ainsi que sa largeur de bande qui augmente sensiblement avec  $n_g$ . L'apparition de modes d'ordre supérieur avec l'augmentation de  $n_g$  s'explique par l'élargissement de la plage permise donnée par les équations (1.38) et (1.41). Enfin, on notera un comportement contraire de la sensibilité et de la  $FOM$  en fonction de

l'indice de réfraction du réseau (voir figures 3.9(c,d)).

Comme attendu, l'augmentation de  $n_g$ , et donc du gap entre les indices de réfraction du substrat et de la couche guidante, est à l'origine d'une importante amélioration de la sensibilité de notre structure (autour de 150 nm/RIU pour une évolution de 0.4 de  $n_g$ ). Ceci confirme le constat déjà établi dans la section précédente quant à la forte corrélation entre la sensibilité de la structure et le gap d'indices. Cependant, l'élargissement des bandes de résonance est prépondérant par rapport à l'amélioration de la sensibilité. Ceci a pour effet de réduire la  $FOM$  de plus de 30 RIU<sup>-1</sup>.

### 3.6 Effet de la forme

Dans cette section, nous nous intéressons à l'étude de l'effet de la forme géométrique sur l'optimisation des performances d'un capteur GMR 2D à réseau périodique. Nous avons choisi pour cela une forme triangulaire avec un profil quasi-isocèle, de largeur à la base  $W$  et de largeur au sommet  $D$ , comparable à celui étudié par [9] (voir figure 3.10). En restant en incidence normale avec une polarisation TE, avec un indice de réfraction du réseau plus élevé ( $n_g = 3.49$ ), en fixant la hauteur, la période et la largeur à la base ( $\Lambda = H = 700$  nm et  $W = 350$  nm) et en variant la largeur au sommet  $D$  (soit le facteur d'inclinaison de la forme triangulaire), les spectres de transmission FDTD sont calculés pour trois facteurs d'inclinaison différents ( $D = 350, 70, 0$  nm) et représentés sur la figure 3.10. Ainsi, en passant d'un profil rectangulaire ( $D = W = 350$  nm) à un profil triangulaire isocèle ( $D = 0$  nm), l'augmentation du facteur d'inclinaison tend à réduire le nombre de modes résonants d'ordre supérieur tel que seul le mode fondamental puisse être excité. Cela peut s'expliquer par le mécanisme des réflexions multiples, à l'origine de l'excitation de ces modes de cavité du réseau d'ordre supérieur. Celui-ci s'atténue fortement avec l'augmentation du facteur d'inclinaison. Cette augmentation est à l'origine du déplacement du mode GMR fondamental vers les petites longueurs d'onde avec un rétrécissement de sa largeur de bande.

Une étude comparative des performances de détection met en évidence une même sensibilité pour les deux formes géométriques qui peut s'expliquer par l'invariance de la surface de contact superstrat-substrat au vu de la largeur à la base identique pour les deux profils (voir figure 3.11). Ceci a pour conséquence d'obtenir une  $FOM$  un peu plus élevée pour le profil triangulaire qui présente des résonances plus fines par rapport au profil rectangulaire. Nos résultats de simulation ont démontré que le profil triangulaire de la géométrie

## CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

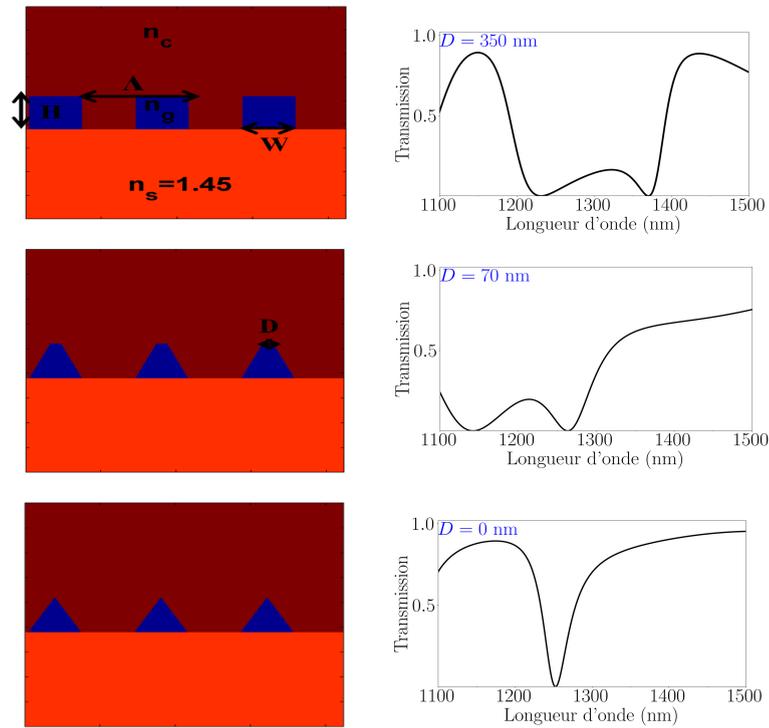


FIGURE 3.10 – Spectres de transmission FDTD pour différents profils du réseau périodique avec  $n_g = 3.49$ ,  $n_s = 1.45$ ,  $n_c = 1.33$ ,  $\Lambda = H = 700$  nm,  $W = 350$  nm et  $D = 350, 70, 0$  nm.

peut avoir un impact significatif sur les caractéristiques du mode de résonance des structures de réseaux sublongueurs d'onde. Il a été mis en évidence un mode de résonance fondamental présentant des propriétés très intéressantes avec une sensibilité comparable et un facteur de qualité  $Q$  assez élevé pour être exploité dans l'optimisation de la  $FOM$  en

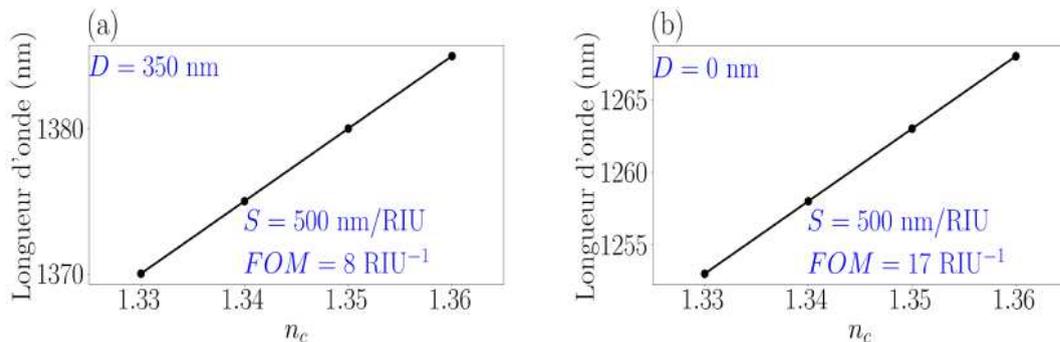


FIGURE 3.11 – Évolution des longueurs d'onde de résonance en fonction de l'indice de réfraction du superstrat pour (a) le profil géométrique rectangulaire et (b) le profil géométrique triangulaire. La sensibilité est déduite de la pente dans chaque courbe.

comparaison avec la structure rectangulaire traditionnelle.

### 3.7 Premier bilan

Dans cette première partie de notre étude paramétrique, nous avons essayé de monter l'effet des différents paramètres géométriques et physiques sur la position de la résonance GMR ainsi que sur la sensibilité et la figure de mérite de notre capteur basique à profil rectangulaire. Ces effets, résumés dans le Tableau 3.1 mettent en évidence la problématique d'optimisation simultanée des deux performances car l'optimisation de l'une se fait souvent au détriment de l'autre.

Pour illustrer cette problématique, nous proposons une comparaison des performances optimales pour la variation du profil d'indice du superstrat ( $n_c = 1.33 - 1.39$ ) de notre structure rectangulaire traditionnelle ( $n_g = 2.4$  et  $n_s = 1.45$ ), obtenues avec les paramètres suivants :

- Une polarisation TE qui présente une meilleure sensibilité sur un large domaine de hauteurs.
- Une hauteur  $H = 500$  nm qui présente, pour cette polarisation, une sensibilité assez importante.
- Une période  $\Lambda = 500$  qui présente, pour la polarisation TE et la hauteur  $H = 500$  nm, une sensibilité importante et au delà de laquelle la  $FOM$  chute considérablement.
- une largeur  $W = 140$  nm qui présente, pour la polarisation TE, la hauteur  $H = 500$  nm et la période  $\Lambda = 500$  nm, une sensibilité optimale qui chute brutalement si l'on augmentait le coefficient de remplissage.

Paramètre	Résonance GMR		$S$	$FOM$
Hauteur ( $H$ )	$H \nearrow$ la résonance shifte vers $\lambda_{GMR} \nearrow$		$H \nearrow, S \nearrow$	$H \nearrow, FOM \nearrow$
Polarisation	TE	Pour TM, la $FWHM$ est importante	$S(TE) > S(TM)$	
	TM		$FOM(TE) < FOM(TM)$	
Période ( $\Lambda$ )	$\Lambda \nearrow$ la résonance shifte vers $\lambda_{GMR} \nearrow$		$\Lambda \nearrow, S \nearrow$	$\Lambda \nearrow, FOM \nearrow$
Largeur ( $W$ )	$W \nearrow$ la résonance shifte vers $\lambda_{GMR} \nearrow$		$W \nearrow, S \searrow$	$W \nearrow, FOM \nearrow$
Indice de réfraction	$n_s$	$n_s \nearrow$ la résonance shifte vers $\lambda_{GMR} \nearrow$	$n_s \nearrow, S \searrow$	$n_s \nearrow, FOM \searrow$
	$n_g$	$n_g \nearrow$ la résonance shifte vers $\lambda_{GMR} \nearrow$	$n_g \nearrow, S \nearrow$	$n_g \nearrow, FOM \searrow$

Tableau 3.1 – Récapitulatif de l'influence des différents paramètres géométriques et physiques sur la position de la résonance (GMR) et sur la sensibilité et la figure de mérite.

### CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

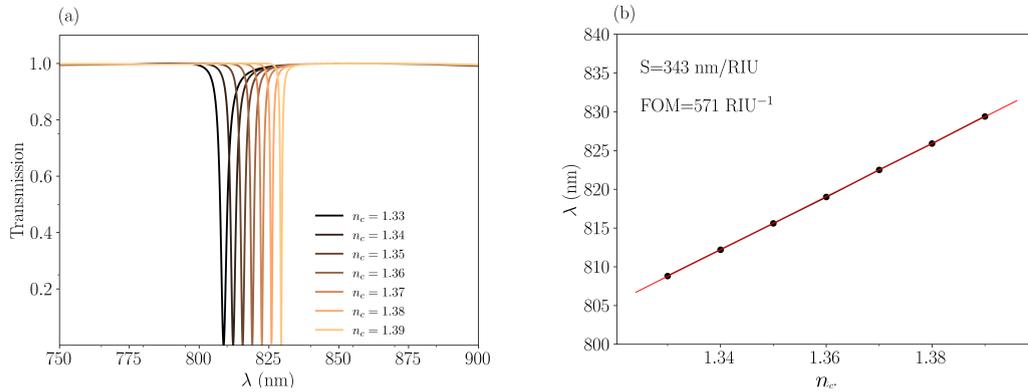


FIGURE 3.12 – (a) Spectres de transmission d’ordre zéro pour les différents indices du superstrat avec  $\Lambda = H = 500$  nm,  $W = 140$  nm,  $n_g = 2.4$  et  $n_s = 1.45$ . (b) Évolution de la résonance GMR en fonction de l’indice du superstrat. La sensibilité est déduite de la pente de la courbe.

Les spectres de transmission ainsi que l’évolution de la résonance GMR pour les différents indices de réfraction du superstrat sont représentés sur la figure 3.12. Les performances de détection obtenus avec ces paramètres sont comparées aux valeurs les plus optimales obtenues pour différents types de structures plus ou moins complexes proposées dans la littérature (voir tableau 3.2).

Les résultats de [106] ont été obtenus en utilisant un motif de réseau à deux largeurs différentes afin d’exciter des résonances type Fano [107]. Celles-ci sont caractérisées par une largeur de bande très fine exploitée pour optimiser la figure de mérite ( $S = 350$  nm/RIU et  $FOM = 437.52$  RIU $^{-1}$ ). Dans le travail de [104], l’analyte est placé entre deux réseaux rectangulaires à motif simple mais décalés l’un par rapport à l’autre. L’utilisation d’une quantité de matière diélectrique doublée a permis d’obtenir des valeurs optimales très importantes des deux performances ( $S = 748$  nm/RIU et  $FOM = 374$  RIU $^{-1}$ ). La troisième étude de [74] exploite un biocapteur à profil rectangulaire comparable à notre structure mais avec des paramètres géométriques beaucoup plus élevés ( $f = 2/5$ ,  $H = 600$  nm et  $\Lambda = 1000$  nm) pour obtenir une sensibilité assez élevée mais une  $FOM$  très faible ( $S = 575$  nm/RIU et  $FOM = 11$  RIU $^{-1}$ ). De cette étude comparative, on peut conclure que notre structure présente une sensibilité optimale comparable à celle de [106] et, à hauteur équivalente, à celle de [104]. Elle présente aussi, et surtout, une  $FOM$  bien meilleure que les trois autres études.

Cette première étude a permis de mettre en évidence l’influence de la variation des paramètres géométriques sur les performances de détection d’un bio-capteur diélectrique

## CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

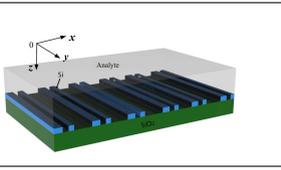
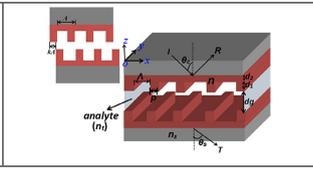
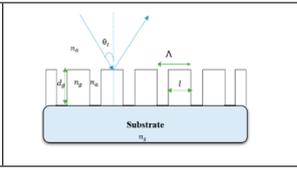
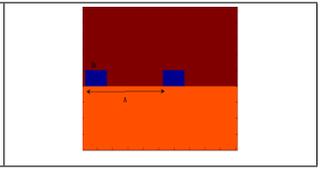
			
[106]	[104]	[74]	Notre structure
$S = 350 \text{ nm}/RIU$	$S = 748 \text{ nm}/RIU$	$S = 575 \text{ nm}/RIU$	$S = 343 \text{ nm}/RIU$
$FOM = 437.5 \text{ RIU}^{-1}$	$FOM = 374 \text{ RIU}^{-1}$	$FOM = 11 \text{ RIU}^{-1}$	$FOM = 571 \text{ RIU}^{-1}$

Tableau 3.2 – Comparaison des performances de détection de notre structure ( $\Lambda = H = 500 \text{ nm}$ ,  $W = 140 \text{ nm}$ ,  $n_g = 2.4$  et  $n_s = 1.45$ ) avec d'autres structures proposées dans la littérature.

à réseau rectangulaire. Elle a aussi montré les limites d'optimisation simultanée des deux performances que sont la sensibilité et la figure de mérite. La valeur élevée de la figure de mérite obtenue dans le cadre de cette étude ne permet malheureusement pas d'améliorer la sensibilité et d'atteindre les valeurs élevées obtenues dans la littérature. C'est dans cette optique que nous proposons, dans la section suivante, une nouvelle stratégie qui consiste à introduire des piliers intermédiaires entre le réseau et le substrat.

### 3.8 Effet de l'insertion de piliers sous le réseau

Des études récentes [108], ont démontré que la perte de sensibilité était due à la perte d'énergie au niveau du substrat. Pour y remédier, il a été proposé l'idée d'utiliser une couche intermédiaire, d'indice de réfraction le plus faible possible, entre le réseau périodique et le substrat, permettant ainsi de récupérer l'énergie perdue dans le substrat et d'améliorer la sensibilité. Dans le domaine des capteurs plasmoniques (LSPR), des piliers diélectriques ont aussi été incorporés pour réduire le contact avec le substrat et ainsi permettre de récupérer l'énergie perdue [109–111].

En s'inspirant de ces études, nous présentons dans cette section les résultats de nos simulations prenant en compte l'introduction de piliers diélectriques, qui montrent une nette amélioration de la sensibilité et de la  $FOM$  de notre capteur diélectrique GMR. Dans un premier temps, nous présenterons en détail les effets de l'insertion d'une couche diélectrique sous le réseau périodique de notre structure de départ (voir figure 3.13). Des piliers de différents indices de réfraction, hauteurs et largeurs seront ensuite introduit pour optimiser la sensibilité et la  $FOM$  de notre capteur GMR. Les paramètres géométriques du réseau périodique sont ceux utilisés en fin de section précédente proposés pour la compa-

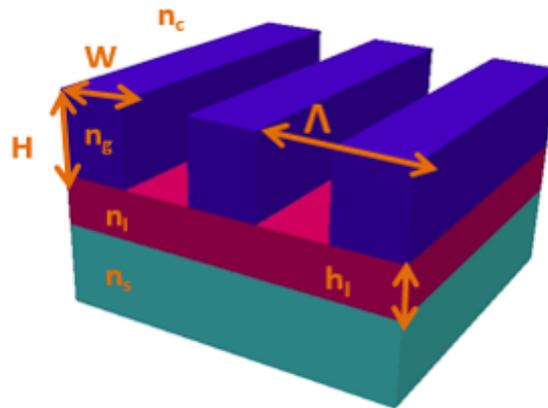


FIGURE 3.13 – Diagramme de la structure de réseau de guides d'ondes GMR avec une couche sous le réseau périodique d'indice de réfraction  $nl$  et d'une hauteur  $hl$ .

raison des performances avec d'autres structures de la littérature ( $\Lambda = H = 500$  et  $W = 140$  nm soit un facteur de remplissage  $f = 0,28$ ).

### 3.8.1 Effet de la couche intermédiaire

La figure 3.14 met en évidence l'effet de la hauteur  $hl$  de la couche intermédiaire ( $25 < hl < 200$  nm) sur les performances du capteur GMR et la distribution de l'énergie électrique pour deux valeurs différentes de son indice de réfraction ( $nl = 1.09$  pour le Dioxyde de Silicium Poreux [108], et  $nl = 1.62$  pour le photorésist [82]). Comme illustré sur les figures 3.14(a-b), l'introduction de la couche intermédiaire a pour effet immédiat de modifier les performances du capteur.

Pour une couche intermédiaire de faible d'indice de réfraction ( $nl = 1.09$ ), on notera une amélioration de la sensibilité, avec l'augmentation de la hauteur de cette couche, avant une saturation autour de  $hl = 150$  nm ( $S = 365$  nm/RIU). Le même comportement est observé pour la  $FOM$  qui atteint une valeur optimale ( $FOM = 905$  RIU<sup>-1</sup>) autour de  $hl = 100$  nm avant de chuter brusquement et se stabiliser autour de  $hl = 150$  nm, mais tout en restant toujours élevée par rapport à la structure sans couche intermédiaire.

Ce comportement des performances de notre structure change négativement lorsque l'indice de la couche intermédiaire est plus élevé ( $nl = 1,62$ ). L'augmentation de la hauteur  $hl$  a pour effet de diminuer la sensibilité ( $S = 310$  nm/RIU pour  $hl = 200$  nm) et d'augmenter la  $FWHM$  induisant une diminution significative de la  $FOM$  ( $FOM = 182$  RIU<sup>-1</sup> pour  $hl = 200$  nm).

### CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

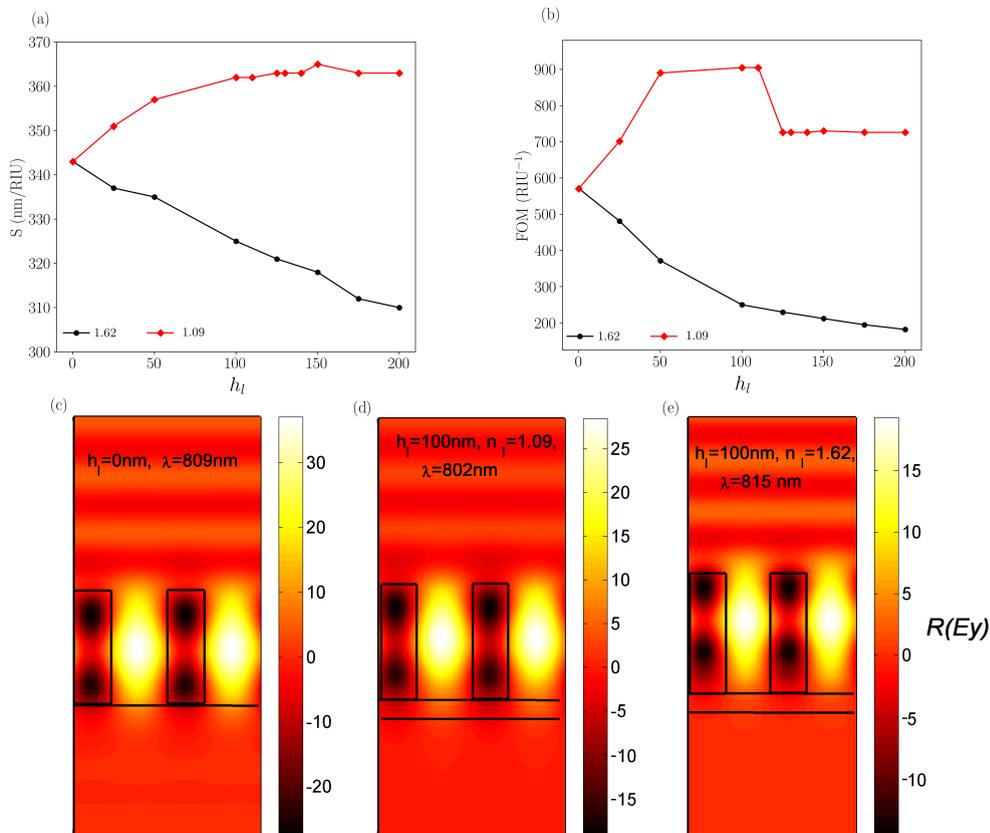


FIGURE 3.14 – Évolution en fonction de la hauteur de la couche intermédiaire de la (a) sensibilité et de la (b)  $FOM$  pour deux indices de réfraction de la couche intermédiaire. Distributions de la partie réelle du champ électrique aux longueurs d'onde de résonance de la structure sans couche intermédiaire (c) et avec couche intermédiaire de hauteur  $hl = 100$  nm et (d)  $nl = 1.09$  ou (e)  $nl = 1.62$ . L'indice de réfraction du superstrat est fixé à  $nc = 1.33$ .

Cette différence d'évolution des performances de détection peut trouver son origine dans l'écart d'indices de réfraction ( $\Delta n = n_{moy}(n_g) - nl$ ) où  $n_{moy}(n_g) = 1,69$  est l'indice moyen du réseau calculé par l'équation (1.38). Plus cet écart est grand ( $nl$  petit) plus l'énergie électrique est dirigée vers le superstrat avec l'augmentation de la hauteur de la couche intermédiaire (voir figures 3.14(c-e)). Cela conduit à une amélioration de la sensibilité et une diminution des pertes d'énergie ( $FWHM$  faible). Les saturations de  $S$  et de la  $FOM$  sont atteintes lorsque toute l'énergie est confinée, ce qui est le cas pour des hauteurs  $hl$  supérieures à 100 nm. Nos résultats pour la couche d'indice  $nl = 1.09$  sont en bon accord avec les résultats de [108], qui montrent une amélioration des performances

de détection avec l'augmentation de l'écart d'indice  $\Delta n$ . Dans le cas d'une couche intermédiaire avec  $n_l = 1,62$ , l'écart d'indice est faible ( $\Delta n = 0,07$ ) et une grande partie de l'énergie est transférée au substrat comme le montre la figure 3.14(e). D'autre part, plus la hauteur de la couche intermédiaire est élevée, plus l'énergie est en contact avec le substrat au détriment du milieu de détection et plus les pertes d'énergie augmentent ( $FWHM$  augmente), induisant une perte de sensibilité et de  $FOM$ .

### 3.8.2 Effet des piliers

Dans la section précédente, nous avons montré l'intérêt de diriger l'énergie transférée au substrat vers l'environnement extérieur via une couche intermédiaire, à faible indice de réfraction ( $\Delta n$  élevé), pour améliorer la sensibilité et la  $FOM$ . Dans cette partie, nous allons remplacer la couche uniforme par des piliers diélectriques (voir figure 3.15). Pour une largeur et une hauteur fixes ( $h_p = 100$  nm et  $l_p = W = 140$  nm), une première étude de l'effet de l'indice de réfraction des piliers met en évidence une augmentation (même légère) de la sensibilité proportionnellement à l'indice de réfraction des piliers, contrairement à ce qui a été observé pour la couche uniforme (voir figure 3.16(a)). A hauteur et indice de réfraction équivalents ( $h_l = h_p = 100$  nm et  $n_l = n_p = 1.09$ ), les

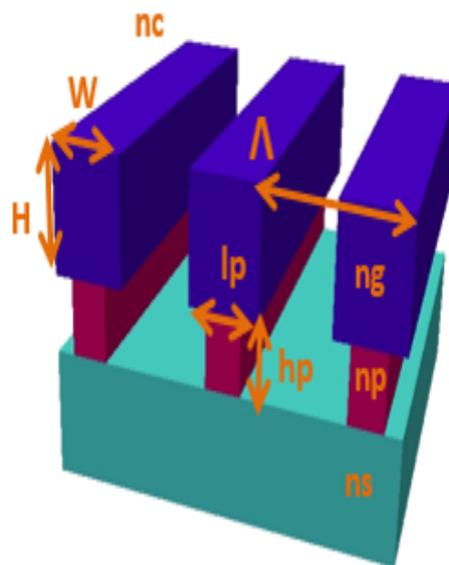


FIGURE 3.15 – Structure GMR composée d'un réseau périodique de piliers diélectriques d'indice de réfraction  $n_p$ , de hauteur  $h_p$  et de largeur  $l_p$ .

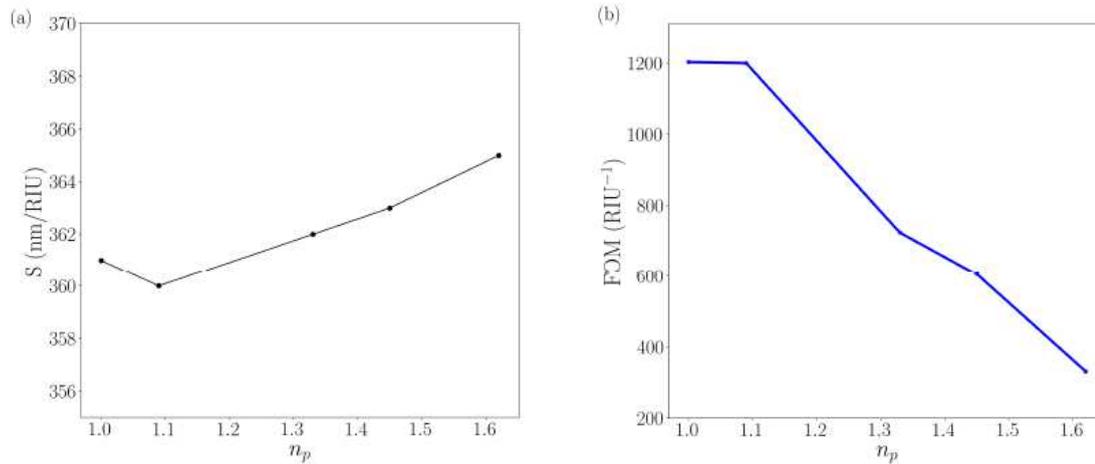


FIGURE 3.16 – Évolution en fonction de l'indice de réfraction des piliers de la (a) sensibilité et de la (b)  $FOM$  avec  $h_p = 100$  nm et  $l_p = w = 140$  nm.

valeurs de la sensibilité obtenues pour une couche intermédiaire uniforme ou un pilier de même largeur que le réseau sont identiques ( $S$  autour de 360 nm/RIU). Concernant la  $FOM$ , l'augmentation de l'indice de réfraction a pour effet, comme pour la couche uniforme, de réduire sa valeur de manière assez importante en raison de l'augmentation de la largeur de la bande de résonance (voir figure 3.16(b)). Néanmoins, la valeur optimale obtenue à hauteur et indice de réfraction équivalents à celle de la couche uniforme est plus importante dans le cas des piliers (1200 RIU<sup>-1</sup> contre 900 RIU<sup>-1</sup> pour la couche uniforme).

L'étape suivant de notre étude paramétrique consiste à voir, comme pour la couche uniforme, l'évolution des performances de notre bio-capteur en fonction de la hauteur des piliers. Pour une largeur fixe ( $l_p = W = 140$  nm), l'effet de la hauteur des piliers, pour différentes valeurs de l'indice de réfraction, est illustré sur la figure 3.16. Comme attendu, une nette amélioration de la sensibilité est obtenue en augmentant la hauteur des piliers pour les trois indices de réfraction, avec des valeurs optimales plus élevées obtenues à des hauteurs plus élevées par rapport à la couche uniforme. Concernant la  $FOM$ , la valeur optimale obtenue est plus élevée par rapport à la couche uniforme mais elle décroît, tout comme pour la couche uniforme, avec l'augmentation de l'indice de réfraction.

Pour mieux expliquer ces résultats, nous avons illustré sur les figures 3.17(c-e) la distribution du champ électrique pour les trois indices de réfraction des piliers et pour une hauteur  $h_p = 100$  nm. Nous pouvons observer une énergie de plus en plus confinée dans le superstrat lorsque l'écart  $\Delta n$  augmente ( $\Delta n = n_{moy}(n_g) - n_{moy}(n_p)$ ), où  $n_{moy}(n_p)$  repré-

### CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

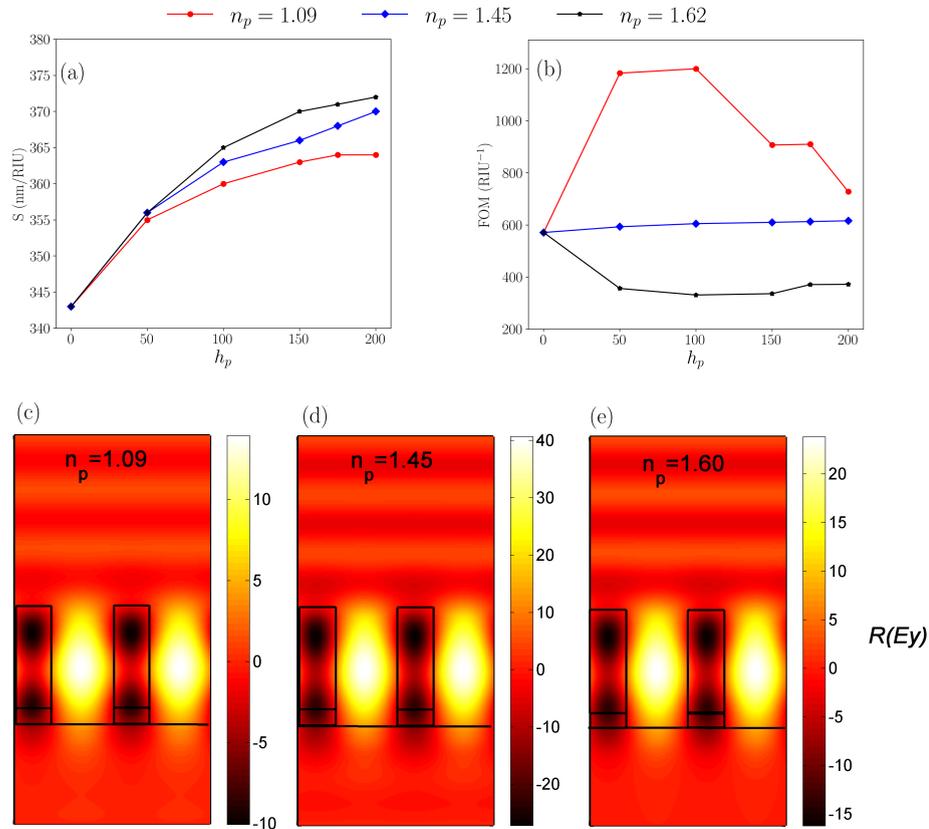


FIGURE 3.17 – Évolution en fonction de la hauteur des piliers de la (a) sensibilité et de la (b)  $FOM$  pour une largeur  $l_p = 140$  nm et pour différents indices de réfraction. Distributions de la partie réelle du champ électrique aux longueurs d'onde de résonance pour chaque indice de réfraction des piliers pour (c)  $n_p = 1.09$  à  $\lambda = 808$  nm, (d)  $n_p = 1.45$  à  $\lambda = 810$  nm et (e)  $n_p = 1.62$  à  $\lambda = 812$  nm

sente l'indice moyen des piliers). Ceci peut expliquer une durée de vie plus élevée et une largeur de bande plus étroite à l'origine d'une  $FOM$  plus élevée pour les faibles valeurs de l'indice de réfraction. A l'inverse, plus l'énergie est en contact avec le milieu extérieur (ce qui est le cas avec les grandes valeurs de l'indice de réfraction), plus la sensibilité est élevée. Ainsi, et contrairement à la couche uniforme, plus l'écart d'indice  $\Delta n$  diminue, plus l'énergie est piégée dans la cavité formée par le réseau périodique, améliorant significativement la sensibilité.

La dernière partie de cette étude porte sur l'effet de la largeur des piliers ( $60 < l_p < 220$  nm) en fixant leurs hauteurs à la valeur optimale  $h_p = 100$  nm et en variant leur indice de réfraction. Les résultats, présentés sur la figure 3.18, montrent l'effet positif de l'introduction de ces piliers avec une valeur optimale de la sensibilité à une largeur plus faible

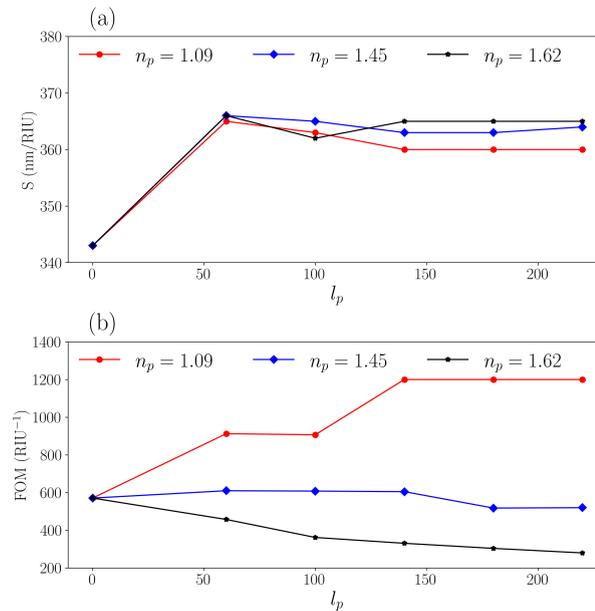


FIGURE 3.18 – Évolution en fonction de la largeur des piliers de la (a) sensibilité et de la (b)  $FOM$  pour une hauteur  $h_p = 100$  nm et pour différents indices  $n_p = 1.09, 1.45$  et  $1.62$ .

que celle du réseau ( $S = 366$  nm/RIU pour  $l_p = 60$  nm et pour les trois indices de réfraction) puis une légère diminution et une saturation lorsque la largeur des piliers atteint celle du réseau ou le dépasse pour tendre vers une couche uniforme. Une augmentation de la  $FOM$  est aussi obtenue pour l'indice de réfraction le plus faible. Une saturation est néanmoins atteinte lorsque la largeur des piliers égale ou dépasse la largeur du réseau. Dans le Tableau 3.3, nous avons résumé les principaux résultats obtenus dans le cadre de cette étude paramétrique en y ajoutant ceux obtenus pour la hauteur  $h_p = 200$  nm et pour lesquelles nous avons obtenu les valeurs les plus élevées de la sensibilité ( $l_p = 60$  nm et  $l_p = 140$  nm). Si l'utilisation d'une couche diélectrique intermédiaire permettait d'améliorer sensiblement les performances de notre bio-capteur (pour un indice de réfraction faible), l'utilisation de piliers (et donc de beaucoup moins de matière) permettait d'avoir des performances équivalentes en sensibilité et une nette amélioration de la  $FOM$  pour une hauteur plus importante par rapport à la couche uniforme ( $h_p = 200$  nm) et une largeur plus faible que celle du réseau périodique ( $l_p = 60$  nm).

## CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

Tableau 3.3 – Résumé des principaux résultats obtenus pour la sensibilité  $S$  (en nm/RIU) la largeur de bande  $FWHM$  (en nm) et la  $FOM$  (en RIU<sup>-1</sup>)).

			$S$	$FWHM$	$FOM$	
<i>sans couche</i>	$hl, hp = 0$ nm		343	0.6	571	
<i>avec la couche</i>	$hl = 100$ nm		$nl = 1.09$	362	0.4	905
			$nl = 1.62$	325	1.3	250
<i>avec piliers</i>	$hp = 100$ nm	$lp = 140$ nm	$np = 1.09$	360	<b>0.3</b>	<b>1200</b>
	$hp = 100$ nm	$lp = 140$ nm	$np = 1.45$	363	0.6	605
	$hp = 100$ nm	$lp = 140$ nm	$np = 1.62$	365	1.1	331
	$hp = 100$ nm	$lp = 60$ nm	$np = 1.09$	365	0.4	912.5
	$hp = 100$ nm	$lp = 60$ nm	$np = 1.45$	366	0.4	610
	$hp = 100$ nm	$lp = 60$ nm	$np = 1.62$	366	0.8	457.5
	<i>avec piliers</i>	$hp = 200$ nm	$lp = 140$ nm	$np = 1.09$	364	0.5
	$hp = 200$ nm	$lp = 140$ nm	$np = 1.45$	370	0.6	616
	$hp = 200$ nm	$lp = 140$ nm	$np = 1.62$	372	0.9	413
	$hp = 200$ nm	$lp = 60$ nm	$np = 1.09$	369	0.4	922.5
	$hp = 200$ nm	$lp = 60$ nm	$np = 1.45$	373	0.6	621
	$hp = 200$ nm	$lp = 60$ nm	$np = 1.62$	<b>374</b>	0.7	534

### 3.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude paramétrique exhaustive en vue d'améliorer les performances de détection (sensibilité et  $FOM$ ) d'un capteur GMR basique à réseau 2D diélectrique. Les valeurs obtenues sont comparées aux valeurs récentes de la littérature avec des structures plus ou moins complexes. L'insertion de piliers diélectriques pour réduire le contact réseau-substrat et la variation des différents paramètres géométriques de ces piliers (hauteur, largeur et indice de réfraction) a permis d'améliorer considérablement la sensibilité et la  $FOM$  de notre capteur GMR. Nous avons pu obtenir des valeurs significatives de la sensibilité ( $S = 360$  nm/RIU) et de la  $FOM$  ( $FOM = 1200$  RIU<sup>-1</sup>).

### CHAPITRE 3. ÉTUDE PARAMÉTRIQUE DES PERFORMANCES D'UN CAPTEUR À RÉSEAU 1D DIÉLECTRIQUE

---

# Exploitation des modes protégés par la symétrie dans l'optimisation d'un capteur diélectrique - Application à la détection des impuretés dans le sang

## 4.1 Introduction

La détection optique des impuretés dans le sang constitue actuellement l'un des domaines les plus attrayant dans la détection biologique. Différents travaux ont été publiés en rapport avec la conception de biocapteurs optiques plus ou moins complexes sensibles à la variation de l'indice de réfraction de la solution sanguine en présence de ces différentes impuretés. C'est le cas pour la détection de l'hémoglobine glyquée dans le sang (vu son importance dans le contrôle quotidien de la glycémie chez les patients diabétiques) [112], ou la détection des anticorps de type IgG (IgG pour Immunoglobuline G) [113].

C'est dans ce contexte que nous proposons, dans le cadre de ce travail, la modélisation d'un bio-capteur fonctionnant dans la gamme proche IR, de conception simple et identique aux structures précédemment proposées [11, 46, 74], pour la détection de la variation de l'indice de réfraction du sang dans le domaine d'indice le plus couramment étudié pour la détection des anticorps, à savoir  $n_c = 1.34 - 1.38$ . Le schéma de notre structure GMR consiste en un réseau sub-longueur d'onde, périodique dans la direction  $OX$  (avec une période  $\Lambda$  plus petite que la longueur d'onde d'excitation tel que seul l'ordre zéro transmis soit propagatif), invariant dans la direction  $OY$  et finie dans la direction  $OZ$

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

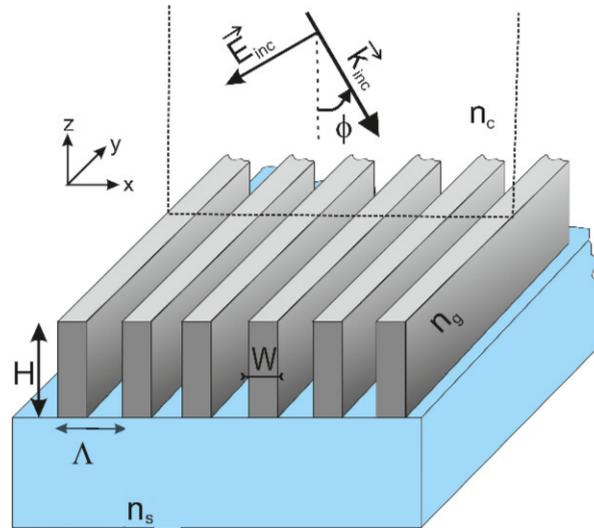


FIGURE 4.1 – Schéma de base de la structure GMR étudiée avec ses différentes dimensions comprenant la période  $\Lambda$ , la hauteur  $H$  et la largeur  $W$ , sous incidence normale ou oblique avec une lumière polarisée TM.  $n_c$ ,  $n_g$  et  $n_s$  sont les indices de réfraction du superstrat, du réseau diélectrique et du substrat, respectivement.

(voir figure 4.1). Le réseau, constitué d'un matériau diélectrique à indice de réfraction ( $n_g$ ) élevé, est de profil rectangulaire de hauteur  $H$  et de largeur  $W$ . Le réseau diélectrique, sur lequel est déposé l'analyte (sang d'indice de réfraction  $n_c$ ), est déposé sur un substrat en verre ( $n_s = 1.45$ ) afin d'approcher les conditions expérimentales de conception et de caractérisation. L'excitation se fait dans le milieu de détection et la transmission est mesurée dans le verre. Nous exploiterons dans cette étude, dans le cas d'une polarisation TM, l'existence de modes GMR particuliers protégés par la symétrie (modes SPM). L'excitation de ce type de résonances dans une telle structure est étudiée et optimisée pour obtenir un facteur de qualité  $Q$  élevé avec ( $Q = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ ,  $\Delta\lambda$  est la largeur à mi-hauteur (FWHM) de cette résonance à la longueur d'onde  $\lambda$ ). Ceci permettra de réduire les limites de détection et donc de mesurer de petits décalages de longueurs d'onde de résonance en fonction de petites variations de l'indice de réfraction. La méthode FMM et la méthode FDTD sont exploitées pour simuler et comparer les spectres de transmission afin de déterminer les conditions d'illumination pour exciter ces modes sombres. Une étude paramétrique est menée pour optimiser les différentes dimensions de la structure et des conditions d'illumination pour améliorer les performances de détection.

Les propriétés diélectriques du sang sont décrites par la dépendance en longueur d'onde (ou en fréquence) de sa permittivité  $\varepsilon(\lambda)$  et de son indice de réfraction  $n(\lambda)$  dans toute la gamme optique, en particulier autour des longueurs d'onde proche IR (jus-

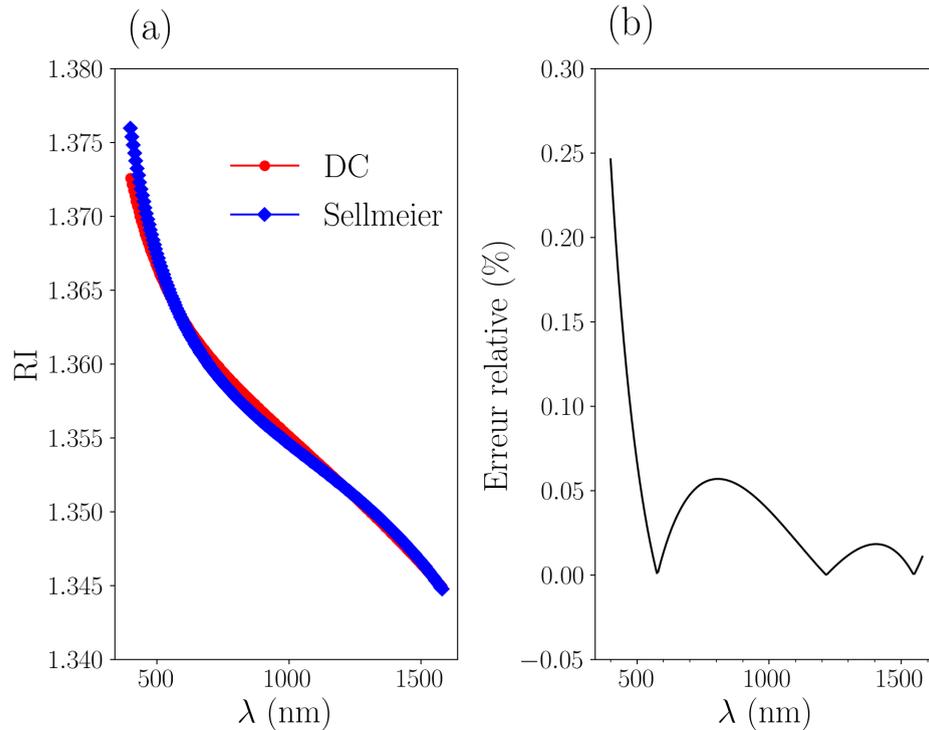


FIGURE 4.2 – (a) Variation de l'indice de réfraction du sang en fonction de la longueur d'onde en utilisant le modèle de Drude à deux points critiques (D2CP) et le modèle de Sellmeier [114]. (b) Variation de l'erreur relative entre les deux modèles.

qu'à 1550 nm). Dans le cadre de notre modélisation, la dispersion du sang est modélisée via le modèle de Drude à deux points critiques (D2CP) [94] (voir équation (2.10)), précédemment développé dans notre code dans le cas des métaux nobles [88]. La figure 4.2(a) illustre les valeurs obtenues pour l'indice de réfraction par le modèle D2CP comparées aux valeurs obtenues par le modèle de Sellmeier [114]. Cette comparaison confirme clairement que notre modèle (D2CP) décrit correctement la dispersion du sang dans toute la gamme optique avec une erreur relative entre les deux modèles ne dépassant pas 0.25% et inférieure à 0.05% au voisinage de l'IR (voir figure 4.2(b)).

## 4.2 Résultats de la simulation

### 4.2.1 Mise en évidence des modes SPM

Dans la suite de nos simulations, nous nous intéresserons à la gamme optique IR (de 1550 nm) où, malgré sa nature dispersive comme démontré précédemment, l'indice de ré-

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

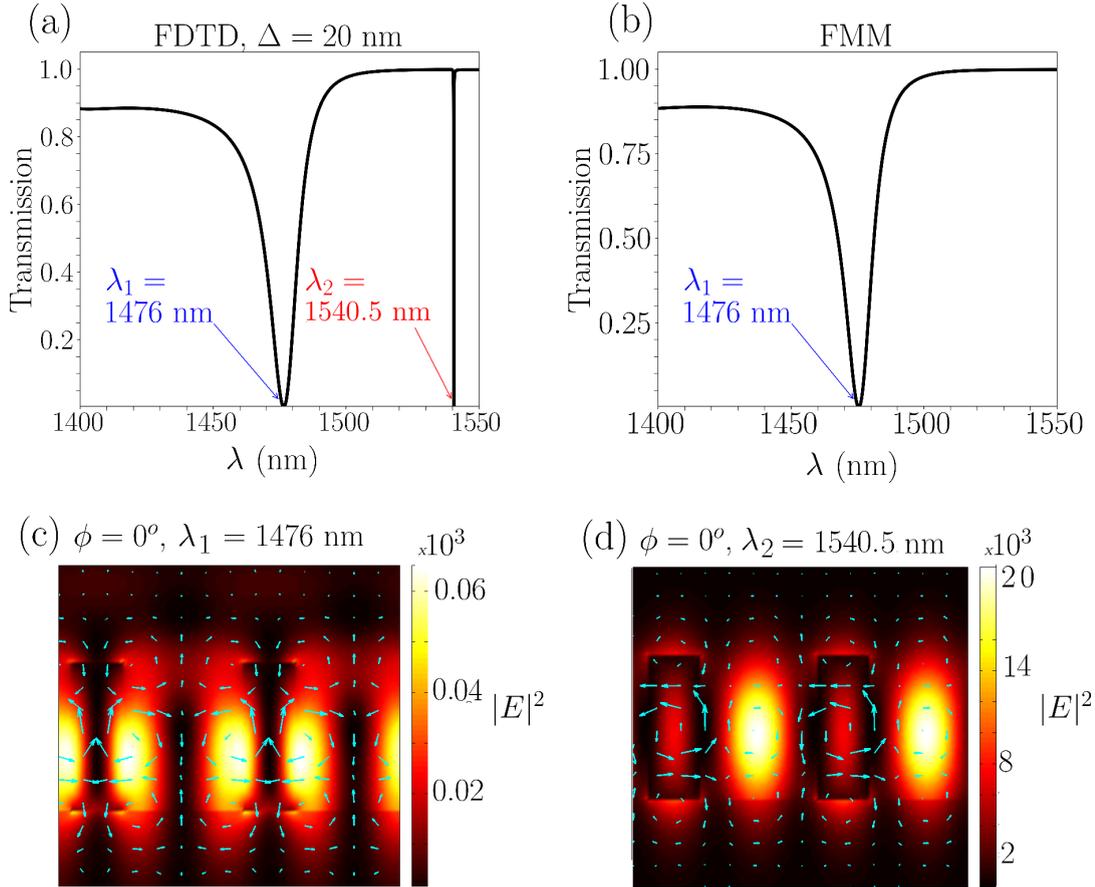


FIGURE 4.3 – Spectres de transmission d'ordre zéro, en incidence normale avec une polarisation TM, calculés par (a) simulation FDTD avec  $\Delta = 20$  nm et (b) simulation FMM. (c, d) Profils d'intensité normalisée du champ électrique dans le plan XZ correspondant aux deux résonances obtenues par Simulation FDTD avec  $\Delta = 20$  nm.

fraction du sang est choisi constant et fixé à la valeur indirectement mesurée par [114] et confirmé par nos calculs ( $n_c = 1,3456$ ). Après de multiples simulations, nous avons choisi de fixer, pour notre structure, les paramètres géométriques suivants :  $n_g = 2.4$ ,  $n_s = 1.45$ ,  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 900$  nm et  $W = 300$  nm. Le pas de discrétisation spatiale dans notre code FDTD est fixé à  $\Delta = \Delta x = \Delta z = 20$  nm.

Pour une incidence normale en polarisation TM, les spectres de transmission d'ordre zéro, illustrés sur la figure 4.3(a,b), révèlent une résonance GMR autour de la même longueur d'onde ( $\lambda_1 = 1476$  nm) aussi bien dans les calculs FDTD que les calculs FMM. Néanmoins, une résonance supplémentaire avec une largeur de bande très fine apparaît à la longueur d'onde ( $\lambda_2 = 1540.5$  nm), avec un facteur de qualité très élevé ( $Q_2 = 2.40 \times 10^4$ )

## CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

---

dans les calculs FDTD seulement. Ceci est la signature de l'excitation d'un SPM, résultant d'une rupture intrinsèque de la symétrie. Celle-ci est numériquement induite par la discrétisation spatiale dans l'algorithme FDTD [115]. Il est utile de rappeler que cette discrétisation imposée par l'algorithme FDTD est très utile dans la prise en compte des imperfections géométriques induites dans le processus de fabrication des structures. Les calculs FDTD de la distribution de l'intensité du champ électrique normalisé  $|E|^2$ , ainsi que la direction et l'amplitude du vecteur de poynting aux deux longueurs d'onde de résonance sont représentés sur les figures 4.3(c,d). Ils mettent en évidence un fort confinement de l'énergie du champ électrique entre les lignes du réseau diélectrique pour le mode SPM ( $\lambda_2$ ) avec un ordre de grandeur  $10^4$  fois plus élevé que le mode de fuite classique ( $\lambda_1$ ). Pour ce dernier, l'énergie du champ électrique est répartie sur les bords entre le milieu de détection et le milieu diélectrique, comme rapporté précédemment dans le cas d'une lame de cristal photonique avec fentes [116]. D'après la distribution spatiale du vecteur de poynting, le caractère (à symétrie protégée) de la seconde résonance est confirmé par la boucle d'énergie électromagnétique (écoulement montant et descendant). Ceci conduit à une durée de vie des photons plus longue entre les lignes du réseau et donc à une forte interaction avec la zone de détection (sang). Les vecteurs du champ électrique calculés (non indiqués pour ne pas encombrer les figures 4.3(c,d)) révèlent un comportement similaire à celui observé par [50] avec une forme rotative et dénotent une symétrie qui n'est pas compatible avec la polarisation linéaire de l'onde incidente. L'excitation de ce mode SPM grâce au maillage grossier est corroborée par des calculs FDTD pour différents pas de discrétisation  $\Delta$ . L'évolution de la position spectrale de la résonance et du facteur de qualité pour les deux modes pour ces différents pas est représentée sur la figure 4.4. Si le comportement des deux positions spectrales, est presque le même pour les deux résonances avec un léger décalage vers le rouge lorsque les pas de discrétisation augmentent, les valeurs de  $Q$  et son évolution sont complètement différentes pour les deux résonances. Alors que la première résonance ( $\lambda_1$ ) présente, fort logiquement, une faible valeur constante du facteur de qualité, indépendamment de  $\Delta$ , la seconde résonance ( $\lambda_2$ ), présente une valeur beaucoup plus élevée par rapport à la première et diminuant avec l'augmentation de  $\Delta$ . Cela peut s'expliquer par le fait que plus la symétrie de la structure est rompue ( $\Delta$  important) plus la bande de résonance devient large (FWHM augmente) et par conséquent le facteur qualité diminue. Tout cela confirme la nature SPM de la résonance supplémentaire observée dans le spectre FDTD [115].

Toutefois, ce mode spécifique peut apparaître dans le spectre de transmission calculé par la méthode FMM en raison d'une rupture de symétrie extrinsèque dans le cas d'une légère

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
 DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
 DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

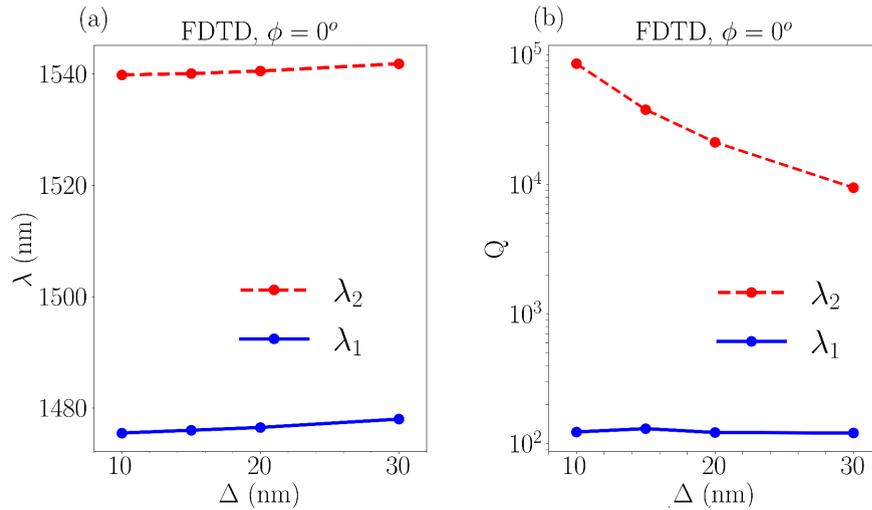


FIGURE 4.4 – Évolution en fonction du pas de discrétisation FDTD de la (a) position spectrale et du (b) facteur de qualité en échelle logarithmique.

déviations par rapport à l'incidence normale idéale et qui peut facilement se produire pendant les caractérisations expérimentales. Les spectres de transmission présentés dans la figure 4.5 montrent l'excitation de ce mode, pour de faibles valeurs de l'angle d'incidence  $\phi$ , même dans les spectres FMM. Ce mode est très sensible à la variation de l'angle d'incidence, comme le traduisent si bien nos calculs FMM pour un large domaine d'angles d'incidence (voir figure 4.6). En effet, plus on brise la symétrie ( $\phi$  augmente) plus la posi-

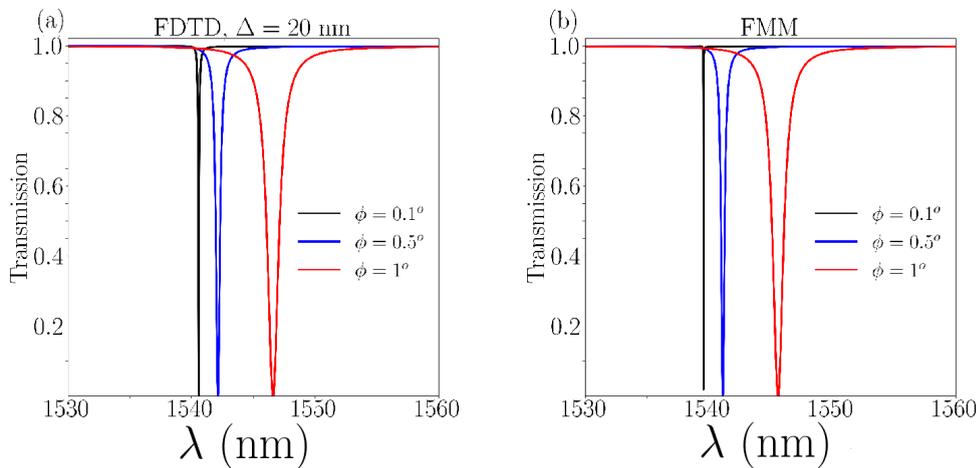


FIGURE 4.5 – Spectres de transmission d'ordre zéro pour différentes valeurs de l'angle d'incidence, calculés par (a) simulation FDTD avec  $\Delta = 20$  nm et (b) simulation FMM.

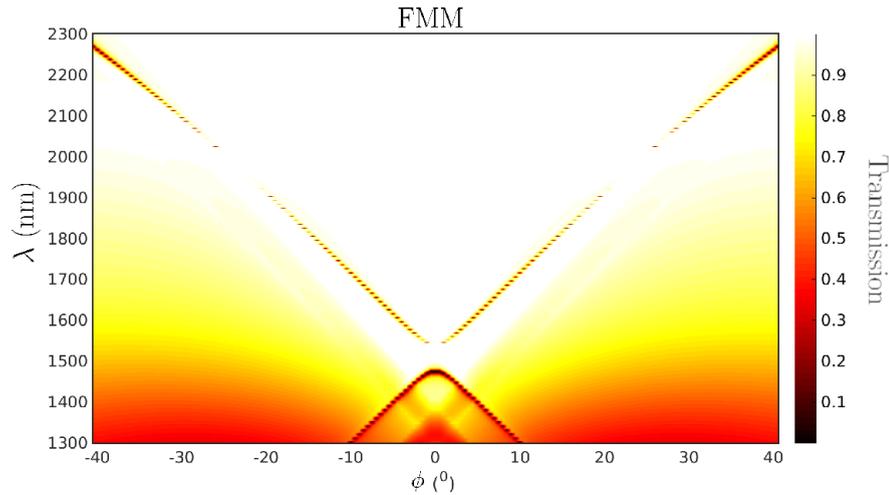


FIGURE 4.6 – Transmission d'ordre zéro pour différentes valeurs de l'angle d'incidence calculée par la méthode FMM.

tion spectrale de la seconde résonance ( $\lambda_2$ ) se déplace vers les grandes longueurs d'onde (voir le cas des faibles valeurs de  $\phi$  dans la figure 4.7(a)). Ce déplacement s'accompagne d'un élargissement de la bande de résonance traduisant ainsi une forte diminution de son facteur de qualité (voir figure 4.7(b)) et confirmant la nature à symétrie protégée de ce mode [50, 117]. Comme pour le cas de la rupture de symétrie intrinsèque, la première résonance ( $\lambda_1$ ) ne présente aucun comportement caractéristique d'un mode SPM (léger déplacement vers le bleu de la position spectrale et un facteur de qualité quasi-constant et très faible malgré l'augmentation de  $\phi$ ). Il est à noter que, malgré le bon accord entre les deux méthodes de simulation (FMM et FDTD) quant aux positions spectrales du mode SPM, un écart de plus de 50 pm est observé entre ces deux méthodes dans le calcul de la largeur de bande FWHM lorsque l'angle d'incidence  $\phi \rightarrow 0^\circ$  (voir figure 4.7(c)). Cette différence, qui disparaît progressivement lorsque l'angle d'incidence augmente (et  $Q$  diminue), peut s'expliquer par la double rupture de symétrie (intrinsèquement induite par le maillage et extrinsèquement induite par l'incidence oblique), qui conduit à une résonance plus large dans le cas de la simulation FDTD par rapport à la simulation FMM (où seule la rupture de symétrie extrinsèque est induite par l'incidence oblique). Ceci peut expliquer la grande différence observée pour les valeurs de  $Q$  et de la  $FOM$  calculées par ces deux méthodes dans la littérature et même dans notre présent travail comme présenté plus loin. Enfin, il est intéressant de noter, en se basant sur la distribution du vecteur de Poynting à la résonance SPM, que la boucle de puissance électromagnétique se transforme en une propagation de surface le long des lignes du réseau en respectant la symétrie du réseau

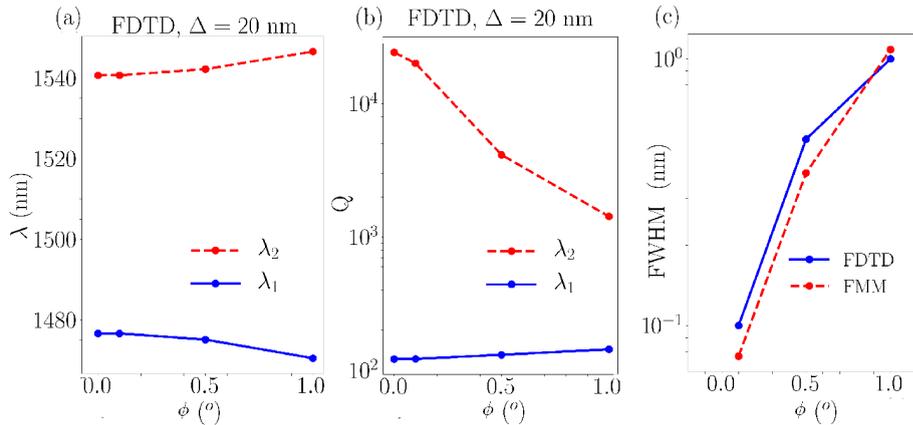


FIGURE 4.7 – Évolution, en fonction de l'angle d'incidence, de la (a) position spectrale et du (b) facteur de qualité en échelle logarithmique pour les deux résonances. (c) Évolution, en fonction de l'angle d'incidence, de la largeur de bande de résonance du mode SPM, calculée par les deux méthodes FDTD et FMM.

(voir figure 4.8). Notons également la possibilité de modulation de l'orientation de cette propagation en fonction du signe de l'angle d'incidence dû aux conditions d'excitation expérimentales, comme le montrent les figures 4.8(a,b).

## 4.2.2 Étude paramétrique et calculs des performances de détection

La deuxième partie de nos calculs est consacrée à une étude paramétrique FDTD impliquant les dimensions du réseau dans le cas d'une incidence légèrement déviée de la normale ( $\phi = 0, 1^\circ$ ) avec une polarisation TM afin d'optimiser la position spectrale dans la gamme optique désirée et le facteur de qualité de la résonance SPM pour des applications en bio-détection.

La figure 4.9 illustre l'effet de la hauteur, de la période et de la largeur sur la position spectrale et la largeur de bande (FWHM) de la résonance SPM, respectivement. Comme le montre la figure 4.9(a), l'augmentation de la hauteur des lignes du réseau, pour un facteur de remplissage ( $f = \frac{W}{\Lambda}$ ) fixe, permet de décaler la résonance vers les grandes longueurs d'onde [74]. La largeur de bande de la résonance SPM est également affectée car elle diminue légèrement avec l'augmentation de la hauteur comme prédit par la théorie des guides d'ondes [10] et les résultats de simulation de [118] (voir figure 4.9(d)). Pour une hauteur fixe, le facteur de remplissage est un autre paramètre important qui affecte la position spectrale du mode SPM et sa largeur de bande. La figure 4.9(b) montre une augmentation linéaire de la position spectrale avec la période du réseau, pour une largeur

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
 DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
 DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

---

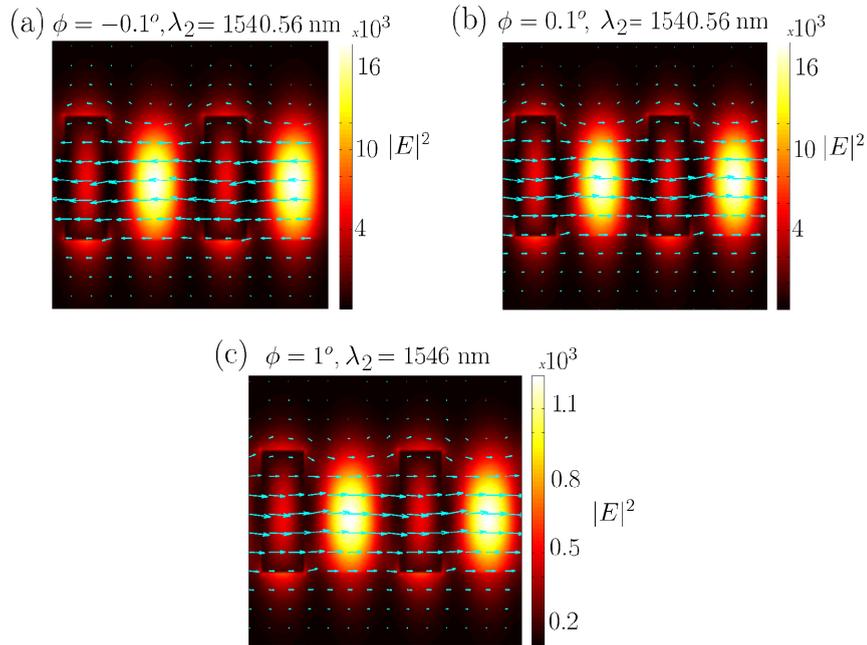


FIGURE 4.8 – Distributions de l'intensité normalisée du champ électrique et du vecteur Poynting (flèches en cyan) correspondant à la résonance SPM ( $\lambda_2$ ) obtenue par simulation FDTD avec  $\Delta = 20 \text{ nm}$  en incidence oblique avec (a)  $\phi = -0.1^\circ$ , (b)  $\phi = 0.1^\circ$  et (c)  $\phi = 1^\circ$ .

fixe. Cette variation linéaire satisfait à l'approximation du milieu effectif pour un réseau de diffraction donnée par l'équation (1.9) [7].

La variation de la largeur de bande, représentée sur la figure 4.9(e) montre que, contrairement à la hauteur, la bande de résonance devient plus large (et par conséquent  $Q$  diminue) avec l'augmentation de la période [74]. Le deuxième paramètre du facteur de remplissage est la largeur du réseau  $W$  pour laquelle on note une dépendance non linéaire du décalage de la longueur d'onde (voir figure 4.9(c)) et un comportement similaire à celui en fonction de la période concernant une légère augmentation de la largeur de bande de résonance (voir figure 4.9(f)). Plus important encore, tous les résultats de la figure 4.9 confirment que la largeur de bande de résonance n'est pas significativement affectée par les dimensions du réseau. Cela dénote la robustesse des propriétés du mode résonnant qui peut être considéré comme un réel avantage contre les imperfections et les défauts de fabrication.

La même étude paramétrique a été menée dans le cas d'une polarisation TE en y ajoutant l'effet de l'angle d'incidence. Le même comportement est observé pour l'évolution de la position spectrale de la résonance en fonction de  $H$ ,  $\Lambda$ ,  $W$  et  $\phi$  (voir figure

4.10). Concernant la largeur de bande, on a un comportement différent avec une variation plus prononcée, en fonction des différents paramètres structuraux, autour d'une valeur minimale. Si la brisure de symétrie, associée à l'augmentation de  $\phi$ , a moins d'effet sur l'évolution de la largeur de bande, celle-ci reste néanmoins plus élevée par rapport à la polarisation TM (voir figure 4.11). On peut ainsi conclure que les propriétés du mode SPM sont beaucoup plus affectées dans le cas de la polarisation TE, comparativement à la polarisation TM.

En s'appuyant sur les résultats de cette étude paramétrique, les performances de détection sont calculées pour notre capteur GMR fonctionnant dans la gamme optique souhaitée (de 1530 à 1550 nm). Pour une incidence oblique, en polarisation TM ( $\phi = 0.1^\circ$ ), les spectres de transmission FDTD et FMM sont calculés pour une variation de l'indice de réfraction du sang dans la plage allant de 1,3456 à 1,38. Un exemple de ces spectres, pour un ensemble de dimensions de réseau ( $\Lambda = 960$  nm,  $W = 220$  nm et  $H = 940$  nm),

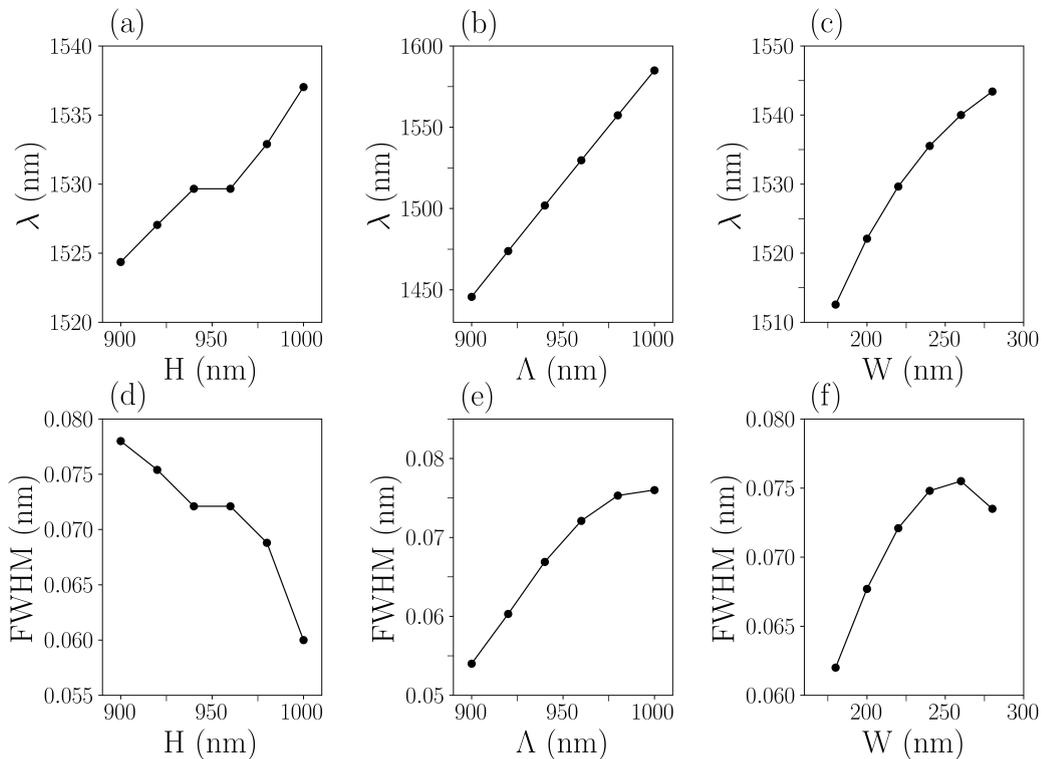


FIGURE 4.9 – Évolution, dans le cas d'une incidence oblique ( $\phi = 0, 1^\circ$ ) et d'une polarisation TM, de la position spectrale et de la largeur de bande du mode SPM en fonction de la (a, b) hauteur  $H$  avec  $W = 220$  nm et  $\Lambda = 960$  nm, de la (c, d) période  $\Lambda$  avec  $W = 220$  nm et  $H = 940$  nm et de la (e, f) largeur  $W$  avec  $\Lambda = 960$  nm et  $H = 940$  nm.

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
 DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
 DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

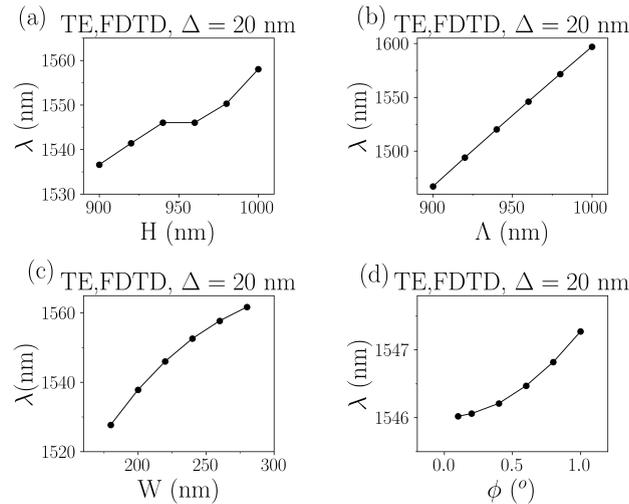


FIGURE 4.10 – Évolution, dans le cas d'une polarisation TE, de la position spectrale du mode SPM en fonction de la (a) hauteur  $H$  avec  $W = 220$  nm,  $\Lambda = 960$  nm et  $\phi = 0, 1^\circ$ , de la (b) période  $\Lambda$  avec  $W = 220$  nm,  $H = 940$  nm et  $\phi = 0, 1^\circ$ , de la (c) largeur  $W$  avec  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 940$  nm et  $\phi = 0, 1^\circ$  et de (d) l'angle d'incidence  $\phi$  avec  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 940$  nm et  $W = 220$  nm.

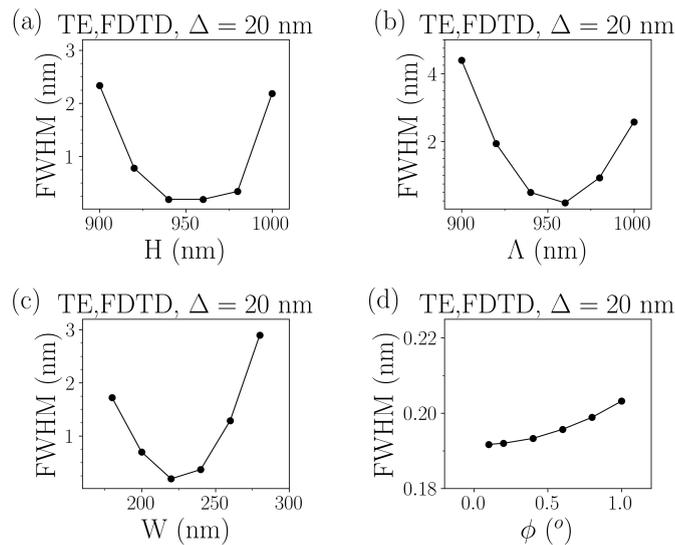


FIGURE 4.11 – Évolution, dans le cas d'une polarisation TE, de la la largeur de bande à mi-hauteur du mode SPM en fonction de la (a) hauteur  $H$  avec  $W = 220$  nm,  $\Lambda = 960$  nm et  $\phi = 0, 1^\circ$ , de la (b) période  $\Lambda$  avec  $W = 220$  nm,  $H = 940$  nm et  $\phi = 0, 1^\circ$ , de la (c) largeur  $W$  avec  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 940$  nm et  $\phi = 0, 1^\circ$  et de (d) l'angle d'incidence  $\phi$  avec  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 940$  nm et  $W = 220$  nm.

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

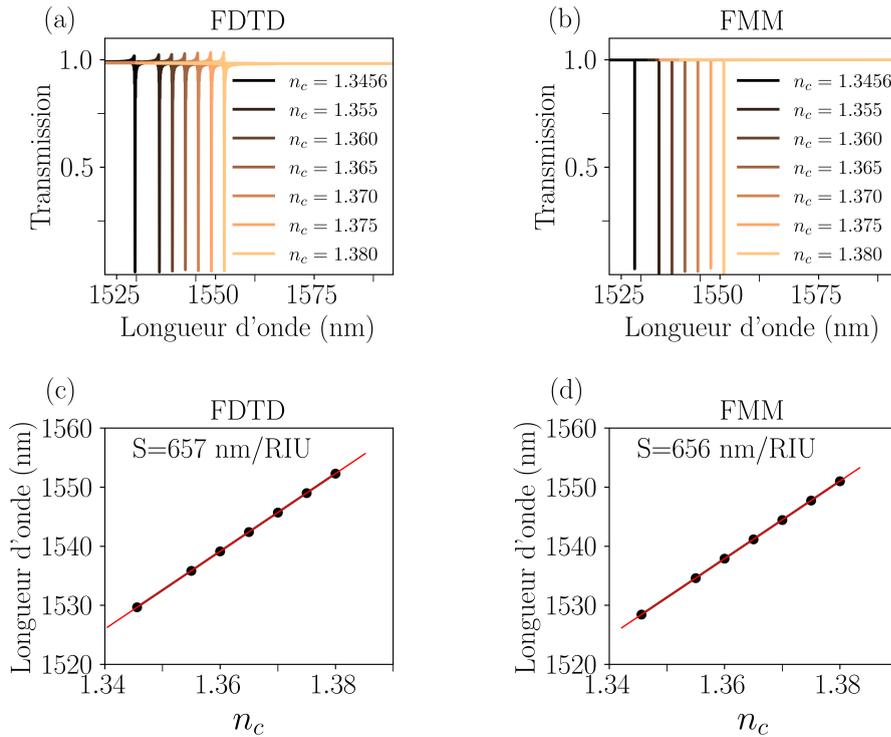


FIGURE 4.12 – Spectres de transmission d'ordre zéro en incidence oblique ( $\phi = 0.1^\circ$ ) et en polarisation TM pour différentes valeurs de l'indice de réfraction du sang calculées par la (a) FDTD et par la (b) FMM. Variation, en fonction de de l'indice de réfraction du sang, de la position spectrale de la résonance calculée par la (c) FDTD et par la (d) FMM. Les dimensions du réseau sont  $\Lambda = 960 \text{ nm}$ ,  $W = 220 \text{ nm}$  et  $H = 940 \text{ nm}$ .

est représenté sur les figures 4.12(a-b). La variation de la position spectrale de la résonance SPM avec l'indice de réfraction du sang, permet de déterminer la même sensibilité ( $S = 657 \text{ nm/RIU}$ ) pour les deux méthodes (voir figures 4.12(c-d)). Cependant, et en raison de la différence de précision entre les deux méthodes pour le calcul de la largeur de bande (FWHM), deux valeurs différentes sont obtenues pour la *FOM* ( $9112 \text{ RIU}^{-1}$  par la méthode FDTD et  $1,64 \times 10^6 \text{ RIU}^{-1}$  par la méthode FMM).

La même étude paramétrique que celle de la Figure. 4.9 est réalisée pour ces deux propriétés de détection ( $S$  et *FOM*). On constate que la sensibilité augmente avec  $H$ ,  $\Lambda$  et  $W$  mais diminue lorsque l'angle d'incidence devient plus élevé (voir figures 4.13(a-d)). La figure 4.13(e) montre que la *FOM* augmente avec la hauteur, en raison de l'augmentation de la sensibilité et de la diminution de *FWHM*. Malgré l'augmentation significative de la sensibilité avec  $\Lambda$  et  $W$ , la *FOM* décroît sous l'influence de l'élargissement de la

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

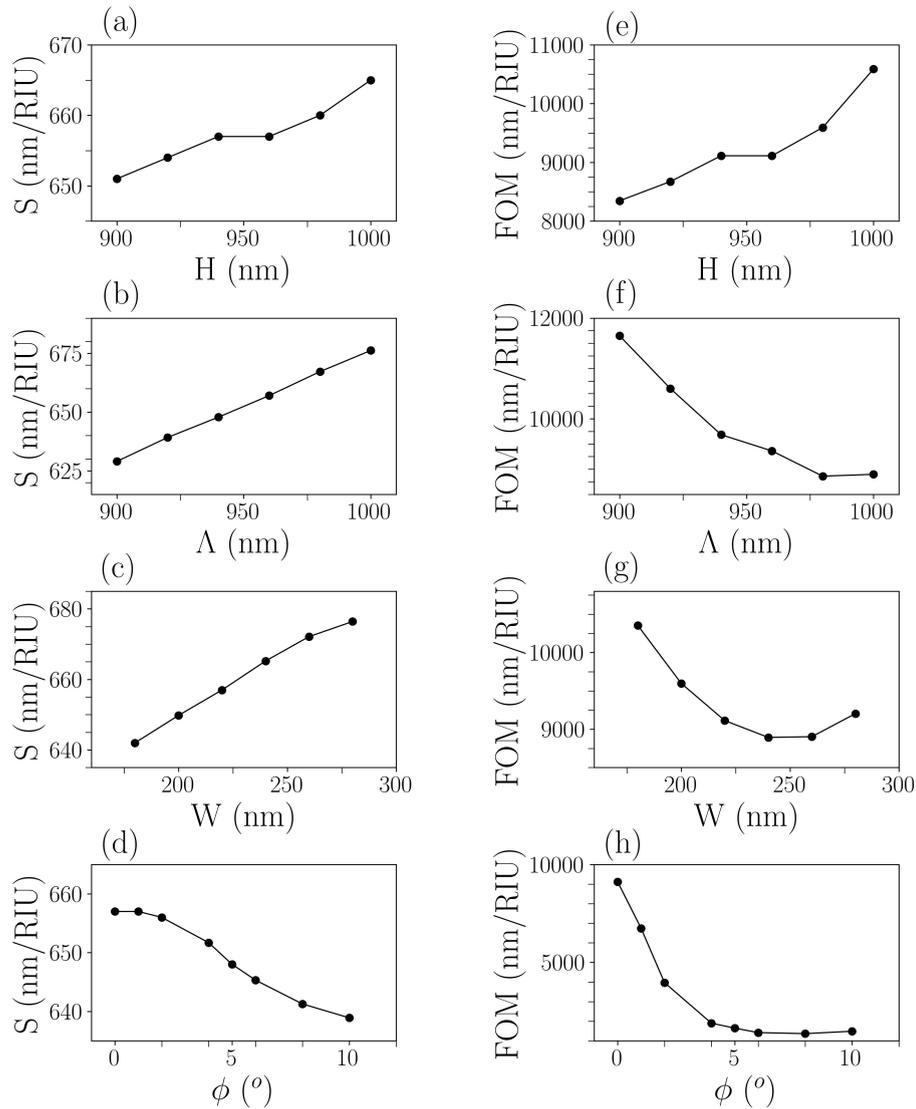


FIGURE 4.13 – Évolution, dans le cas d'une incidence oblique et d'une polarisation TM, de la sensibilité et de la  $FOM$  en fonction de la (a, e) hauteur  $H$  avec  $W = 220$  nm,  $\Lambda = 960$  nm et  $\phi = 0.1^\circ$ , de la (b, f) période  $\Lambda$  avec  $W = 220$  nm,  $H = 940$  nm et  $\phi = 0.1^\circ$ , de la (c, g) largeur  $W$  avec  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 940$  nm et  $\phi = 0.1^\circ$  et de (d, h) l'angle d'incidence avec  $\Lambda = 960$  nm,  $H = 940$  nm et  $W = 220$  nm.

résonance, comme illustré sur les figures 4.13(f-g). Enfin, et comme attendu, l'augmentation de l'angle d'incidence, qui a pour effet de diminuer  $Q$ , est à l'origine d'une forte

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

---

diminution de la  $FOM$  suite à la brisure de symétrie induite par l'écart à l'incidence normale (voir figure 4.13(h)). Parmi les nombreuses configurations étudiées dans le cadre de notre étude paramétrique, les résultats détaillés (position spectrale,  $FWHM$ , facteur de qualité  $Q$ , sensibilité et  $FOM$ ) pour trois d'entre elles sont résumés dans le tableau 4.1. D'un côté, la sensibilité la plus élevée est atteinte dans la deuxième configuration avec la hauteur des lignes du réseau la plus élevée. Ceci peut être expliqué par l'augmentation du volume d'interaction entre le sang et le mode SPM entre les lignes du réseau. D'un autre côté, la  $FOM$  la plus élevée est obtenue pour la troisième configuration en réduisant la largeur du réseau (et par conséquent la  $FWHM$ , comme le prédit l'étude paramétrique).

Par conséquent, nous pouvons conclure que des performances de détection élevées sont atteintes pour ces configurations avec des géométries de réseau 2D les plus couramment proposées dans la littérature [11, 74, 119]. Même si les valeurs obtenues par les calculs FDTD sont beaucoup plus faibles que ceux obtenus par la FMM, ils ont quand même donné lieu à un facteur de qualité élevé de l'ordre de  $2 \times 10^4$  (presque 2 fois la valeur obtenue par [118]), à une valeur élevée de la  $FOM$  de l'ordre de  $10^4$  (soit 2 fois la valeur obtenue par [118]) et à une valeur très élevée de la sensibilité (650 nm/RIU) bien supérieure à celles obtenues dans [74, 120].

Tableau 4.1 – Valeurs des positions spectrales (pour  $n_c = 1.3456$ ), des largeurs à mi-hauteur  $FWHM$ , du facteur de qualité  $Q$ , de la sensibilité  $S$  et de la  $FOM$  calculées pour différentes configurations par les méthodes FDTD et FMM.

	Configuration 1	Configuration 2	Configuration 3
$\Lambda$ (nm)	960	960	960
$H$ (nm)	940	1 000	940
$W$ (nm)	220	220	180
$\lambda_{FDTD}$ (nm)	1 529.66	1 537.03	1 512.57
$\lambda_{FMM}$ (nm)	1 528.4352	1 535.7783	1 511.2386
$FWHM_{FDTD}$ (nm)	0.0721	0.0628	0.0620
$FWHM_{FMM}$ (nm)	0.0004	0.0004	0.0001
$Q_{FDTD}$	21 216	24 475	24 396
$Q_{FMM}$	3 821 088	3 839 445	15 112 386
$S_{FDTD}$ (nm/RIU)	657	665	642
$S_{FMM}$ (nm/RIU)	656	664	641
$FOM_{FDTD}$ (RIU <sup>-1</sup> )	9 112.3	10 589	10 355
$FOM_{FMM}$ (RIU <sup>-1</sup> )	1 640 000	1 660 000	6 410 000

### 4.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons pu mettre en évidence la possibilité d'exciter des résonances GMR de type SPM dans notre structure basique à réseau diélectrique périodique dans le cas d'un environnement asymétrique. Ces résonances, à très haut facteur de qualité, sont induites par une rupture de symétrie qui peut être causée par des imperfections de fabrication et révélée par la méthode FDTD en cas d'incidence normale. De plus, ces modes particuliers peuvent aussi être excités dans le cas des calculs FMM par une petite déviation de l'incidence normale. Ainsi, le choix de la méthode de calcul et des conditions d'illumination est important pour exciter et accorder la position spectrale et le facteur de qualité de ces modes. La méthode FDTD reste, néanmoins, la plus adaptée dans la prise en compte des défauts de fabrication en adaptant la discrétisation spatiale à la précision du procédé de fabrication. Enfin, une étude paramétrique a permis d'optimiser les dimensions du réseau en vue d'atteindre des performances de détection du sang très élevées par des calculs FDTD ( $Q = 2.1 \times 10^4$ ,  $S = 657$  nm/RIU et  $FOM \simeq 9\,112$  RIU<sup>-1</sup>) et des calculs FMM ( $Q = 3 \times 10^6$ ,  $S = 656$  nm/RIU et  $FOM \simeq 1,64 \times 10^6$  RIU<sup>-1</sup>). Ces résultats originaux permettent d'ouvrir la voie au développement d'une nouvelle génération de détecteurs biologiques miniaturisés.

CHAPITRE 4. EXPLOITATION DES MODES PROTÉGÉS PAR LA SYMÉTRIE  
DANS L'OPTIMISATION D'UN CAPTEUR DIÉLECTRIQUE - APPLICATION À LA  
DÉTECTION DES IMPURETÉS DANS LE SANG

---

# Modélisation et optimisation d'un capteur optique hybride (Diélectrique-métal)

## 5.1 Introduction

Dans les sections précédentes, nous avons pu démontrer et mettre en évidence de hautes performances de détection de faibles variations d'indices de réfraction de l'analyte avec des structures diélectriques basiques à réseau 1D périodique. Les résonances fines à très faibles largeurs de bande sont à l'origine de *FOM* très élevées. Cependant, en comparaison avec des réseaux métalliques, les capteurs diélectriques sont toujours en cours d'exploration et d'optimisation concernant la sensibilité. Dans cette dernière section, en nous basant sur des travaux récents [121], nous nous sommes intéressés aux performances de structures hybrides (métal-diélectrique) obtenues en insérant une couche métallique uniforme ou un réseau métallique au dessous ou au dessus du réseau diélectrique de notre capteur optique. Nous présenterons dans ce qui suit les résultats de calculs FDTD préliminaires, qui en appellerons à d'autres beaucoup plus approfondis, pour différentes configurations concernant l'effet du positionnement et des dimensions de la partie métallique sur les performances de détection, notamment la sensibilité, de notre capteur hybride. Pour cela, les dimensions géométriques du réseau diélectrique sont fixées avec une période  $\Lambda = 500$  nm, une largeur  $W = 50$  nm et une hauteur  $H = 500$  nm. Les indices de réfraction du substrat et du réseau diélectrique sont inchangés par rapport à nos précédentes études ( $n_s = 1.45$  et  $n_g = 2.4$ ) (voir exemple de la figure 5.1). L'excitation lumineuse se fait en incidence normale avec une polarisation TE. Le choix de cette polarisation est lié à notre volonté de ne pas vouloir exploiter les résonances plasmons de surface (excitables

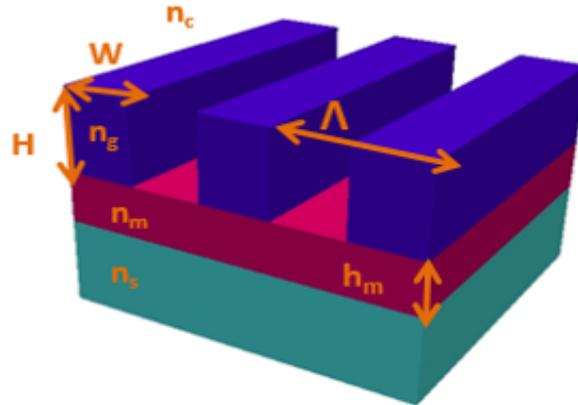


FIGURE 5.1 – Schéma de la structure 2D hybride constituée d'un réseau diélectrique périodique suivant la direction  $Ox$ , invariant suivant la direction  $Oy$  et fini suivant la direction  $Oz$ .  $n_s$ ,  $n_c$  et  $n_g$  sont les indices de réfraction du substrat, du milieu de détection et du réseau périodique, respectivement.  $W$ ,  $\Lambda$  et  $H$  sont la largeur, la période et la hauteur du réseau diélectrique.  $n_m$  et  $h_m$  sont l'indice de réfraction et la hauteur de la couche métallique d'or intermédiaire entre le réseau diélectrique et le substrat.

à l'interface métal-diélectrique avec une polarisation TM pour des couches métalliques uniformes) mais plus pour étudier l'effet des propriétés d'absorption métalliques sur les résonances GMR du réseau diélectrique. Enfin, la nature dispersive du métal (en l'occurrence l'or dans notre cas) est prise en considération dans le cadre du modèle de Drude à deux points critiques implémenté dans notre code FDTD (voir chapitre 2).

## 5.2 Couche métallique intermédiaire

Dans une première étape, une couche métallique d'or est introduite entre le substrat et le réseau périodique, à l'image de ce qui a été déjà fait dans le chapitre 3 avec une couche diélectrique. L'effet de la présence du métal sur la position de la résonance ainsi que sur les performances de notre capteur est étudié. Pour différentes hauteurs de la couche métallique ( $0 < h_m < 100$  nm) et pour un indice de réfraction du superstrat  $n_c = 1.33$ , les spectres d'absorption, de réflexion et de transmission sont calculés dans la gamme du visible-proche IR (voir figure 5.2). On peut ainsi noter l'effet de la présence du métal ( $h_m \neq 0$  nm) sur la position de la résonance qui se décale vers les petites longueurs d'onde avec l'augmentation de la hauteur métallique. Ceci peut s'expliquer par la nature même du métal [78]. On notera aussi, comme attendu, une diminution de l'intensité de transmission

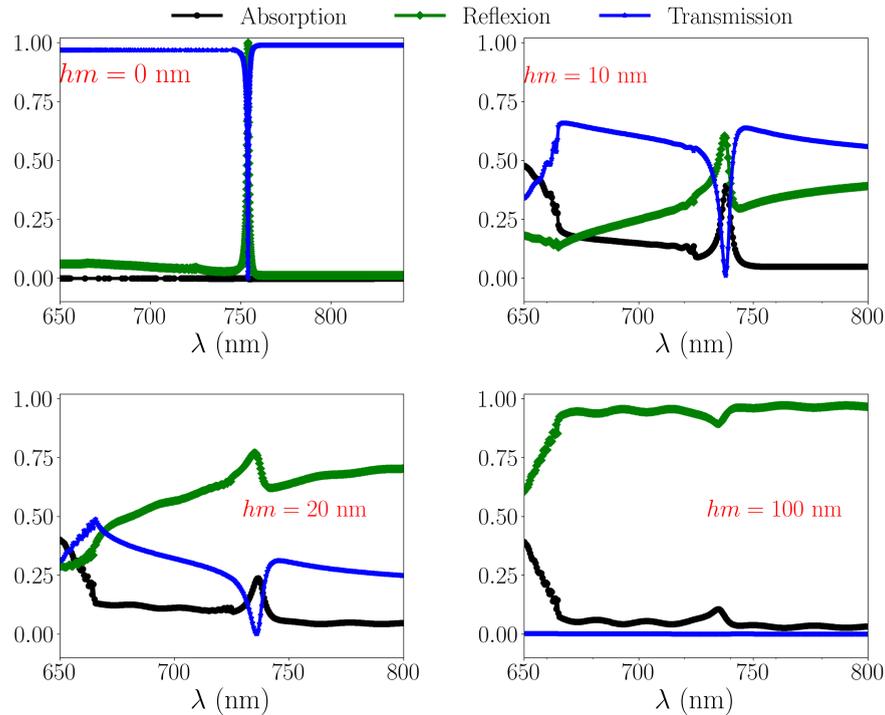


FIGURE 5.2 – Spectres d’absorption, de réflexion et de transmission pour différentes hauteurs du métal, avec  $n_c = 1.33$ .

en faveur de l’intensité de réflexion avec l’augmentation de la hauteur  $h_m$  jusqu’à disparition totale de transmission dans le substrat à partir d’une hauteur métallique critique ( $h_m$  autour de  $\approx 100$  nm) pour laquelle la réflexion est quasi-totale avec une résonance d’absorption de faible intensité, qui s’élargit jusqu’à disparition. Au voisinage de cette hauteur métallique critique, on notera néanmoins la persistance d’une résonance d’absorption, de faible intensité, qui ne peut pas être d’origine plasmonique (polarisation TE). Les conditions de la résonance GMR permettent de concentrer et piéger efficacement l’énergie, permettant son absorption par la couche métallique. Des phénomènes similaires ont été mis en évidence dans des dispositifs GMR composés de matériaux à pertes modérées où un pic d’absorption est observé dans les conditions de résonance [77].

Le calcul des performances de notre capteur hybride se fait pour différentes hauteurs (bien en deçà de la hauteur métallique critique) en variant l’indice du milieu de détection de  $n_c = 1.33$  à  $n_c = 1.38$  (voir figure 5.3). On peut ainsi remarquer des résonances de transmission de plus en plus larges pour les valeurs élevées de  $h_m$ . L’augmentation de la hauteur de cette couche métallique a pour effet d’améliorer la sensibilité de détection (de 335 nm/RIU pour  $h_m = 0$  nm à 387 nm/RIU pour  $h_m = 20$  nm) au détriment d’une chute

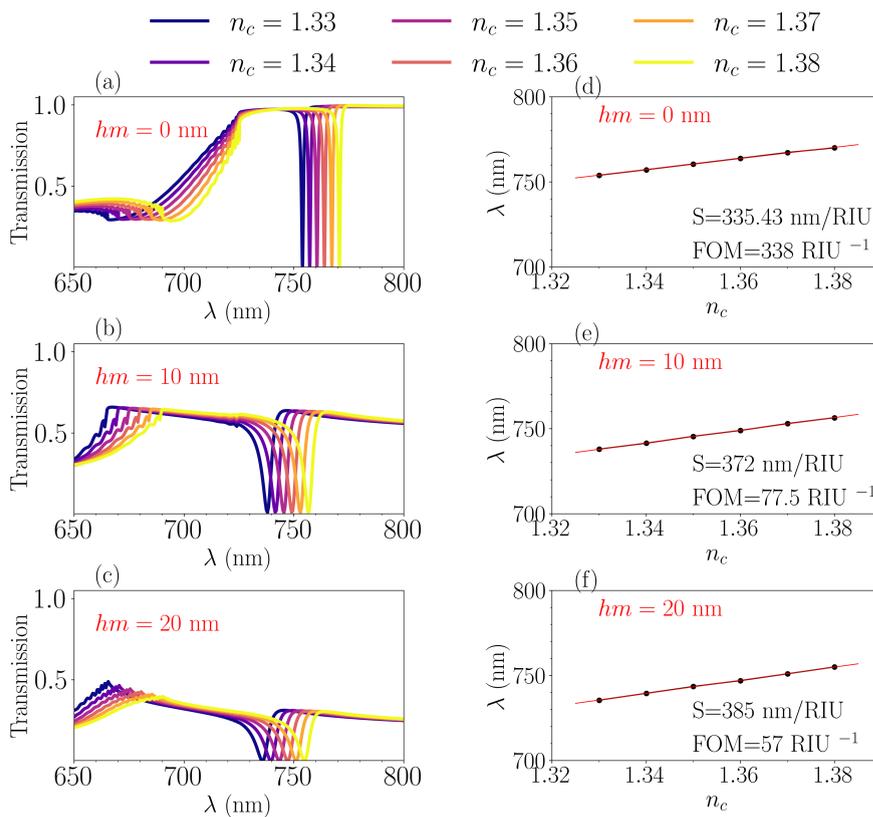


FIGURE 5.3 – (a-c) Spectres de Transmission et (d-f) Sensibilité  $S$  et  $FOM$  calculées pour différentes hauteurs de la couche métallique dans la structure hybride de la figure 5.1

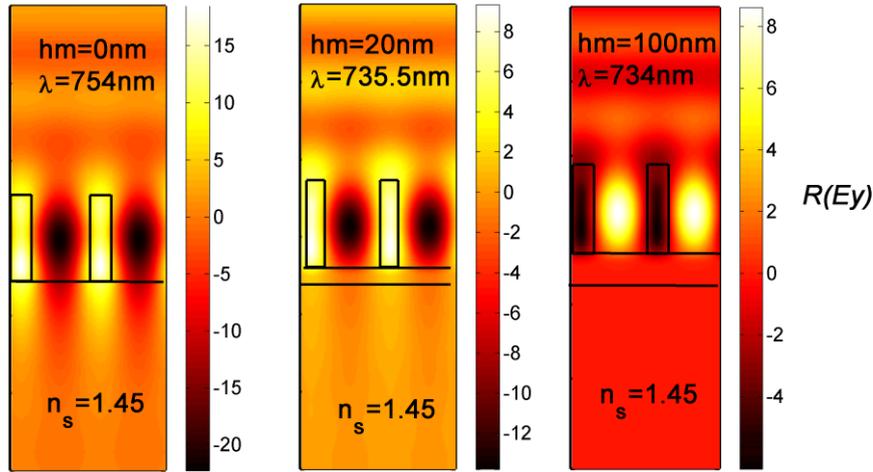


FIGURE 5.4 – Distribution de la partie réelle de la composante  $E_y$  du champ électrique ( $\Re(E_y)$ ), dans le cas de la structure de la figure 5.1, aux longueurs d'onde de résonance correspondant aux différentes hauteurs de la couche métallique, pour  $n_c = 1.33$ .

brutale de la  $FOM$  (de  $338 \text{ RIU}^{-1}$  pour  $h_m = 0 \text{ nm}$  à  $57 \text{ RIU}^{-1}$  pour  $h_m = 20 \text{ nm}$ ) en raison du fort élargissement des bandes de résonance avec l'augmentation de  $h_m$  ( $FWHM = 0.99 \text{ nm}$  pour  $h_m = 0 \text{ nm}$  et  $FWHM = 6.7 \text{ nm}$  pour  $h_m = 20 \text{ nm}$ ). Cela s'explique par la nature métallique de la couche intermédiaire puisque les pics de résonance de nature métallique sont plus sensibles mais plus larges que les pics de résonance de nature diélectrique [79]).

La répartition de l'énergie électrique (variation de la partie réelle du champ électrique), pour les trois hauteurs de la couche métallique intermédiaire, est illustrée sur la figure 5.4. En l'absence de la couche métallique, la structure diélectrique présente une concentration de l'énergie électrique à l'intérieur des lignes du réseau diélectrique périodique avec une répartition symétrique autour de ce dernier (au niveau du substrat et du superstrat). Cette symétrie de répartition est associée à la forte valeur de la  $FOM$  [74], qui diminue avec l'augmentation de  $h_m$  pour laquelle l'énergie électrique est plus confinée dans le superstrat, toujours à l'intérieur des lignes du réseau diélectrique, puis totalement entre les lignes du réseau et dans le milieu de détection pour une hauteur critique ( $h_m = 100 \text{ nm}$ ). Ceci explique l'augmentation de la sensibilité de détection en raison du confinement croissant de l'énergie électrique qui est plus en contact avec le milieu de détection.

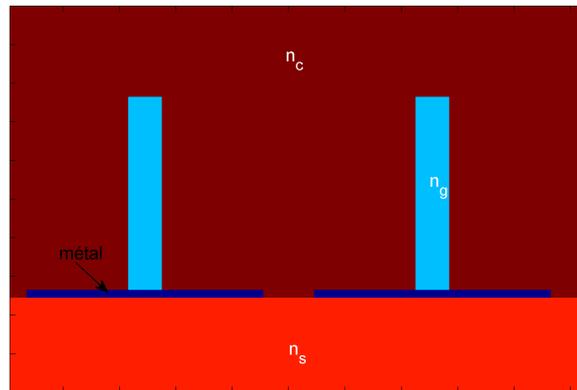


FIGURE 5.5 – Vue en coupe de la structure hybride avec un réseau métallique périodique, de largeur  $W_m = 400$  nm, de hauteur  $h_m = 20$  nm et de période identique à celle du réseau diélectrique au dessus du métal (dont les dimensions sont  $\Lambda = 500$  nm,  $W = 50$  nm et  $H = 500$  nm).  $n_s$ ,  $n_c$  et  $n_g$  sont les indices de réfraction du substrat, du milieu de détection.

### 5.3 Réseau métallique

Dans une deuxième étape de cette étude, la couche métallique est remplacée par un réseau métallique périodique avec deux configurations possibles. Dans la première configuration, le réseau métallique est placé entre le réseau diélectrique d'indice de réfraction  $n_g$  et le substrat d'indice de réfraction  $n_s$ . Dans la deuxième configuration, c'est le réseau diélectrique qui se situe entre le réseau métallique et le substrat.

#### 5.3.1 Réseau métallique en dessous

La figure 5.5 illustre notre structure hybride avec un réseau métallique périodique, de même période que le réseau diélectrique, inséré entre le réseau diélectrique et le substrat. Pour une hauteur métallique faible fixée à  $h_m = 20$  nm, les spectres de transmission sont calculés pour différentes valeurs de  $n_c$  et pour trois largeurs différentes des lignes du réseau métallique ( $W_m = 20$  nm  $< W$ ,  $W_m = 50$  nm  $= W$  et  $W_m = 400$  nm  $> W$ ).

Comme illustré sur la figure 5.6, plus on diminue la largeur du métal, plus les pics de résonance deviennent plus intenses et se déplacent vers les grandes longueurs d'onde. Concernant les performances de détection, l'augmentation de la largeur du métal a pour effet d'améliorer la sensibilité tandis que la  $FOM$  diminue en raison de la prépondérance de l'élargissement des bandes de résonance. L'amélioration de la sensibilité et la diminution de la  $FOM$  peut s'expliquer à travers la répartition de l'énergie électrique à la résonance, pour les différentes configurations (voir figure 5.7). On remarque que, pour

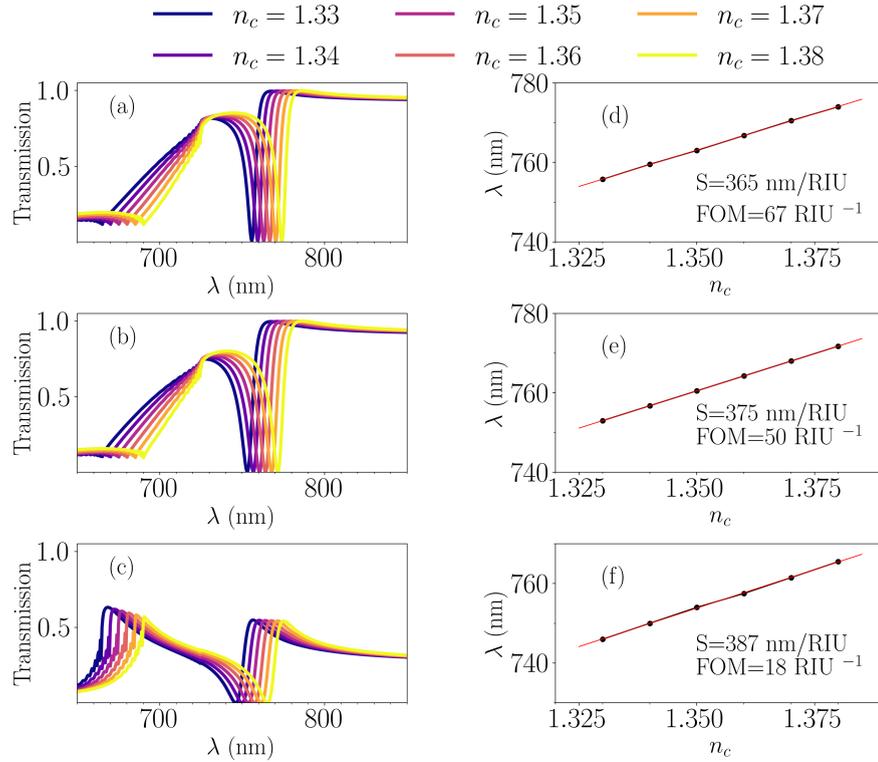


FIGURE 5.6 – Spectres de Transmission et performances de détection (sensibilité et  $FOM$ ) pour différentes largeurs du métal, de hauteur  $h_m = 20$  nm, sous le diélectrique : (a, d)  $W_m = 20$  nm, (b,e)  $W_m = 50$  nm et (c,f)  $W_m = 400$  nm.

une faible largeur du métal ( $W_m = 20$  nm), la répartition de l'énergie est bien symétrique sur toute la structure, entre les lignes des deux réseaux, d'où la valeur élevée de la  $FOM$ . Cette répartition symétrique fait qu'une partie de cette énergie est cédée au substrat, d'où la faible valeur de  $S$ . Pour la largeur métallique plus importante que celle du diélectrique ( $W_m = 400$  nm), on remarquera que l'énergie n'est plus répartie de manière symétrique entre les différentes couches de la structure hybride, mais est plus confinée au niveau des lignes du réseau périodique, au dessus du métal, et plus au contact du milieu de détection. Ceci explique la diminution de la valeur de la  $FOM$  et l'augmentation de la sensibilité.

### 5.3.2 Réseau métallique au dessus

Le réseau métallique, de largeur variable ( $W_m = 20, 50, 100$  nm), est maintenant déposé au dessus du réseau diélectrique (voir figure 5.8). Les spectres de transmission d'ordre zéro, calculés pour différentes valeurs de  $n_c$ , pour les trois largeurs du réseau métallique et illustrés sur la figure 5.9, mettent en évidence une invariance de comportement,

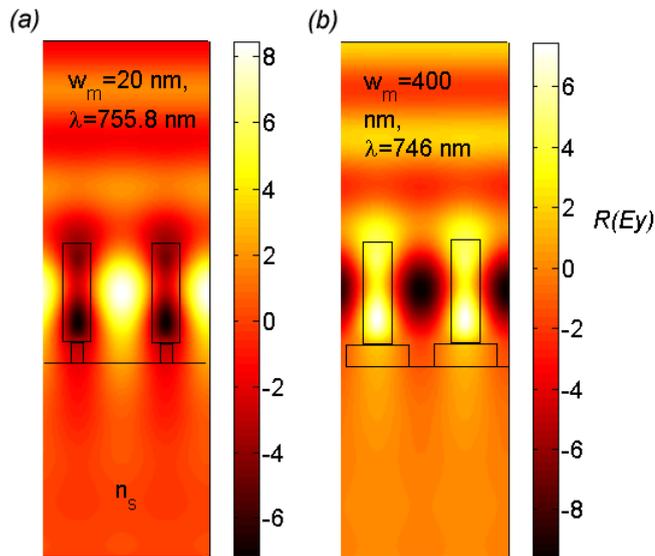


FIGURE 5.7 – Distribution de la partie réelle de la composante  $E_y$  du champ électrique ( $\Re(E_y)$ ), dans le cas de la structure de la figure 5.5 aux longueurs d'onde de résonance correspondant aux différentes largeurs du réseau métallique, pour  $n_c = 1.33$ .

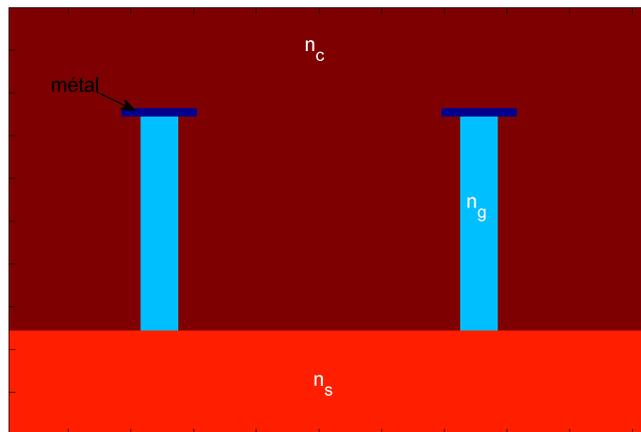


FIGURE 5.8 – Vue en coupe de la structure hybride avec un réseau métallique périodique, de largeur  $W_m = 100$  nm, de hauteur  $h_m = 20$  nm et de période identique à celle du réseau diélectrique au-dessous du métal (dont les dimensions sont  $\Lambda = 500$  nm,  $W = 50$  nm et  $H = 500$  nm).  $n_s$ ,  $n_c$  et  $n_g$  sont les indices de réfraction du substrat, du milieu de détection.

CHAPITRE 5. MODÉLISATION ET OPTIMISATION D'UN CAPTEUR OPTIQUE HYBRIDE (DIÉLECTRIQUE-MÉTAL)

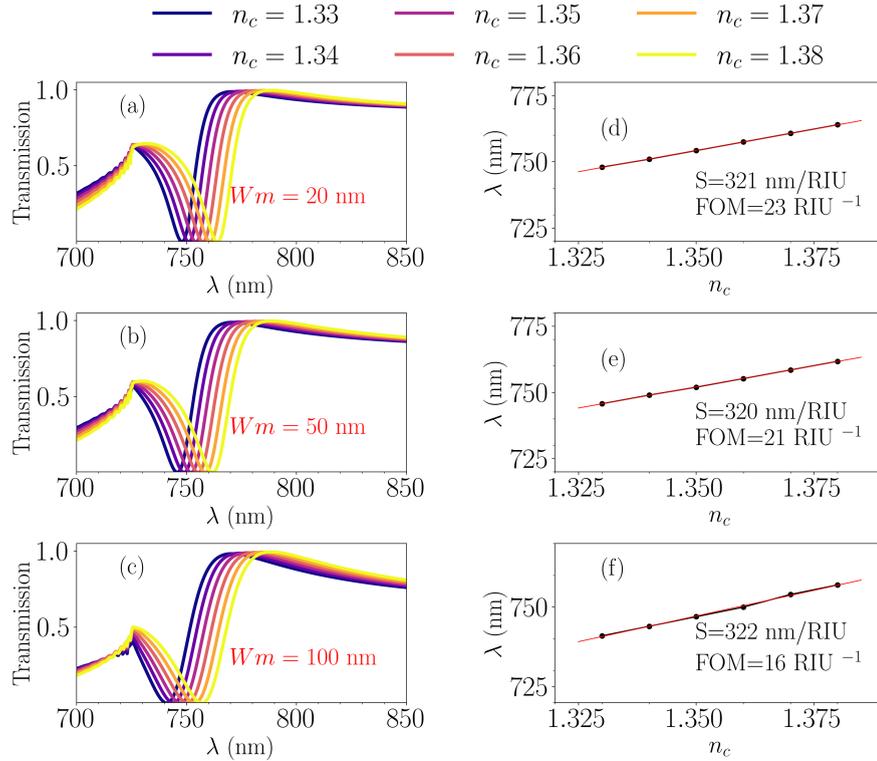


FIGURE 5.9 – Spectres de Transmission et performances de détection (sensibilité et  $FOM$ ) pour différentes largeurs du métal, de hauteur  $h_m = 20$  nm, sur le diélectrique : (a, d)  $W_m = 20$  nm, (b,e)  $W_m = 50$  nm et (c,f)  $W_m = 100$  nm.

que ce soit sur la position spectrale de la résonance ou sur les performances de détection même si un léger élargissement de la bande de résonance avec l'augmentation de  $W_m$  est observé (d'où une légère diminution de la  $FOM$ ). En fait, et comme le montre les cartes de champ pour les différentes largeurs métalliques de la figure 5.10, la présence du métal dans cette configuration est à l'origine d'une forte réflexion de l'énergie électrique. Seule une faible partie de cette énergie, confinée dans les lignes du réseau diélectrique et dans le substrat de manière identique pour les deux largeurs métalliques, est exploitable pour la détection avec une sensibilité identique et plus faible en comparaison avec la configuration précédente. Le réseau métallique constitue alors une sorte de barrière diminuant le confinement de l'énergie et les résonances de modes guidés dans le réseau diélectrique.

On peut ainsi noter que, contrairement à la configuration précédente (réseau métallique sous le réseau diélectrique), la présence du métal au dessus du réseau diélectrique est à l'origine de la diminution des performances de détection du capteur hybride et que la variation de la largeur du réseau métallique n'a pas d'influence sur la réponse optique

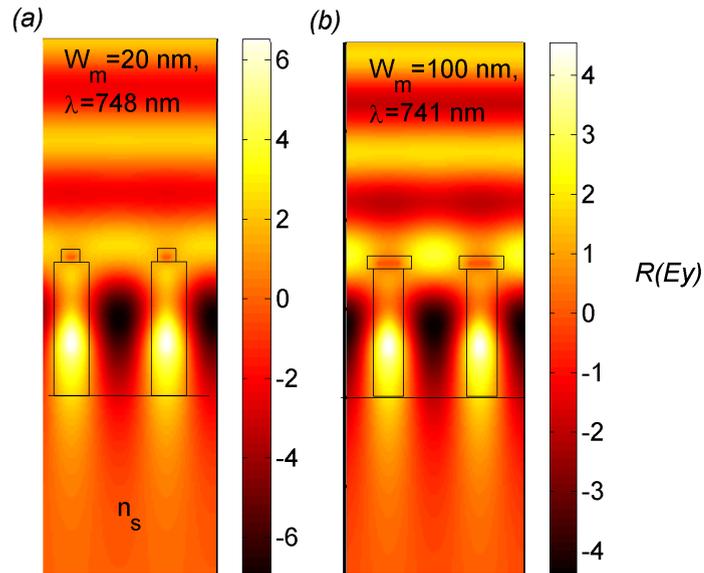


FIGURE 5.10 – Distribution de la partie réelle de la composante  $E_y$  du champ électrique ( $\Re(E_y)$ ), dans le cas de la structure de la figure 5.8 aux longueurs d'onde de résonance correspondant aux différentes largeurs du réseau métallique, pour  $n_c = 1.33$ .

et les performances de ce capteur. Cette différence de comportement peut s'expliquer par la différence de changement d'indice de réfraction de l'environnement autour du réseau métallique. Lorsque celui-ci est au dessous du réseau diélectrique, il est en contact avec le substrat ( $n_s = 1.45$ ) d'une part et le réseau diélectrique ( $n_g = 2.4$ ) et l'analyte d'autre part ( $n_c = 1.33$ ). Ces deux derniers peuvent alors être considérés comme le superstrat d'indice de réfraction moyen donné par l'équation 1.38 ( $n_{moy_{sup}} = 1.47$  pour une largeur métallique  $W = W_m = 50$  nm, soit un facteur de remplissage  $f = 0.1$ ). Dans la deuxième configuration, le réseau métallique, au dessus du réseau diélectrique, est en contact avec l'analyte ( $n_c = 1.33$ ) et le substrat est composé d'une part du réseau diélectrique ( $n_g = 2.4$ ) et d'analyte d'autre part. Ces derniers seront alors vus par le métal comme un substrat d'indice de réfraction moyen ( $n_{moy_{sub}} = 1.47$  pour la même largeur métallique  $W = W_m = 50$  nm). En comparaison avec la première configuration où l'environnement autour du métal est symétrique, l'énergie électrique est plus en contact avec le substrat dans la deuxième configuration où l'environnement autour du métal est plus asymétrique (voir figure 5.10). Les résonances, plus larges, s'en trouvent alors moins sensibles au changement d'indice de réfraction du superstrat et les performances de détection sont plus faibles. Cette dépendance des performances de détection avec l'environnement (symétrique ou asymétrique) du capteur optique a été aussi observée dans le cas de capteurs optiques metallo-diélectriques ou

## CHAPITRE 5. MODÉLISATION ET OPTIMISATION D'UN CAPTEUR OPTIQUE HYBRIDE (DIÉLECTRIQUE-MÉTAL)

---

Structure		$S$ (nm/RIU)	$FOM$ (RIU <sup>-1</sup> )
Sans métal		335.43	338
Couche métallique en dessous		387	57
Réseau métallique	en dessous	367	67
	au dessus	322	23

Tableau 5.1 – Comparaison des performances de détection de notre capteur optique hybride en présence de la matrice métallique (de hauteur  $h_m = 20$  nm), en couche uniforme sous le réseau diélectrique ou en réseau périodique (de largeur  $W_m = 20$  nm et de même période que le réseau diélectrique) sous et sur le réseau diélectrique.

plasmoniques [105, 122] qui présentaient des performances de détection plus faibles que ceux obtenus avec notre structure hybride dans les deux configurations résumées dans le tableau 5.1.

### 5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude paramétrique préliminaire en vue d'optimiser les performances de détection (sensibilité et  $FOM$ ) d'un capteur GMR hybride basé sur l'insertion d'une matrice métallique, en l'occurrence l'or, dans notre réseau 1D diélectrique. Pour une faible valeur de la hauteur métallique, les valeurs optimales obtenues dans les différentes configurations sont présentées dans le tableau 5.1. Si l'insertion de la matrice métallique a permis d'améliorer considérablement la sensibilité du capteur hybride, la  $FOM$  s'en trouve malheureusement affectée en raison de l'élargissement des bandes de résonances affectées par la présence de la matrice diélectrique, notamment lorsqu'elle se trouve au dessus du réseau diélectrique.

CHAPITRE 5. MODÉLISATION ET OPTIMISATION D'UN CAPTEUR OPTIQUE  
HYBRIDE (DIÉLECTRIQUE-MÉTAL)

---

# Conclusion Générale

A l'ère de la miniaturisation de plus en plus croissante, la conception de bio-capteurs nano-optiques performants constitue un des défis scientifiques et technologiques majeurs de ces dernières décennies. Qu'ils soient diélectriques ou hybrides, l'optimisation de leurs performances n'a cessé de croître avec des structures plus ou moins complexes en parallèle avec des techniques d'élaborations de plus en plus développées. C'est pourquoi il devient primordial de recourir à la modélisation numérique de ces structures et de les adapter aux différents domaines d'application technologique.

Notre travail de thèse participe à cette dynamique florissante de proposition et d'optimisation de dispositifs nanométriques pouvant répondre à une problématique simple, à savoir concevoir une structure la plus simple possible à élaborer mais avec des performances de détection les plus élevées possibles.

Tout d'abord, un état de l'art sur le phénomène des résonances des modes guidés est présenté. Le guide d'onde diélectrique dans ses différentes formes et évolutions y est défini. L'excitation de ces modes propagatifs dans la couche guidante y est expliquée et détaillée via l'inclusion d'un réseau périodique dont l'interaction avec la lumière excitatrice est à l'origine de modes diffractés qui vont être guidés dans la couche guidante, donnant ainsi lieu à ce qui est communément appelé *résonance du mode guidé* ou *résonance GMR*. Celle-ci est identifiée par une équation de dispersion reliant tous les paramètres de la structure aux indices de réfraction des différentes couches constituant la structure GMR en tenant compte d'un paramètre important qu'est la polarisation de la lumière. Un bref aperçu bibliographique sur les bio-capteurs optiques et leur principe de fonctionnement, avec ses avantages et ses inconvénients, est donné. Celui-ci repose essentiellement sur deux phénomènes physiques que sont les résonances GMR pour les bio-capteurs diélectriques et les résonances plasmoniques de surface pour les bio-capteurs SPR.

La modélisation de ces phénomènes optiques et la détermination de leurs efficacités diffractives s'est faite dans le cadre de ce travail à l'aide de deux codes de simulation exploitant deux méthodes numériques différentes que sont la FDTD et la FMM. Ces codes maison nous ont permis de mener des études paramétriques permettant de mieux comprendre l'effet des paramètres géométriques et physiques sur les performances de la structure GMR proposée. Nous avons réussi à mettre en évidence l'existence de modes GMR particuliers protégés par la symétrie de notre structure (SPM). Ces modes, ne pouvant exister que sous certaines conditions d'illumination, sont caractérisés par un facteur de qualité très élevé. Une étude paramétrique sur cette résonance a permis d'optimiser la sensibilité et la FOM de la structure proposée pour la détection des impuretés dans le sang. A notre connaissance, ces performances obtenues par les calculs FDTD ( $Q = 2.1 \times 10^4$ ,  $S = 657$  nm/RIU et  $FOM \simeq 9\,112$  RIU<sup>-1</sup>) et les calculs FMM ( $Q = 3 \times 10^6$ ,  $S = 656$  nm/RIU et  $FOM \simeq 1,64 \times 10^6$  RIU<sup>-1</sup>) sont d'un niveau élevé jamais atteint dans la littérature.

La dernière partie de notre travail est une étude préliminaire menée pour l'optimisation des performances de détection d'une structure hybride (métal-diélectrique) basée sur l'exploitation de l'introduction d'une matrice métallique (de l'or dans notre cas) à notre structure diélectrique de départ. Dans le cas d'une couche métallique uniforme en sandwich entre le réseau diélectrique et le substrat, la variation de la hauteur de cette couche a pour conséquence le déplacement de la résonance vers les petites longueurs d'ondes. Ce déplacement est accompagné d'un élargissement de la bande de résonance. L'exploitation de ces résonances est étudié pour de faibles valeurs de la hauteur d'un réseau métallique en contact avec le réseau diélectrique avec deux configuration différentes, au dessous et au dessus du réseau diélectrique. Une sensibilité plus élevée est obtenue lorsque le réseau diélectrique est au dessous du réseau diélectrique. C'est dans cette dernière configuration que la valeur optimale de la *FOM* est obtenue même si elle reste très faible et très en deçà des valeurs obtenues avec la structure diélectrique pure.

Ces premiers résultats obtenus avec nos codes de simulations ouvrent la voie au développement d'une nouvelle génération de détecteurs biologiques diélectriques ou hybrides miniaturisés. Comme perspectives à ce présent travail, nous prévoyons la modélisation, l'optimisation et la fabrication de nouvelles structures diélectriques (avec des géométries différentes) plus performantes dans différents domaines de détection. Une étude plus détaillée sur les structures hybrides à optimiser demeure aussi une des perspectives futures, notamment avec d'autre types de métaux noble moins coûteux (argent ou cuivre) et en utilisant une polarisation TM.

# Bibliographie

- [1] L. M. Lechuga. Chapter 5 optical biosensors. In *Biosensors and Modern Biospecific Analytical Techniques*, volume 44 of *Comprehensive Analytical Chemistry*, pages 209–250. Elsevier, 2005.
- [2] S. Buluswar, Z. Friedman, P. Mehta, S. Mitra, and R. Sathre. Breakthroughs : Critical scientific and technological advances needed for sustainable global development. *LBNL Institute for Globally Transformative Technologies, Berkeley, CA, USA*, 2014.
- [3] P. Yáñez-Sedeño, L. Agüí, and J. M. Pingarrón. *Biosensors in Forensic Analysis*. Wiley-VCH Verlag : Weinheim, Germany, 2016.
- [4] J. S. Van Dyk and B. Pletschke. Review on the use of enzymes for the detection of organochlorine, organophosphate and carbamate pesticides in the environment. *Chemosphere*, 82(3) :291–307, 2011.
- [5] P. Leonard, S. Hearty, J. Brennan, L. Dunne, J. Quinn, T. Chakraborty, and R. O’Kennedy. Advances in biosensors for detection of pathogens in food and water. *Enzyme and Microbial Technology*, 32(1) :3–13, 2003.
- [6] S. S. Wang, R. Magnusson, J. S. Bagby, and M. G. Moharam. Guided-mode resonances in planar dielectric-layer diffraction gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 7(8) :1470–1474, 1990.
- [7] S. S. Wang and R. Magnusson. Theory and applications of guided-mode resonance filters. *Appl. Opt.*, 32(14) :2606–2613, 1993.
- [8] W. Yu, D. Wu, X. Duan, and Y. Yi. Subwavelength grating wideband reflectors with tapered sidewall profile. *MRS Advances*, 1(23) :1683–1691, 2016.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [9] S. Zhang, Y. Hwan Ko, and R. Magnusson. Broadband guided-mode resonant reflectors with quasi-equilateral triangle grating profiles. *Opt. Express*, 25(23) :28451–28458, 2017.
- [10] G. Quaranta, G. Basset, O. J. F. Martin, and B. Gallinet. Recent advances in resonant waveguide gratings. *Laser & Photonics Reviews*, 12(9) :1800017, 2018.
- [11] Y. Zhou, B. Wang, Z. Guo, and X. Wu. Guided mode resonance sensors with optimized figure of merit. *Nanomaterials*, 9(6) :837, 2019.
- [12] T. Sang, Z. Wang, J. Zhu, L. Wang, Y. Wu, and L. Chen. Linewidth properties of double-layer surface relief resonant brewster filters with equal refractive index. *Optics express*, 15(15) :9659–9665, 2007.
- [13] I Abdulhalim. Simplified optical scatterometry for periodic nanoarrays in the near-quasi-static limit. *Applied optics*, 46(12) :2219–2228, 2007.
- [14] W. Yu, M. Ye, and Y. S. Yi. Impacts of tapered sidewall profile on subwavelength grating wideband reflectors. *Journal of Nanophotonics*, 9(1) :093058, 2015.
- [15] Y. Zhou, X. Li, S. Li, Z. Guo, P. Zeng, J. He, D. Wang, R. Zhang, M. Lu, S. Zhang, and X. Wu. Symmetric guided-mode resonance sensors in aqueous media with ultrahigh figure of merit. *Optics express*, 27(24) :34788–34802, 2019.
- [16] R. Magnusson, H. Hemmati, D. J. Carney, K. J. Lee, Y. H. Ko, and S.-G. Lee. Fundamentals and applications of resonant leaky-mode photonic lattices. In *2019 IEEE Aerospace Conference*, pages 1–8, 2019.
- [17] J. Zenneck. On the propagation of plane electromagnetic waves along a plane conducting surface and their relation to wireless telegraphy. *Annalen der Phys.*, 328 :846–866, 1907.
- [18] V. Yesudasu, H. S. Pradhan, and R. J. Pandya. Recent progress in surface plasmon resonance based sensors : A comprehensive review. *Heliyon*, 7(3) :e06321, 2021.
- [19] F. R. S. Lord Rayleigh. XVIII. On the passage of electric waves through tubes, or the vibrations of dielectric cylinders. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 43(261) :125–132, 1897.
- [20] K. Balaa. *Capteur à fibre optique basé sur le principe de Résonance de Plasmons de Surface : optimisation pour la détection d'espèces chimiques*. PhD thesis, Université de Nantes, 2007.
- [21] P. D. Trinh, S. Yegnanarayanan, and B. Jalali. Integrated optical directional couplers in silicon-on-insulator. *Electronics Letters*, 31(24) :2097–2098, 1995.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [22] C. Dragone, C. A. Edwards, and R. C. Kistler. Integrated optics N\*N multiplexer on silicon. *3(10) :896–899*, 1991.
- [23] A. Maalouf, M. Gadonna, D. Bosc, and I. Hardy. Integrated polymers (PVCi/PMATRIFE) microring resonators for low power tunable filters. *Optics Communications*, 285(20) :4088–4091, 2012.
- [24] K. Balaa, M. Kanso, S. Cuenot, T. Minea, and G. Louarn. Experimental realization and numerical simulation of wavelength-modulated fibre optic sensor based on surface plasmon resonance. *Sensors and Actuators B : Chemical*, 126(1) :198–203, 2007.
- [25] R. W. Wood. XLII. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 4(21) :396–402, 1902.
- [26] Lord Rayleigh F. R. S. III. Note on the remarkable case of diffraction spectra described by Prof. Wood. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 14(79) :60–65, 1907.
- [27] A. Hessel and A. A. Oliner. A new theory of Wood’s anomalies on optical gratings. *Applied optics*, 4(10) :1275–1297, 1965.
- [28] L. Mashev and E. Popov. Diffraction efficiency anomalies of multicoated dielectric gratings. *Optics communications*, 51(3) :131–136, 1984.
- [29] D. A Zhuravlev, E. G. Loewen, and E. Popov. Diffraction gratings and their applications (Marcel Dekker, New York, 1997). *Optics and Spectroscopy*, 88(1) :143–144, 2000.
- [30] E. G. Loewen and E. Popov. *Diffraction Gratings and Applications*. Optical Science and Engineering. CRC Press, 2018.
- [31] A. Dutta, B. Deka, and P. P. Sahu. *Planar Waveguide Optical Sensors. From theory to applications*. Springer, 2016.
- [32] P. Karvinen. *Applications of resonant waveguide gratings*. Itä-Suomen yliopisto, 2010.
- [33] M. J. Uddin and R. Magnusson. Efficient guided-mode-resonant tunable color filters. *IEEE Photonics Technology Letters*, 24(17) :1552–1554, 2012.
- [34] T. Tamulevičius, I. Gražulevičiūtė, D. Urbonas, M. Gabalis, R. Petruškevičius, and S. Tamulevičius. Numerical and experimental analysis of optical response of sub-

## BIBLIOGRAPHIE

---

- wavelength period structure in carbonaceous film for refractive index sensing. *Optics express*, 22(22) :27462–27475, 2014.
- [35] S. Tibuleac and R. Magnusson. Reflection and transmission guided-mode resonance filters. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(7) :1617–1626, 1997.
- [36] A. Shakoor, M. Grande, J. Grant, and D. R. S. Cumming. One-dimensional silicon nitride grating refractive index sensor suitable for integration with CMOS detectors. *IEEE photonics Journal*, 9(1) :1–11, 2017.
- [37] T. Sang, H. Zhao, S. Cai, and Z. Wang. Design of guided-mode resonance filters with an antireflective surface at oblique incidence. *Optics Communications*, 285(3) :258–263, 2012.
- [38] P. Lalanne and D. Lemerrier-Lalanne. On the effective medium theory of subwavelength periodic structures. *Journal of Modern Optics*, 43(10) :2063–2085, 1996.
- [39] T. Alasaarela, D. Zheng, L. Huang, A. Priimagi, B. Bai, A. Tervonen, S. Honkanen, M. Kuittinen, and J. Turunen. Single-layer one-dimensional nonpolarizing guided-mode resonance filters under normal incidence. *Optics letters*, 36(13) :2411–2413, 2011.
- [40] H. J. Shin, S.-H. Kim, K. Park, M.-C. Lim, S.-W. Choi, and G. Ok. Free-standing guided-mode resonance humidity sensor in terahertz. *Sensors and Actuators A : Physical*, 268 :27–31, 2017.
- [41] M. Callan, C. M. Linton, and D. V. Evans. Trapped modes in two-dimensional waveguides. *Journal of Fluid Mechanics*, 229 :51–64, 1991.
- [42] D. C. Marinica, A. G. Borisov, and S. V. Shabanov. Bound states in the continuum in photonics. *Physical review letters*, 100(18) :183902, 2008.
- [43] C. W. Hsu, B. Zhen, J. Lee, S.-L. Chua, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić. Observation of trapped light within the radiation continuum. *Nature*, 499(7457) :188–191, 2013.
- [44] A. Krasnok, M. Tymchenko, and A. Alù. Nonlinear metasurfaces : a paradigm shift in nonlinear optics. *Materials Today*, 21(1) :8–21, 2018.
- [45] Z. F. Sadrieva, I. S. Sinev, K. L. Koshelev, A. Samusev, I. V. Iorsh, O. Takayama, R. Malureanu, A. A. Bogdanov, and A. V. Lavrinenko. Transition from optical bound states in the continuum to leaky resonances : role of substrate and roughness. *ACS Photonics*, 4(4) :723–727, 2017.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [46] J. M. Foley and J. D. Phillips. Normal incidence narrowband transmission filtering capabilities using symmetry-protected modes of a subwavelength, dielectric grating. *Optics letters*, 40(11) :2637–2640, 2015.
- [47] S. Campione, S. Liu, L. I. Basilio, L. K. Warne, W. L. Langston, T. S. Luk, J. R. Wendt, J. L. Reno, G. A. Keeler, I. Brener, et al. Broken symmetry dielectric resonators for high quality factor fano metasurfaces. *Acs Photonics*, 3(12) :2362–2367, 2016.
- [48] X. Yin, T. Sang, H. Qi, G. Li, X. Wang, J. Wang, and Y. Wang. Symmetry-broken square silicon patches for ultra-narrowband light absorption. *Scientific Reports*, 9(1) :1–11, 2019.
- [49] J. W. Yoon, S. H. Song, and R. Magnusson. Critical field enhancement of asymptotic optical bound states in the continuum. *Scientific reports*, 5(1) :1–8, 2015.
- [50] A. Hoblos, M. Suarez, N. Courjal, M.-P. Bernal, and F. I. Baida. Excitation of symmetry protected modes in a lithium niobate membrane photonic crystal for sensing applications. *OSA Continuum*, 3(11) :3008–3018, 2020.
- [51] K. M. Mayer and J. H. Hafner. Localized surface plasmon resonance sensors. *Chemical reviews*, 111(6) :3828–3857, 2011.
- [52] L. C. Clark Jr and C. Lyons. Electrode systems for continuous monitoring in cardiovascular surgery. *Annals of the New York Academy of sciences*, 102(1) :29–45, 1962.
- [53] J. Kirsch, C. Siltanen, Q. Zhou, A. Revzin, and A. Simonian. Biosensor technology : Recent advances in threat agent detection and medicine. *Chemical Society Reviews*, 42(22) :8733–8768, 2013.
- [54] G. S. Wilson and Y. Hu. Enzyme-based biosensors for in vivo measurements. *Chemical reviews*, 100(7) :2693–2704, 2000.
- [55] K. Hegnerová, M. Bocková, H. Vaisocherová, Z. Křištofiková, J. Říčný, D. Řípková, and J. Homola. Surface plasmon resonance biosensors for detection of Alzheimer disease biomarker. *Sensors and Actuators B : Chemical*, 139(1) :69–73, 2009.
- [56] H. K. Hunt and A. M. Armani. Label-free biological and chemical sensors. *Nanoscale*, 2(9) :1544–1559, 2010.
- [57] J. S. Daniels and N. Pourmand. Label-free impedance biosensors : Opportunities and challenges. *Electroanalysis*, 19(12) :1239–1257, 2007.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [58] J. Homola and M. Piliarik. *Surface Plasmon Resonance (SPR) Sensors*, pages 45–67. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [59] K. Saha, S. S. Agasti, C. Kim, X. Li, and V. M. Rotello. Gold nanoparticles in chemical and biological sensing. *Chemical reviews*, 112(5) :2739–2779, 2012.
- [60] S. Sahu, J. Ali, P. P. Yupapin, and G. Singh. Optical biosensor based on a cladding modulated grating waveguide. *Optik*, 166 :103–109, 2018.
- [61] R. H. Ritchie. Plasma losses by fast electrons in thin films. *Physical Review*, 106(5) :874, 1957.
- [62] E. A. Stern and R. A. Ferrell. Surface plasma oscillations of a degenerate electron gas. *Physical Review*, 120(1) :130, 1960.
- [63] A. Otto. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, 216(4) :398–410, 1968.
- [64] E. Kretschmann and H. Raether. Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 23(12) :2135–2136, 1968.
- [65] N. J. Tao, S. Boussaad, W. L. Huang, R. A. Arechabaleta, and J. D’Agnese. High resolution surface plasmon resonance spectroscopy. *Review of Scientific Instruments*, 70(12) :4656–4660, 1999.
- [66] M. Kanso. *Modélisation, réalisation et caractérisation d’un capteur plasmonique à fibre optique : Effets de la rugosité, des réactions de surface et de la cinétique dans un système microfluidique*. PhD thesis, Université de Nantes, 2008.
- [67] A. J. Haes, S. Zou, J. Zhao, G. C. Schatz, and R. P. Van Duyne. Localized surface plasmon resonance spectroscopy near molecular resonances. *Journal of the American Chemical Society*, 128(33) :10905–10914, 2006.
- [68] T. A. Bendikov, A. Rabinkov, T. Karakouz, A. Vaskevich, and I. Rubinstein. Biological sensing and interface design in gold island film based localized plasmon transducers. *Analytical chemistry*, 80(19) :7487–7498, 2008.
- [69] R. Magnusson, Y. Ding, K. J. Lee, P. S. Priambodo, and D. Wawro. Characteristics of resonant leaky-mode biosensors. In *Nanosensing : Materials and Devices II*, volume 6008, page 60080U. International Society for Optics and Photonics, 2005.
- [70] X. Wei and S. M. Weiss. Guided mode biosensor based on grating coupled porous silicon waveguide. *Optics express*, 19(12) :11330–11339, 2011.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [71] A. Sharon, D. Rosenblatt, and A. A. Friesem. Resonant grating–waveguide structures for visible and near-infrared radiation. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(11) :2985–2993, 1997.
- [72] R. J. Stockermans and P. L. Rochon. Narrow-band resonant grating waveguide filters constructed with azobenzene polymers. *Applied optics*, 38(17) :3714–3719, 1999.
- [73] M. R. Saleem, R. Ali, S. Honkanen, and J. Turunen. Bio-molecular sensors based on guided mode resonance filters. In *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, volume 146, page 012030. IOP Publishing, 2016.
- [74] S. Isaacs, A. Hajoj, M. Abutoama, A. Kozlovsky, E. Golan, and I. Abdulhalim. Resonant grating without a planar waveguide layer as a refractive index sensor. *Sensors*, 19(13) :3003, 2019.
- [75] R. Magnusson, D. Wawro, S. Zimmerman, and Y. Ding. Resonant photonic biosensors with polarization-based multiparametric discrimination in each channel. *Sensors*, 11(2) :1476–1488, 2011.
- [76] D. B. Mazulquim, K. J. Lee, J. W. Yoon, L. V. Muniz, B.-H. V. Borges, L. G. Neto, and R. Magnusson. Efficient band-pass color filters enabled by resonant modes and plasmons near the rayleigh anomaly. *Optics express*, 22(25) :30843–30851, 2014.
- [77] A. L. Fannin. *Theory and applications of absorbing guided-mode resonant devices in sensing, communications, and display*. PhD thesis, University of Texas, 2017.
- [78] A. L. Fannin, B. R. Wenner, J. W. Allen, M. S. Allen, and R. Magnusson. Properties of mixed metal–dielectric nanogratings for application in resonant absorption, sensing, and display. *Optical Engineering*, 56(12) :121905, 2017.
- [79] A. Mizutani, S. Urakawa, and H. Kikuta. Highly sensitive refractive index sensor using a resonant grating waveguide on a metal substrate. *Applied Optics*, 54(13) :4161–4166, 2015.
- [80] W. Liu, Z. Lai, H. Guo, and Y. Liu. Guided-mode resonance filters with shallow grating. *Optics letters*, 35(6) :865–867, 2010.
- [81] T. Khaleque and R. Magnusson. Light management through guided-mode resonances in thin-film silicon solar cells. *Journal of Nanophotonics*, 8(1) :083995, 2014.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [82] Z. Ren, Y. Sun, S. Zhang, K. Zhang, Z. Lin, and S. Wang. Wide wavelength range tunable guided-mode resonance filters based on incident angle rotation for all telecommunication bands. *Infrared Physics & Technology*, 93 :81–86, 2018.
- [83] H. Yala. *Développement de codes de calcul  $\mu$ a base de la méthode modale de Fourier pour des applications en nano-optique*. PhD thesis, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2011.
- [84] A. Taflove, S. C. Hagness, and M. Picket-May. Computational electromagnetics : the finite-difference time-domain method. *The Electrical Engineering Handbook*, 3, 2005.
- [85] A. Belkhir. *Extension de la modélisation par FDTD en nano-optique*. PhD thesis, Université de Franche-Comté, 2008.
- [86] H. Yala, B. Guizal, and D. Felbacq. Fourier modal method with spatial adaptive resolution for structures comprising homogeneous layers. *J. Opt. Soc. Am. A*, 26(12) :2567–2570, 2009.
- [87] I. M. Fradkin, S. A. Dyakov, and N. A. Gippius. Fourier modal method for the description of nanoparticle lattices in the dipole approximation. *Physical Review B*, 99(7) :075310, 2019.
- [88] M. Hamidi, F. I. Baida, A. Belkhir, and O. Lamrous. Implementation of the critical points model in a SFM-FDTD code working in oblique incidence. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 44(24) :245101, 2011.
- [89] K. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, 14(3) :302–307, 1966.
- [90] J.-P. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of computational physics*, 114(2) :185–200, 1994.
- [91] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Physique des solides*. EDP sciences, 2012.
- [92] A. Vial and T. Laroche. Comparison of gold and silver dispersion laws suitable for FDTD simulations. *Applied physics B*, 93(1) :139–143, 2008.
- [93] F. I. Baida and A. Belkhir. Split-field FDTD method for oblique incidence study of periodic dispersive metallic structures. *Optics letters*, 34(16) :2453–2455, 2009.
- [94] P. G. Etchegoin, E. C. Le Ru, and M. Meyer. An analytic model for the optical properties of gold. *The Journal of chemical physics*, 125(16) :164705, 2006.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [95] A. Vial and T. Laroche. Description of dispersion properties of metals by means of the critical points model and application to the study of resonant structures using the FDTD method. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 40(22) :7152, 2007.
- [96] A. Vial, A.-S. Grimault, D. Macías, D. Barchiesi, and M. L. De La Chapelle. Improved analytical fit of gold dispersion : Application to the modeling of extinction spectra with a finite-difference time-domain method. *Physical Review B*, 71(8) :085416, 2005.
- [97] P. Lalanne and G. M. Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(4) :779–784, 1996.
- [98] L. Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(9) :1870–1876, 1996.
- [99] G. Granet and B. Guizal. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 13(5) :1019–1023, 1996.
- [100] P. Yeh, A. Yariv, and C.-S. Hong. Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory. *J. Opt. Soc. Am. A*, 67(4) :423–438, 1977.
- [101] E. Popov and M. Nevière. Grating theory : new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17(10) :1773–1784, 2000.
- [102] E. Popov, B. Chernov, M. Nevière, and N. Bonod. Differential theory : application to highly conducting gratings. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21(2) :199–206, 2004.
- [103] E. Silberstein, P. Lalanne, J.-P. Hugonin, and Q. Cao. Use of grating theories in integrated optics. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18(11) :2865–2875, 2001.
- [104] L. Wang, T. Sang, J. Li, J. Zhou, B. Wang, and Y. Wang. High-sensitive transmission type of gas sensor based on guided-mode resonance in coupled gratings. *Journal of Modern optics*, 65(13) :1601–1608, 2018.
- [105] M. Braik. *Etude de couplage plasmonique à longue distance : Application en nano-optique*. PhD thesis, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2021.
- [106] J. Hu, X. Liu, J. Zhao, and J. Zou. Investigation of Fano resonance in compound resonant waveguide gratings for optical sensing. *Chinese Optics Letters*, 15(3) :030502, 2017.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [107] G. Zheng, L. Zhao, L. Qian, F. Xian, and L. Xu. Fano resonance and tunability of optical response in double-sided dielectric gratings. *Optics Communications*, 358 :140–146, 2016.
- [108] Y. Wan, N. A. Krueger, C. R. Ocier, P. Su, P. V. Braun, and B. T. Cunningham. Resonant mode engineering of photonic crystal sensors clad with ultralow refractive index porous silicon dioxide. *Advanced Optical Materials*, 5(21) :1700605, 2017.
- [109] A. Dmitriev, C. Hägglund, S. Chen, H. Fredriksson, T. Pakizeh, M. Käll, and D. S. Sutherland. Enhanced nanoplasmonic optical sensors with reduced substrate effect. *Nano letters*, 8(11) :3893–3898, 2008.
- [110] X. Liu, R. Ma, D. Sutherland, and J. Wang. A simple and high-performance platform for refractive index sensing based on plasmonic metal disks on a metal mirror. In *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, volume 484, page 012030. IOP Publishing, 2019.
- [111] S. S. Aćimović, H. Šípová, G. Emilsson, A. B. Dahlin, T. J. Antosiewicz, and M. Käll. Superior LSPR substrates based on electromagnetic decoupling for on-chip high-throughput label-free biosensing. *Light : Science & Applications*, 6(8) :e17042–e17042, 2017.
- [112] S. Olyaei, M. Seifouri, and H. Mohsenirad. Label-free detection of glycated haemoglobin in human blood using silicon-based photonic crystal nanocavity biosensor. *Journal of Modern Optics*, 63(13) :1274–1279, 2016.
- [113] B-T. Wang and Q. Wang. An interferometric optical fiber biosensor with high sensitivity for IgG/anti-IgG immunosensing. *Optics Communications*, 426 :388–394, 2018.
- [114] E. N. Lazareva and V. V. Tuchin. Blood refractive index modelling in the visible and near infrared spectral regions. *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*, 4(1), 2018.
- [115] A. Hoblos, M. Suarez, B. Guichardaz, N. Courjal, M.-P. Bernal, and F. I. Baida. Revealing photonic symmetry-protected modes by the finite-difference-time-domain method. *Optics letters*, 45(7) :2103–2106, 2020.
- [116] X. Cui, H. Tian, Y. Du, G. Shi, and Z. Zhou. Normal incidence filters using symmetry-protected modes in dielectric subwavelength gratings. *Scientific reports*, 6(1) :1–6, 2016.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [117] S. Han, M. V. Rybin, P. Pitchappa, Y. K. Srivastava, Y. S. Kivshar, and R. Singh. Guided-mode resonances in all-dielectric Terahertz Metasurfaces. *Advanced Optical Materials*, 8(3) :1900959, 2020.
- [118] G. Lan, S. Zhang, H. Zhang, Y. Zhu, L. Qing, D. Li, J. Nong, W. Wang, L. Chen, and W. Wei. High-performance refractive index sensor based on guided-mode resonance in all-dielectric nano-silt array. *Physics Letters A*, 383(13) :1478–1482, 2019.
- [119] D. N. Maksimov, V. S. Gerasimov, S. Romano, and S. P. Polyutov. Refractive index sensing with optical bound states in the continuum. *Optics Express*, 28(26) :38907–38916, 2020.
- [120] X. Lu, G. G. Zheng, and P. Zhou. High performance refractive index sensor with stacked two-layer resonant waveguide gratings. *Results in Physics*, 12 :759–765, 2019.
- [121] Y.-L. Liao and Y. Zhao. Ultra-narrowband dielectric metamaterial absorber with ultra-sparse nanowire grids for sensing applications. *Scientific reports*, 10(1) :1–7, 2020.
- [122] S. Bakhti. *Étude théorique des résonances plasmon de nanostructures métalliques et leur inscription lithographique par Microscopie à Force Atomique*. PhD thesis, Université de Saint-Etienne, 2014.

## Annexe : Production scientifique

[1] S. Mesli , H. Yala, M. Hamidi, A. BelKhir, F. I. Baida. "High performance for refractive index sensors via symmetry-protected guided mode resonance". Opt. Express 29 : 21199, 2021.

[2] S. Mesli, M. Hamidi, F.I. BAIDA, A. Belkhir. "Grating shape effect on the GMR sensing performances", 1<sup>st</sup> International Conference on Sustainable Energy and Advanced Materials, IC-SEAM 21, April 21-22, 2021, Ouargla, ALGERIA (Virtual conference).

[3] S. Mesli, M. Hamidi, F.I. BAIDA, A. Belkhir. "Optimizing the Performance of Grating Refractive Index Sensor Based on Guided-Mode Resonance", Congrès International de Physique et Chimie Quantique, CIPCQ 2019, Bejaia 04-06 Novembre 2019, Algérie.

[4] S. Mesli, M. Hamidi, A. Belkhir. "Simulation FDTD de la sensibilité à l'indice de réfraction de nanocapteurs diélectriques via la GMR", École Thématique sur la Nano-Optique et Plasmonique, Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou, juin 2018, Algérie.

[5] S. Mesli, M. Hamidi, A. Belkhir et O. Lamrous. "Optimization of plasmonic nanostructures for better-SERS substrates", 2ème Congrès Internationale d'Optique et Photonique OPAL2018, Université des Sciences et Technologies d'Oran Mohamed Boudiaf, Mai 2018, Algérie.

## **Résumé :**

Les structures périodiques métallo-diélectriques sub-longueur d'onde permettent d'exhiber de nouvelles fonctionnalités pour des applications en nano-optique. Les structures diélectriques font l'objet d'un intérêt particulier de par la nature et du coût commercial des matériaux les composants d'une part, et de par les caractéristiques des résonances GMR qui y sont excitées, à savoir un facteur de qualité très élevé, d'autre part.

L'objectif assigné à ce travail de thèse est de modéliser et d'optimiser, via des codes FDTD et FMM, des capteurs diélectriques ou hybrides (métal-diélectrique) à base de structures exhibant des résonances en transmissions ou en réflexion très fines avec des sensibilités à la variation de l'indice de réfraction de l'analyte, et des *FOM* très élevées. Des valeurs optimales jamais atteintes dans la littérature ont été obtenues en exploitant les modes GMR de type SPM excités sur un capteur 2D diélectrique périodique basique.

Mots clés : FDTD, FMM, capteur, nano-optique.

## **Abstract :**

New functionalities are offered by subwavelength periodic metallic-dielectric periodic structures for applications in nano-optics fields. Dielectric structures are of particular interest because of the nature and low cost of the used materials, on the one hand, and because of the characteristics of the GMR resonances excited, namely a very high quality factor, on the other hand.

The objective of this work is to model and optimise, via FDTD and FMM codes, dielectric or hybrid (metallic-dielectric) sensors based on structures exhibiting narrowband transmission or reflection resonances with sensitivities to the the analyt's refractive index variation, and very high *FOM*. Optimal values never reached in the literature have been obtained by exploiting the GMR modes of the SPM type excited on a basic periodic dielectric 2D sensor.

Keywords : FDTD, FMM, sensor, nano-optics.

